

N° ORDRE: 3661

Université des Sciences et Technologies de Lille
UFR de Physique

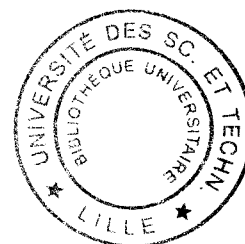
Pour obtenir le grade de

DOCTEUR de l'université

Spécialité: Sciences des Matériaux

Par

Julien DURINCK



**MODELISATION DE LA PLASTICITE DE LA
FORSTERITE PAR CALCULS A L'ECHELLE
ATOMIQUE ET PAR DYNAMIQUE DES
DISLOCATIONS**

Soutenu le 23 septembre 2005

Membres du jury:

M. A. Legris
M. L. Kubin
M. F. Louchet
M. P. Cordier
M. L. Pizzagalli

Président
Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Examineur

Remerciements

Ce travail de thèse a été réalisé au Laboratoire de Structure et Propriétés de l'Etat Solide de l'Université des Sciences et Technologies de Lille.

Je tiens à exprimer mes remerciements à Monsieur Ladislav KUBIN, Directeur de Recherches, et à Monsieur le Professeur François LOUCHET d'avoir bien voulu être les rapporteurs de mon manuscrit ainsi qu'à Monsieur le Professeur Alexandre LEGRIS et Monsieur Laurent PIZZAGALLI d'avoir accepté d'examiner mon travail.

Monsieur le Professeur Patrick CORDIER a dirigé cette étude. Je le remercie vivement de m'avoir fait confiance et de m'avoir soutenu et encouragé. Il a en grande partie contribué à faire de moi un jeune chercheur.

L'adaptation de la simulation de la Dynamique des Dislocations à la forstérite n'a été possible que grâce à la collaboration avec MM. Ladislav KUBIN, Benoît DEVINCRE, Ronan MADEC et Ghiath MONNET. Merci à eux pour leur aide, leur soutien et pour leur accueil lors de mes venues au Laboratoire d'Etude des Microstructures (ONERA-Châtillon).

Je suis reconnaissant à Monsieur le Professeur Alexandre LEGRIS pour l'aspect atomistique qu'il a contribué à donner à cette étude. La collaboration avec lui a été très sympathique et enrichissante.

Je tiens à remercier Madame Denise FERRE pour les échanges fructueux que nous avons eus à propos des simulations *ab initio*. Merci à Monsieur Philippe CARREZ pour les discussions scientifiques ou diverses et pour son amitié.

Si cette thèse a pu s'effectuer dans les meilleures conditions, c'est aussi grâce à l'ambiance agréable qui règne au LSPES. Je tiens à remercier Olivia, Francesca, Nicolas et mes autres camarades du laboratoire d'y avoir largement contribué.

Pour finir, j'aimerais remercier mes proches, et plus particulièrement mes parents et Sophie, qui, sans le savoir, ont contribué au bon déroulement de ces années de thèse.

Table des matières

INTRODUCTION.....	3
CHAPITRE 1 DEFORMATION PLASTIQUE DE L'OLIVINE : ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE	
CRITIQUE.....	5
1.1 INTRODUCTION	7
1.1.1 Structure de l'intérieur de la Terre	7
1.1.2 Cristallochimie de l'olivine	8
1.2 PROPRIETES ELASTIQUES.....	11
1.3 PLASTICITE DU MONOCRISTAL D'OLIVINE.....	15
1.3.1 Systèmes de glissement dans l'olivine	15
1.3.2 Comportement mécanique du monocristal d'olivine.....	25
1.4 DU MONOCRISTAL AU POLYCRISTAL	40
1.4.1 Première ébauche de la plasticité du monocristal.....	40
1.4.2 Un premier modèle pour le polycristal	45
CHAPITRE 2 PRESENTATION DES TECHNIQUES DE CALCUL UTILISEES.....	47
2.1 LE CALCUL <i>AB INITIO</i>	49
2.1.1 Principe	49
2.1.2 Les approximations.....	50
2.1.3 Techniques de calcul.....	54
2.2 SIMULATION DE LA DYNAMIQUE DES DISLOCATIONS	59
2.2.1 Historique.....	59
2.2.2 Discrétisation de l'espace et des lignes	61
2.2.3 Calcul de la force effective sur une dislocation.....	62
2.2.4 Loi de vitesse des dislocations	63
2.2.5 Gestion des obstacles.....	64
2.2.6 Les conditions aux limites	65
2.2.7 Optimisation de la simulation de la dynamique des dislocations.....	69
2.2.8 Les applications de la simulation de la dynamique des dislocations à 3D.....	70
CHAPITRE 3 CALCULS DES ENERGIES DE FAUTE D'EMPILEMENT GENERALISEES DANS LA FORSTERITE	73
3.1 CODE DE CALCUL UTILISE: PRESENTATION ET VALIDATION DU MODELE	75
3.1.1 Présentation générale.....	75
3.1.2 Convergence des calculs: points <i>k</i> et énergie de coupure.....	75
3.2 PROPRIETES DE VOLUME DE LA FORSTERITE SOUS PRESSION	77
3.2.1 Construction des cellules de référence sous pression	77
3.2.2 Calcul des constantes élastiques.....	79

3.3 L'APPROCHE DES ENERGIES DE FAUTE D'EMPILEMENT GENERALISEES	86
3.3.1 <i>Technique de calcul</i>	86
3.3.2 <i>Résultats</i>	92
3.4 VERS UNE DESCRIPTION DU CŒUR DES DISLOCATIONS: LE MODELE DE PEIERLS-NABARRO	98
3.4.1 <i>Généralités</i>	99
3.4.2 <i>Application aux dislocations dans la forsterite</i>	103
CHAPITRE 4 MODELISATION DE LA PLASTICITE DU MONOCRISTAL DE FORSTERITE PAR DYNAMIQUE DES DISLOCATIONS	111
4.1 GEOMETRIE DE GLISSEMENT DANS LE MONOCRISTAL DE FORSTERITE	113
4.1.1 <i>Pertinence des différents systèmes de glissement et choix de la géométrie de glissement pour la simulation</i>	113
4.1.2 <i>Construction de la base de vecteurs</i>	113
4.1.3 <i>Conditions aux limites périodiques et libres parcours moyens des segments de dislocation</i>	117
4.1.4 <i>L'élasticité dans la simulation</i>	122
4.2 GLISSEMENT SIMPLE ET CALIBRATION DES LOIS DE VITESSE DES DISLOCATIONS	122
4.2.1 <i>Rappel des microstructures observées</i>	122
4.2.2 <i>Des lois de vitesse thermiquement activées</i>	123
4.2.3 <i>Calibration des lois de vitesse</i>	125
4.3 GLISSEMENT MULTIPLE POUR UNE SOLLECITATION SUIVANT [101]C	134
4.3.1 <i>Influence de la température</i>	134
4.3.2 <i>Influence de la vitesse de déformation</i>	136
4.4 INTERSECTIONS ENTRE SYSTEMES DE GLISSEMENT	140
4.4.1 <i>Les différents types d'intersection entre dislocations dans la forstérite</i>	140
4.4.2 <i>Simulation des intersections entre dislocations</i>	141
CHAPITRE 5 DISCUSSION	157
5.1 LES SYSTEMES DE GLISSEMENT DE LA FORSTERITE	159
5.1.1 <i>Influence respective du glissement $b = [100]$ et du glissement $b = [001]$</i>	159
5.1.2 <i>Le glissement [001]</i>	160
5.1.3 <i>Le glissement [100]</i>	162
5.1.4 <i>Effet de la pression</i>	163
5.2 PERTINENCE DE LA RELATION DE TAYLOR DANS LA FORSTERITE	166
5.3 DU MONOCRISTAL AU POLYCRISTAL	171
5.4 PERSPECTIVES	173
BIBLIOGRAPHIE.....	183
ANNEXE: BASE DE VECTEURS DE LA SIMULATION POUR LA FORSTERITE	193

Introduction

La compréhension des manifestations géologiques qui ont lieu à la surface de la Terre (volcanisme, tremblements de terre, formation de chaînes de montagne, ...) s'est considérablement affinée depuis le début du XIX^e siècle. Nous n'en sommes plus aujourd'hui à expliquer la formation des montagnes comme le résultat du refroidissement de la planète entraînant, telle une pomme qui perd son eau, des rides et des craquelures à la surface.

L'idée de dérive des continents a été proposée par Wegener en 1912. Pour ce météorologiste allemand, la formation des continents (ou plutôt des océans) est le résultat de la mobilité de plaques dont les "collisions" sont à l'origine des reliefs de la Terre. Cette thèse qui constituera la base de la théorie moderne de la tectonique des plaques a pourtant été très mal acceptée à l'époque. Ses détracteurs se sont basés surtout sur une interrogation qui l'a fragilisée: quelles sont les forces qui sont capables de mettre en mouvement ces masses gigantesques que représentent les continents ?

En l'absence de réelle explication physique à ce problème, l'idée de dérive des continents a pour un temps été abandonnée. Ce n'est que dans les années soixante qu'elle sera exhumée lorsque Hess constatera que les planchers océaniques sont en expansion. Il admet alors que les continents sont sur un "tapis roulant" dont le moteur est constitué de larges mouvements de convection prenant place dans le manteau.

L'hypothèse d'une convection est tout à fait envisageable dans un manteau terrestre, certes solide, mais qui peut subir de grandes déformations aux échelles des temps géologiques. Elle est largement admise aujourd'hui dans la communauté des géophysiciens et sa modélisation est importante dans la compréhension de la dynamique interne de la Terre.

La convection mantellique est alimentée par une source de chaleur interne issue du refroidissement séculaire, de la cristallisation de la graine, mais surtout de la désintégration en son sein d'éléments radioactifs. La subduction des plaques lithosphériques, froides, joue un rôle particulièrement important dans la dynamique du manteau. Le rebond post-glaciaire permet de mettre en évidence la plasticité du manteau. On observe en effet une remontée des plages de Scandinavie, du Canada, de Sibérie, d'Ecosse suite à la fonte de la calotte de glace de trois kilomètres d'épaisseur, il y a 18000 ans. La vitesse de remontée permet d'estimer un ordre de grandeur de la viscosité moyenne du manteau : 10^{21} Pa.s. La sismologie ne donne pas seulement des informations sur les grandes enveloppes de la Terre interne. La mesure de l'anisotropie de propagation des vitesses sismiques permet d'obtenir des informations précieuses sur les mouvements qui animent (ou plutôt qui ont animé) le manteau terrestre. La plasticité des roches peut en effet produire des textures qui révèlent l'anisotropie élastique des cristaux qui les constituent. C'est ainsi que l'on interprète généralement l'anisotropie sismique du manteau supérieur à partir des textures des roches riches en olivine.

La modélisation de la convection mantellique, comme son étude à partir de la sismologie, nécessitent donc de connaître les propriétés plastiques des minéraux qui constituent les roches de la Terre profonde.

Dans ce domaine, l'étude expérimentale de la déformation des minéraux du manteau terrestre connaît un essor important depuis une dizaine d'années avec le développement et l'utilisation de machines de déformation qui sont capables de reproduire de mieux en mieux les conditions de pression et de température qui règnent à des

profondeurs croissantes. D'un autre côté, l'utilisation d'une approche numérique, couplée à l'approche expérimentale, peut s'avérer très utile dans la compréhension des mécanismes physiques qui entrent en jeu dans la plasticité de ces minéraux et qui font intervenir le mouvement des dislocations.

L'approche numérique de la plasticité représente une part très importante dans les recherches actuelles sur les métaux, à plusieurs échelles différentes. A l'échelle nanoscopique, les techniques de calcul atomistiques sont maintenant capables de nous renseigner sur les propriétés individuelles des dislocations (configurations du cœur, contrainte de Peierls, glissement dévié, ...). A l'échelle macroscopique, le comportement d'un agrégat polycristallin peut être étudié grâce aux méthodes d'éléments finis à partir de lois de comportement du monocristal. Ces dernières peuvent être déterminées à une échelle intermédiaire, mésoscopique, qui fait le lien entre les propriétés nanoscopiques du cœur des dislocations et le comportement rhéologique du monocristal. Le comportement collectif des dislocations dans le monocristal est alors étudié à l'aide de simulations de la dynamique des dislocations. Dans les minéraux, une telle approche multi-échelle de la plasticité n'existe pas encore et, dans cette étude, nous proposons de jeter les bases de la première modélisation de la plasticité aux échelles nanoscopique et mésoscopique.

Nous avons choisi de nous intéresser à l'olivine, minéral majoritaire du manteau supérieur de la Terre. Beaucoup d'études expérimentales ont déjà été consacrées à la plasticité de ce minéral, elles sont présentées dans le chapitre 1. Le chapitre 2 est consacré à la description des techniques de calculs *ab initio* et à la simulation de la dynamique des dislocations. Les chapitres 3 et 4 seront ensuite dédiés à la présentation des résultats obtenus aux deux échelles. Pour finir, le chapitre 5 constituera une discussion globale de nos résultats, avec le souci d'établir des liens entre les deux échelles, et une mise en perspective par rapport aux résultats expérimentaux antérieurs.

Chapitre 1

Déformation plastique de l'olivine : étude bibliographique critique

L'olivine est le minéral majoritaire du manteau supérieur de la Terre et sa rhéologie constitue un point crucial pour la compréhension de la dynamique interne de la Terre. Depuis la fin des années soixante, l'étude de la plasticité de l'olivine fait l'objet de nombreuses études et les progrès techniques toujours croissants permettent aujourd'hui d'explorer les propriétés rhéologiques de l'olivine sous des conditions semblables à celles qui règnent dans le manteau supérieur.

Dans ce chapitre, nous commencerons par présenter l'olivine d'un point de vue de sa cristallographie et de ses propriétés élastiques avant de nous intéresser à la bibliographie qui existe sur la déformation plastique de ce minéral depuis les balbutiements jusqu'à nos jours. Plus qu'un simple aperçu des différents travaux réalisés, ce chapitre se veut être une revue critique dans laquelle nous confronterons des résultats anciens avec d'autres plus récents pour tenter de proposer un modèle de la plasticité du monocristal et du polycristal.

1.1 Introduction

1.1.1 Structure de l'intérieur de la Terre

La sismologie constitue la principale source d'informations sur la structure interne de la Terre. La vitesse des ondes sismiques de compression et de cisaillement est liée aux propriétés élastiques et à la densité des milieux qu'elles traversent.

Les principales divisions de l'intérieur de la Terre (Figure 1-1) issues du modèle PREM (Preliminary Reference Earth Model) correspondent à des sauts de vitesses des ondes sismiques. On trouve les discontinuités suivantes:

- la croûte a une épaisseur variable entre 5 et 60 km selon qu'elle est océanique ou continentale,
- le manteau, lui-même divisée en un manteau supérieur (jusqu'à 410 km) et un manteau inférieur (670-2900 km) séparés par une zone de transition,
- le noyau composé d'un noyau liquide au travers duquel ne se propagent pas les ondes de cisaillement S (2900-5150 km) et d'une graine solide au centre de la Terre.

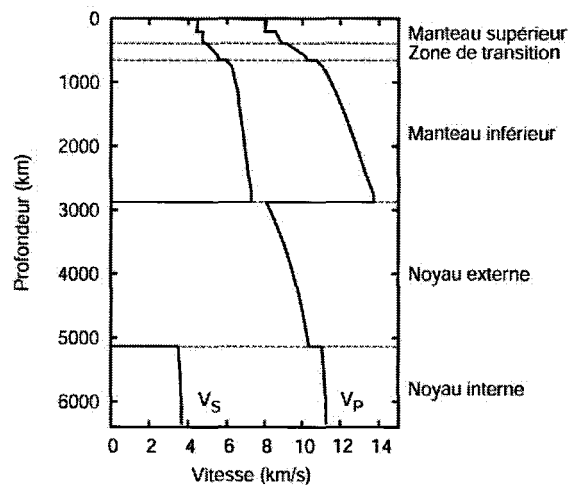


FIGURE 1-1

Vitesse des ondes sismiques de cisaillement VS et de compression VP en fonction de la profondeur (modèle PREM: Dziewonski et Anderson (1981))

Avec la profondeur, la température et la pression augmentent et l'olivine ($(\text{Mg}, \text{Fe})_2\text{SiO}_4$) se transforme, vers 13 GPa et 1400°C, en deux phases plus denses : la wadsleyite puis la ringwoodite (les deux polymorphes de haute pression de l'olivine). Vers 23 GPa et 1600°C, wadsleyite, ringwoodite et grenats se transforment en minéraux de structure perovskite et en magnésowustite ($(\text{Mg}, \text{Fe})\text{O}$) de structure cubique (Figure 1-2). Une dernière transition entre le manteau inférieur et la couche D" a lieu à environ 2750 km de profondeur (135 GPa environ) et a récemment été attribuée à la transition de phase de la structure perovskite en une structure post-perovskite (Tsuchiya *et al.* (2004), Murakami *et al.* (2004), Oganov et Ono (2004)).

Ainsi, le manteau supérieur est composé d'olivine, de pyroxène et de grenat; la zone de transition, de wadsleyite, de ringwoodite, de pyroxène et de grenat; le manteau inférieur de pérovskite et de magnésowustite (Figure 1-2).

Un modèle de composition globale du manteau a été proposé par Green et Ringwood (1963). Cette composition moyenne du manteau est appelée pyrolite. Dans ce modèle, l'olivine représente 60% des minéraux du manteau supérieur (Figure 1-2).

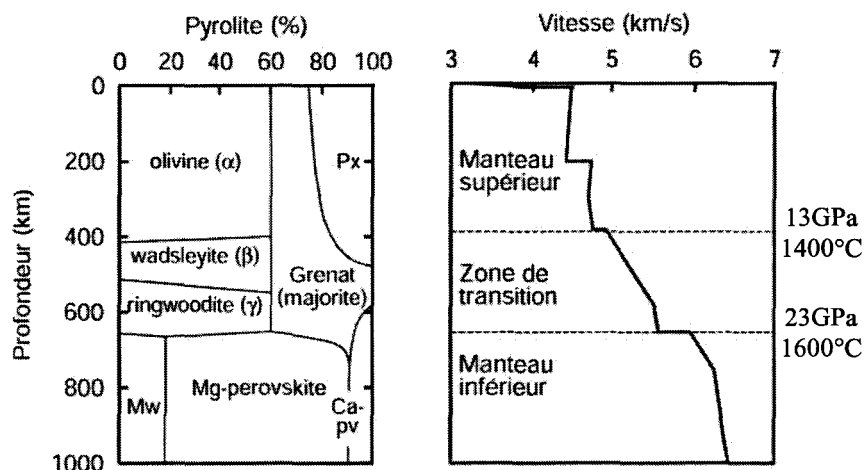


FIGURE 1-2

Transformations et réactions des différents minéraux du manteau en fonction de la profondeur (donc de la pression) pour un manteau de composition pyrolitique (issue de Davies (1999)). Le pyrolite est un mélange synthétique de composition proche de la composition moyenne du manteau (45% de SiO_2 , 38% de MgO , 7,8% de FeO , 4,4% de Al_2O_3 , 3,5% de CaO , ...). La vitesse des ondes sismiques de cisaillement est également représentée pour montrer les trois parties du manteau terrestre.

1.1.2 Cristallochimie de l'olivine

Comme nous venons de le voir, l'olivine est, avec les pyroxènes et les grenats, un des silicates les plus importants du manteau supérieur. L'olivine forme une solution solide notée $(\text{Mg,Fe})_2\text{SiO}_4$ ayant pour pôles extrêmes, la forstérite Mg_2SiO_4 (Fo_{100}) et la fayalite Fe_2SiO_4 (Figure 1-3). Dans le manteau supérieur, l'olivine a une composition moyenne Fo_{92} (92% de forstérite et 8% de fayalite).

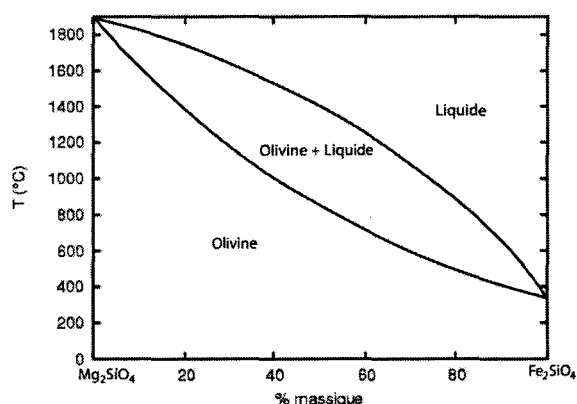


FIGURE 1-3

Diagramme binaire de l'olivine à pression ambiante (d'après Bowen et Schairer (1932)).

Si l'on ne considérait que le sous-réseau d'anions, on pourrait décrire la structure cristallographique de l'olivine comme étant un empilement hexagonal compact (Figure 1-4).

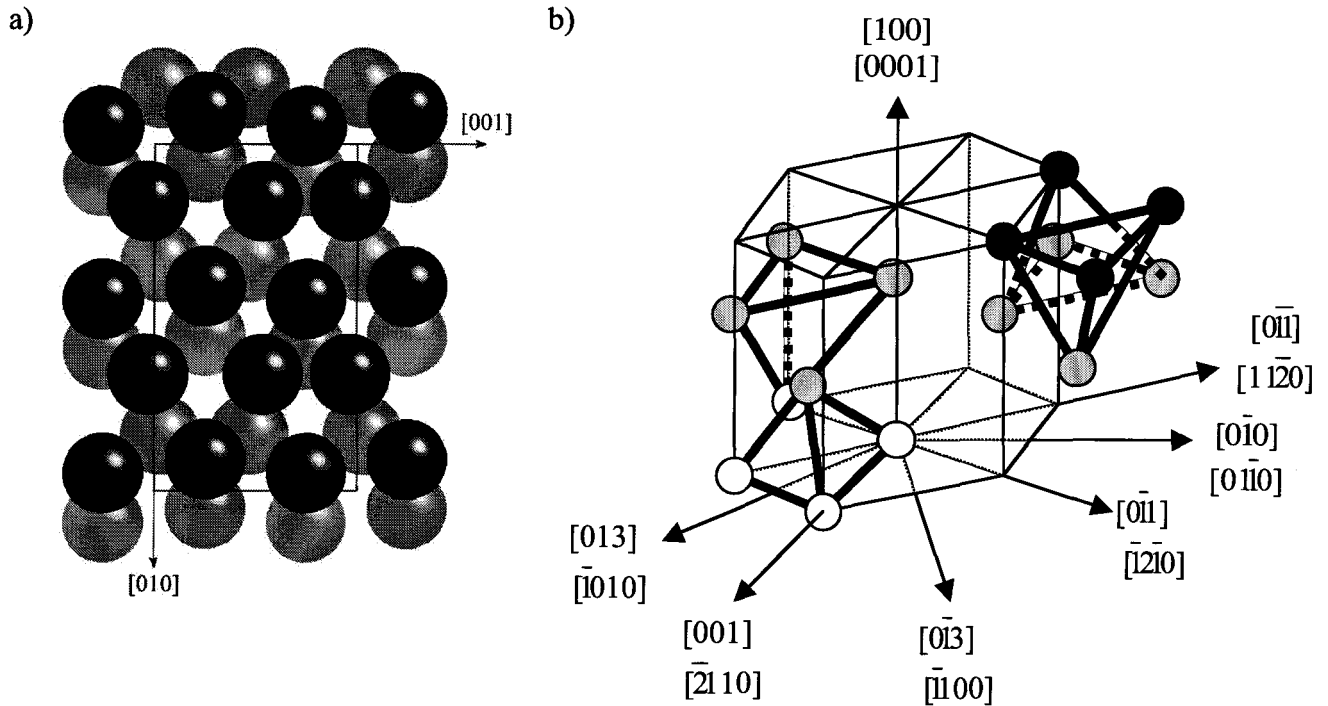


FIGURE 1-4

a) Projection de la maille élémentaire de la forstérite suivant la direction $[100]$. Il est possible de décrire la structure cristallographique de la forstérite comme un empilement hexagonal compact d'anions d'oxygène suivant $[100]$. La couche d'atomes d'oxygène noirs se trouve au-dessus de la couche d'atomes d'oxygène gris.

b) Réseau hexagonal compact des anions d'oxygène (au sommet des tétraèdres). Les cercles blancs représentent les ions O à la hauteur 0 dans la maille hexagonale compacte; les cercles gris, ceux à une hauteur $c/2$; les cercles noirs ceux à une hauteur c . Les directions du réseau orthorhombique sont notées dans le réseau orthorhombique et dans le réseau hexagonal (notation à quatre indices). (d'après Poirier (1975))

L'insertion de cations Si^{4+} en sites tétraédriques T (1/8 des sites T sont occupés) et de cations Mg^{2+} et Fe^{2+} en sites octaédriques M (1/4 des sites M sont occupés) brise les symétries de la structure hexagonale compacte en la distordant sensiblement (Brown, 1982). Ainsi, même s'il est utile parfois de raisonner à partir d'un réseau hexagonal compact légèrement distordu, on décrira plus rigoureusement la structure cristallographique de l'olivine avec une structure orthorhombique appartenant au groupe d'espace Pbnm.

La maille élémentaire de la forstérite est représentée sur la Figure 1-5. Ses paramètres de maille, à température ambiante et à 1 atm., sont : $a = 4,756 \text{ \AA}$, $b = 10,207 \text{ \AA}$ et $c = 5,98 \text{ \AA}$ (Smyth et Hazen (1973)). Selon Brown (1982), le squelette de la structure se caractérise principalement par des chaînes d'octaèdres M2 alignées selon la direction $[001]$. Chaque chaîne est reliée d'une part à deux chaînes par des tétraèdres T et, d'autre part, à deux autres par des octaèdres M1. Les octaèdres M1 partagent alors six de leurs douze arêtes (deux avec d'autres octaèdres M1, deux avec des octaèdres M2 et deux avec des tétraèdres) et les octaèdres M2 ne partagent que trois de leurs arêtes (deux avec des octaèdres M1 et une avec un tétraèdre). Les tétraèdres T sont isolés les uns des autres, mais ont trois arêtes communes avec deux octaèdres M2 et un octaèdre M1, et un sommet qu'ils partagent avec deux octaèdres M2 et un octaèdre M1. Les liaisons Si-O sont des liaisons covalentes fortes alors que les liaisons Mg-O (et Fe-O si l'on considère une fayalite) sont ioniques et plus faibles.

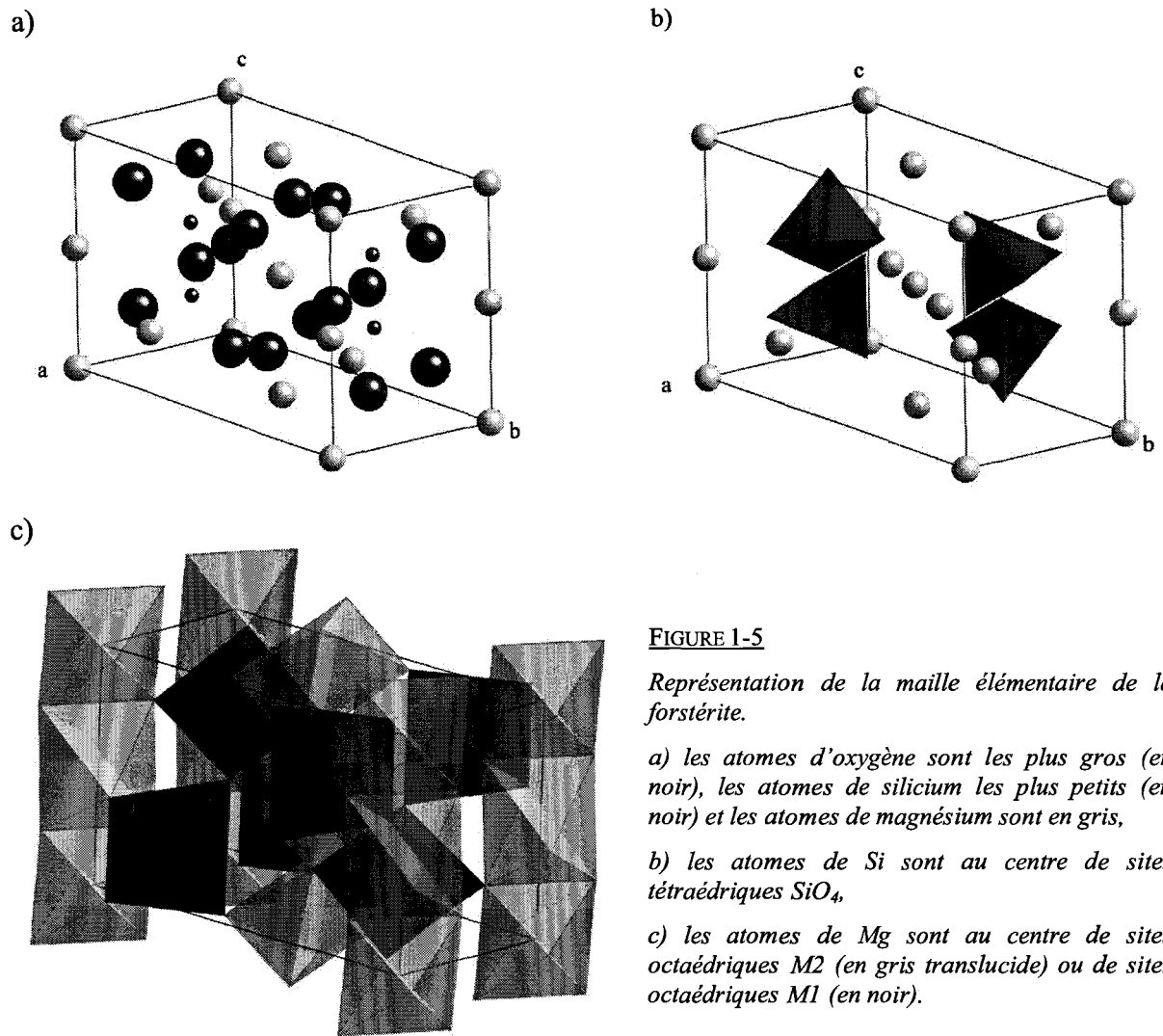


FIGURE 1-5

Représentation de la maille élémentaire de la forstérite.

a) les atomes d'oxygène sont les plus gros (en noir), les atomes de silicium les plus petits (en noir) et les atomes de magnésium sont en gris,

b) les atomes de Si sont au centre de sites tétraédriques SiO_4 ,

c) les atomes de Mg sont au centre de sites octaédriques M2 (en gris translucide) ou de sites octaédriques M1 (en noir).

1.2 Propriétés élastiques

Au-delà de quelques centaines de kilomètres de profondeur, la sismologie constitue la première source d'information sur la Terre interne. La vitesse des ondes sismiques se propageant dans le manteau terrestre est fonction de la minéralogie et des conditions de pression et de température. Pour construire de tels modèles, il est indispensable d'avoir une connaissance précise des propriétés élastiques des minéraux dans les conditions de pression et température du manteau terrestre.

Dans ce paragraphe, seront présentés différents résultats concernant l'élasticité des monocristaux et polycristaux d'olivine en fonction des différents paramètres.

L'olivine est orthorhombique. Le tenseur d'ordre quatre des constantes élastiques c_{ijkl} peut s'exprimer, avec la notation de Voigt (Tableau 1-1), comme une matrice carrée à neuf composantes indépendantes c_{mn} :

$$[c] = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{22} & c_{23} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{23} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{bmatrix}$$

Tenseur	11	22	33	23	32	13	31	12	21
Matrice	1	2	3	4	4	5	5	6	6

TABLEAU 1-1

Notation de Voigt qui permet de représenter un tenseur d'ordre quatre par une matrice carrée.

Il existe plusieurs techniques de détermination des propriétés élastiques. Nous ne les aborderons pas toutes dans ce paragraphe mais, pour une revue plus exhaustive de ces techniques, le lecteur pourra se référer à Liebermann et Li (1998) et à Duffy et Wang (1998).

Isaak *et al.* (1989) ont utilisé la méthode RPR (Rectangular Parallelepiped Resonance) pour déterminer les constantes élastiques de la forstérite à pression ambiante, jusqu'à 1427°C (Figure 1-6). Cette technique consiste à déterminer les modes de résonance d'un échantillon parallélépipédique dont les fréquences peuvent être reliées aux c_{ijkl} . En utilisant la même méthode, Isaak *et al.* (1993) ont déterminé les constantes élastiques de la fayalite Fo_0 (Figure 1-7) et Ohno (1976) celle de l'olivine Fo_{92} .

Grâce à la détermination de la vitesse des ondes acoustiques suivant certaines directions connues du cristal et après application des équations de Christoffel¹, Kumazawa et Anderson (1969) ont déterminé les valeurs des c_{ijkl} de la Fo_{93} jusqu'à 0,2 GPa, Graham et Barsch (1969) celles de la Fo_{100} à des températures comprises entre

¹ Les équations de "Christoffel" sont: $\left| c_{ijkl} n_j n_l - \rho V^2 \delta_{ik} \right| = 0$ où ρ est la densité, V la vitesse de propagation de l'onde et \mathbf{n} la direction de propagation. Il existe deux types de solution à ces équations: une onde longitudinale (onde P) avec une polarisation parallèle à la direction \mathbf{n} de propagation et deux ondes transversales ou cisailantes (onde S) avec des polarisations perpendiculaires à \mathbf{n} .

l'ambiante et 427°C et des pressions comprises entre la pression atmosphérique et 1 GPa, Webb (1989) celles d'une olivine Fo₉₁ jusqu'à 3 GPa et Yoneda et Morioka (1992) celles de la Fo₁₀₀ jusqu'à 6 GPa.

La technique que l'on appelle "Diffusion Brillouin" consiste à mesurer la vitesse des ondes acoustiques à partir de la fréquence de décalage de l'indice de réfraction du cristal. Plus précisément, un faisceau LASER incident interagit inélastiquement avec les phonons acoustiques du cristal et l'onde lumineuse résultante est décalée en fréquence par effet Doppler. En couplant cette technique avec l'utilisation d'une cellule à enclume de diamant, Zha *et al.* (1998) ont pu déterminer les constantes élastiques de la forstérite Fo₁₀₀ jusqu'à 16 GPa et Shimizu *et al.* (1982) jusqu'à 4 GPa.

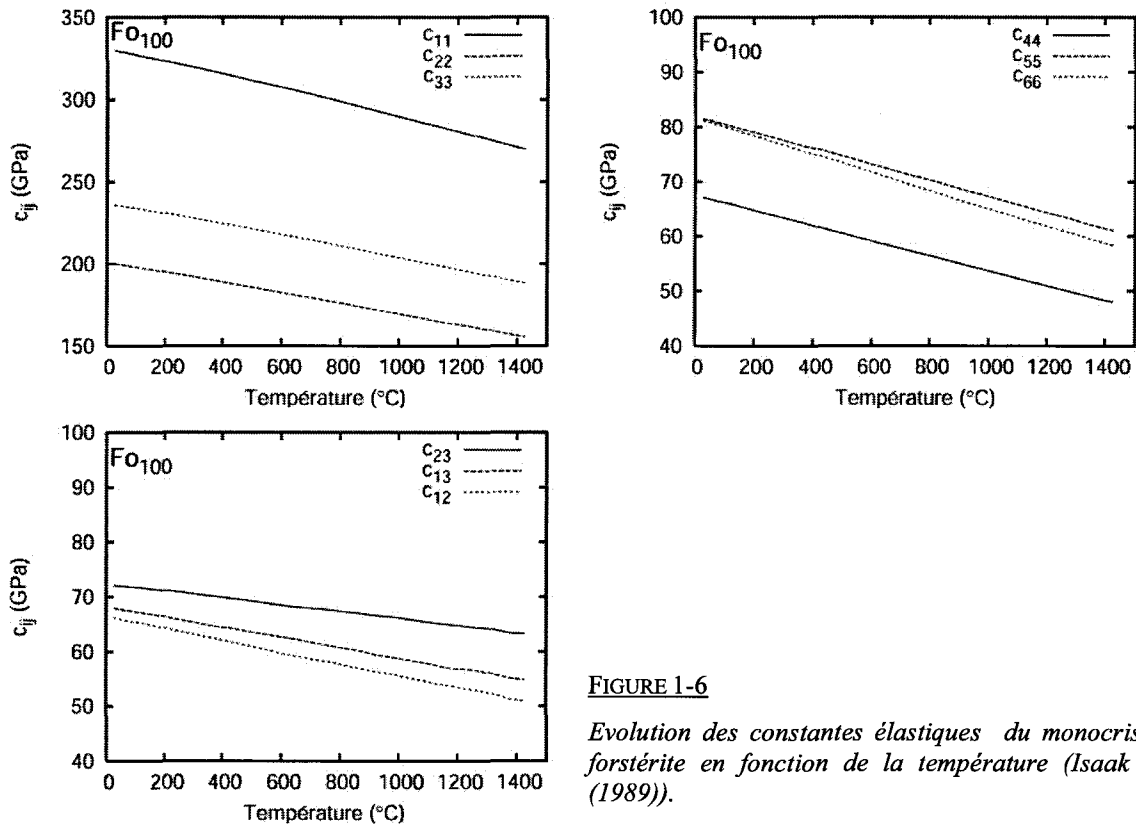


FIGURE 1-6

Evolution des constantes élastiques du monocristal de forstérite en fonction de la température (Isaak et al. (1989)).

Sur la Figure 1-7, sont comparés différents résultats obtenus par différents auteurs pour des olivines de composition différentes. La température de fusion d'une fayalite et d'une forstérite sont nettement différentes (cf. paragraphe précédent: 1200°C environ pour la fayalite et 1900°C environ pour la forstérite) et un effet identique est attendu sur les constantes élastiques. En effet, une différence notable peut être constatée (une diminution de 20% entre la forstérite et la fayalite pour c_{11}); néanmoins entre deux olivines Fo₁₀₀ et Fo₉₂, les différences sont bien moins importantes et, dans le cadre de cette étude, nous les négligerons.

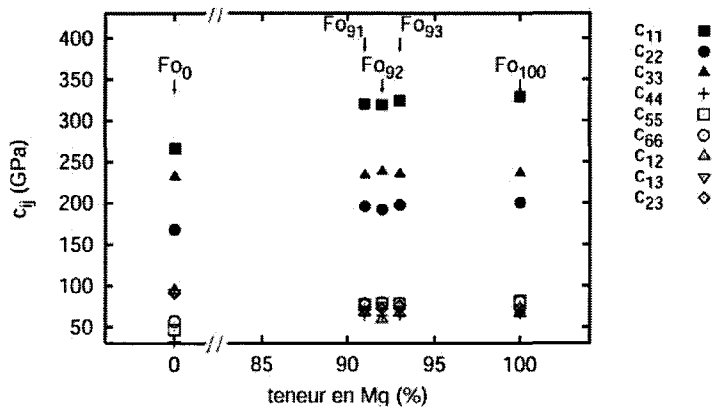


FIGURE 1-7

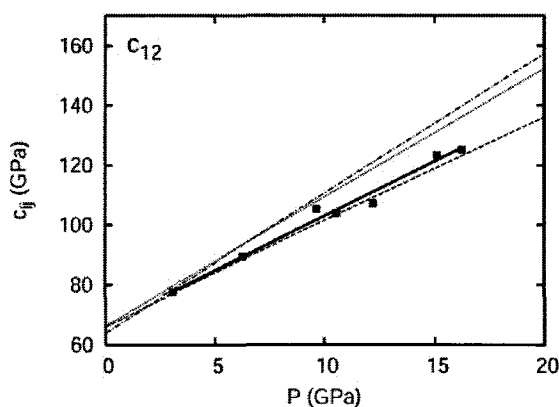
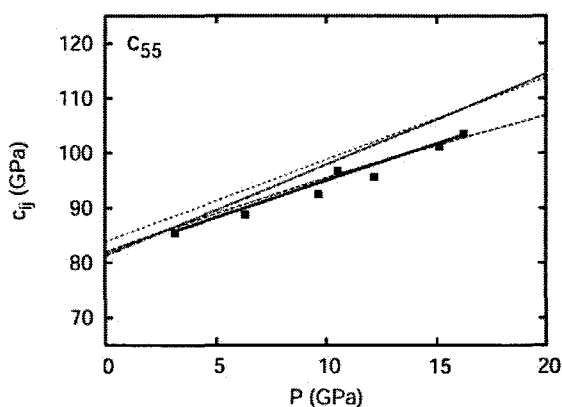
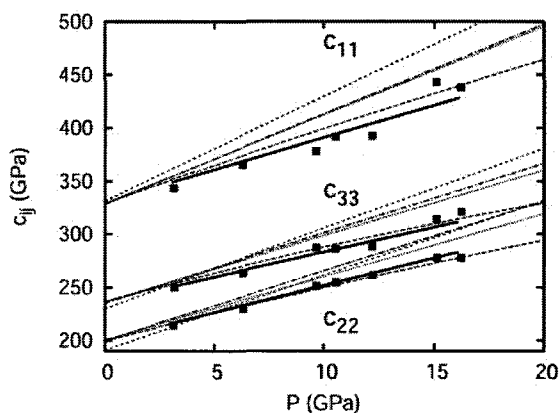
Evolution des constantes élastiques en fonction de la teneur en magnésium de l'olivine ($Mg_xFe_{(1-x)}_2SiO_4$) telles qu'elles le sont présentées dans Bass (1995). Les données sont issues de Graham et Barsch (1969) pour Fo_{100} , de Kumazawa et Anderson (1969) pour Fo_{93} , de Ohno (1976) pour Fo_{92} , de Webb (1989) pour Fo_{91} et de Isaak et al. (1993) pour Fo_0 .

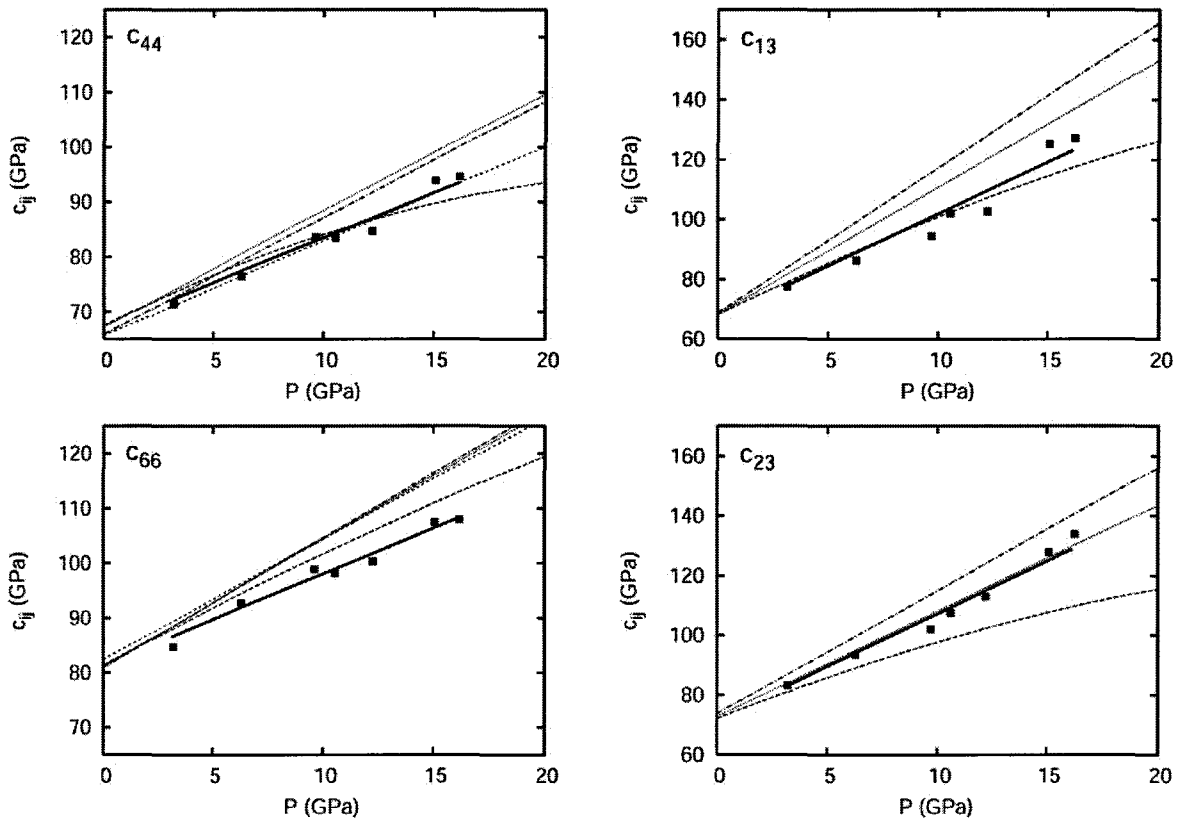
L'effet de la pression sur les constantes élastiques est relativement important (Figure 1-8). Depuis 1969, les niveaux de pression atteints n'ont cessé d'augmenter et les dernières données expérimentales disponibles aujourd'hui sont celles de Zha et al. (1998). On remarquera également sur la Figure 1-8 que, en général, les courbes extrapolées par les différents auteurs à partir de leurs données obtenues à pressions plus basses s'éloignent des résultats obtenus par Zha et al. (1998) lorsque la pression augmente.

FIGURE 1-8

(Cette page et la suivante) Valeurs des constantes élastiques selon différents auteurs (voir texte). Les droites en trait gras sont des ajustements par la méthode des moindres carrés pondérés, réalisés par les auteurs et correspondant aux données de Zha et al. (1998). Les courbes en pointillées de différents styles correspondent à des extrapolations de leurs résultats obtenus à des pressions plus basses.

- Zha et al. (1998) ■
- Yoneda et Morioka (1992) - - - - -
- Shimizu et al. (1982) ·····
- Graham et Barsch (1969) - · - · -
- Kumazawa et Anderson (1969) - - - - -





Li *et al.* (1996) ont calculé, à partir de la mesure des vitesses de propagation des ondes acoustiques, les modules de compressibilité et de cisaillement du polycristal de forstérite en bon accord avec les données d'autres auteurs (Figure 1-9).

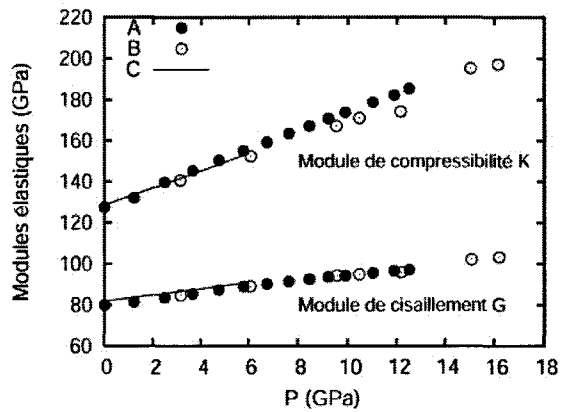


FIGURE 1-9

Comparaison des données issues de Li *et al.* (1996) (A), de Duffy *et al.* (1995)/Zha *et al.* (1996) (B) et Yoneda *et Morioka* (1992) (C) pour le polycristal de composition Fo_{100} . Ce graphique a été reproduit à partir de Liebermann (2000).

1.3 Plasticité du monocristal d'olivine

1.3.1 Systèmes de glissement dans l'olivine

1.3.1.1 Les systèmes de glissement potentiels

Les vecteurs de Burgers des dislocations sont généralement choisis parmi les plus petites translations du réseau et les plans de glissement parmi les plus denses. L'énergie élastique d'une dislocation est proportionnelle au carré de la norme de son vecteur de Burgers ($E_{el} \propto b^2$) et si l'on considère les dislocations non dissociées, il est évident que, pour l'olivine, une dislocation de vecteur de Burgers [010] est énergétiquement défavorable (Tableau 1-2) comparée aux dislocations de vecteur de Burgers [100] et [001].

Vecteur de Burgers	Module b (en Å)	Energie relative
[100]	4,76	1
[001]	5,99	1,6
[101]	7,65	2,6
[010]	10,2	4,6

TABLEAU 1-2

Les différents vecteurs de Burgers possibles dans l'olivine et leur énergie relative (en considérant qu'elle est proportionnelle à b^2).

Comme la plupart des minéraux silicatés il est possible et intéressant de représenter la maille cristalline de l'olivine par un empilement hexagonal compact des plans (100) d'oxygène (Figure 1-4) pour déterminer les plans de plus grande compacité. On trouve alors que les plans les plus denses sont les plans (100) (plan basal (0001)_h du réseau hexagonal compact), les plans {110} (plans pyramidaux du 1^{er} ordre), les plans (010) et {011} (plans prismatiques du 1^{er} ordre) et les plans (001) et {031} (les plans prismatiques du 2nd ordre). Cependant tous ces plans ne sont pas égaux face à la cristalochimie du cristal. En effet, les liaisons covalentes Si-O étant fortes, les plans doivent éviter de les couper et il est nécessaire d'envisager ce critère supplémentaire pour tenir compte de la facilité relative de glissement dans les différents systèmes.

En se basant sur ces considérations, Poirier (1975) a proposé les systèmes de glissement potentiels de l'olivine présentés dans le Tableau 1-3.

Basal	(100)[001]
Prismatique du 1 ^{er} ordre	(010)[001]
Pyramidal du 1 ^{er} ordre	(110)[001]
Prismatique du 1 ^{er} ordre	(010)[100]
Prismatique du 1 ^{er} ordre	(011)[100]
Prismatique du 2 ^{ème} ordre	(001)[100]
Prismatique du 2 ^{ème} ordre	(031)[100]

TABLEAU 1-3

Systèmes de glissement (d'après Poirier (1975)).

1.3.1.2 Les systèmes de glissement observés

1.3.1.2.1 *Dans les échantillons naturels*

Les roches du manteau supérieur qui peuvent être observées sont principalement celles qui sont retrouvées en surface. Elles ont des origines diverses et peuvent être classées suivant le mode de remontée auquel elles ont été soumises. On appelle "ophiolites", les roches qui ont été exhumées par des mouvements tectoniques et "xénolites", celles qui ont été "arrachées" au manteau supérieur lors d'éruptions volcaniques.

La composition moyenne des roches du manteau est celle des péridotites. Etant donnée l'étendue lexicale en géologie, il est utile de préciser quelques éléments de vocabulaire que nous utiliserons à plusieurs reprises dans ce chapitre. Les minéraux essentiels des péridotites sont l'olivine ($Mg_{0,9}Fe_{0,1}SiO_4$) à 60-70%, l'orthopyroxène ($Mg_{0,9}Fe_{0,1}SiO_3$) à 15-20% et le clinopyroxène (ou diopside) $CaMg(SiO_3)_2$ à 0-10%. Selon la teneur en diopside, il faut distinguer l'harzburgite (diopside < 5%) du lherzolite (diopside > 5%). On appelle également "dunite", le polycristal d'olivine.

Différents auteurs se sont intéressés à la détermination des mécanismes de déformation plastique de roches naturelles telles que des lherzolites provenant de massifs (Caristan (1975)) ou de xénolites (Boullier et Nicolas (1975); Gueguen (1977); Zeuch et Green (1977)). Gueguen (1979) a observé de nombreuses microstructures de dislocations dans des olivines de péridodite (provenant d'enclaves). Il a déterminé les systèmes de glissement par microscopie optique grâce à la technique de décoration par oxydation interne (Kohlstedt *et al.* (1976)²) et par microscopie électronique en transmission. Aucun système de glissement de vecteur de Burgers [010] n'a été observé et seuls les systèmes de vecteur de Burgers [100] et [001] semblent avoir été activés. En général, on observe les systèmes (0kl)[100] (les principaux plans étant (010), (100), (011), (021) et (031)) ainsi que les systèmes (010)[001], (100)[001] et {110}[001]. Plus précisément, les systèmes (0kl)[100] sont prédominants dans les nodules de kimberlite, alors que les systèmes {110}[001] le sont davantage dans les massifs et les

² Cette technique consiste à décorer le cœur des dislocations par précipitation de manganèse. Elle nécessite l'utilisation d'un recuit d'une heure à 900°C. Même s'il a été souligné que le recuit n'influait nullement la forme, l'emplacement et la distribution des dislocations, on accordera toujours plus de confiance aux observations réalisées en microscopie électronique en transmission. En effet, contrairement à la microscopie optique, la préparation d'échantillons en vue d'observations au microscope électronique en transmission ne réclame aucun recuit. De plus la MET permet de déterminer sans ambiguïté les vecteurs de Burgers des dislocations.

météorites. A propos de cette dernière catégorie de roche naturelle, les microstructures de déformation observées sont le résultat de chocs subis dans l'espace ou lors d'impacts à la surface de la Terre. Les premiers à avoir décrit les traces de déformation par choc dans l'olivine des météorites sont Carter *et al.* (1968). Ashworth et Barber (1975) ont déterminé, par microscopie électronique en transmission, les systèmes de glissement $\{110\}[001]$ et $(100)[001]$ comme étant ceux ayant participé activement à la déformation plastique de l'olivine dans des chondrites (météorites constituées de grains métalliques, de sphérules ou chondrules de pyroxène, d'olivine et d'autres minéraux moins présents). Ces observations ont d'ailleurs été plus tard confirmées par d'autres études sur des chondrites (Madon et Poirier (1983); Langenhorst *et al.* (1995)) et complétée par la détermination du système de glissement $(010)[001]$ (Joreau *et al.* (1997)). Le lecteur pourra trouver dans Leroux (2001) une revue plus complète des microstructures de déformation dans les minéraux (et notamment dans l'olivine) des météorites.

1.3.1.2.2 Dans les polycristaux déformés en laboratoire

Raleigh (1968) a étudié la déformation plastique d'un nodule de lherzolite à des températures inférieures à 1000°C , sous une pression de confinement de 500MPa et pour des vitesses de déformation de 10^{-2} à 10^{-6} s^{-1} . Les systèmes de glissement ont été déterminés de façon indirecte par observation des lamelles de déformation sous lumière polarisée en microscopie optique. Ces lamelles de déformation correspondent à des bandes de glissement produites par l'activation des dislocations d'un système de glissement. Si le plan de glissement des dislocations peut être déterminé avec plus ou moins de certitude, la direction de leur vecteur de Burgers est déduite de façon indirecte. Il a ainsi été constaté qu'il existait un changement des systèmes de glissement activés selon les conditions de déformation. Alors que l'on augmente la température ou que l'on diminue la vitesse de déformation, on passe d'un mécanisme de déformation contrôlé par le glissement de dislocations de vecteur de Burgers $[001]$ dans les plans $\{110\}$, (100) et (010) à un autre contrôlé par le glissement de dislocations $(0kl)[100]$ en passant par l'activation seule du système $\{110\}[001]$.

Ces observations ont été confirmées par Carter et Ave'Lallemant ((1970)) qui ont déterminé les systèmes de glissement activés (par la méthode d'observation des lamelles de déformation) lors de la déformation d'une dunite et d'une lherzolite, sur une large gamme de température (de 300°C à 1400°C), de vitesse de déformation (de 10^{-3} à 10^{-8} s^{-1}) et sous pression de confinement entre 500MPa et 3GPa . Ils aboutissent aux mêmes conclusions avec quelques précisions supplémentaires sur les différents systèmes de glissement. Aux très basses températures ($T < 400^{\circ}\text{C}$), le système $(100)[001]$ est activé. A des températures supérieures mais inférieures à environ 900°C , $\{110\}[001]$ est le système dominant. Aux hautes températures ($T > 1000^{\circ}\text{C}$), le glissement $[100]$ dans les plans $\{0kl\}$ devient dominant et, au-delà de $1200\text{-}1300^{\circ}\text{C}$, seul le système $(010)[100]$ semble être activé. Le même effet de la diminution de la vitesse de déformation sur la facilité du glissement $[100]$ par rapport au glissement $[001]$ a été constaté.

Alors que les résultats des deux précédents auteurs semblent converger vers une température de transition du glissement $[001]$ vers le glissement $[100]$ d'environ $900\text{-}1000^{\circ}\text{C}$, Zeuch et Green (1979) trouvent des densités comparables pour les deux types de dislocations au-delà de 1100°C . Ils interprètent ce résultat par le fait que leurs échantillons de dunite synthétique sont plus résistants à cause de leur faible teneur en eau et avancent l'argument d'un effet de la contrainte sur l'activation des systèmes de glissement.

Ces informations sur la déformation du polycristal permettent, dès lors, de dégager une première tendance : le glissement [010] est très difficile et n'a jamais été rencontré dans les polycristaux, le glissement [100] est le glissement des hautes températures et des basses contraintes alors que le glissement [001] est celui des basses températures et des hautes contraintes. Une température de transition entre les deux types de glissement vers 1000°C peut être proposée. Dans un souci de raffinement et dans le but de déterminer de façon plus quantitative la facilité relative des différents systèmes de glissement, il est nécessaire de s'intéresser aux résultats obtenus sur les monocristaux .

1.3.1.2.3 Dans les monocristaux orientés déformés en laboratoire

L'intérêt des essais de déformation sur des monocristaux d'olivine réside dans le fait qu'il est alors possible de solliciter préférentiellement un (ou plusieurs) système(s) de glissement en fonction de l'orientation. Nous avons rassemblé les différents résultats des études menées sur des monocristaux d'olivine, en sélectionnant ceux pour lesquels une analyse microstructurale a été entreprise ou pour lesquelles les données mécaniques ont été présentées (les conditions de déformation sont récapitulées dans le Tableau 1-4).

Olivine	Essai de déformation	Orientations utilisées	Température	Pression	Technique de caractérisation microstructurale	Auteurs
Fo ₉₂	fluage	[110]c, [011]c, [101]c	1150-1600°C	ambiante	microscopie optique	2, 3
Fo ₉₂	fluage	quelconques	1428-1650°C	ambiante	microscopie optique MET	11
Fo ₁₀₀	fluage	[110]c, [011]c, [101]c	1400-1650°C	ambiante	MET	4
Fo ₁₀₀	fluage	[110]c, [011]c, [101]c	1400-1650°C	ambiante	microscopie optique	8
Fo ₁₀₀	fluage	[110]c, [011]c, [101]c	1400-1650°C	ambiante	microscopie optique	5
Fo ₁₀₀	fluage	[110]c, [011]c, [101]c, [111]c	1280-1710°C	ambiante	microscopie optique	9
Fo ₁₀₀	ε constante	[110]c, [011]c, [101]c et quelconques	600-1250°C	1 GPa	MET	1
Fo ₉₂	essai de dureté	[110]c, [011]c, [101]c	20-1500°C	ambiante	microscopie optique	6
Fo ₉₂	essai de dureté	[110]c, [011]c, [101]c	20-900°C	ambiante	microscopie optique MET	12
Fo ₉₂	fluage	[110]c, [011]c, [101]c	1300-1500°C	ambiante	microscopie optique	10
Fo ₁₀₀	ε constante	[110]c, [011]c, [101]c	1350-1500°C	ambiante	microscopie optique MET	7
Fo ₉₂	ε constante	[110]c, [011]c, [101]c	1100-1300°C	300 MPa	MET	13

TABLEAU 1-4

Récapitulatif des différentes études concernant la déformation plastique d'olivines monocristallines. Y sont notamment consignées les conditions de déformation ainsi que les méthodes d'analyse microstructurale.

1 :	Phakey et al. (1972)	8 :	Darot (1980)
2 :	Durham et Goetze (1977a)	9 :	Michaut (1981)
3 :	Durham et al. (1977)	10 :	Bai et Kohlstedt (1992b), Bai et al. (1991)
4 :	Gueguen et Darot (1982)	11 :	Kohlstedt et Goetze (1974)
5 :	Darot et Gueguen (1981)	12 :	Gaboriaud et al. (1981)
6 :	Evans et Goetze (1979)	13 :	Mackwell et al. (1985)
7 :	Kashima et al. (1983)		

Les monocristaux d'olivine ont été essentiellement déformés suivant les axes de sollicitation à 45° des directions cristallographiques du cristal : [110]c, [011]c, [101]c et [111]c (l'indice « c » signifiant que les axes de sollicitation sont repérés dans un repère cubique). Ces axes permettent de sélectionner ou d'inhiber tel ou tel système de glissement. Nous donnons, dans le Tableau 1-5, les facteurs de Schmid correspondant aux systèmes de glissement communément observés pour les quatre axes de sollicitations utilisés et nous représentons sur la Figure 1-10 ceux qui sont alors les plus susceptibles d'être activés.

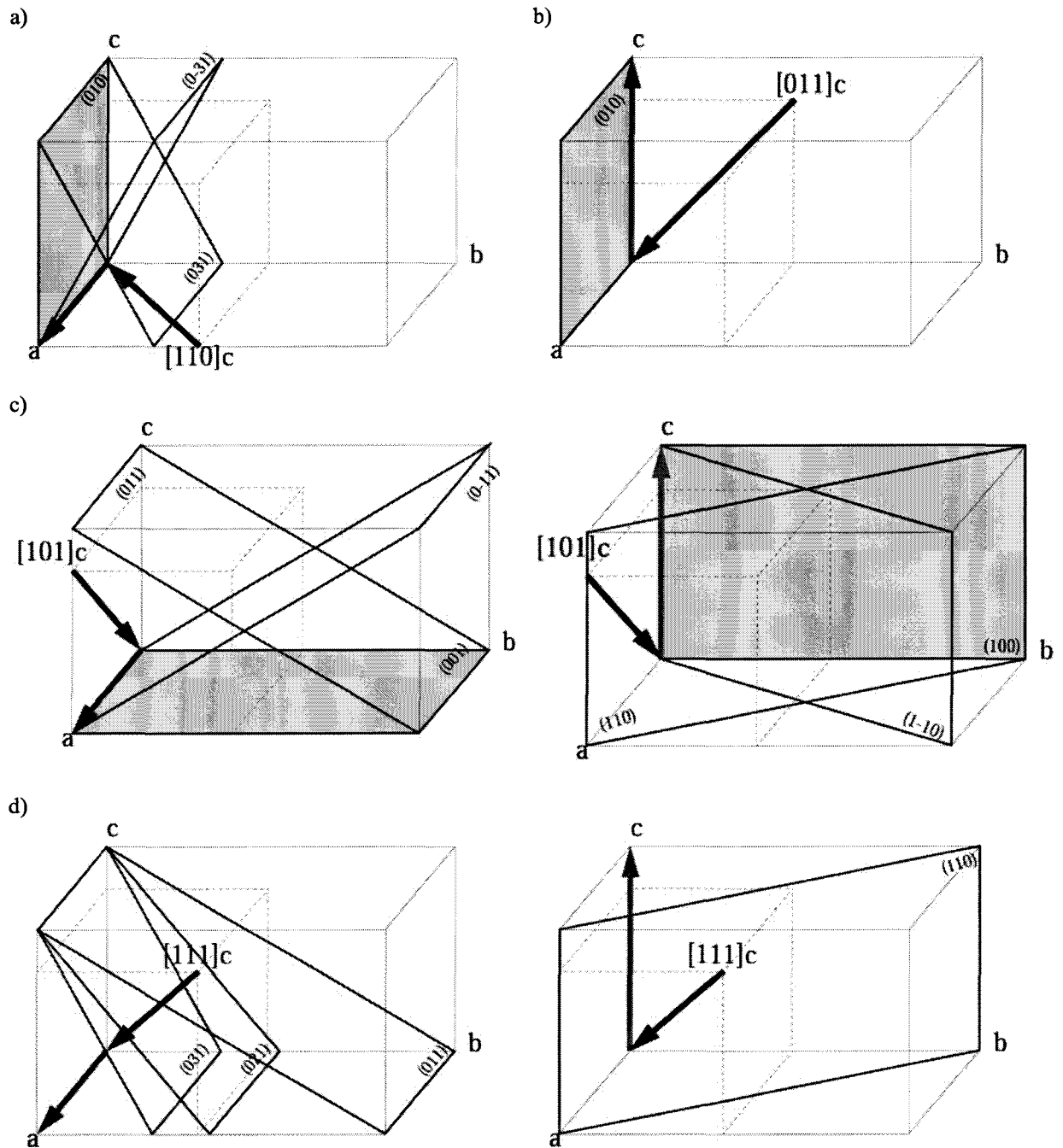


FIGURE 1-10

Systèmes de glissement dont le facteur de Schmid est non nul et supérieur à 0,4 suivant l'axe de sollicitation utilisé ($[110]c$, $[011]c$, $[101]c$ et $[111]c$, respectivement pour les figures a, b, c et d). Les vecteurs de Burgers sont représentés par les flèches bleue ($[100]$) ou rouge ($[001]$). Les plans de glissement en gris correspondent aux plans appartenant aux systèmes de glissement les plus activés.

Même si d'autres systèmes sont sollicités avec des axes de sollicitation $[110]c$ et $[011]c$, les systèmes de glissement $(010)[100]$ et $(010)[001]$ le sont davantage (leur facteur de Schmid est maximal et vaut 0,5). Ainsi, suivant les orientations $[110]c$ et $[011]c$, on peut s'attendre à réaliser des essais de déformation en glissement simple par activation des systèmes $(010)[100]$ et $(010)[001]$ respectivement. Par contre un essai de déformation suivant l'axe de sollicitation $[101]c$ entraînerait un glissement duplex car il sollicite de la même manière les

systèmes (001)[100] et (100)[001] avec un facteur de Schmid maximal. La situation pour un axe de sollicitation [111]c est encore plus complexe puisque plusieurs systèmes de glissement ont des facteurs de Schmid très proches.

Système de glissement	[110]c	[011]c	[101]c	[111]c
(001)[100]	0,00	0,00	0,50	0,33
(010)[100]	0,50	0,00	0,00	0,33
(011)[100]	0,25	0,00	0,43	0,46
(0-11)[100]	-0,25	0,00	0,43	0,12
(021)[100]	0,38	0,00	0,32	0,47
(0-21)[100]	-0,38	0,00	0,32	-0,04
(031)[100]	0,43	0,00	0,25	0,45
(0-31)[100]	-0,43	0,00	0,25	-0,13
(100)[001]	0,00	0,00	0,50	0,33
(010)[001]	0,00	0,50	0,00	0,33
(110)[001]	0,00	0,21	0,45	0,44
(1-10)[001]	0,00	-0,21	0,45	0,16

TABLEAU 1-5

Facteurs de Schmid pour les différents systèmes de glissement suivant les quatre axes de sollicitation à 45° des axes cristallographiques du cristal d'olivine.

Deux études (Phakey *et al.* (1972) et Kohlstedt et Goetze (1974)) se sont un peu écartées de ces directions pour solliciter d'autres systèmes de glissement. Malheureusement seul Phakey *et al.* (1972) ont mené une étude des microstructures en identifiant systématiquement, par microscopie électronique en transmission, les systèmes de glissement ayant participé à la déformation plastique. La Figure 1-11 représente une projection stéréographique d'un cristal d'olivine avec les courbes de niveau du facteur de Schmid pour certains systèmes de glissement. On y trouvera également les directions des axes de sollicitation utilisés par les différents auteurs.

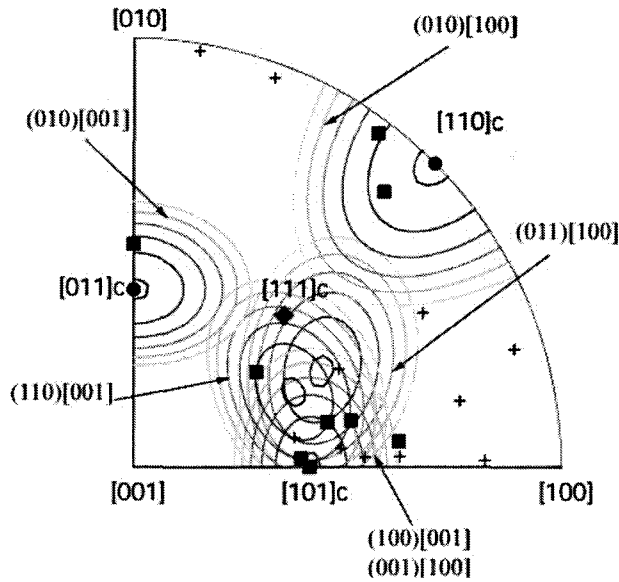


FIGURE 1-11

Projection stéréographique représentant les courbes de niveau de la valeur du facteur de Schmid pour différents systèmes de glissement : (010)[100], (011)[100], (010)[001], (110)[001], (100)[001] et (001)[100]. Par souci de clarté, les valeurs des facteurs de Schmid sont comprises entre 0,40 et environ 0,50.

■ : 1

+ : 11

● : 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 13

- 1 : Phakey *et al.* (1972)
 2 : Durham et Goetze (1977a)
 3 : Durham *et al.* (1977)
 4 : Gueguen et Darot (1982)
 5 : Darot et Gueguen (1981)
 6 : Evans et Goetze (1979)
 7 : Kashima *et al.* (1983)

- 8 : Darot (1980)
 9 : Michaut (1981)
 10 : Bai et Kohlstedt (1992b), Bai *et al.* (1991)
 11 : Kohlstedt et Goetze (1974)
 12 : Gaboriaud *et al.* (1981)
 13 : Mackwell *et al.* (1985)

Nous avons récapitulé sur la Figure 1-12, sur une échelle de température, les différents systèmes qui ont été activés et qui ont été observés par différents auteurs dans des monocristaux d'olivine déformés plastiquement à contrainte constante (fluage), à vitesse de déformation constante ou lors d'essais de dureté.

L'orientation [110]c :

Suivant cette orientation, le système (010)[100] est le plus sollicité. Il a largement été observé et est considéré comme étant le plus actif jusqu'à très haute température. On ne dispose pas d'observations pour des températures inférieures à 800°C, mais on peut noter qu'à 800°C le système (010)[100] devient tellement difficile que le système (100)[010], inattendu car très défavorable, est activé (Phakey *et al.* (1972)). (021)[100] a été activé et observé à haute température (Darot (1980)) mais reste minoritaire comparé à (010)[100].

L'orientation [011]c :

Alors que pour la précédente orientation, on sollicitait le glissement [100], on s'attend à ce que l'orientation [011]c active exclusivement le système (010)[001], inhibant complètement le glissement [100]. On observe effectivement le système (010)[001] à plutôt haute température (Bai et Kohlstedt (1992b)). Néanmoins, à plus basse température, on a uniquement constaté l'activation des systèmes {110}[001] et (100)[001] (Phakey *et al.* (1972)) et, à très haute température (1500°C-1650°C), le système (010)[001] n'a pas l'exclusivité puisque (001)[100] et (010)[100] participent également à la déformation plastique du monocristal (Darot (1980), Darot et Gueguen (1981), Gueguen et Darot (1982)). Sauf pour {110}[001] pour lequel le facteur de Schmid est non nul, les trois autres systèmes ne sont normalement pas sollicités. Il est donc surprenant qu'ils soient activés et ceci peut s'expliquer par le fait que l'axe de sollicitation n'est pas strictement parallèle à la direction [011]c, entraînant des facteurs de Schmid faibles mais non nuls pour les systèmes (100)[001], (010)[100] et (001)[100].

On peut donc affirmer que le glissement [001] est plus facile dans les plans {110} et (100) à plutôt basse température ($T < 1000^\circ\text{C}$) et que le glissement [100] l'est davantage à très haute température ($T > 1500^\circ\text{C}$) dans les plans (010) et (001).

L'orientation [101]c :

Cette orientation est intéressante car elle sollicite de la même manière les systèmes (100)[001] et (001)[100] et a été largement étudiée. Les facteurs de Schmid sont également non nuls mais plus faibles pour les systèmes (0kl)[100] et {110}[001]. A très basse température, grâce à des essais de dureté suivant cette orientation (Gaboriaud *et al.* (1981)), on constate que seul le système (100)[001] est activé. A partir de 600°C , vient s'y ajouter le système {110}[001]. Au-delà de 1000°C , le glissement [100] devient prépondérant dans le plan (001) et dans les plans (0kl) à très haute température ($T > 1500^\circ\text{C}$). Le glissement [001] n'est pas complètement inhibé à haute température mais devient minoritaire dans le plan (100).

L'orientation [111]c :

Suivant cette orientation, plusieurs systèmes sont sollicités. Nous ne disposons d'observations qu'à très haute température (Michaut (1981)) et on peut constater que le glissement [001] y est absent. Par contre le glissement [100] est activé dans les plans (010), (001) et (0kl).

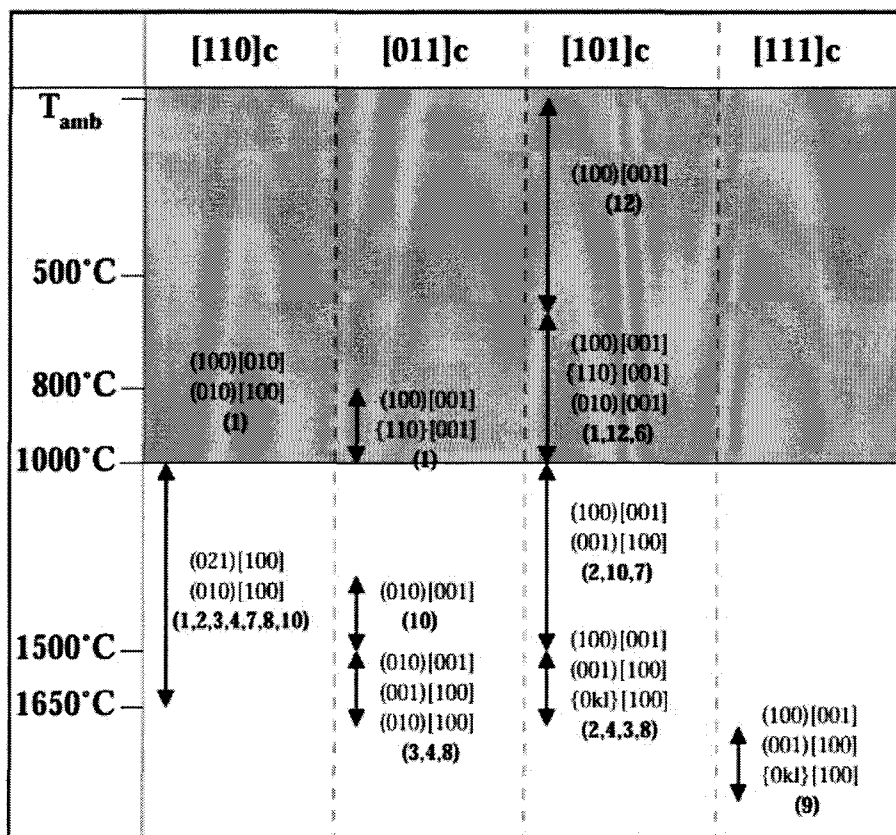


FIGURE 1-12

Systèmes de glissement observés dans des monocristaux d'olivine déformés suivant les quatre directions à 45° des axes cristallographiques. Les références sont numérotées de la même façon que pour le Tableau 1-4.

- | | | | |
|-----|--------------------------|------|---|
| 1 : | Phakey et al. (1972) | 8 : | Darot (1980) |
| 2 : | Durham et Goetze (1977a) | 9 : | Michaut (1981) |
| 3 : | Durham et al. (1977) | 10 : | Bai et Kohlstedt (1992b), Bai et al. (1991) |
| 4 : | Gueguen et Darot (1982) | 11 : | Kohlstedt et Goetze (1974) |
| 5 : | Darot et Gueguen (1981) | 12 : | Gaboriaud et al. (1981) |
| 6 : | Evans et Goetze (1979) | 13 : | Mackwell et al. (1985) |
| 7 : | Kashima et al. (1983) | | |

De ces observations microstructurales, nous pouvons confirmer certains résultats obtenus sur le polycristal et tirer quelques tendances :

L'orientation [101]c qui sollicite de la même manière un système de vecteur de Burgers [001] et un système de vecteur de Burgers [100], confirme l'existence d'une température de transition du glissement [001] à basse température vers le glissement [100] à plus haute température. Cette température est d'environ 1000°C.

Le glissement [001] semble plus facile dans les plans (100) et {110} que dans le plan (010) à basse température (cf. orientation [011]c). A haute température, cette constatation n'est plus valable car le système de glissement (010)[001] est activé.

Il ne semble pas y avoir d'anisotropie plastique entre les différents systèmes de glissement [100] à haute température (cf. orientations [101]c et [111]c). On ne peut étendre cette affirmation aux plus basses températures puisque le glissement [100] n'y a pas été observé.

Pour préciser ces conclusions et se diriger vers un modèle plus quantitatif, nous allons maintenant nous intéresser aux données mécaniques obtenues suivant ces axes de sollicitation spécifiques.

1.3.2 Comportement mécanique du monocristal d'olivine

1.3.2.1 Déformation à basse température ($T < 1000^{\circ}\text{C}$)

- *Résultats de Gaboriaud et al. (1981):*

Associés à une analyse de la microstructure, les essais d'indentation permettent d'appliquer localement les contraintes nécessaires pour pouvoir localiser la transition fragile-ductile dans des matériaux très durs. Gaboriaud *et al.* (1981), en utilisant ce type d'essai mécanique sur des monocristaux d'olivine de San Carlos (Fo_{92}), ont pu mettre en évidence une température de transition fragile-ductile de 600°C (soit environ 0,4 fois la température de fusion absolue), au-dessous de laquelle des fractures s'ouvrent et se propagent sans multiplication de dislocations (rupture fragile) et au-delà de laquelle on trouve, en front de fissure, une zone plastique (rupture ductile). Même si le champ de contrainte sous l'indenteur est complexe, ces essais d'indentation peuvent être assimilés à des essais réalisés suivant la direction $[101]_c$. Pour des températures inférieures à la température de transition, le système $(100)[001]$ est le seul activé, ce qui est cohérent avec le fait qu'il est très sollicité suivant cet axe de sollicitation. Au-delà de la température de transition, $\{110\}[001]$ est activé à son tour. Il semble donc que la température de transition fragile-ductile soit liée à l'apparition du glissement de vecteur de Burgers $[001]$ dans les plans $\{110\}$.

- *Résultats de Phakey et al. (1972):*

L'étude du comportement mécanique de l'olivine peut être poussée plus loin à l'aide d'essais de déformation à vitesse constante. C'est ce qu'ont réalisé Phakey *et al.* (1972) en déformant des monocristaux d'une olivine de qualité gemme, de composition Fo_{92} , à l'aide d'une machine de déformation de type « Griggs » qui permet de déformer l'échantillon sous des pressions de confinement solide de l'ordre du gigapascal. Les résultats mécaniques obtenus sont rappelés dans la Figure 1-13. Des échantillons ont été déformés suivant les orientations classiques $[110]_c$, $[011]_c$ et $[101]_c$ à 600°C , 800°C et 1000°C (les résultats obtenus suivant l'orientation $[111]_c$ à 1250°C ne sont pas discutés ici). Les auteurs attribuent peu de précisions à leurs résultats, à cause notamment de la présence de friction à l'interface piston/milieu de confinement, de déformations de l'appareillage et d'erreurs sur la mesure de la température. Deux essais ont été effectués à 600°C suivant $[101]_c$ et les niveaux de contrainte atteints sont anormalement bas par rapport aux essais à 800°C , sans qu'aucune explication n'ait été apportée. Il semble toutefois que l'échantillon déformé à cette température présente localement des fractures et il est possible que la limite d'élasticité dans l'olivine soit limitée aux basses températures par la rupture fragile. A 800°C , il est plus difficile de déformer le monocristal suivant l'orientation $[110]_c$ que suivant les orientations $[011]_c$ et $[101]_c$. A 1000°C , les niveaux de contrainte deviennent comparables : les contraintes requises pour déplacer les dislocations de vecteur de Burgers $[100]$ et $[001]$ sont égales. Ceci est cohérent avec le fait que le polycristal se déforme essentiellement par activation du glissement de vecteur de Burgers $[001]$ à des températures inférieures à 1000°C . Le changement de pente sur les courbes « contrainte-déformation » n'est pas interprété par les auteurs comme étant dû à un seuil de plasticité mais comme étant un changement dans le taux

de durcissement. Néanmoins, comme nous le préciserons plus tard, ce changement de pente peut également être le fait d'un phénomène de multiplication de dislocations. Ainsi l'explication suivante peut être fournie pour expliquer la forme des courbes contrainte-déformation. La Figure 1-14 montre que la densité ρ de dislocations augmente encore pour un taux de déformation de 10%, à 800°C. Pour des températures inférieures à 1000°C, les dislocations produites seraient peu mobiles et, pour satisfaire à la relation d'Orowan ($\dot{\epsilon} = \rho b v$ avec v la vitesse des dislocations), il serait nécessaire d'augmenter la contrainte. Cette augmentation de contrainte est d'autant moins importante que la densité de dislocations est grande et la contrainte n'est pas stabilisée tant que la vitesse des dislocations ou leur densité n'est pas suffisante pour que la vitesse de déformation soit atteinte.

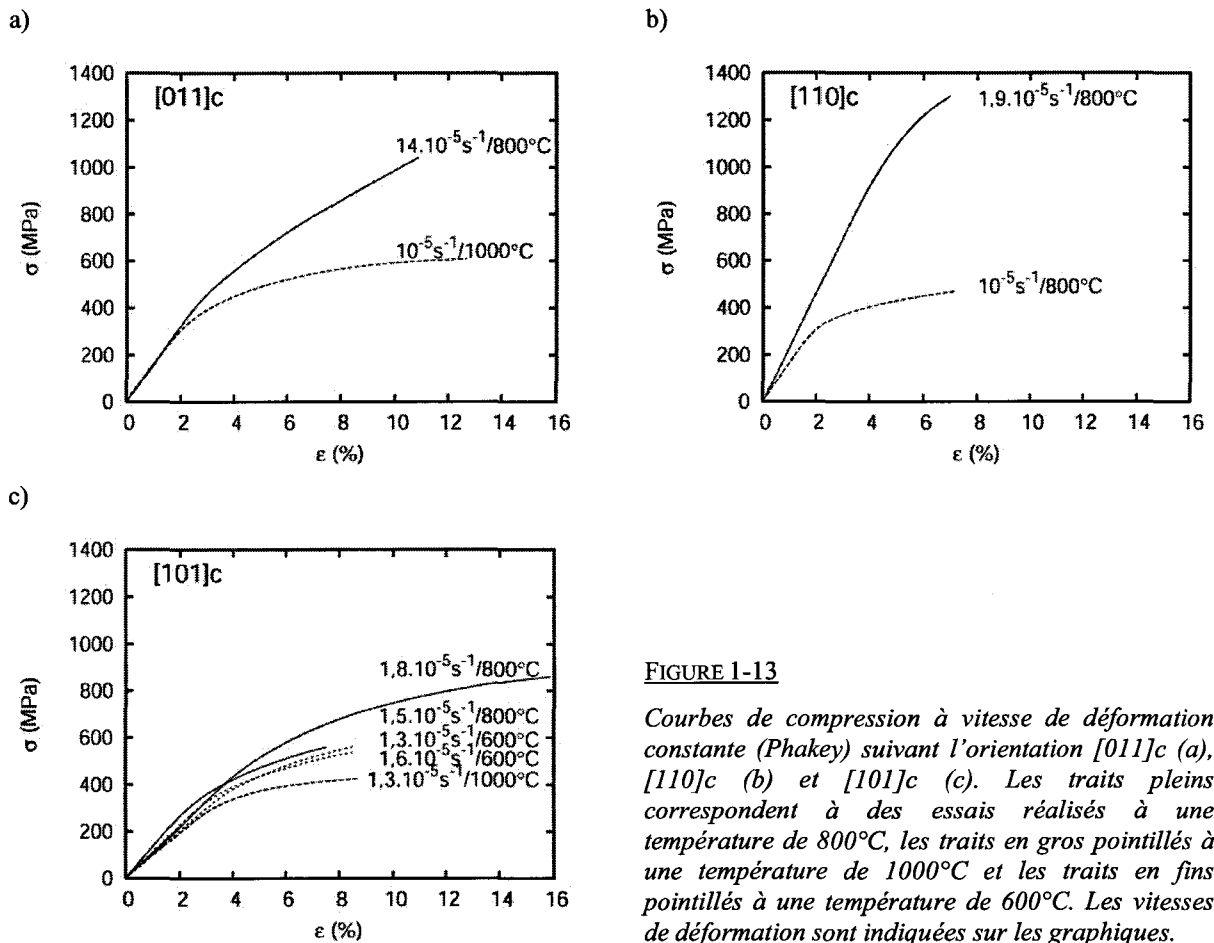


FIGURE 1-13

Courbes de compression à vitesse de déformation constante (Phakey) suivant l'orientation [011]c (a), [110]c (b) et [101]c (c). Les traits pleins correspondent à des essais réalisés à une température de 800°C, les traits en gros pointillés à une température de 1000°C et les traits en fins pointillés à une température de 600°C. Les vitesses de déformation sont indiquées sur les graphiques.

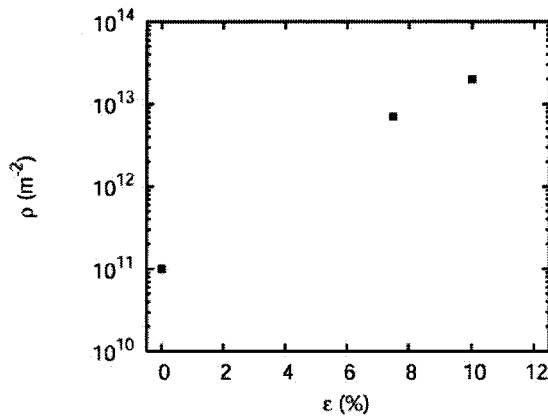


FIGURE 1-14

Evolution de la densité de dislocations en fonction du taux de déformation. Donnée issues d'essais effectués suivant [101]c à 800°C (Phakey *et al.* (1972)).

Aux températures inférieures à 1000°C, les mécanismes de déformation sont assez clairs. La mobilité des dislocations est très fortement contrôlée par la cristallographie et le glissement de vecteur de Burgers [001] est prédominant. En microscopie optique, Gaboriaud *et al.* (1981) montrent que les dislocations des systèmes de glissement de vecteur de Burgers [001] consistent en de longues et droites parties vis. Phakey *et al.* (1972) confirment cette observation par l'utilisation de la microscopie électronique en transmission. Ces derniers ont montré également que, suivant [110]c (orientation qui n'active pas le glissement [001]), des dislocations vis de vecteur de Burgers [010] sont présentes à 800°C. Les dislocations de ce type sont énergétiquement défavorables et ne sont pas observées dans les polycristaux. Elles sont absentes à 1000°C au profit des dislocations du système (010)[100], lesquelles consistent en des boucles de forme carrée à cette température. A 800°C et 1000°C, des enchevêtrements de dislocations alignés suivant [001] sont fréquents dans les échantillons déformés suivant [101]c. Pour interpréter ce type d'arrangement, Phakey *et al.* (1972) ont proposé deux hypothèses. L'intersection entre dislocations de vecteur de Burgers différents ([001] et [100]) serait à l'origine de la formation de crans, sessiles en l'absence de montée, entravant le déplacement des dislocations. Il est possible aussi d'envisager le glissement dévié (et le double glissement dévié) comme étant responsable de ces enchevêtrements et de la formation de dipôles. Cette seconde hypothèse est d'autant plus plausible que de longs segments de dislocations déviés ont été observés sur les longues et droites parties vis des dislocations de vecteur de Burgers [001] à 1000°C. Quelques évidences de montée sont présentes dès 1000°C et peuvent expliquer la formation de boucles prismatiques à partir de dipôles coins.

1.3.2.2 Déformation à haute température (T>1000°C)

Le tableau 2 montre qu'à des températures supérieures à 1000°C, la déformation plastique du monocristal d'olivine a été étudiée en utilisant deux types d'essais mécaniques. Certains auteurs (Kashima *et al.* (1983), Mackwell *et al.* (1985)) se sont servis d'essais de compression à vitesse de déformation constante, d'autres d'essais de fluage (Kohlstedt et Goetze (1974), Darot et Gueguen (1981), Durham *et al.* (1977), Durham *et al.* (1979), Michaut (1981), Darot (1980)). Bien que, en laboratoire, il ne soit pas possible de reproduire les vitesses de déformation mises en œuvre dans le manteau, beaucoup d'études ont porté sur la détermination d'équations rhéologiques de l'olivine par des essais de fluage³ à hautes températures en vue de les extrapoler aux conditions

³ Pour déterminer une énergie d'activation, il est possible de mesurer la variation de la vitesse de déformation lors d'un saut de température à contrainte constante. Cette méthode simple est plus adaptée pour les essais de fluage. Pour les essais de

du manteau terrestre. Ces relations relient la vitesse de déformation $\dot{\epsilon}$ aux deux autres paramètres, la température T et la contrainte σ . Dans la plupart des études, le comportement rhéologique de l'olivine est modélisé par une loi-puissance du type :

$$\dot{\epsilon} = A\sigma^n \exp\left(-\frac{Q}{kT}\right) \quad (1-1)$$

Les deux types d'essais mécaniques impliquent les mêmes processus physiques (il existe des équivalences entre les formes des courbes de fluage $\dot{\epsilon} = f(t)$ à contrainte constante et les courbes de compression $\sigma = f(\epsilon)$ à vitesse de déformation constante) et permettent d'obtenir des informations complémentaires.

- *Résultats de Kashima et al. (1983):*

Kashima *et al.* (1983) ont déformé des monocristaux synthétiques de forstérite à vitesse de déformation constante, à des températures comprise entre 1350°C et 1500°C, sous pression ambiante, suivant [110]c et [101]c. Leurs monocristaux de départ contiennent peu de dislocations ($\rho=10^8 \text{ m}^{-2}$). Les Figure 1-15a et Figure 1-15b montrent que la contrainte d'écoulement, suivant l'orientation [110]c, dépend fortement de la température de déformation et que l'existence d'un crochet de compression est d'autant plus marquée que la température est basse. Un effet identique de la vitesse de déformation peut être constaté sur la Figure 1-16: la contrainte d'écoulement et la hauteur du crochet de compression sont d'autant plus importantes que la vitesse de déformation est grande. Le crochet de compression est suivie d'un palier où la consolidation est faible, voire nulle.

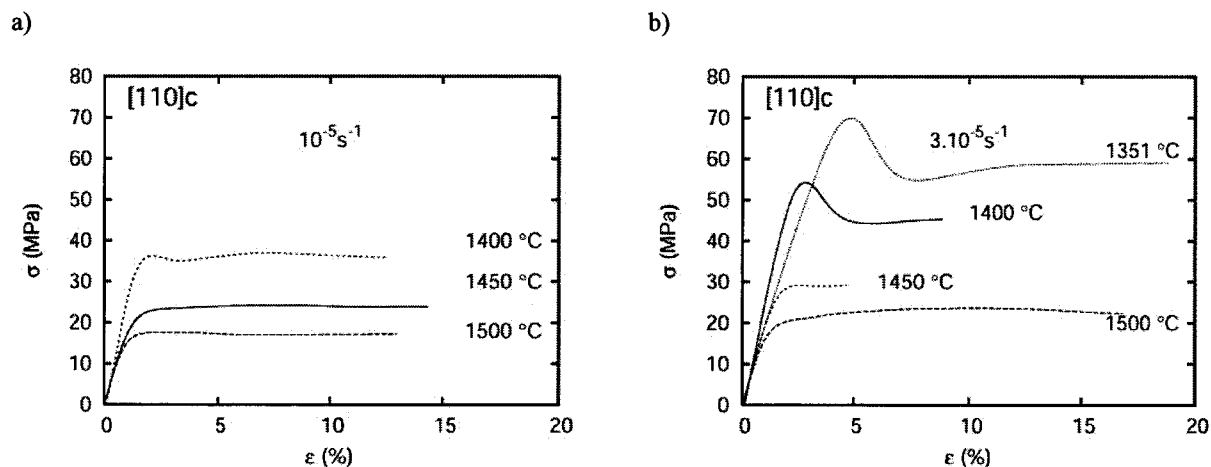


FIGURE 1-15

Courbes « contrainte-déformation » obtenues pour des monocristaux de forstérite synthétique déformés en compression suivant [110]c (Kashima et al. (1983)). Les vitesses de déformation sont respectivement 10^{-5} s^{-1} et 3.10^{-5} s^{-1} pour a) et b) et les températures de l'essai sont indiquées sur le graphique.

déformation à vitesse constante, il est nécessaire de combiner la variation de contrainte lors d'un saut de température à vitesse constante et la variation de contrainte lors d'un saut de vitesse de déformation à température constante pour déterminer l'énergie d'activation.

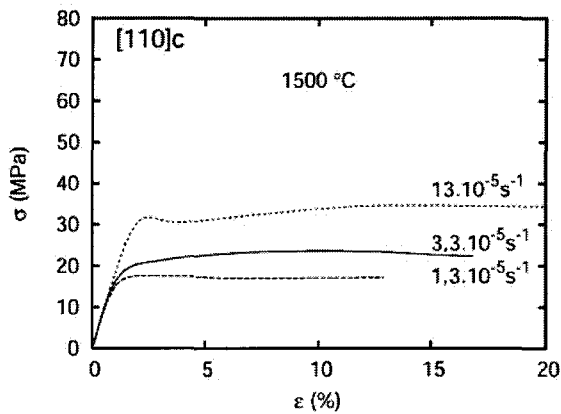


FIGURE 1-16

Courbes « contrainte-déformation » obtenues pour des monocristaux de forstérite synthétique déformés en compression suivant [110]c (Kashima et al. (1983)). La température de déformation est de 1500°C et les vitesses de déformation sont indiquées sur le graphique.

Le changement de forme constaté de l'échantillon au cours de la déformation en compression suivant [110]c confirme le fait que le système (010)[100] participe majoritairement à la déformation. La rotation de l'échantillon par rapport à l'axe de sollicitation est mise en évidence par l'étude par rayons X de l'orientation du cristal.

Une étude de la microstructure par microscopie électronique en transmission, à différents stades de la déformation du monocristal, montre qu'aucune organisation des dislocations n'a lieu à la limite d'élasticité supérieure (sommet du crochet de compression). Les sources commencent à produire des dislocations du système (010)[100] dont les parties coins sont plus longues et droites que les parties vis. La microstructure s'organise et devient hétérogène à la limite d'élasticité inférieure, avec des zones plus denses que d'autres en dislocations. Après le crochet de compression, les dislocations s'organisent en sous-joints de flexion composés de dislocations coins de vecteur de Burgers [100] dans les zones les plus denses.

La présence du crochet de compression peut être expliquée de la façon suivante. La densité de dislocations du matériau de départ est faible (10^8m^{-2}). Pour assurer la vitesse de déformation imposée par la machine de déformation, il faut donc augmenter la vitesse des dislocations pour qu'elle satisfasse à la loi d'Orowan $\dot{\epsilon} = \rho b v$. Il faut alors augmenter fortement la contrainte car la vitesse v dépend de cette dernière. A la limite d'élasticité supérieure, les dislocations se multiplient brusquement et pour satisfaire à la loi d'Orowan, les dislocations doivent se déplacer à une vitesse plus faible, d'où la chute de contrainte amenant à la limite d'élasticité inférieure. On comprend alors facilement l'effet que peut avoir une augmentation de la vitesse de déformation sur la hauteur du crochet de compression : une vitesse de déformation importante n'est atteinte que si on augmente fortement la contrainte. La nature thermiquement activée du glissement dans l'olivine est évidente : la contrainte d'écoulement dépend fortement de ce paramètre. Plus la température est élevée, moins il est nécessaire d'augmenter la contrainte pour rendre les dislocations mobiles. Ainsi la hauteur du crochet de compression est une fonction décroissante de la température de déformation.

Suivant [101]c, les systèmes (100)[001] et (001)[100] sont sollicités de la même manière. Les effets de la vitesse de déformation et de la température sont présentés sur les Figure 1-17a et Figure 1-17b. La contrainte d'écoulement est, dans ce cas aussi, fonction de ces deux paramètres. On peut également voir un crochet de compression mais l'effet de la vitesse de déformation ou de la température sur sa taille n'est pas évident. A environ 9% de déformation, des dislocations appartenant au système (001)[100] sont présentes mais aucun sous-joint n'est formé. Les parties vis des dislocations sont plus nombreuses mais elles ne sont ni très longues ni très

droites. A environ 30% de déformation, le système (100)[001] est activé en plus du premier système et des sous-joints de torsion composés de dislocations vis des deux systèmes sont visibles. La consolidation semble plus importante suivant cette orientation. L'analyse par rayons X montre que l'échantillon tourne par rapport à l'axe de sollicitation à cause du glissement simple (001)[100] jusqu'à ce que (100)[001] soit activé à son tour. Le durcissement peut être expliqué par le fait que l'échantillon se déforme d'abord par glissement simple (001)[100] (stade I) puis on entre dans le stade II après 25 à 35% de déformation lorsque les dislocations du système (100)[001] sont rendues mobiles (peut-être à cause d'un effet de la rotation du cristal) et interagit avec la forêt de dislocations du système primaire ou avec les parois de dislocations formées lors du stade I. Néanmoins ces résultats et l'interprétation que nous en avons faite sont à considérer avec précaution car les auteurs soulignent que les courbes « contrainte-déformation » suivant [101]c sont peu reproductibles et que les coefficients de durcissement sont instables.

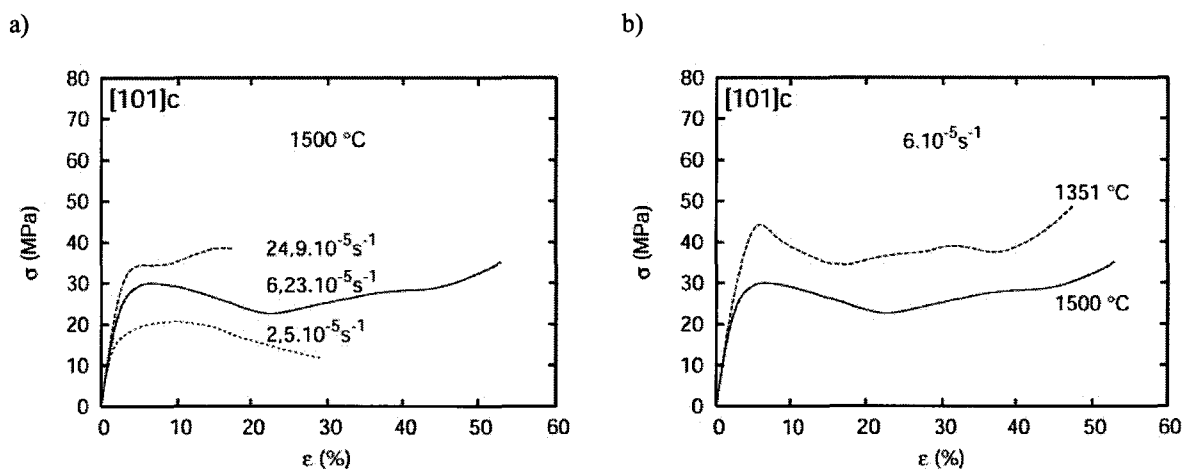


FIGURE 1-17

Effet de la vitesse de déformation à 1500°C (a) et de la température à environ $6 \cdot 10^{-5} s^{-1}$ (b) sur la courbe « contrainte-déformation » du monocristal d'olivine suivant [101]c (Kashima et al. (1983))

- Résultats de Mackwell et al. (1985):

Les crochets de traction visibles sur les courbes « contrainte-déformation » d'une forstérite pure, le sont moins ou pas du tout sur celles d'une olivine Fo_{92} de San Carlos (Figure 1-18). Mackwell et al. (1985) ont déformé des monocristaux de cette composition à 1300°C, sous 300MPa de pression, dans une machine de Paterson. Pour les mêmes orientations, les niveaux de contrainte d'écoulement obtenus sont comparables à ceux déterminés dans l'étude présentée précédemment (légèrement plus importante à cause de la température de déformation moins importante). La contrainte nécessaire à la déformation plastique des monocristaux orientés suivant [011]c est plus importante que pour les deux autres. L'absence de crochet de compression peut s'expliquer par le fait que la densité initiale de dislocations n'est pas aussi basse que dans les monocristaux synthétiques de forstérite de Kashima et al. (1983). Aucune information n'est disponible sur la densité de dislocations des monocristaux avant déformation, mais le fait qu'il s'agisse de monocristaux naturels peut laisser supposer qu'ils contiennent déjà des défauts. Les échantillons ont certes été déformés jusqu'à des taux de déformations plus faibles (environ 10%), mais ils ne présentent pas (ou très peu) de consolidation sur leur courbe « contrainte-déformation » quelle que soit leur orientation.

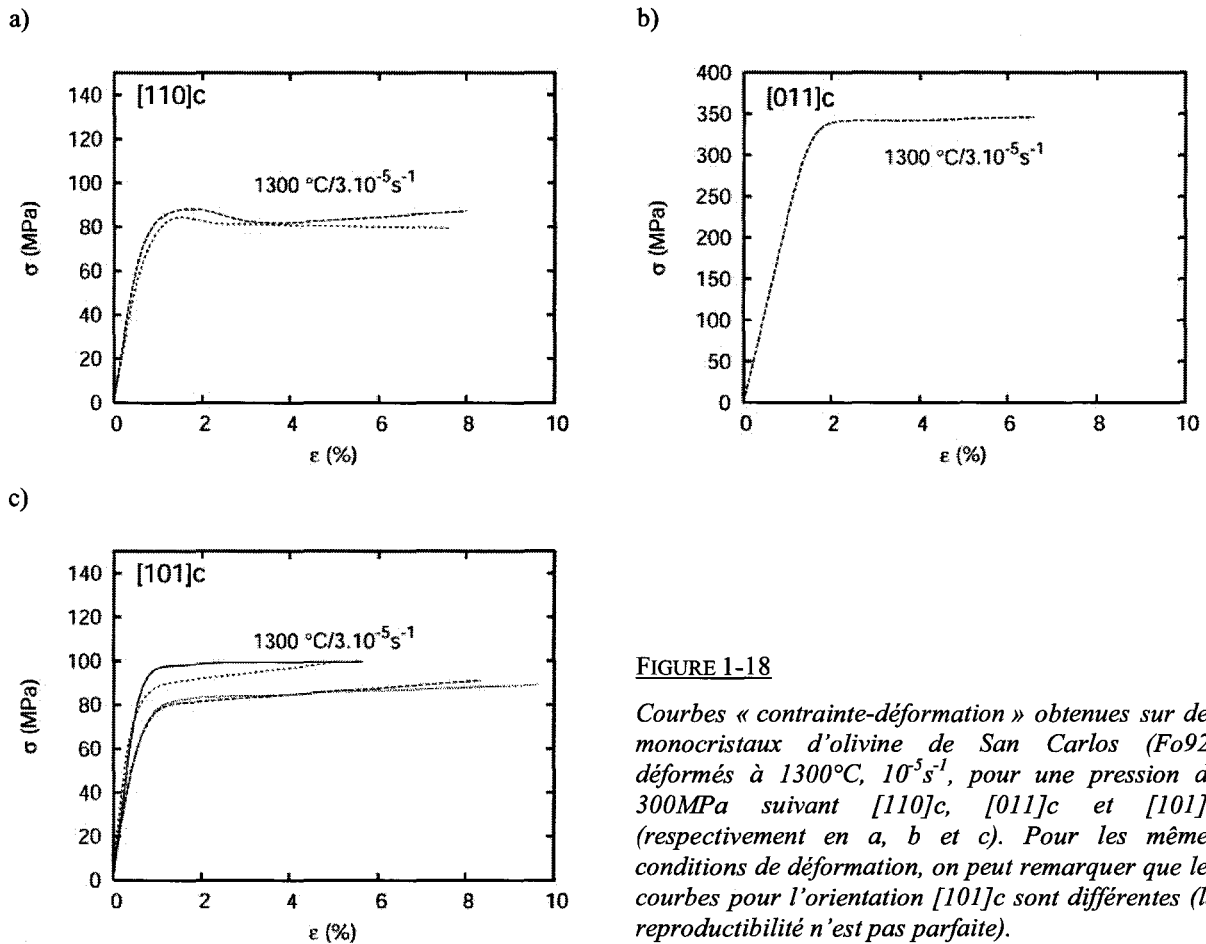


FIGURE 1-18

Courbes « contrainte-déformation » obtenues sur des monocristaux d'olivine de San Carlos (Fo92) déformés à 1300°C , 10^{-5}s^{-1} , pour une pression de 300MPa suivant [110]c, [011]c et [101]c (respectivement en a, b et c). Pour les mêmes conditions de déformation, on peut remarquer que les courbes pour l'orientation [101]c sont différentes (la reproductibilité n'est pas parfaite).

- Résultats de Durham et al. (1979):

Durham et al. (1979) ont réalisé des essais de fluage à très haute température (1480°C - 1680°C) et basses contraintes (de 1,5MPa à 30MPa environ) pour étudier la déformation de monocristaux synthétiques de forstérite. Ils ont constaté qu'une contrainte de cisaillement minimale de 10MPa environ était nécessaire pour que leurs échantillons se déforment (aucune déformation n'a été constatée en dessous de 7,8MPa). Par contre les échantillons qui ont subi une prédéformation à des contraintes supérieures à 10MPa se déformaient à des contraintes inférieures à 7,8MPa. Les dislocations du monocristal brut de croissance sont générées et se multiplient pour $\sigma > 10\text{MPa}$, mais elles sont mobiles pour $\sigma < 10\text{MPa}$. Ceci explique la présence de crochets de traction lors des essais de déformation à vitesse constante sur les monocristaux synthétiques de forstérite (Kashima et al. (1983)). C'est également compatible avec leur absence sur les essais de Mackwell et al. (1985) pour lesquels nous avons supposé que les monocristaux utilisés contenaient des dislocations préexistantes.

Pour déterminer le comportement rhéologique de l'olivine d'un point de vue phénoménologique, il est plus facile de s'intéresser au fluage. Les conditions de déformation et les principaux résultats obtenus sont résumés dans le Tableau 1-6.

Orientation	Température (°C)	Contrainte (MPa)	Composition	n	Q (eV)	Référence
Divers	1430-1650	5-150	FO ₉₂	variable	5,4	Kohlstedt et Goetze (1974)
[110]c	1400-1600	10-40	FO ₉₂	3,6	5,4	Durham <i>et al.</i> (1977)
[011]c	1400-1600	10-120	FO ₉₂	3,5	5,4	
[101]c	1400-1600	10-150	FO ₉₂	3,7	5,4	
[101]c	1450-1650	8-60	FO ₁₀₀	3,5	5,9	Durham et Goetze (1977b)
[111]c	1480-1680	3-30	FO ₁₀₀	2,9	6,9	Durham <i>et al.</i> (1979)
[110]c	1400-1600	15-80	FO ₁₀₀	2,6	4,8	Darot et Gueguen (1981)
[110]c	1400-1600	<15	FO ₁₀₀		f(σ)	
[011]c	1500-1600	30-100	FO ₁₀₀	2,7	6,2	
[101]c	1400-1600	60-100	FO ₁₀₀	3,6	5,9	

TABLEAU 1-6

Conditions de déformation en fluage et principaux résultats obtenus par différents auteurs.

Kohlstedt et Goetze (1974) ont peut-être été les premiers à déformer un monocristal d'olivine FO₉₂ à haute température (1430°C-1650°C) par des essais de fluage. Il semble que la vitesse de déformation réalisée à contrainte constante soit insensible à l'orientation du cristal et les auteurs ont ainsi déterminé les paramètres de l'Equation 1.1. Une énergie d'activation de 5,4eV a été déterminée par la méthode des sauts de température sur un seul échantillon et utilisée pour modéliser le comportement des autres. Cette valeur de l'énergie d'activation semble donner des résultats convenables quelle que soit l'orientation du cristal. La dépendance de la vitesse de déformation avec la contrainte n'est pas constante et dépend de la température. Durham *et al.* (1977) ont réalisé des sauts de contrainte sur monocristaux FO₉₂ et ont ainsi déterminé un exposant n de contrainte valant environ 3,6 pour les trois orientations. Ces mesures ont été faites en considérant que l'énergie d'activation valait 5,4eV. A partir des données publiées de Durham *et al.* (1977), Goetze (1978) prétend que le rapport $\frac{Q}{nR}$ chute pour des températures inférieures à 1300°C pour plusieurs orientations du cristal, soupçonnant ainsi une mauvaise détermination de n . Pour préciser davantage la connaissance que l'on peut avoir de ces deux paramètres, Darot et Gueguen (1981) ont réalisé des sauts de température à contrainte constante et des sauts de contrainte à température constante lors d'essais de fluage sur des monocristaux de forstérite (FO₁₀₀) et sur des monocristaux d'olivine FO₉₂. Contrairement à la forstérite, l'olivine FO₉₂ qui contient du fer est très sensible à la pression partielle d'oxygène et il faut souligner que les deux travaux présentés précédemment n'ont pas tenu compte de ce paramètre important. Les énergies d'activation tendent à être plus importante pour la forstérite que pour une olivine et la dépendance en contrainte de la vitesse de déformation est toujours plus importante pour une olivine que pour la forstérite. Contrairement aux études antérieures, Darot et Gueguen (1981) ont montré que la plasticité du monocristal de la forstérite était anisotrope : la déformation suivant [110]c est plus facile que suivant [011]c, l'orientation [101]c ayant un comportement intermédiaire. Il semble également que les énergies d'activation (surtout celle qui correspond à l'orientation [110]c) soient fortement dépendantes de σ aux basses contraintes (Figure 1-19). Il est difficile de donner des conclusions sur l'évolution de l'énergie d'activation en

fonction de la contrainte pour les orientations [101]c et [011]c étant donnés les grosses incertitudes qui persistent sur les mesures ou le peu de données qui existent. Néanmoins, si cet effet de contrainte sur l'énergie d'activation est confirmé, on peut alors s'interroger sur la pertinence de l'emploi de la loi du type de celle de l'Equation 1-1 qui suppose une énergie d'activation indépendante de la contrainte.

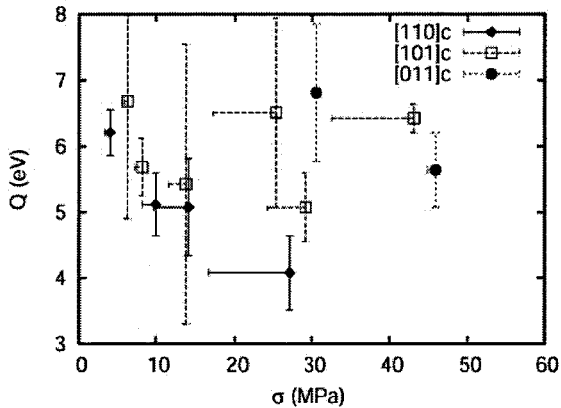


FIGURE 1-19

Variation de l'énergie d'activation Q en fonction de la contrainte suivant l'axe de sollicitation, à des contraintes basses.

La détermination des paramètres du Tableau 1-6 est basée sur une loi de nature empirique. Dans beaucoup d'études, les auteurs se sont beaucoup attachés à savoir quel était le mécanisme qui contrôlait l'énergie d'activation. Goetze et Kohlstedt (1973) ont déterminé une énergie d'activation pour le processus de montée des dislocations (environ 6,1eV) à partir de l'évolution du rapport entre les densités de dislocations libres et celles piégées dans les sous-joints, entre 1290°C et 1450°C. Cette valeur est à comparer à celle de la diffusion de l'oxygène ou du silicium (3,9eV environ) déterminée par Jaoul *et al.* (1981) (voir aussi Jaoul *et al.* (1980)). Il semble donc, comme l'a plus tard précisé Goetze (1978), que l'énergie d'activation déterminée par Goetze et Kohlstedt (1973) soit celle d'un processus complexe faisant intervenir de la montée et du glissement de dislocation.

L'étude microstructurale réalisée en microscopie optique par Darot et Gueguen (1981), complétée par l'utilisation de la microscopie électronique en transmission sur les mêmes échantillons (Gueguen et Darot (1982)) permettent de dégager les principaux mécanismes de haute température. Suivant l'orientation [110]c, les dislocations du système (010)[100] sont majoritaires. Les parties coins sont très longues, sans être vraiment rectilignes, et s'organisent en parois de flexion (100). La montée contribue certainement à cet arrangement. Suivant [011]c, les dislocations vis, droites et longues, du système (100)[001] sont présentes dans les échantillons. Elles forment localement des parois de torsion (010) avec des dislocations vis de vecteur de Burgers [100] qui ne sont normalement pas activées suivant cette orientation. L'orientation [101]c est la seule des trois qui sollicite les deux types de glissement. Ainsi on trouve aussi localement des parois de torsion composées de dislocations vis de vecteurs de Burgers [100] et [001]. Comme à basse température, les dislocations du système (100)[001] ont leurs parties vis très longues et droites, suggérant l'importance du glissement dans ce cas. Les dislocations du système (001)[100] sont souvent des mixtes de direction $\langle 110 \rangle$. Selon les observations de Durham et Goetze (1977a) en microscopie optique, les boucles de dislocation de ce système se caractérisent en général par des parties vis longues et droites et, à très haute température (1600°C), les parties coins sont courbes et courtes alors qu'à des températures plus basses (1150°C), les parties coins disparaissent au profit de parties mixtes droites selon la direction $\langle 110 \rangle$. De nombreuses boucles dipolaires de

vecteur de Burgers [001] sont également visibles dans ces échantillons. Gueguen et Darot (1982) interprètent la formation de ces boucles comme étant le résultat du traînage des dislocations [001] en dipôles par les dislocations [100]. Ces observations amènent alors les auteurs à proposer que le fluage à haute température de l'olivine soit contrôlé par la montée des dislocations de vecteur de Burgers [100] et le glissement (et cross-slip) des dislocations de vecteur de Burgers [001]. Poirier et Vergobbi (1978) ont d'ailleurs montré que les résultats de Kohlstedt et Goetze (1974) pouvaient très bien être modélisés par une loi rhéologique contrôlée par le glissement dévié.

1.3.2.3 Déformation de l'olivine sous pression et en présence d'eau

Jusqu'à présent il n'a pas été discuté (ou très peu) des autres paramètres tels que la teneur en eau des minéraux et la pression. Il semblerait que la déformation plastique de l'olivine soit fortement influencée par ces deux paramètres. La compréhension et la quantification des phénomènes mis en jeu sont d'autant plus primordiales que l'olivine est censée se déformer dans un manteau supérieur contenant des traces d'eau sous des pressions comprises entre 3 et 13 GPa.

1.3.2.3.1 *L'eau dans l'olivine*

L'olivine est un minéral anhydre, c'est-à-dire qu'aucun groupement OH n'est présent dans sa formule chimique. Cependant, les xénolites montrent que les minéraux du manteau (olivine, pyroxènes, grenats, ...) peuvent contenir des traces d'eau dont la teneur est comprise entre 0,01% et 0,1% en poids. Cette eau est incorporée sous forme de défauts ponctuels contenant des hydroxyls. Il s'agit d'un phénomène important, car on pense qu'il affecte de manière significative le cycle de l'eau dans la Terre. De plus, l'impureté « eau » est bien connue pour avoir un effet majeur sur la plasticité du quartz. Qu'en est-il de l'olivine ? Une étude de la solubilité de l'hydrogène (Bai et Kohlstedt (1992a)) a montré que l'olivine était capable de stocker jusqu'à 0,03% en poids d'eau. Des expériences réalisées sur des dunites "hydratées" (Carter et Ave'Lallemant (1970); Blacic (1972); Zeuch et Green (1979); Chopra et Paterson (1984)) montrent qu'elles se déforment plastiquement à des vitesses plus importantes que celles atteintes pour des dunites "sèches" (pour des niveaux de contrainte semblables). Encore aujourd'hui, beaucoup d'efforts sont fournis pour tenter de comprendre les mécanismes de cet adoucissement dus à la présence d'eau et, entre autres, de répondre à la question: "S'agit-il d'un mécanisme intra ou intergranulaire ?".

Une première hypothèse en faveur d'un mécanisme intragranulaire est de dire que, à l'image du quartz, l'eau aurait pour effet de rendre les liaisons covalentes Si-O fortes plus faibles (Blacic (1972)), ce qui pourrait accroître la mobilité des dislocations. Mackwell *et al.* (1985) ont déformé des monocristaux d'olivine Fo_{92} et leurs résultats confirment un mécanisme intragranulaire. Ils ont constaté une réduction de la contrainte d'écoulement d'un facteur 1,5 à 2,5 pour le monocristal "hydraté", à 1300°C et une vitesse de déformation de $10^{-5} s^{-1}$, qu'ils associent à une augmentation de la diffusion des défauts ponctuels et à une facilité accrue du phénomène de montée des dislocations.

Chopra et Paterson (1984) ont constaté que la vitesse de déformation d'une dunite "hydratée", déformée à 1200-1400°C et à des vitesses de déformation de 10^{-4} - $10^{-6} s^{-1}$, dépend davantage de la taille de grain que celle d'une dunite "sèche". Dans ce cas, un mécanisme purement intragranulaire ne permet pas d'expliquer cette dépendance

en taille de grains et une accélération de la diffusion aux joints de grains semble être un mécanisme plus efficace. Un effet sur les joints de grains a également été constaté par Jung et Karato (2001a). Ils proposent un mécanisme de déformation de l'olivine par recristallisation dynamique avec augmentation de la migration des joints de grains en présence d'eau.

L'influence de l'eau sur les mécanismes de déformation de l'olivine paraît complexe et il est fort possible que les deux types de mécanismes interviennent en même temps. Deux études plus récentes (Mei et Kohlstedt (2000a); Mei et Kohlstedt (2000b)) semblent avoir eu la volonté de réconcilier les deux approches. Une olivine Fo₉₁ a été déformée à 1200-1300°C en présence d'eau dans un régime de fluage-diffusion (contrainte inférieure à 100MPa) et dans un régime de fluage-dislocation (contrainte supérieure à 100MPa). Dans le cas du premier régime, le mécanisme d'adoucissement de l'eau est un mécanisme intergranulaire (contrôlé par la diffusion d'interstitiels de Si aux joints de grains) alors que dans le cas du second, il s'agit d'un mécanisme intragranulaire (régé par la montée de dislocations contrôlée par la diffusion d'interstitiels de Si).

Jung et Karato (2001b) ont présenté des résultats sur les textures dans un polycristal d'olivine déformée en présence d'eau. Ces dernières diffèrent des textures obtenues dans l'olivine "sèche". Ce changement de texture correspond à un changement dans les systèmes de glissement participant à la déformation plastique. A faible teneur en eau, les textures obtenues sont le résultat de l'activation importante du système de glissement (010)[100] alors qu'à plus haute teneur en eau, les textures résultent de l'activation des systèmes de glissement (010)[001] et (100)[001]. L'addition d'eau favoriserait ainsi le glissement des dislocation de vecteur de Burgers [001]. Aucune étude microstructurale n'a cependant permis à ce jour d'interpréter l'origine de ce phénomène.

1.3.2.3.2 Influence de la pression

Comme l'a souligné Poirier (Poirier (1985)), le rôle de la pression sur la déformation plastique des minéraux ne peut pas être négligé puisqu'à l'intérieur de la Terre, la pression augmente plus rapidement que la température et peut atteindre 13 GPa environ dans la partie supérieure du manteau inférieur. La pression n'entraîne pas de composante de cisaillement et ne peut donc être à l'origine directe d'une déformation plastique. Son effet est donc indirect et il trouve son origine dans un changement de volume ΔV intervenant dans un mécanisme de déformation plastique.

Ce volume d'activation ΔV peut être intégré de façon phénoménologique dans l'Equation 1-1, laquelle prend alors la forme suivante:

$$\dot{\epsilon} = A\sigma^n \exp\left(-\frac{Q + P\Delta V}{kT}\right) \quad (1-2)$$

Depuis une trentaine d'années, les avancées technologiques ont permis de repousser les limites des pressions atteintes lors d'essais de déformation plastique, tout en donnant accès à tous les paramètres de l'Equation 1-2.

Ross *et al.* (1979) sont les premiers à avoir déterminé le volume d'activation de l'Equation 1-2 dans l'olivine. Ces premiers résultats ont été obtenus grâce à l'utilisation d'une machine de Griggs⁴ jusqu'à des pressions de 1,5 GPa et donnent un volume d'activation moyen de 13 cm³/mol. En utilisant le même appareillage, Green et Borch (1987) ont estimé le volume d'activation à 27 cm³/mol, pour des pressions de 2,5 GPa, et Karato et Jung (2003) à

⁴ Dans une machine de Griggs, l'échantillon est enfermé dans un milieu de confinement solide et un piston permet de le déformer pour des pressions maximales d'environ 4 GPa.

14 cm³/mol pour des pressions de 1 à 2 GPa. Bussod *et al.* (1993), en utilisant une presse multi-enclumes⁵ pour atteindre des pressions de l'ordre de 13,5 GPa et des températures de 1600 °C ont trouvé qu'un volume d'activation compris entre 5 et 10 cm³/mol permettait d'expliquer leurs résultats.

Jusqu'alors, les niveaux de contrainte atteints lors de la déformation sous pression de l'olivine n'étaient accessibles que de façon indirecte et *post mortem* par la mesure des densités de dislocations. Récemment l'utilisation d'un faisceau de rayons X sur une presse multi-enclumes placée sur une ligne synchrotron a permis de calculer *in situ* la contrainte à laquelle a été déformé l'échantillon. Wang *et al.* (2003) décrivent en détail l'utilisation conjointe du faisceau de rayons X et de la presse multi-enclumes⁶. Grâce à cette technique, Li *et al.* (2005) ont déterminé un volume d'activation nul pour l'olivine, grâce à leurs résultats obtenus pour des pressions comprises entre 3,5 et 9,6 GPa.

Il existe une disparité importante sur les valeurs de volume d'activation dans l'olivine et on pourra accorder plus de confiance aux résultats obtenus par Li *et al.* (2005). En effet, non seulement la machine de déformation (D-DIA) qu'ils ont utilisée permet d'atteindre des pressions de 15 GPa bien supérieures à celles atteintes par une machine de Griggs, mais en plus la contrainte est déterminée *in situ* par diffraction des rayons X.

Béjina *et al.* (1999) ont calculé un volume d'activation associé à la diffusion des atomes de silicium de 5cm³/mol, jusqu'à des pressions et des températures de 9 GPa et 1600 °C. Ils proposent un mécanisme de fluage contrôlé par la montée de dislocations. Ce volume d'activation d'environ 5cm³/mol est tout à fait comparable aux faibles valeurs des volumes d'activation déterminés par des essais de déformation sous pression.

Un autre effet important que peut avoir la pression sur les mécanismes de déformation plastique de l'olivine sous pression a été mis à jour par Couvy *et al.* (2004). Ils ont déformé en cisaillement des échantillons polycristallins de forstérite dans une presse multi-enclumes à 11 GPa et 1400 °C. Ils ont constaté que le glissement de vecteur de Burgers [100] était dominant dans de telles conditions de pression et de température correspondant à celles du manteau supérieur. Les textures résultantes des polycristaux déformés sont peu anisotropes et conduisent à une interprétation nouvelle de l'anisotropie sismique du manteau supérieur (Mainprice *et al.* (2005)).

1.3.2.4 Proposition d'un premier modèle de la plasticité du monocristal

A partir des résultats mécaniques provenant d'étude menées sur monocristaux (Tableau 1-4, il est possible de déterminer les contraintes critiques projetées τ des différents systèmes qui participent à la déformation de l'olivine. En effet, si l'on connaît l'orientation suivant laquelle le monocristal est sollicité et la contrainte σ nécessaire pour le déformer plastiquement, on peut alors déterminer la contrainte de cisaillement critique projetée $\tau_{(hkl)[uvw]}$ dans le(s) système(s) de glissement activé(s) : $\tau_{(hkl)[uvw]} = S_{(hkl)[uvw]} \cdot \sigma$ (1-3) où $S_{(hkl)[uvw]}$ est le facteur de Schmid dans le système (hkl)[uvw].

Nous proposons maintenant d'aller au-delà de l'étude bibliographique et de regrouper les différents résultats de la littérature dans le but d'avancer vers un premier modèle de la plasticité du monocristal. Pour ce faire, nous n'avons conservé que les résultats provenant d'essais de fluage pour lesquels la vitesse de déformation dans

⁵ Dans une presse multi-enclumes, l'échantillon se trouve dans une enceinte octaédrique. Une contrainte égale est appliquée sur chacune des faces et des pressions maximales de 25 GPa peuvent ainsi être atteintes.

⁶ Cette machine de déformation est appelée plus souvent "D-DIA".

l'état stationnaire était de 10^{-5} s^{-1} et ceux issus d'essais mécaniques en compression à une vitesse constante d'environ 10^{-5} s^{-1} .

Contrainte critique projetée pour le glissement [100] dans les plans (010), (001) et {0kl} :

L'orientation [110]c sollicite au maximum le système (010)[100] et nous avons vu que ce dernier était largement activé de 800°C jusqu'à très haute température. Les détails de la construction de la courbe ajustée de la contrainte critique projetée du système (010)[100] présenté en pointillés sur la Figure 1-20 seront détaillés plus tard dans le chapitre 4.

L'activation du système (001)[100] a été constatée lors de la déformation de monocristaux suivant la direction [101]c à plutôt haute température ($T > 1000^\circ\text{C}$). Grâce aux données obtenues sur monocristaux déformés suivant cet axe de sollicitation, il est possible de déterminer la contrainte projetée dans ce système de glissement. Nous l'avons reportée sur la Figure 1-20 (petits points) et nous nous apercevons que les niveaux atteints sont comparables à ceux du système (010)[100] pour des températures supérieures à 1000°C (pour lesquelles le glissement de vecteur de Burgers [100] est activé). Les systèmes {0kl}[100] ont, eux aussi, participé à la déformation du monocristal mais seulement à très haute température. Il est alors difficile de déterminer une contrainte projetée dans ces systèmes de glissement.

Par manque de donnée, on fera l'hypothèse que la contrainte projetée est la même dans tous les systèmes de vecteur de Burgers [100].

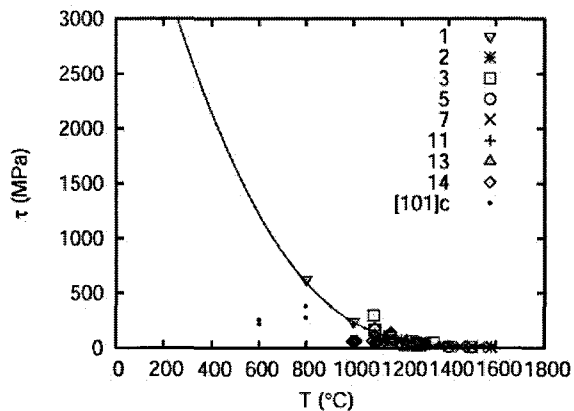


FIGURE 1-20

Données expérimentales projetées dans (010)[100] issues de la déformation du monocristal suivant [110]c. La courbe représente un ajustement de la contrainte critique projetée. Les petits points représentent la contrainte projetée dans le système (001)[100] déterminée à partir d'essais de déformation suivant la direction [101]c. Dans la légende, les numéros font référence aux auteurs cités de la même façon dans le Tableau 1-4.

Contrainte critique projetée dans (010)[001] :

Le système (010)[001] est très sollicité suivant l'orientation [011]c. Bai *et al.* (1991) ont déformé des monocristaux d'une olivine de San Carlos orientés pour être sollicités suivant cette direction et ont constaté l'activation de ce système de glissement dès 1300°C. Phakey *et al.* (1972) ont déformé le monocristal de forstérite suivant [011]c à 1000°C et ont observé que le glissement [001] était activé. Même si les plans de glissement n'ont pas été déterminés, nous avons fait l'hypothèse que (010)[001] était activé et conservé cette donnée (Figure 1-21).

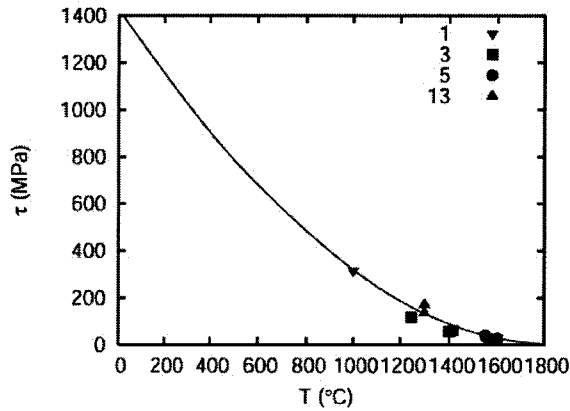


FIGURE 1-21

Données expérimentales projetées dans (010)[001] issues de la déformation du monocristal suivant [011]c. La courbe pointillée représente un ajustement de la contrainte critique projetée. Dans la légende, les numéros font référence aux auteurs cités de la même façon dans le Tableau 1-4.

Contrainte critique projetée dans (100)[001] :

Nous avons vu que le système (100)[001] était activé depuis les basses jusqu'aux hautes températures suivant [101]c. Nous avons donc utilisé les résultats obtenus suivant cette orientation pour déterminer la contrainte critique projetée du système (100)[001] (Figure 1-22). Phakey *et al.* (1972) soulignent que les deux points à 600°C sont anormalement bas comparés à ceux à 800°C sans toutefois fournir d'explication.

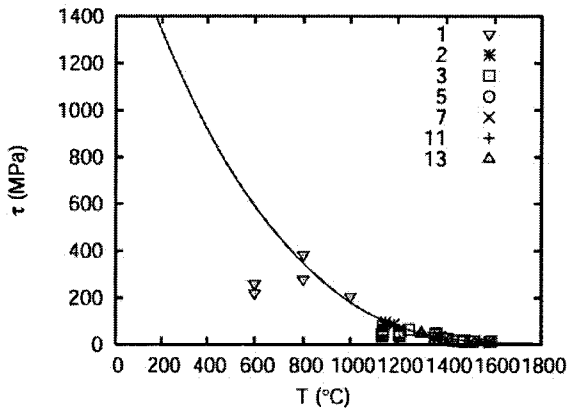


FIGURE 1-22

Données expérimentales projetées dans (100)[001] issues de la déformation du monocristal suivant [101]c. La courbe pointillée représente un ajustement de la contrainte critique projetée. Dans la légende, les numéros font référence aux auteurs cités de la même façon dans le Tableau 1-4.

Contrainte critique projetée dans (110)[001] :

Evans et Goetze (1979) ont réalisé des essais d'indentation sur des monocristaux orientés de la température ambiante jusqu'à 1500°C. Pour des températures inférieures à 1200°C, il ont constaté l'activation du système {110}[001]. Ils proposent de déterminer la contrainte critique projetée de ce système en utilisant la variation de la largeur de la rosette dans l'équation $\tau_{\{110\}[001]} = \frac{L_{800}}{L_T} \sigma_{800}$ (σ_{800} est la valeur de la contrainte critique projetée calculée dans le système {110}[001] à partir de l'essai de déformation suivant [101]c réalisé par Phakey *et al.* (1972) à 800°C, L_{800} et L_T les largeurs des rosettes à 800°C et T respectivement mesurées par Evans et Goetze (1979)). Phakey *et al.* (1972) ont réalisé deux essais de déformation à 800°C, jusqu'à 6% et 16% de déformation, suivant une orientation proche de [101]c. Plutôt que d'extraire des résultats de Phakey *et al.* (1972), à l'instar d'Evans et Goetze (1979), une σ_{800} de l'essai à 6% de déformation pour lequel le système {110}[001] n'a pas été observé avec certitude, nous proposons de choisir comme référence la σ_{800} (environ 350 MPa) issue

de l'essai à 16%. Dans ce cas, la contrainte projetée est donc plus importante que celle qu'a calculée Evans et Goetze (1979) (Figure 1-23).

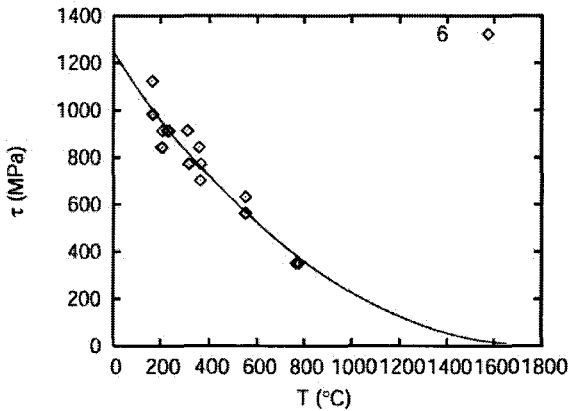


FIGURE 1-23

Données expérimentales projetées dans $\{110\}[001]$ issues d'essais de dureté sur des monocristaux orientés. La courbe pointillée représente un ajustement de la contrainte critique projetée. Dans la légende, les numéros font référence aux auteurs cités de la même façon dans le Tableau 1-4.

Les ajustements réalisés sur les contraintes projetées dans les systèmes de glissement de vecteur de Burgers $[001]$ sont mal contraints, soit à basse température (pour $(100)[001]$ et $(010)[001]$) soit à haute température (pour $\{110\}[001]$). On pourra se reporter au chapitre 4 pour obtenir des détails sur la forme des équations utilisées et leur détermination.

Grâce aux données mécaniques issues de différentes études menées sur monocristaux, les contraintes projetées dans les différents systèmes de glissement ont pu être déterminées. Néanmoins elles souffrent souvent du manque de données.

Nous avons pu composer une contrainte projetée dans le système $(010)[100]$ à partir de données issues d'essais réalisés de 800°C à 1600°C environ. Il faut souligner que, comme nous l'avons interprété précédemment, les données de basse température ($T \leq 800^{\circ}\text{C}$) de Phakey *et al.* (1972) souffraient peut-être d'imprécision. Nous avons vu que le système $(001)[100]$ était activé au-delà de 1000°C pour un axe de sollicitation selon la direction $[101]_c$ et que les niveaux de sa contrainte critique projetée étaient comparables à ceux du système $(010)[100]$. Trop peu d'informations sur les systèmes $(0kl)[100]$ (lesquels sont peu sollicités suivant les axes à 45° des directions cristallographiques de la maille d'olivine) ne permettent pas d'y déterminer de contrainte projetée. Faute de données, nous ferons alors l'hypothèse que le glissement de vecteur de Burgers $[100]$ est activé pour des contraintes identiques dans les plans (010) , (001) et $\{0kl\}$.

Quant au glissement de vecteur de Burgers $[001]$, nous avons déterminé des contraintes critiques projetées dans les plans (100) , (010) et $\{110\}$ mais remarqué que, selon le système de glissement considéré, les ajustements réalisés étaient mal contraints aux basses températures (pour $(010)[001]$ et $(100)[001]$) ou aux hautes températures (pour $\{110\}[001]$). On peut, comme pour les systèmes de glissement de vecteur de Burgers $[100]$, considérer que la contrainte projetée est la même dans tous les systèmes de vecteur de Burgers $[001]$ et composer un ajustement « global » de la contrainte projetée à partir de celle des trois systèmes de glissement (Figure 1-24). Il s'approche beaucoup de celui déterminé pour le système $\{110\}[001]$ et la contrainte projetée pour le système $(100)[001]$ s'en écarte aux basses températures ($T < 800^{\circ}\text{C}$). En choisissant cet ajustement global pour tous les systèmes de vecteur de Burgers $[001]$, on aurait tendance à sous-estimer la contrainte projetée dans le système $(010)[001]$ par rapport à celle qui avait été déterminée précédemment pour ce dernier.

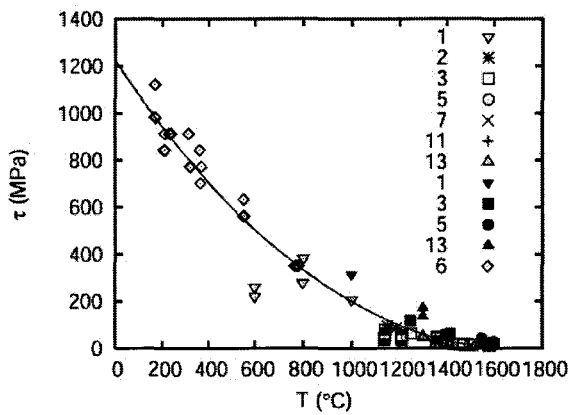


FIGURE 1-24

Contrainte critique projetée « globale » dans les trois systèmes de glissement de vecteur de Burgers [001]. Dans la légende, les signes vides correspondent aux données issues de l'orientation [011]c et les signes remplis à celles issues de l'orientation [101]c. Les numéros font référence aux auteurs cités de la même façon dans le Tableau 1-4.

1.4 Du monocristal au polycristal

1.4.1 Première ébauche de la plasticité du monocristal

A partir des contraintes projetées retenues pour les différents systèmes de glissement, nous pouvons tenter de reconstruire le comportement du monocristal soumis à une contrainte extérieure suivant un axe de sollicitation donné. Une contrainte σ_i^O suivant l'axe de sollicitation O nécessaire pour activer un système i de contrainte critique projetée τ_i peut être calculée : $\sigma_i^O = \tau_i / S_i^O$ ou $\sigma_i^O = \tau_i / K_i^O$. ou $\sigma_i^O = m_i^O \tau_i$ (1-4) avec m_i^O l'inverse du facteur de Schmid pour le système i sollicité suivant l'orientation O . En utilisant la relation précédente, il est possible de connaître avec quelle contrainte σ^O le monocristal se déforme pour une orientation O avec un jeu de n systèmes de glissement. σ^O est choisie comme étant égale à la(les) contrainte(s) σ_i^O la(les) plus basse(s) du(des) système(s) i . A partir des considérations des paragraphes précédents sur les systèmes les plus communément observés, le jeu de systèmes de glissement que nous adopterons pour la forstérite est : (100)[001], (010)[100], {110}[001], (001)[100], (010)[100] et {0kl}[100] (nous considérerons uniquement les plans de glissement {011}). Nous avons utilisé des projections stéréographiques pour visualiser, à différentes températures, les systèmes de glissement les plus facilement activés (Figure 1-25) suivant la direction de sollicitation. Pour savoir quel est, du glissement de vecteur de Burgers [100] ou du glissement de vecteur de Burgers [001] (ou les deux), celui qui participe majoritairement à la déformation plastique du monocristal nous avons représenté sur la Figure 1-26 les domaines où les glissements [100] et [001] sont activés (domaines noir et blanc respectivement). Les domaines gris sont les domaines où les deux types de glissement sont susceptibles d'être activés en même temps. La Figure 1-27 permet de prédire les niveaux de contrainte atteints lors d'un essai de déformation suivant l'axe de sollicitation. De plus, nous avons comparé ces projections stéréographiques à des essais expérimentaux réalisés sur des monocristaux pour pouvoir confirmer ou infirmer les hypothèses faites sur les contraintes projetées. Dans ce paragraphe, avec l'aide de ces projections stéréographiques, ce sera également l'occasion de discuter du fait de choisir ou non une même contrainte critique projetée dans les systèmes de glissement de vecteur de Burgers [001].

On peut remarquer sur la Figure 1-27 qu'il est toujours plus difficile, quelle que soit la température de l'essai de déformation, de déformer le monocristal suivant les axes [100], [010] et [001]. En effet, puisque les systèmes de glissement dans l'olivine sont uniquement du type $(0kl)[100]$ ou $(hk0)[001]$, ces directions n'activent aucun de ces systèmes (le facteur de Schmid est nul). De plus, aux basses températures ($T < 1000^\circ\text{C}$), il est plus difficile de déformer le monocristal suivant un axe $[uv0]$ à 90° de l'axe [001] alors qu'aux températures plus élevées ($T > 1100^\circ\text{C}$), les directions $[0vw]$ à 90° de l'axe [100] sont les plus « dures ». En effet, on peut voir sur la Figure 1-25 que, jusqu'à 1000°C , le monocristal se déforme principalement par activation des systèmes de vecteur de Burgers [001] (la majorité de la projection stéréographique est recouverte par les domaines correspondant aux systèmes $(hk0)[001]$). Au-delà de 1000°C , la situation s'inverse et le monocristal se déforme majoritairement par activation des systèmes $(0kl)[100]$.

La température de 1000°C est connue comme étant la température de transition entre le glissement de vecteur de Burgers [001] et le glissement de vecteur de Burgers [100]. La Figure 1-26 confirme cet argument puisque l'on peut remarquer, qu'à cette température et à 1100°C , il existe un domaine où le glissement [100] et le glissement [001] peuvent être activés en même temps (domaine gris).

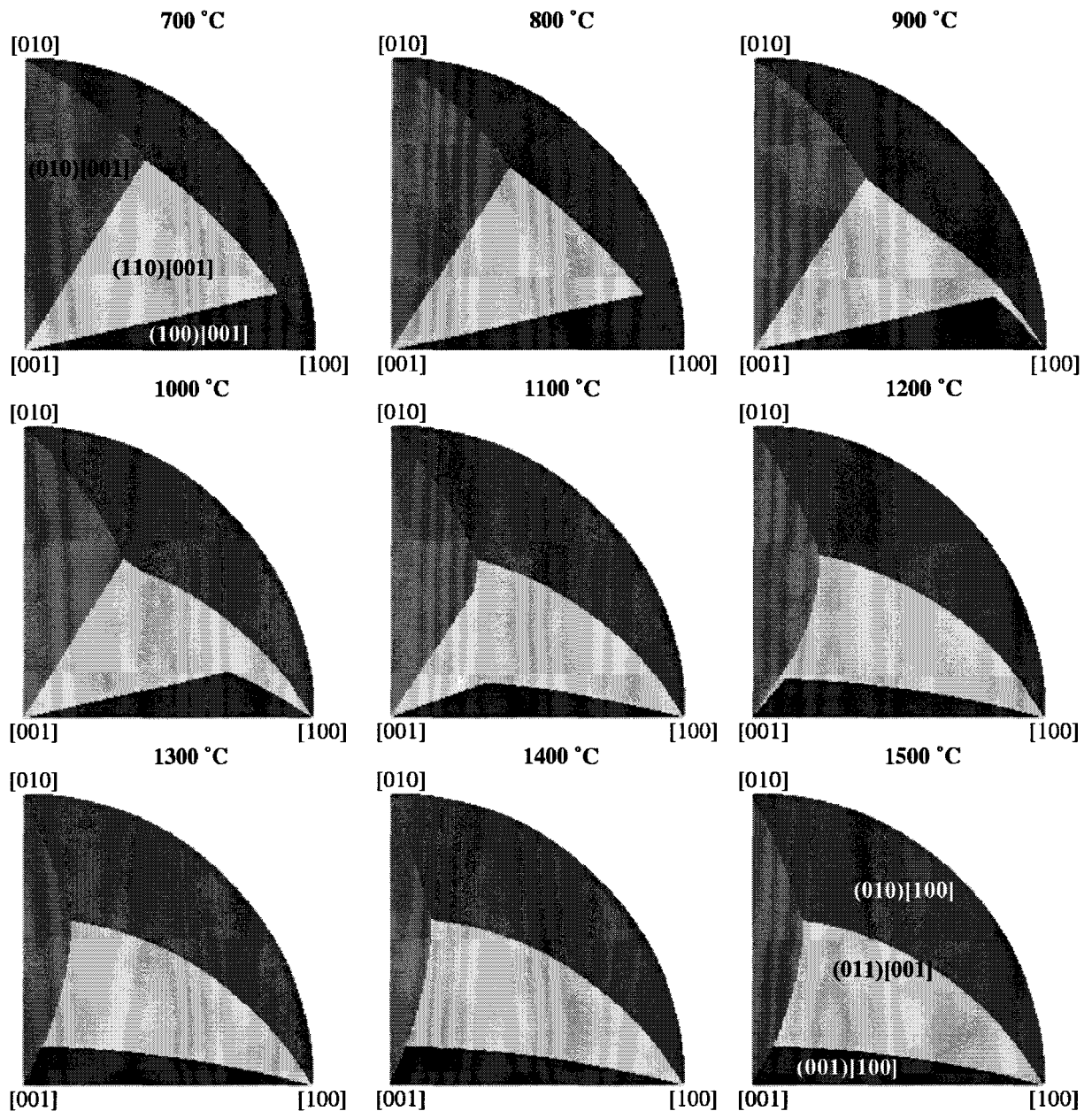


FIGURE 1-25

Projection stéréographique d'un cristal de forstérite montrant les domaines où chaque système de glissement est susceptible d'être activé selon l'axe de sollicitation utilisé et la température. Les domaines de niveau de gris différent correspondent à des systèmes de glissement différent. $(010)[001]$, $(100)[001]$ et $(110)[001]$ sont repérés sur la figure à 700°C. $(010)[100]$, $(001)[100]$ et $(011)[001]$ sont repérés sur la figure à 1500°C.

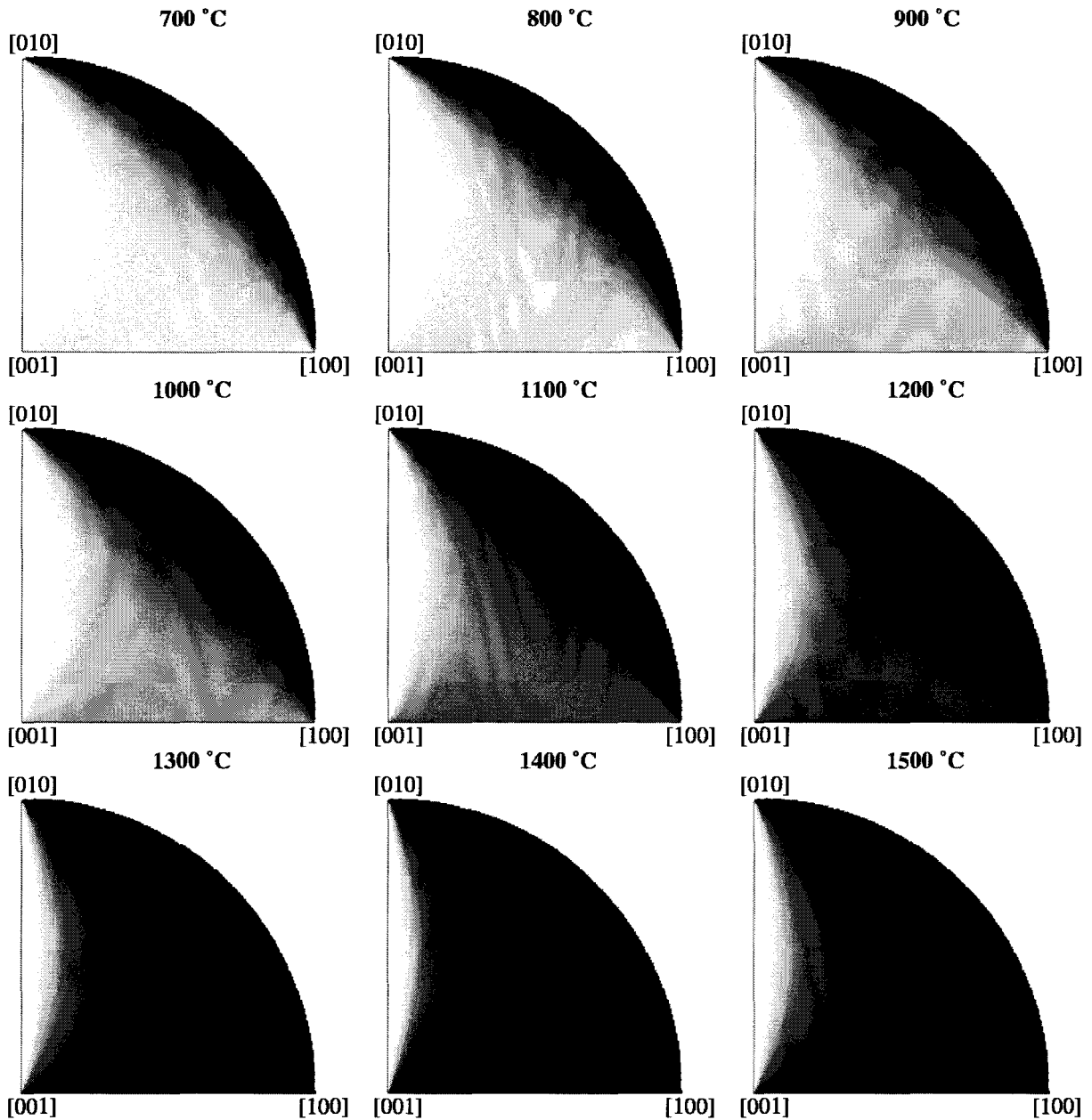


FIGURE 1-26

Projection stéréographique d'un cristal de forstérite montrant les domaines où le glissement de vecteur de Burgers [100] (en noir) ou celui de vecteur de Burgers [001] (en blanc) est activé en fonction de l'axe de sollicitation utilisé et la température. Certains domaines de couleur mixte grise traduisent l'occurrence d'un glissement mixte de vecteurs de Burgers [100] et [001].

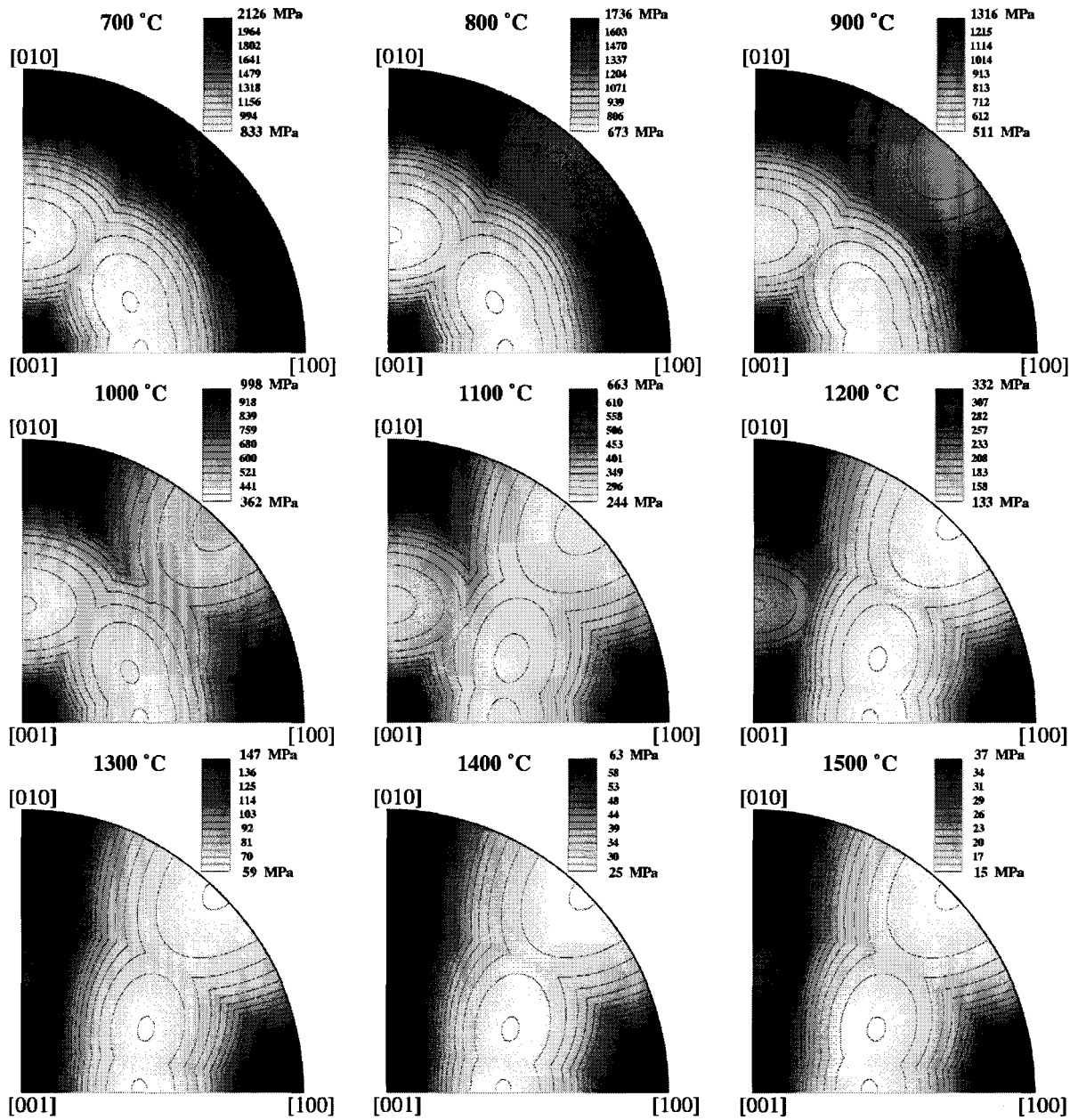


FIGURE 1-27

Projection stéréographique d'un cristal de forstérite montrant les niveaux de contrainte susceptibles d'être atteints suivant l'axe de sollicitation utilisé et selon la température de l'essai.

1.4.2 Un premier modèle pour le polycristal

Il est fondamental de pouvoir déduire le comportement plastique d'un agrégat polycristallin à partir de la connaissance des lois de comportement du monocristal. Il existe de nos jours des méthodes de modélisation de plus en plus fines. Leur niveau de complexité se traduit par l'incorporation de paramètres qui permettent de s'approcher davantage de la réalité du comportement du polycristal (effets de taille de grain, prise en compte de l'incompatibilité plastique entre grains,...).

Une première approche triviale est celle du modèle de Sachs (1928). Elle consiste à isoler mentalement chaque grain de l'agrégat et à supposer que la contrainte est homogène au sein des grains et égale à la contrainte macroscopique. A partir de l'Equation 3, si la contrainte critique projetée τ est la même dans tous les systèmes de glissement, la contrainte vaudra : $\sigma^O = m^O \tau$, avec $m^O = \min(m_i^O)$ l'inverse du facteur de Schmid du système le plus favorablement orienté suivant l'orientation O . En égalant le travail fourni par la contrainte extérieure avec celle dépensée pour la déformation du grain, on trouve que le même facteur d'orientation m^O apparaît dans la relation entre $d\gamma$, l'incrément de déformation sur le système de glissement, et $d\varepsilon$, l'incrément de déformation correspondant suivant l'axe de sollicitation : $m^O = \frac{d\gamma}{d\varepsilon} = \frac{\sigma^O}{\tau}$. Chaque grain ou « monocristal » de l'agrégat peut prendre toutes les orientations possibles par rapport à l'axe de sollicitation. Ainsi la contrainte d'écoulement d'un polycristal serait : $\sigma = \overline{m} \tau$, où \overline{m} est la valeur moyenne de m^O pour une distribution aléatoire d'orientations O des grains. Dans la forstérite, nous avons vu que les contraintes critiques projetées entre les systèmes de glissement de vecteur de Burgers [100] et de vecteur de Burgers [001] étaient différentes. Ainsi l'Equation 3 devient : $\sigma^O = \min(m_i^O \tau_i)$ et il est également possible de calculer la contrainte $\sigma = \langle \min(m_i^O \tau_i) \rangle$ (1-5) du polycristal, en considérant que toutes les orientations que peuvent prendre les grains de l'agrégat sont équiprobables. Le résultat, déterminé à partir des contraintes critiques projetées proposées dans le paragraphe précédent, est présenté sur la Figure 1-28 pour une gamme de température allant de 400°C à 1600°C. La contrainte calculée est souvent inférieure à celle qui a été déterminée sur des polycristaux d'olivine par différents auteurs.

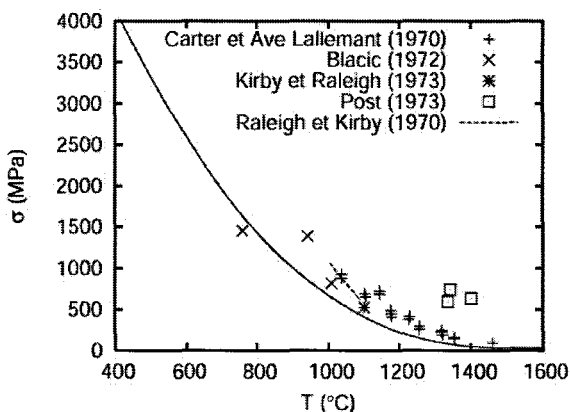


FIGURE 1-28

Contrainte d'écoulement atteinte par le polycristal de forstérite calculée à partir de l'Equation 4 (courbe en trait plein) et contrainte d'écoulement déterminée expérimentalement sur des olivines polycristallines (□, Post (1973) issu de Goetze (1978) ; +, Carter et Ave'Lallemand (1970) ; x, Blacic (1972) ; *, Kirby et Raleigh (1973); en traits pointillés, Raleigh et Kirby (1970)).

Dans les métaux CFC, on trouve également un écart entre la contrainte d'écoulement expérimentale et la contrainte d'écoulement calculée de la même manière, pour le polycristal. En supposant que chaque grain du polycristal se déforme en glissement simple, \bar{m} vaut environ 2,24 alors qu'une valeur de 3,06 (Taylor (1938)) est plus adéquate pour obtenir la contrainte d'écoulement de l'agrégat. Taylor (1938) a expliqué cet écart par les raisons suivantes :

Si chaque grain se déforme par activation d'un seul système de glissement des cavités entre chaque grain doivent se produire. Sauf pour le fluage à haute température, la cohésion et la continuité du matériau sont conservées. Von Mises (1928) a montré que la déformation du grain nécessitait l'activation d'au moins cinq systèmes de glissement indépendants. Ainsi, suivant certaines orientations, le facteur \bar{m} doit être supérieur à ce qui est prévu pour pouvoir activer d'autres systèmes de glissement moins favorablement orientés par rapport à l'axe de sollicitation.

La deuxième condition découle de la première. La continuité du matériau entraîne une continuité de la contrainte à travers la surface entre les grains. La répartition des contraintes au sein du polycristal est alors soumise à certaines restrictions qui ne sont pas prévues par la précédente approche.

Avec l'augmentation des puissances de calcul, de nouvelles méthodes de modélisation sont apparues. Pour tenir compte de l'évolution de la forme des grains ou de la texture cristallographique, le modèle autocohérent donne une bonne estimation de la réponse de l'agrégat polycristallin (Berveiller et Zaoui (1997)). Pour remédier à la méconnaissance du comportement local du grain et rendre mieux compte de la dispersion des états de contrainte au sein d'un même grain, les méthodes d'homogénéisation utilisant une analyse par éléments finis sont mieux adaptées (Fivel et Forest (2004), Barbe *et al.* (2001a), Barbe *et al.* (2001b)).

Le modèle statique que nous avons utilisé pour modéliser le comportement plastique du polycristal, à partir des contraintes projetées adoptées dans les différents systèmes de glissement, ne permet pas de décrire de façon satisfaisante la réponse des polycristaux de structure CFC mais s'avère pertinente dans le cas de certaines structure hexagonales (Fivel et Forest (2004)). Dans le cas de la forstérite, la contrainte d'écoulement obtenue en fonction de la température semble constituer une borne inférieure relativement proche du comportement plastique équivalent du polycristal. Ce résultat permet de conforter le choix des contraintes projetées retenues dans les différents systèmes de glissement.

Chapitre 2

Présentation des techniques de calcul utilisées

Nous avons choisi de modéliser le comportement plastique de la forstérite à l'échelle atomique et à l'échelle du monocristal. A ces deux échelles, deux types de simulation ont été utilisées: le calcul ab initio et la simulation de la dynamique des dislocations et ce chapitre a pour objet de les présenter.

Une première partie commencera par présenter les bases de la théorie qui sont à l'origine du calcul ab initio (et ses approximations), ce qui permettra d'introduire le principe de fonctionnement du code VASP que nous avons utilisé dans cette étude.

Une seconde partie présentera la simulation de la dynamique des dislocations. Nous montrerons les principes de base de la simulation en exposant les évolutions qu'elle a subies depuis les modèles à deux dimensions jusqu'au modèle actuel "pure-mixte".

2.1 Le calcul *ab initio*

Pour modéliser certaines propriétés des matériaux (interaction de molécules avec des surfaces métalliques, propriétés élastiques, diffusion de défauts ponctuels dans les solides, ...), il est souvent nécessaire d'adopter une approche numérique à l'échelle atomique. A cette échelle, la détermination de la configuration atomique et de l'énergie interne d'un solide cristallin peut être réalisée par l'utilisation de simulations basées sur des méthodes différentes. On peut distinguer, par exemple, les calculs *ab initio* qui consistent essentiellement en un calcul des configurations électroniques, des simulations qui utilisent des potentiels d'interaction interatomique ajustés sur des propriétés du solide (méthode des potentiels empiriques).

Dans les versions les plus simplistes des simulations à paramètres ajustables, l'interaction entre atomes, au sein d'un solide cristallin par exemple, peut être approchée par des potentiels de paires qui ne dépendent que de la distance qui sépare deux atomes. Un degré de raffinement supplémentaire peut être ajoutée à cette méthode en utilisant des potentiels qui dépendent également de l'environnement des atomes (nature des autres atomes voisins). L'intérêt de l'utilisation des potentiels empiriques réside dans le fait qu'ils permettent de prendre en compte un nombre très important d'atomes (quelques centaines de millions). Malheureusement les paramètres des potentiels doivent être ajustés au type de matériau modélisé et la complexité de cet ajustement croît avec le nombre d'atomes de nature différente.

La forstérite se compose de trois types d'atomes différents et, dans ce cas, les simulations à paramètres ajustables sont mal adaptées. En effet la détermination des potentiels devient rapidement très complexe puisqu'il faut pouvoir correctement décrire à la fois les interactions entre atomes de même nature et entre ceux de natures différentes. Ainsi lorsque l'on ne connaît rien à priori des interactions entre les différents atomes d'un cristal tel que la forstérite, les calculs *ab initio* sont les plus performants puisqu'ils permettent, grâce à la résolution de l'équation de Schrödinger, de calculer l'interaction entre les atomes sans paramètre ajustable. Le prix à payer pour une telle précision est un coût numérique important empêchant la modélisation de structures comportant plus d'une centaine d'atomes.

2.1.1 Principe

L'état d'équilibre d'un système est celui pour lequel son énergie libre de Gibbs $G = E + PV - TS$ (2-1) est minimale pour une pression P et une température T données. L'énergie interne E peut être calculée par la résolution de l'équation de Schrödinger :

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (2-2)$$

où \hat{H} est l'opérateur d'Hamilton, E l'énergie du système et Ψ la fonction d'onde totale du système.

Pour un système composé de N ions de coordonnées \vec{R}_J , de charge Z , de masse M et de n électrons de coordonnées \vec{r}_i , et de masse m , l'Hamiltonien s'écrit :

$$\hat{H} = \sum_{I=1}^N \frac{\nabla_I^2}{2M_I} + \sum_{i=1}^n \frac{\nabla_i^2}{2m} + \sum_{i>j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_{I>J} \frac{Z_I Z_J}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} - \sum_{I,i} \frac{Z_I}{|\vec{R}_I - \vec{r}_i|} \quad (2-3)$$

On retiendra dans l'Equation 2-3 que les deux premiers termes représentent les énergies cinétiques respectives des ions et des électrons et que les termes suivants désignent les énergies potentielles d'interaction coulombienne électron-électron v_{e-e} , ion-ion v_{N-N} et électron-ion v_{e-N} respectivement. L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$\left[\sum_{I=1}^N \frac{\nabla_I^2}{2M_I} + \sum_{i=1}^n \frac{\nabla_i^2}{2m} + \sum v_{e-e} + \sum v_{N-N} - \sum v_{e-N} \right] \Psi(\vec{x}, \vec{R}) = E\Psi(\vec{x}, \vec{R}) \quad (2-4)$$

où $\vec{x} = (\vec{r}, \sigma)$ désigne l'ensemble des coordonnées orbitales et des spins des électrons et $\Psi(\vec{x}, \vec{R})$, la fonction d'onde électrons/ions.

L'Equation 2-4 permettant de calculer l'énergie interne du système constitue un problème à $(N + n)$ corps. Sa résolution n'est possible analytiquement que pour un système à deux corps et n'est réalisable numériquement pour un nombre très restreint de particules (en considérant les moyens de calcul actuels). La suite de ce paragraphe aura donc pour objet de présenter les approximations raisonnables permettant la résolution de ce problème.

2.1.2 Les approximations

2.1.2.1 Approximation de Born-Oppenheimer

La masse des ions étant quelques milliers de fois plus importante que celle des électrons, ces derniers se déplacent beaucoup plus rapidement que les premiers. Les échelles de temps fixées par le déplacement des électrons sont donc bien plus petites que celles fixées par le mouvement des ions. Une première approximation consiste alors à découpler le mouvement des électrons de celui des ions (les électrons relaxent instantanément dans leur état d'énergie minimal après le déplacement d'un ion). La fonction d'onde $\Psi(\vec{x}, \vec{R})$ peut alors s'écrire :

$$\Psi(\vec{x}, \vec{R}) = \psi(\vec{x}, \vec{R})\chi(\vec{R}) \quad (2-5)$$

où $\psi(\vec{x}, \vec{R})$ est la fonction d'onde électronique et $\chi(\vec{R})$, celle des ions. L'approximation de Born-Oppenheimer permet alors de réévaluer ce problème de mécanique quantique en considérant les noyaux des atomes fixes dont les positions déterminent la fonction d'onde électronique $\psi(\vec{x}, \vec{R})$ de l'état fondamental. Cela revient donc à calculer l'énergie en résolvant l'équation de Schrödinger électronique:

$$\left[\sum_{i=1}^n \frac{\nabla_i^2}{2m} + \sum_{i>j} v_{e-e}(\vec{r}) - \sum_{i,I} v_{e-N}(\vec{r}, \vec{R}) \right] \psi(\vec{x}, \vec{R}) = \varepsilon_n(\vec{R}) \psi(\vec{x}, \vec{R}) \quad (2-6)$$

Les solutions de l'équation 2-6 représentent les énergies ε_n des états électroniques n . Ces dernières dépendent des positions \vec{R} des ions (ici considérées comme des paramètres extérieurs) et, pour une configuration atomique donnée, les électrons sont censés se trouver dans leur état fondamental qui correspond à l'énergie ε_0 du système (approximation adiabatique).

Cette approximation permet de réduire le problème à $(N + n)$ corps à un problème à n électrons. Néanmoins sa taille demeure trop importante pour qu'il puisse être résolu. Les approximations que nous allons maintenant présenter concernent la résolution de l'équation de Schrödinger électronique.

2.1.2.2 Approximations de Hartree et de Hartree-Fock

Historiquement, la méthode de résolution proposée par Hartree est à l'origine des méthodes plus récentes utilisées surtout en chimie du solide. Les écoles « Hartree » et « Hartree-Fock », même si elles conduisent formellement à des équations similaires à celle de la Théorie de la Fonctionnelle de Densité (cf §2.1.2.3), reposent sur une vision différente. Dans Hartree-Fock, l'élément central est la fonction d'onde monoélectronique.

L'approximation introduite consiste à écrire la fonction d'onde électronique comme le produit des fonctions d'onde monoélectroniques:

$$\psi = \phi_1 \phi_2 \phi_3 \dots \phi_n = \prod_{i=1}^n \phi_i \quad (2-7)$$

Il faut noter que cette forme de la fonction d'onde électronique serait exacte pour un système d'électrons indépendants (d'un point de vue statistique). L'équation 2-6 est alors transformée en un système d'équations monoélectroniques :

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + v_{e-N}(\vec{r}, \vec{R}) + v_{e-e}(\vec{r}) \right] \phi_i(x, \vec{R}) = \varepsilon_i(\vec{R}) \phi_i(x, \vec{R}) \quad (2-8)$$

où $T_e = \sum_{i=1}^n -\frac{1}{2} \nabla_i^2$ est l'énergie cinétique d'un système d'électrons indépendants,

$v_{e-e} = v_H = \int \frac{|\phi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r'$ est le potentiel associé à l'interaction coulombienne avec les autres

électrons du gaz (également appelé "potentiel de Hartree") et v_{e-N} celui avec les ions. Le fait d'écrire une relation telle que (2-8) va à l'encontre du principe d'exclusion de Pauli et si l'on essaie de calculer la probabilité

de trouver deux électrons à la même position en même temps, on la trouvera non nulle. La méthode de Hartree-Fock introduit alors ces effets quantiques désignés sous le nom de "échange".

Dans la méthode de Hartree-Fock, la fonction d'onde ψ peut être écrite comme un déterminant de Slater:

$$\psi_{1\dots n}(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_1(x_2) & \dots & \phi_1(x_n) \\ \phi_2(x_1) & \phi_2(x_2) & \dots & \phi_2(x_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_n(x_1) & \phi_n(x_2) & \dots & \phi_n(x_n) \end{vmatrix} \quad (2-9)$$

Cette façon d'exprimer la fonction d'onde d'un système à n électrons à partir des fonctions d'onde monoélectroniques satisfait le principe d'exclusion de Pauli car ψ est antisymétrique par rapport à l'échange de deux électrons¹. L'Equation 2-6 est, dans ce cas, remplacée par un système d'équations de Hartree-Fock:

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{e-N}(\vec{r}, \vec{R}) + \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \right] \phi_i(\vec{r}) - \sum_{j \neq i} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \int \frac{\phi_j^*(\vec{r}') \phi_i(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \phi_j(\vec{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\vec{r}) \quad (2-10)$$

Alors que la méthode de Hartree ne tient pas compte de l'impossibilité pour deux électrons de même spin d'être dans le même état quantique, la méthode de Hartree-Fock permet de combler cette lacune en introduisant un terme d'échange (dernier terme de l'équation (2-10)). Chaque électron a alors tendance à s'entourer d'un trou d'électrons et cette répulsion diminue l'énergie du système. La différence entre l'énergie de l'état fondamental du système déterminée à partir de (2-8) et celle déterminée à partir de (2-10) est l'énergie d'échange.

Rappelons que les interactions électrons-électrons sont décrites, dans le modèle, comme les interactions de chaque électron avec un champ moyen dû aux autres électrons. Ceci n'intègre pas la forte corrélation qui existe entre deux électrons de spins opposés et qui les tient à distance l'un de l'autre. La différence entre l'énergie de l'état fondamental vraie et celle déterminée à partir de (2-10) est l'énergie de corrélation. Un traitement "post Hartree-Fock" permet de combler le manque de corrélation en raffinant le modèle par une combinaison linéaire de déterminants de Slater pour décrire la fonction d'onde polyélectronique.

La méthode de Hartree-Fock devient rapidement très coûteuse numériquement lorsque le nombre d'électrons augmente. Les différents termes intervenant dans la résolution de l'équation de Schrödinger électronique (énergie cinétique d'un système d'électrons n'interagissant pas, potentiel de Hartree, échange et corrélations) ont été introduits par la méthode de Hartree-Fock. Ils seront repris dans la Théorie de la Fonctionnelle de Densité moins coûteuse.

2.1.2.3 Théorie de la fonctionnelle de densité (DFT)

¹ Dans le cas le plus simple d'un système à deux électrons 1 et 2, l'Equation (2-9) s'écrit:

$$\psi_{12}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_1(x_1)\phi_2(x_2) - \phi_1(x_2)\phi_2(x_1)] \text{ et la probabilité de trouver 1 et 2 à la même position, dans le même état de spin}$$

$$\text{vaut bien: } P = |\psi_{12}(x_1, x_1)|^2 = \frac{1}{2} [\phi_1(x_1)\phi_2(x_1) - \phi_1(x_1)\phi_2(x_1)]^2 = 0.$$

Alors que la théorie de Hartree-Fock a contribué à la résolution du problème en manipulant des fonctions d'onde, la Théorie de la Fonctionnelle de Densité (DFT) propose une méthode de résolution différente. Kohn et Sham (1965) proposent d'appliquer la démarche théorique concernant un gaz homogène d'électrons au gaz inhomogène d'électrons pour donner naissance à la DFT. D'un point de vue historique, Thomas-Fermi ont introduit la densité électronique comme champ de variables fondamental à la place des fonctions d'onde, ce que reprend la DFT.

Dans cette nouvelle méthode de la résolution du problème à n corps, les termes d'échange et de corrélation sont pris en compte et dépendent uniquement de la densité électronique. Cette dernière hypothèse a été démontrée par Hohenberg et Kohn (1964) dont le théorème repose sur deux postulats:

- L'énergie de l'état fondamental du système d'électrons, soumis à un potentiel extérieur $V_{ext}(\vec{r})$ (dû aux ions par exemple), est une fonctionnelle qui dépend uniquement de la densité électronique $\rho(\vec{r})$,
- le minimum de la fonctionnelle $E[\rho(\vec{r})]$ correspond à la densité $\rho_0(\vec{r})$ à l'équilibre.

Ainsi, la fonctionnelle de l'énergie totale peut s'écrire:

$$E[\rho(\vec{r})] = G[\rho(\vec{r})] + E_H[\rho(\vec{r})] + \int V_{ext}[\rho(\vec{r})]\rho(\vec{r})d^3r \quad (2-11)$$

Dans l'Equation (2-11), $E_H[\rho(\vec{r})] = \frac{e^2}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r d^3r'$ est l'énergie d'Hartree due à l'interaction coulombienne répulsive électron-électron. Le terme d'énergie cinétique $T[\rho]$ et le terme d'énergie d'échange-corrélation $E_{XC}[\rho]$ d'un gaz inhomogène d'électrons sont contenus dans la fonctionnelle $G[\rho]$

$$G[\rho(\vec{r})] = E_{XC}[\rho(\vec{r})] + T[\rho(\vec{r})] \quad (2-12)$$

Les termes d'énergie cinétique et d'énergie d'échange-corrélation ne dépendent que de la densité électronique mais leurs formes ne sont pas connues dans un gaz inhomogène d'électrons mais le sont pour un gaz homogène d'électrons indépendants. La DFT reprend la forme de l'énergie cinétique pour un gaz homogène d'électrons indépendants. L'erreur générée est alors reportée dans le terme d'échange-corrélation.

La théorie de Kohn-Sham réduit le problème à n corps à un système d'équations monoélectroniques identique à celui de Hartree contenant un terme d'échange-corrélation $v_{XC}[\rho(\vec{r})] = \frac{\delta E_{XC}[\rho(\vec{r})]}{\delta \rho(\vec{r})}$ supplémentaire:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + v_{e-N}(\vec{r}, \vec{R}) + v_H[\rho(\vec{r})] + v_{XC}[\rho(\vec{r})] \right] \phi_i(x, \vec{R}) = \varepsilon_i(\vec{R}) \phi_i(x, \vec{R}) \quad (2-13)$$

Le problème à n corps est fortement simplifié par la théorie de Kohn-Sham. Le système considéré est maintenant constitué d'électrons indépendants et se déplaçant dans un potentiel dû aux autres électrons. Les équations de Kohn-Sham peuvent être résolues de façon auto-cohérente. La résolution nécessite juste de faire varier la distribution de la densité électronique, correspondant à des états électroniques occupés, qui va engendrer le potentiel électronique qui est utilisé dans (2-15). Si l'expression de la fonctionnelle d'échange-corrélation était

connue avec exactitude, les effets d'échange et de corrélation seraient complètement pris en compte dans la théorie de la DFT. Néanmoins il n'existe pas encore aujourd'hui de forme exacte mais seulement des méthodes approchées. La plus connue et la plus simple est l'approximation LDA (Local Density Approximation). Elle considère que le gaz de densité électronique non uniforme peut être découpé en portions de gaz de densité uniforme et donc que, localement, l'énergie d'échange-corrélation ε_{XC} d'un électron à une position \vec{r} dans un gaz d'électrons inhomogène est la même que celle dans un gaz homogène de densité électronique identique à celle du point \vec{r} . Ainsi :

$$E_{XC}[\rho(\vec{r})] = \int \varepsilon_{XC}^{\text{hom}}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (2-14)$$

L'approximation LDA ignore complètement les corrections d'échange-corrélation à effectuer lorsque la densité électronique n'est plus localement homogène et il est dans ce cas surprenant qu'elle puisse donner des résultats aussi satisfaisants. Il faut d'ailleurs nuancer ce succès en précisant que la LDA sous-estime la longueur des distances atomiques et surestime l'énergie. Un degré de raffinement supplémentaire peut être ajouté en incluant une dépendance en gradient de la densité électronique. Cette approximation est appelée GGA (Generalised Gradient Approximation). Elle est moins utilisée que la précédente mais donne des résultats aussi satisfaisants. Contrairement à la LDA, la GGA est connue pour surestimer les distances atomiques et sous-estimer l'énergie.

2.1.3 Techniques de calcul

2.1.3.1 Supercellules périodiques

Pour simuler les propriétés d'un solide de dimensions réelles (que l'on supposera infinies), il est nécessaire de prendre en compte un nombre gigantesque d'électrons, ce qui rend de nouveau le problème insoluble. Dans ce cas, il est nécessaire et indispensable de tirer profit de la périodicité du cristal pour simplifier le problème. Puisque l'arrangement des atomes d'un cristal parfait est périodique, les électrons sont soumis à un potentiel extérieur (dû aux atomes) qui est lui aussi périodique. Cette affirmation constitue la base sur laquelle peut être développé le théorème de Bloch.

2.1.3.1.1 Le théorème de Bloch

Le théorème de Bloch utilise la périodicité du cristal pour réduire le nombre infini de fonctions d'onde électroniques au nombre d'électrons dans la maille élémentaire du cristal. La fonction d'onde est alors écrite comme le produit d'une onde plane et d'une fonction f_i de même périodicité que le cristal:

$$\phi_i(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) f_i(\vec{r}) \quad (2-15)$$

La fonction périodique f_i peut être exprimée comme une somme discrète d'ondes planes dont les vecteurs d'onde sont des vecteurs \vec{G} du réseau réciproque du cristal:

$$f_i(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{i,\vec{G}} \exp(i\vec{G}\cdot\vec{r}) \quad (2-16)$$

Et:

$$\phi_i(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c_{i,\vec{k}+\vec{G}} \exp[i(\vec{k} + \vec{G})\cdot\vec{r}] \quad (2-17)$$

Le théorème de Bloch permet de simplifier le problème: au lieu de devoir le résoudre sur l'espace entier (cristal de dimensions presque infinies), il peut être résolu dans une maille élémentaire (en fait il s'agit de la première zone de Brillouin), mais en un nombre infini de points \vec{k} .

2.1.3.1.2 Echantillonnage de la zone de Brillouin: points \vec{k}

D'un point de vue numérique, il n'est pas possible de résoudre les équations monoélectroniques en un nombre infini de points \vec{k} et les solutions doivent être intégrées sur un nombre fini de points \vec{k} dans la zone de Brillouin. Cet échantillonnage de la zone de Brillouin est une approximation raisonnable. Il faut une densité de points \vec{k} plus importante lorsque la structure de bande varie très rapidement (cas des métaux par rapport à celui des isolants ou semiconducteurs) et lorsque le volume de la maille élémentaire décroît. Un des échantillonnages les plus communément utilisé est celui de Monkhorst et Pack (1976) qui définit un ensemble uniforme de points \vec{k} tels que:

$$\vec{k} = u_p \vec{b}_1 + u_r \vec{b}_2 + u_s \vec{b}_3 \quad (2-18)$$

avec \vec{b}_1 , \vec{b}_2 et \vec{b}_3 les vecteurs de base du réseau réciproque, et u_p , u_r et u_s des nombres vérifiant la loi de construction:

$$u_r = \frac{2r - q_r - 1}{2q_r} \quad (r = 1, 2, 3, \dots, q_r) \quad (2-19)$$

où q_r est le nombre de points \vec{k} dans la direction \vec{r} .

La convergence du calcul en fonction de la densité de points \vec{k} utilisée doit toujours être vérifiée.

2.1.3.1.3 Les ondes planes

Rappelons qu'en principe un ensemble infini d'ondes planes est requis. Néanmoins, les ondes ayant les vecteurs d'onde les plus grands jouent un rôle moins important que celles ayant des vecteurs d'onde petits et pourront de ce fait être négligées. L'introduction d'une énergie de coupure E_c permet de limiter le nombre d'ondes planes nécessaire au calcul. Cette condition est définie par l'inégalité suivante:

$$\frac{1}{2} |\vec{k} + \vec{G}|^2 < \frac{mE_c}{\hbar^2} \quad (2-20)$$

Ainsi, plus l'énergie de coupure est importante et plus le nombre d'ondes planes est élevé. Le calcul est alors d'autant plus précis que l'énergie de coupure est grande mais il devient également plus coûteux en temps de calcul.

2.1.3.2 Interactions électrons-ions:

Nous avons montré précédemment qu'il était possible de résoudre les équations de Kohn-Sham pour un système cristallin de dimensions infinies avec le théorème de Bloch et grâce à l'utilisation d'une énergie de coupure et à un échantillonnage de la première zone de Brillouin. Malheureusement, si l'on veut pouvoir décrire les rapides oscillations des fonctions d'onde des électrons de cœur des atomes constituant le cristal, il est nécessaire d'utiliser un nombre important d'ondes planes.

En fait, la plupart des propriétés physiques des solides dépendent beaucoup plus des électrons de valence que des électrons de cœur. C'est sur cette constatation que l'approximation du potentiel du cœur de l'atome par un pseudopotentiel prend tout son sens (on considère les électrons de cœur "gelés" dans leur état fondamental). Elle consiste à remplacer les interactions des électrons de valence avec les électrons de cœur et avec le noyau (ensemble que l'on peut appeler "ion") par un pseudopotentiel. Les fonctions d'onde des électrons de valence varient rapidement dans la région proche du cœur de l'atome car elles doivent satisfaire au principe d'orthogonalité avec les fonctions d'onde des électrons de cœur. Ces pseudopotentiels sont construits de telle façon que les pseudo-fonctions d'ondes et le potentiel soient identiques, au-delà d'un rayon de coupure r_c , à ceux qui existent lorsque tous les électrons sont pris en compte (Figure 2-1).

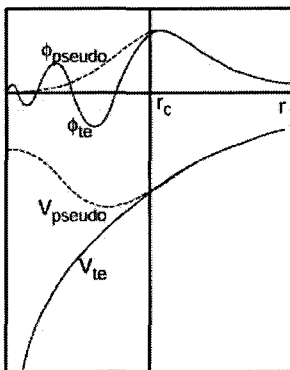


FIGURE 2-1

Schéma de la construction d'un pseudopotentiel. Au-delà d'un rayon de coupure r_c , la fonction d'onde et le potentiel coïncident avec les vrais déterminés lorsque tous les électrons de cœur sont pris en compte (schéma reproduit d'après Payne).

L'utilisation des pseudopotentiels conduit à des pseudo fonctions d'onde plus « lisses », ce qui réduit le nombre d'ondes planes nécessaires au calcul. Les pseudopotentiels à norme conservée qui donnent le nombre correct d'électrons de cœur doivent être distingués des pseudopotentiels "ultra-doux" pour lesquels la pseudofonction n'a pas la même charge intégrée que celle de la fonction d'onde en considérant tous les électrons. Cette seconde famille de pseudopotentiels à norme non conservée dont l'utilisation a été suggérée par Vanderbilt (1990) permet d'utiliser encore moins d'ondes planes dans le développement. Alors que les pseudopotentiels à norme conservée

ne permettent de traiter les éléments de transition qu'au prix d'un surcoût numérique non négligeable, les pseudopotentiels "ultra-doux" y parviennent en utilisant des ressources informatiques moindres. Pour de plus amples informations, Payne *et al.* (1992) ont fait une excellente description de l'utilisation des pseudopotentiels.

2.1.3.3 Algorithmes utilisés

La détermination de l'énergie totale d'un système d'ions se décompose en deux étapes importantes.

Tout d'abord, pour une configuration d'ions donnée, la fonction d'onde de l'état fondamental est calculée de façon auto-cohérente. Par cette méthode, une fonction d'onde d'essai de départ est construite en choisissant aléatoirement ses coefficients et une densité d'essai initiale ρ_0 est déterminée à partir des densités de charge des atomes pris isolément. Cet état initial est très éloigné des états propres définis par l'équation de Kohn-Sham et la boucle de calcul "électronique" a pour but d'optimiser la densité de charge. Cette dernière permet de construire l'Hamiltonien de Kohn-Sham ce qui permet de calculer de façon itérative la fonction d'onde correspondant à cet Hamiltonien. A partir de cette fonction d'onde, une nouvelle densité électronique ρ_n est calculée, laquelle est mélangée à la densité de départ et réinjectée dans le schéma. Tant que la différence $\rho_n - \rho_0$ n'est pas nulle (ou presque), l'état fondamental n'est pas atteint (Figure 2-2).

Une fois que l'état fondamental électronique est déterminé, le théorème de Hellmann-Feynman est utilisé pour calculer les forces agissant sur les ions. La force s'exerçant sur un ion i en position \vec{R}_i est donnée par la dérivée partielle au premier ordre de l'énergie par rapport à la position \vec{R}_i :

$$\frac{dE}{d\vec{R}_i} = \left\langle \phi \left| \frac{dH}{d\vec{R}_i} \right| \phi \right\rangle \quad (2-21)$$

Sous l'influence de ces forces, de nouvelles positions ioniques sont alors déterminées par intégration des équations de mouvement ou par des méthodes directes de minimisation (gradients conjugués). Après chaque changement de la configuration des ions, les fonctions d'onde ne sont plus celles des états propres et un nouveau pas "ionique" doit être réalisé. La relaxation des positions ioniques s'achève lorsque les forces qui s'appliquent sur les ions sont nulles ou minimales dans la pratique.

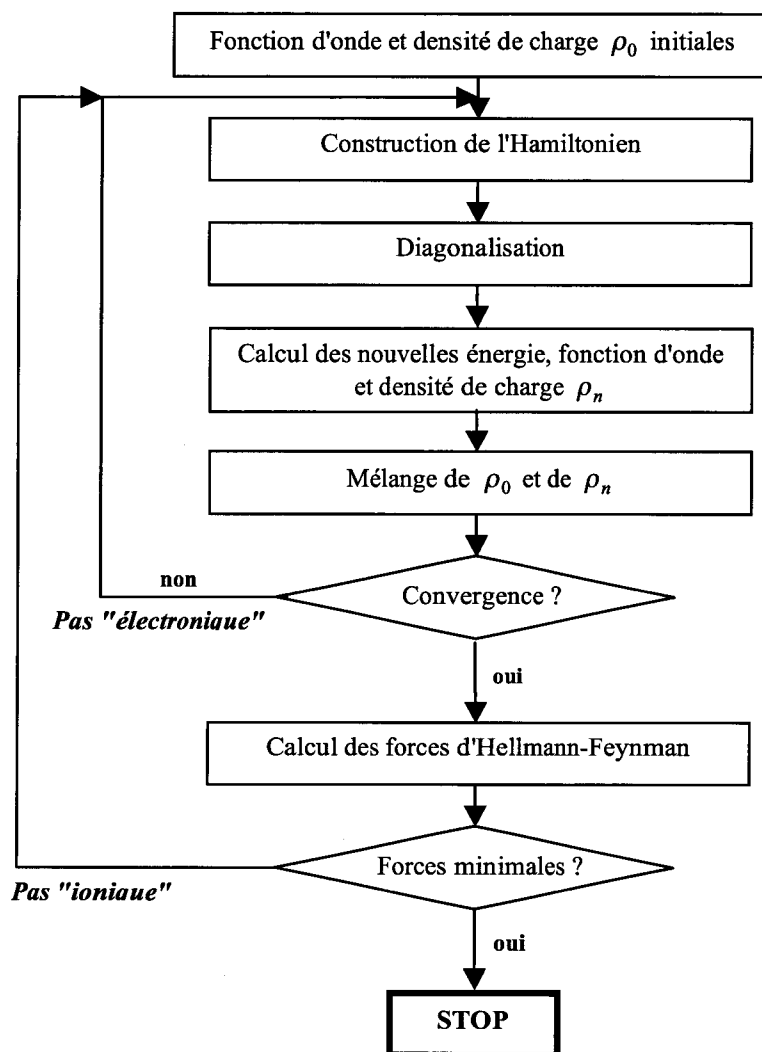


FIGURE 2-2

Organigramme de l'algorithme général utilisé dans un code de simulation ab initio.

2.2 Simulation de la dynamique des dislocations

On sait depuis longtemps que le comportement plastique d'un solide cristallin résulte du mouvement de ses défauts appelés dislocations. Le développement des simulations de la dynamique des dislocations a émergé, dans les années 80, de la volonté de construire un pont entre la physique des dislocations et la plasticité du cristal pour combler la frustration due à l'utilisation de lois rhéologiques phénoménologiques intervenant dans les modèles mécaniques (lois de comportement utilisées dans les codes basés sur les éléments finis).

Pour se placer à l'échelle du monocristal (de une à quelques dizaines de micromètres), il est préférable de considérer les dislocations comme des discontinuités linéaires dans un milieu élastique continu plutôt que comme des distorsions du réseau atomique. Ainsi, dans les simulations de dynamique des dislocations, les propriétés de cœur (dissociations par exemple) sont prises en compte indirectement grâce à des lois phénoménologiques de mobilité alors que les interactions entre dislocations sont calculées à l'aide de la théorie élastique.

Dans ce paragraphe, nous donnerons les éléments nécessaires à la compréhension du fonctionnement de tels codes de simulation. Nous présenterons essentiellement la simulation à trois dimensions de la dynamique des dislocations basée sur un réseau discret qui a été développée au Laboratoire des Etudes Microstructurales de l'ONERA-Châtillon, sans oublier qu'elle est issue des simulations à deux dimensions.

2.2.1 Historique

A l'origine, les simulations de la dynamique des dislocations sont à deux dimensions. Les premières, dès les années soixante, sont des simulations de la dynamique des dislocations dites dans le plan (Foreman et Makin (1966)) par "dans le plan" il faut entendre "plan de glissement"). Une ligne de dislocation unique y est discrétisée en segments interconnectés par des nœuds qu'il faut déplacer sous l'action d'une contrainte extérieure appliquée. Ces simulations ont permis, dans un premier temps, de vérifier et de préciser les lois de tension de ligne des dislocations puis de proposer des modèles simplifiés du durcissement de la forêt.

Il faut attendre le milieu des années 80 pour voir apparaître un autre type de simulation de la dynamique des dislocations à deux dimensions qui a pour but d'étudier l'établissement de microstructures avec la déformation plastique. Contrairement aux simulations dans le plan, les dislocations sont idéalement considérées comme des lignes infinies, toutes de caractère identique et interagissant élastiquement les unes avec les autres. Des lois de mobilité en glissement et montée sont utilisées pour déplacer les dislocations en réponse à la contrainte effective qui s'exerce sur elles. Il faut distinguer les simulations qui sont basées sur une discrétisation de l'espace (Lépinoux et Kubin (1987)) de celles qui ne le sont pas (Amodeo et Ghoniem (1990a); Amodeo et Ghoniem (1990b)). En raison de l'absence d'une troisième dimension, les deux modèles ne peuvent tenir compte de la tension de ligne et les processus de multiplication des sources y sont donc intégrés de façon indirecte par l'utilisation de règles locales. Les annihilations, la montée, la formation de jonctions et de dipôles sont prises en compte de manière simplifiée. Les deux types de simulation ont montré que l'application d'une contrainte extérieure entraînait la formation de bandes de glissement (Figure 2-3) et qu'à haute température, en présence de

montée des dislocations, l'organisation en structures cellulaires permettait la relaxation des contraintes internes (Amodeo et Ghoniem (1990b)).

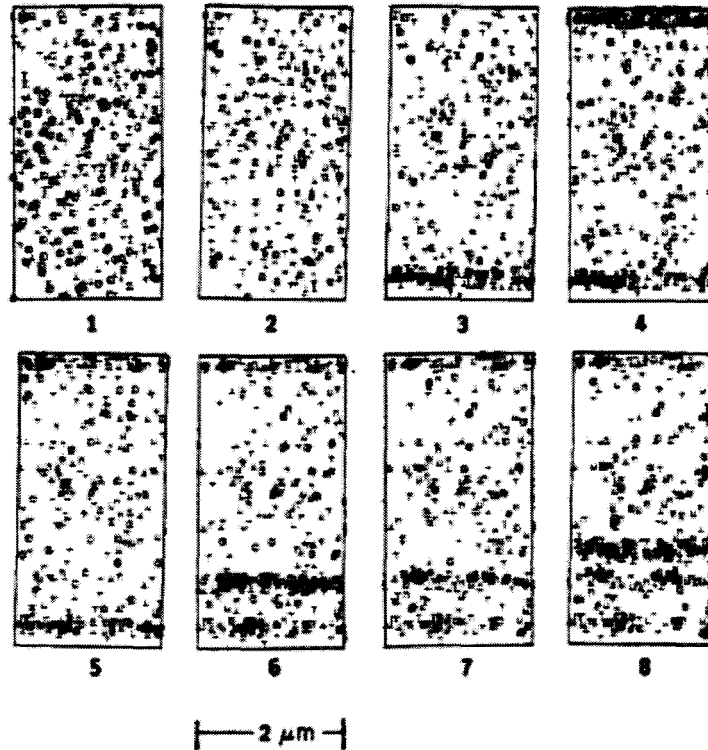


FIGURE 2-3

Formation de bandes de glissement à partir d'une population de dislocations de caractère coin (Amodeo et Ghoniem (1990b)).

Comme l'ont précisé Bulatov *et al.* (2001b), ces simulations à deux dimensions ne tiennent pas compte de la géométrie de glissement, des effets de tension de ligne et demeurent trop incomplètes quant à l'étude de la plasticité des cristaux.

Il fallait ajouter la troisième dimension manquante pour pouvoir passer à la génération suivante de simulation de la dynamique des dislocations, dès le début des années 90. Le prix à payer pour l'intégration des effets de tensions de ligne dans la simulation est une complexification importante du problème, notamment sur le plan topologique. Il s'agit alors de manipuler des lignes, d'en assurer la continuité et leurs intersections dans un espace à trois dimensions. Il faut ici remarquer que l'évolution du 2D vers le 3D n'a été possible que grâce à l'évolution toujours croissante des puissances de calcul.

Il existe aujourd'hui deux grandes familles de simulation 3D de la dynamique des dislocations héritées directement des deux types de simulation 2D: certaines manipulent des segments se déplaçant sur un réseau discret (modèle discret) et d'autres gèrent le déplacement des nœuds d'interconnexion entre segments (modèle continu). Ces deux approches ne sont pas fondamentalement différentes mais conduisent à deux familles de codes de simulation qui sont relativement éloignées l'une de l'autre. Madec (2001) signale notamment que le fait d'abandonner la discrétisation de l'espace au profit d'un espace continu entraîne une perte d'efficacité lorsque le nombre de dislocations devient important. Dans ce paragraphe, nous ne décrivons plus en détail que le modèle

discret de la simulation de la dynamique des dislocations et, pour de plus amples informations sur la seconde, le lecteur pourra consulter Schwarz (1999), Zbib *et al.* (1998) et Zbib *et al.* (2000).

2.2.2 Discrétisation de l'espace et des lignes

Lépinoux et Kubin (1987) utilisaient déjà une discrétisation de l'espace dans les simulations de la dynamique des dislocations à deux dimensions et les simulations actuelles à trois dimensions en ont hérité.

Le principe consiste à discrétiser le continuum élastique en utilisant un pavage reposant sur un réseau homothétique de la structure cristallographique étudiée. Dans le cas d'un cristal de structure cubique à faces centrées, le réseau de la simulation est cubique et ses dimensions sont ajustées de telle sorte que deux plans de glissement (111) soient distants de deux fois la distance critique d'annihilation spontanée d'un dipôle coin (Devincre et Condat (1992); Devindre (1993)). Cette distance a été déterminée expérimentalement par Essmann et Mughrabi (1979) et vaut $y_c = 1,6nm$. Le réseau de la simulation est alors fixé dans ce cas à :

$a = 2\sqrt{3}y_c \approx 5,54nm$. L'avantage de la discrétisation de l'espace réside dans le fait que la simulation fournit "naturellement" une limite entre les interactions de cœur et les interactions élastiques entre dislocations. En effet, deux dislocations ne réagissent pour se recombier (annihilations, formation de jonction) que si elles occupent le même nœud, processus qui nécessiterait un traitement atomistique des propriétés de cœur. La discrétisation de l'espace peut se faire suivant le même principe dans d'autres structures telles que les cubiques simples ou les cubiques diamant (Moulin *et al.* (1997)). Nous verrons que pour la forstérite, de structure orthorhombique, les dimensions du réseau de la simulation ont été déterminées d'une manière différente.

Les lignes de dislocation sont elles aussi discrétisées par des segments de caractères déterminés interconnectés entre eux. A l'origine des premières simulations 3D, une succession de segments de caractères vis ou coin était utilisée pour construire une dislocation et rendre compte de sa courbure (Devincre et Condat (1992); Devindre (1993)). Madec *et al.* (2001), en introduisant deux autres caractères mixtes, ont permis de mieux décrire la courbure des dislocations en utilisant moins de segments pour la discrétiser (Figure 2-4). L'autre avantage du modèle "pure-mixte" par rapport au modèle "coin-vis" est de permettre la simplification de la gestion des réactions entre dislocations (cf. 2.2.5 §2.2.5).

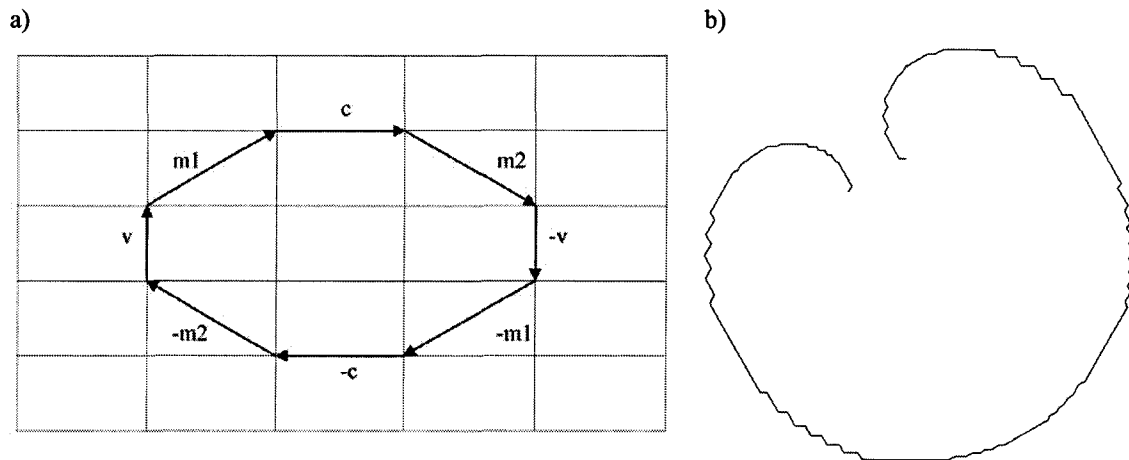


FIGURE 2-4

Boucle élémentaire montrant la discrétisation des caractères que peuvent prendre les segments de dislocations dans le système (100)[001] de la forstérite (cf chapitre 4). Seuls un caractère vis (v), un caractère coin (c) et deux caractères mixtes ($m1$ et $m2$) sont accessibles dans la simulation.

Discrétisation d'une source de Franck-Read du système (100)[001] de la forstérite à partir des directions possibles de la boucle élémentaire.

Les vecteurs de déplacement, perpendiculaires à la direction de ligne des segments, sont prédéterminés de telle sorte qu'après chaque déplacement d'un nombre entier de fois ces vecteurs, toutes les extrémités de segments se retrouvent sur des nœuds du réseau. De plus, au cours de leur déplacement, les caractères des segments ne sont pas modifiés. En réalité, ils se déplacent sur des rails définis par la direction des deux caractères voisins connectés à leurs extrémités et leur norme doit être soit allongée soit raccourcie. La détermination de la base des vecteurs du réseau doit ainsi tenir compte des déplacements et des directions ligne de chaque segment de la boucle élémentaire. Cette opération, simple dans le modèle coin-vis, est bien plus complexe dans le modèle pure-mixte.

2.2.3 Calcul de la force effective sur une dislocation

Avant de déplacer les segments, la contrainte effective est calculée, en élasticité isotrope, au centre de chaque segment. Elle est la somme de différentes contributions: la contrainte appliquée τ_a , la tension de ligne τ_l et la contrainte interne τ_i due à la présence des autres dislocations.

La contrainte appliquée est considérée comme homogène dans tout le volume simulé en compression ou en traction. La manière dont elle agit au cours du temps définit le mode de sollicitation adopté: fluage à contrainte constante, contrainte qui varie pour maintenir une vitesse de déformation imposée, relaxation à contrainte nulle ou fatigue lorsque la sollicitation consiste en une succession de cycle de traction et de compression à vitesse imposée.

Comme nous l'avons déjà expliqué, les dislocations sont discrétisées à l'aide d'un nombre fini de segments rectilignes. Le calcul de la tension de ligne locale sur un segment i est alors obtenu en remplaçant le segment i et ses premiers voisins ($i-1$) et ($i+1$) par un arc de cercle de rayon R passant par les centres des segments. A partir de la courbure locale R , la tension de ligne est alors calculée grâce à:

$$\tau_l = \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \frac{1}{R} \left[(1+\nu - 3\nu \sin^2 \alpha') \ln\left(\frac{2\Lambda}{r_0}\right) - \nu \cos 2\alpha' \right] \quad (2-22)$$

où μ est le module de cisaillement, ν le module de Poisson, α' l'angle que fait la tangente au centre du segment i avec le vecteur de Burgers, R le rayon de courbure de l'arc et Λ la longueur de l'arc (Gomez-Garcia *et al.* (1999)).

Gomez-Garcia *et al.* (1999) ont montré que, dans le modèle coin-vis, une attention particulière devait être portée à la longueur des segments qui discrétisent la dislocation. Des segments trop longs entraînent une courbure trop grossière de la dislocation. Des segments trop courts multiplient les "coins" au niveau desquels on passe brusquement d'un caractère coin à un caractère vis et qui génèrent un champ de contrainte parasite. Une discrétisation optimale de six segments pour discrétiser une source de dislocation permet de minimiser son énergie élastique. Le modèle "pure-mixte" permet de mieux décrire la courbure des dislocations avec moins de segments (un nombre de quatre s'avère suffisant) et en formant des "coins" dont les angles sont plus obtus que pour le modèle coin-vis (Madec (2001)).

Le calcul de la contrainte interne constitue une partie importante de la simulation en terme de temps de calcul. Il est nécessaire de calculer l'interaction de chaque segment avec tous les autres (sauf avec les segments premiers voisins connectés aux deux extrémités du segment) et le temps de calcul augmente alors avec le carré du nombre de segments. Il était donc nécessaire d'adopter une formulation la plus efficace possible pour cette partie de la simulation. Nous ne rappellerons pas ici les équations utilisées mais elles sont décrites clairement par Devincré (1995). Nous verrons plus tard que l'approximation de la méthode des boîtes permet d'alléger le traitement des interactions élastiques entre segments de dislocation.

La contrainte appliquée et la contribution de la contrainte interne étant connues pour chaque segment, la contrainte de Peach et Koehler peut être calculée:

$$\tau_{PK} b = \left[\left(\overline{\sigma}_a + \overline{\sigma}_i \right) \cdot \vec{b} \right] \times \vec{l} \quad (2-23)$$

Et la contrainte effective est égale à:

$$\tau^* = \tau_{PK} + \tau_l \quad (2-24)$$

2.2.4 Loi de vitesse des dislocations

Une fois que la contrainte effective est calculée pour un segment, une loi de mobilité permet de mettre ce dernier en mouvement. Cette loi relie la vitesse à la contrainte et parfois à d'autres paramètres comme la température.

Bulatov *et al.* (2001b) précise que "la fidélité des simulations de la dynamique des dislocations dépend de la précision des lois de mobilité"². Ainsi une attention particulière doit être accordée au choix de telles relations.

Les forces qui s'opposent au déplacement d'une dislocation, en l'absence d'inertie, sont des forces de freinage visqueux (interactions avec électrons à basse température ou avec les phonons à haute température) et des forces de friction du réseau lui-même (Philibert (1979)). Dans les structures CFC, le réseau oppose peu de résistance au

déplacement d'une dislocation et la mobilité des dislocations dépend linéairement de la contrainte: $v = \frac{\tau^* b}{B}$

(avec B un coefficient d'amortissement visqueux). Par contre, les forces de friction de réseau ne sont plus négligeables pour les dislocations de caractère vis dans les structures CC et pour les dislocations vis et mixtes dans des matériaux covalents comme le silicium par exemple (structure cubique diamant). Les lois de mobilité sont, dans ces cas, des lois d'Arrhenius gouvernées par un mécanisme de formation et de propagation de doubles décrochements (Tang *et al.* (1998); Moulin *et al.* (1997)).

Le temps est discrétisé dans la simulation et, lorsque la vitesse d'un segment est déterminée, son déplacement peut être calculé pour le pas de temps fixé.

2.2.5 Gestion des obstacles

Connaissant le pas de temps, la longueur, l'orientation, la vitesse du segment et les directions de ligne de ses voisins, l'aire balayée par le segment peut être prédite pour chaque pas de simulation (Figure 2-5).

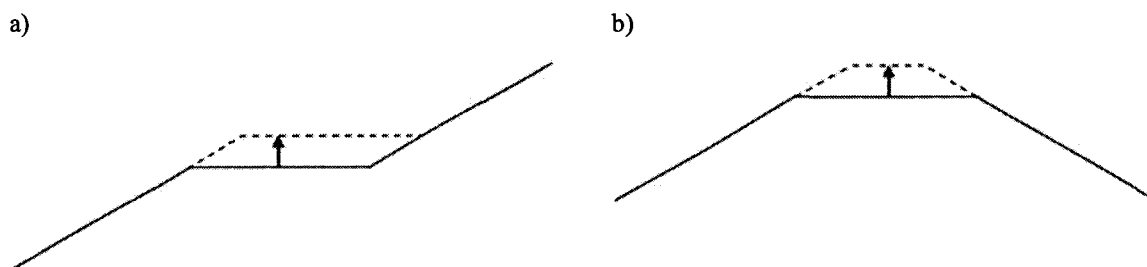


FIGURE 2-5

Le déplacement d'un segment se fait sur des "rails" définis par les deux segments voisins. Pour que la continuité de la ligne soit respectée lors du déplacement, la norme du segment peut être conservée (a) ou modifiée (b). Les longueurs des segments voisins sont elles aussi modifiées.

Avant de déplacer réellement les segments, il faut vérifier qu'ils ne rencontrent pas d'obstacles dans l'aire balayée prédite. Si c'est le cas, la simulation traite les réactions de natures différentes qui peuvent se produire. Dans un cristal pur, ces obstacles sont généralement constitués par d'autres segments de dislocation.

Deux segments ayant le même vecteur de Burgers, glissant dans le même plan de glissement mais ayant des sens de circulation de ligne opposées s'attirent et vont s'annihiler. Inversement s'ils ont des sens de circulation de ligne identiques, ils se repousseront.

² "... the fidelity of DD simulations depends on the accuracy of the mobility functions used to move dislocations in response to applied forces..."

Deux dislocations de vecteurs de Burgers différents glissant dans des plans sécants peuvent se rencontrer. Si la configuration est attractive, elle peut conduire soit à la formation d'une jonction (si elle est énergétiquement favorable), soit à un état croisé (si la jonction n'est pas énergétiquement favorable). Sinon la configuration est répulsive. Le critère énergétique le plus simple qui peut être utilisé pour étudier la formation d'une jonction est le critère de Frank (2-25).

$$\Delta U = (\vec{b}_1^2 + \vec{b}_2^2) - (\vec{b}_1 + \vec{b}_2)^2 \quad (2-25)$$

Ce critère est utilisé dans la simulation lorsque deux segments se rencontrent en un nœud du réseau. Si le résultat de l'équation (2-25) est positif, les deux dislocations 1 et 2 se recombinent pour former une jonction.

Dans le modèle coin-vis, les directions de jonction ne sont généralement pas accessibles dans la simulation (notamment dans la structure CFC) et les deux segments ne peuvent se recombinaison pour donner une jonction. Néanmoins deux dislocations, en les laissant interagir élastiquement, s'entremêlent naturellement suivant la direction de jonction pour minimiser leur énergie. Malheureusement cela ne peut rendre compte du caractère sessile de certaines jonctions. Deux segments en configuration pour former une jonction sont alors "artificiellement" immobilisés et la contrainte de destruction de la jonction est déterminée de façon phénoménologique. Le modèle pure-mixte prouve une nouvelle fois ici tout son intérêt. Le fait d'avoir accès à des directions mixtes permet de recombinaison deux segments suivant la direction de jonction. On laisse alors à l'élasticité le seul choix de la construction ou de la destruction de la jonction.

2.2.6 Les conditions aux limites

Pour faire en sorte que le comportement simulé d'un volume de quelques micromètres soit représentatif de celui d'un volume de cristal plus important, il est nécessaire d'adopter des conditions aux limites rigoureuses.

Les problèmes ont été énoncés mathématiquement par El-Azab (2000). Tout d'abord, outre la contrainte interne due à l'interaction entre les dislocations situées à l'intérieur du volume simulé, les segments sont également censés être soumis à un champ de contrainte dû aux autres dislocations du cristal situées à l'extérieur du volume simulé. Ainsi, en toute rigueur, il est nécessaire de tenir compte d'un champ de contrainte équivalent à celui qui serait généré par les dislocations extérieures au volume simulé. En pratique, une méthode dite "méthode de la sphère" a été adoptée. Dans ce cas, les limites du volume simulé sont considérées comme étant quasi-libres: le champ de contrainte interne n'est pas équilibré par un champ correctif et les dislocations peuvent sortir du volume mais ne peuvent pas y entrer. Ainsi la densité de dislocations est plus faible près des bords qu'à l'intérieur du volume. La méthode consiste alors à ne calculer la déformation et les densités de dislocations qu'à l'intérieur d'une sphère centrée dans le cube simulé, tout en prenant en compte l'ensemble des segments du volume entier (Verdier *et al.* (1998); Tang *et al.* (1998); Fivel et Canova (1999)). Les segments contenus dans cette sphère sont soumis à un champ de contrainte résultant de l'interaction avec les autres segments situés à la fois à l'intérieur et à l'extérieur de la sphère. Le rayon de la sphère doit être suffisamment petit pour éviter l'interaction avec les surfaces libres du volume simulé mais assez grand pour prendre en compte un grand nombre de dislocations et faire en sorte que les statistiques (déformation et densité) soient valables.

Le second problème concerne l'équilibrage du flux de dislocations. Puisque le volume simulé est censé représenter un petit élément de volume du cristal, des dislocations doivent sortir du volume tandis que d'autres doivent y entrer. Pour chaque système de glissement, la déformation plastique "sortante" est alors compensée par une déformation plastique "entrante" par introduction aléatoire de nouvelles sources (Fivel et Canova (1999); Tang *et al.* (2001)).

A l'image de la dynamique moléculaire, l'utilisation de conditions aux limites périodiques peut s'avérer très utile lorsqu'il s'agit d'étudier le comportement d'un cristal massif (voire infini) à partir d'un petit volume de ce cristal. Les conditions aux limites périodiques étaient déjà utilisées dans les simulations de dynamique des dislocations à deux dimensions. La plupart des auteurs ont souvent émis des réserves quant à l'implémentation de telles conditions aux limites dans les simulations à trois dimensions. L'argument invoqué était que, contrairement aux simulations à 2D pour lesquels les objets manipulés sont ponctuels (i.e. des dislocations droites, de longueur infinie, vues de bout), les simulations 3D gèrent des lignes dont la continuité ne pourrait plus être assurée lorsque l'on utilise les conditions aux limites périodiques (Fivel et Canova (1999); Zbib *et al.* (1998)). Pourtant Bulatov *et al.* (2001a) ont montré qu'il est tout à fait possible d'intégrer de telles conditions aux limites et que cette méthode permet de satisfaire "naturellement" aussi bien le problème de flux des dislocations que l'équilibre des contraintes internes.

Les conditions aux limites périodiques consistent à répéter périodiquement le volume simulé dans l'espace. Lorsqu'un segment quitte le volume simulé, il se retrouve alors dans un des 26 volumes images qui le bordent. Parallèlement l'image du segment qui se déplaçait dans un autre volume image entre dans le volume simulé. En pratique, dans la simulation, seuls les segments contenus dans le volume simulé sont pris en compte dans le calcul; les segments qui quittent le volume simulé sont oubliés et leurs images sont injectées dans le volume simulé à la position périodique équivalente grâce à des opérations de modulo. La Figure 2-6 représente une source de Frank-Read en expansion dont une partie a quitté le volume image. Les conditions aux limites périodiques consistent à "replier" la configuration à l'intérieur du volume. La configuration résultante, dans le volume simulé, semble alors n'être qu'un ensemble de "bouts" de dislocations non connectés entre eux. Mais si l'on repave l'espace avec les images de cette configuration, la boucle de dislocation est reconstruite. La Figure 2-6 s'appuie sur une vue à deux dimensions pour illustrer le principe des conditions aux limites périodiques mais le raisonnement est identique à trois dimensions. Le fait d'adopter des conditions aux limites périodiques dans des simulations à 3D de la dynamique des dislocations préserve bien la continuité de la ligne.

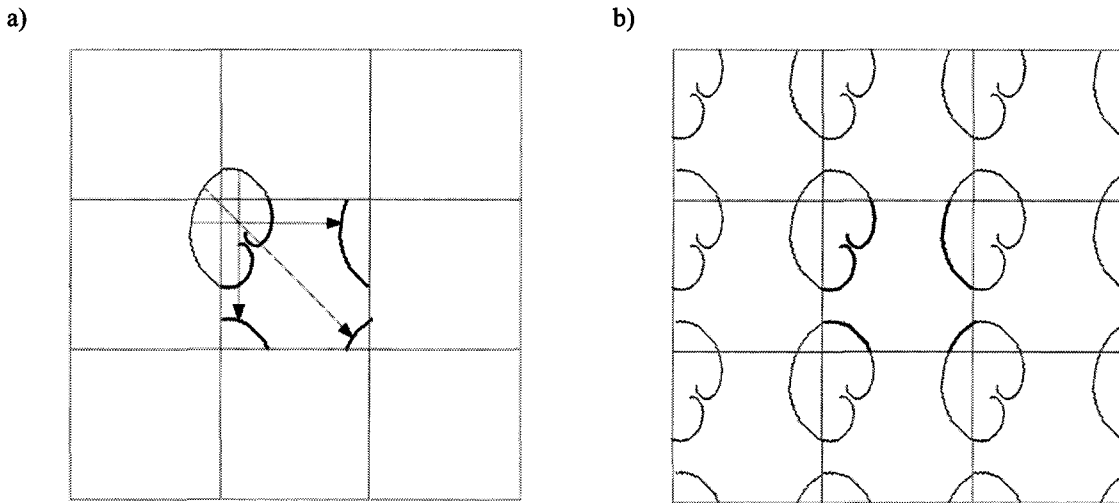


FIGURE 2-6

Lorsqu'un segment de dislocation traverse les limites du volume simulé, il est replié dans le volume à la position périodique équivalente. La continuité des lignes est préservée. Lorsque l'on repave l'espace, avec les volumes images, la forme de la boucle de dislocation est retrouvée.

Le calcul de la contrainte interne au milieu d'un segment est réalisé en considérant la contribution élastique de tous les segments sauf des deux premiers voisins qui lui sont connectés. Avec les conditions aux limites périodiques, les positions des segments sont translattées et "repliées" dans le volume simulé pour que la configuration soit recentrée autour du point où l'on désire calculer la contrainte interne. Ceci revient à déplacer le volume simulé au sein du pavage périodique de la configuration pour amener son centre sur le point et d'y calculer la contrainte interne en ne considérant que les segments originaux ou images contenus dans les limites du volume translatté (Figure 2-7)

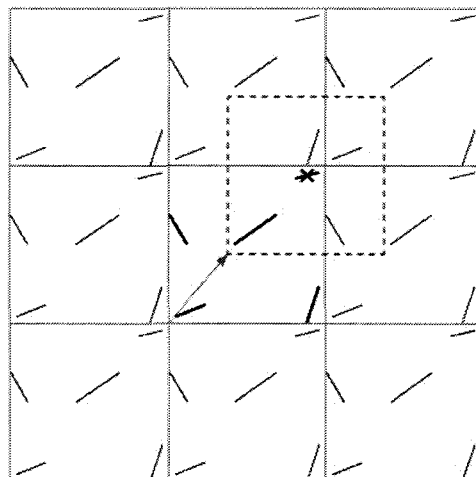


FIGURE 2-7

Pour calculer la contrainte interne qui s'applique au milieu d'un segment (marqué d'une croix), on déplace les limites du volume simulé sur le pavage périodique de telle sorte que le centre soit amené sur le milieu du segment. Seules les contributions élastiques des segments images ou originaux contenus dans le volume déplacé sont pris en compte pour le calcul de la contrainte interne.

Grâce aux conditions aux limites périodiques, les effets de bords disparaissent puisque l'environnement est recréé autour d'un segment pour lequel la contrainte interne doit être déterminée. De plus, contrairement à ce que certains auteurs (Fivel et Canova (1999); Zbib *et al.* (1998)) ont pu penser, la continuité de ligne est préservée. Néanmoins les conditions aux limites périodiques peuvent être à l'origine de certains artefacts qu'il est nécessaire d'éviter ou dont les effets doivent être minimisés. Lorsqu'une portion d'une boucle de dislocation qui s'étend dans son plan de glissement traverse les limites du volume simulé, elle est réintroduite dans le volume simulé à la position périodique équivalente. Elle glisse alors dans un second plan de glissement parallèle au premier. Après un nombre de passages des limites de la boîte plus ou moins important, une portion de la boucle peut se retrouver dans le plan de glissement initial et s'annihiler avec une autre portion de sa boucle. La Figure 2-8 montre à deux dimensions que, lorsque le volume simulé a une face carrée et qu'un segment se déplace suivant une direction à 45° des arêtes de cette face, il se produit rapidement une auto-annihilation. La densité de dislocations arrive alors artificiellement à saturation. Pour limiter ce problème, la distance d'auto-annihilation peut-être augmentée en déformant le volume simulé.

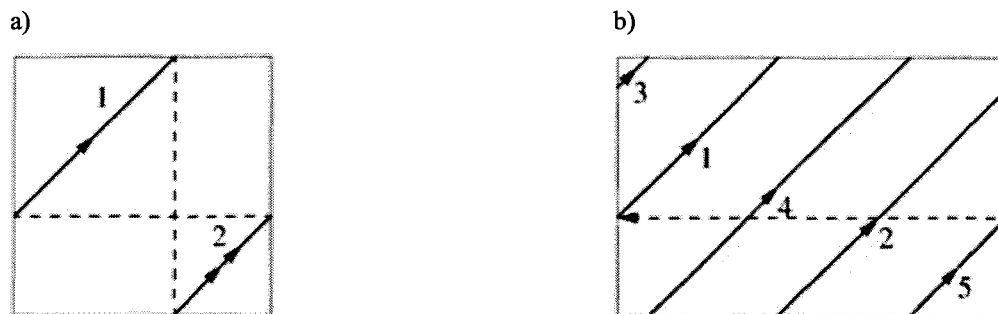


FIGURE 2-8

Dans le cas à deux dimensions du déplacement suivant une direction à 45° des arêtes du carré, un segment revient dans son plan de glissement initial et s'auto-annihile avec une portion de la boucle après avoir traversé deux fois les limites du carré (a). En adoptant une géométrie parallélépipédique, la distance avant auto-annihilation est augmentée (b). (reproduit à partir de Madec (2001)).

Lorsque le nombre de plans de glissement balayés avant auto-annihilation est très grand, il est possible qu'un autre type d'artefact soit généré. Les plans de glissement, dans ce cas, sont très proches et des portions d'une même boucle qui y glissent peuvent interagir par interaction dipolaire.

Les distances d'auto-annihilation sont des fonctions complexes de la géométrie de glissement (normale des plans de glissement, direction de déplacement et forme des boucles de dislocation) et des dimensions du volume simulé. Madec *et al.* (2003a) ont récemment montré qu'elles pouvaient être déterminées avec précision dans tous les cas.

2.2.7 Optimisation de la simulation de la dynamique des dislocations

Pour N segments contenus dans la simulation, le calcul de la contrainte interne au milieu de chaque segment implique de calculer $(N-1)^2$ interactions. Par multiplication des dislocations au cours de la simulation, la densité, donc le nombre de segments augmentent et N peut atteindre quelques dizaines de milliers de segments. Le temps de calcul est proportionnel au nombre d'interactions à prendre en compte et peut ainsi devenir prohibitif en fin de simulation.

Pour avoir un temps de calcul raisonnable qui permette d'obtenir des valeurs de déformation d'au moins 0,1%, il est nécessaire de diminuer le nombre d'interactions à calculer et d'optimiser la dépendance du temps de calcul avec le nombre N de segments. Pour ce faire, la "méthode des boîtes" a été développée et introduite dans des simulations de la dynamique des dislocations par Verdier *et al.* (1998) et a pu être adaptée à l'utilisation des conditions aux limites périodiques par Madec (2001).

Les approximations qui découlent de la méthode des boîtes se basent sur un constat: la contribution des segments situés à longue distance sur la contrainte interne varie lentement dans le temps et dans l'espace. La méthode d'accélération de la simulation consiste alors à découper le volume simulé en sous-boîtes de même géométrie.

Pour un segment appartenant à une certaine sous-boîte, les interactions à longues distances sont constituées des interactions avec les segments n'appartenant pas aux 26 boîtes premières voisines et à la sous-boîte du segment considéré. Puisque la contrainte à longue distance varie peu dans l'espace, on considère en première approximation que la contrainte à longue distance est la même pour chaque segment d'une même sous-boîte. Celle-ci est évaluée au centre de la sous-boîte à partir de la contribution de chaque segment appartenant aux autres sous-boîtes non premières voisines. De plus, comme la contrainte à longue distance varie également peu dans le temps, elle ne nécessite pas d'être réévaluée à chaque pas mais tous les n pas. La contrainte à courte distance, quant à elle, est calculée sans approximation pour chaque segment de la sous-boîte à partir des interactions avec chaque segment appartenant à la même sous-boîte et aux 26 sous-boîtes premières voisines. Le temps de calcul ne varie alors plus comme le nombre total N au carré de segments mais comme (Madec (2001)):

$$\begin{aligned} \text{temps} &\propto (\text{interactions à longue distance}) + (\text{interactions à courte distance}) \\ &\propto N_{\text{boîtes}} N \left[\frac{N_{\text{boîtes}} - 27}{N_{\text{boîtes}}} \right] + n \frac{27N^2}{N_{\text{boîtes}}} \end{aligned} \quad (2-26)$$

Il existe un nombre de boîtes et un nombre de pas avant réactualisation de la contrainte interne à longue distance optimaux qui donnent le temps de calcul le plus court ($N=7^3$ et $n=5$). Il a été montré que les erreurs générées par la méthode des boîtes sur la contribution à longue distance de la contrainte interne étaient inférieures au pourcent (Devincre et Kubin (1997)).

2.2.8 Les applications de la simulation de la dynamique des dislocations à 3D

Il existe aujourd'hui différentes familles de simulation de la dynamique des dislocations à trois dimensions, toutes issues des simulations à deux dimensions. Nous avons essentiellement présenté le fonctionnement de base des simulations de la dynamique des dislocations basées sur une discrétisation de l'espace. D'autres simulations qui abandonnent cette discrétisation de l'espace ont été développées par des équipes américaines. Le modèle continu est moins enclin à réaliser des simulations comportant un nombre important de dislocations. Néanmoins il est plus efficace lorsqu'il s'agit d'étudier des phénomènes particuliers tels que la résistance de dipôles ou de jonctions sous contrainte (Zbib *et al.* (2000)), la contrainte nécessaire pour déplacer une source de dislocation interagissant avec des amas de défauts ponctuels dans le cuivre irradié (Sun *et al.* (2000)) ou la relaxation d'une configuration de dislocations dans les couches minces (Schwarz (2003)).

Les simulations de la dynamique des dislocations basées sur une discrétisation de l'espace sont quant à elles plus efficaces pour modéliser le comportement massif d'une population de dislocation. Au début des années 90, le modèle coin-vis a été utilisé pour modéliser le durcissement de la forêt dans les structures CFC. Ce champ d'étude a été débroussaillé par l'étude de la formation de jonctions et la stabilité de ces verrous (Devincre et Kubin (1994)). Il a plus tard été montré que, grâce à des simulations réalisées en déformation monotone ou cyclique, le glissement dévié jouait un rôle important dans le stockage de dislocation, dans l'irréversibilité du glissement par formation de débris donc dans le durcissement (Kubin et Devincre (1999)). Le modèle pure-mixte, qui décrit mieux les jonctions sans application de règles locales, a permis d'étudier avec précision la formation des différents types d'intersections entre dislocations de vecteurs de Burgers différents glissant dans des plans sécants (Kubin *et al.* (2003)). Outre le fait que le modèle pure-mixte a confirmé le rôle important du glissement dévié sur le durcissement et la formation de microstructures organisées (Madec *et al.* (2002b)), il a permis de démontrer que les interactions colinéaires (deux dislocations de même vecteur de Burgers glissant dans des plans sécants peuvent s'annihiler et laisser de petits segments résiduels) tiennent une part plus importante que la formation de jonctions dans le durcissement de la forêt (Madec *et al.* (2003b)).

Des structures cubique-diamant ont également été étudiées en adaptant le modèle coin-vis au silicium dont les dislocations sont soumises à de fortes forces de Peierls. Ces travaux ont permis d'obtenir un modèle du fonctionnement d'une source de dislocation (Moulin *et al.* (1997)) dans lequel les lois de vitesses thermiquement activées et dépendantes de la longueur des dislocations tiennent une part importante. Ces premiers résultats se sont vus complétés par une étude des propriétés du crochet de multiplication lors d'essais numériques de déformation en glissement simple à partir d'une distribution initiale de sources (Moulin *et al.* (1999)).

Le modèle coin-vis a également prouvé son utilité dans la compréhension du caractère thermiquement activé de la mobilité des dislocations. Tang *et al.* (1998) ont notamment montré qu'il était possible de déduire des essais mécaniques les propriétés individuelles des dislocations. Nous verrons d'ailleurs plus tard que les résultats principaux de cette étude seront réinvestis dans la modélisation de la plasticité de la forstérite à l'échelle mésoscopique. Un modèle du durcissement de la forêt dans les structures CC a pu être proposé à basse température (Tang *et al.* (1999)). A cause d'une forte friction de réseau sur les caractères vis, ce modèle s'avère être différent de celui qui s'applique dans les structures CFC.

Aujourd'hui, le modèle coin-vis détrôné par le modèle pure-mixte n'est surtout utilisé que couplé avec un code d'éléments finis....

Plus récemment, le modèle pure-mixte a été appliqué à une structure HC (hexagonale compacte) pour étudier le stade 0 et la formation des jonctions (Monnet *et al.* (2004)) et déterminer un premier modèle de durcissement de la forêt.

Chapitre 3

Calculs des énergies de faute d'empilement généralisées dans la forsterite

Nous présentons dans ce chapitre une approche de la plasticité de l'olivine à l'échelle atomique basée sur le calcul de fautes d'empilement généralisées et le modèle de Peierls-Nabarro.

Dans un premier temps, après avoir présenté et validé le modèle numérique utilisé, nous déterminerons les contraintes qu'oppose le cristal à son cisaillement rigide dans les systèmes de glissement communément observés.

Dans un second temps, nous utiliserons le modèle de Peierls-Nabarro pour calculer les étalements de cœur des dislocations et une contrainte critique projetée à 0°K dans les différents systèmes de glissement à partir des énergies de faute d'empilement. L'application du modèle de Peierls nécessite certaines hypothèses et approximations et nous discuterons des avantages et inconvénients de l'utilisation d'un tel modèle dans notre cas.

3.1 Code de calcul utilisé: présentation et validation du modèle

3.1.1 Présentation générale

Les calculs ont été effectués grâce au code de calcul *ab initio* VASP (Vienna Ab-initio Simulation Program) développé à l'Institut für Materialphysik de l'Université de Vienne (Kresse et Hafner (1993), Kresse et Furthmüller (1996a), Kresse et Furthmüller (1996b)). Cette simulation est basée sur la Théorie de la Fonctionnelle de Densité qui a été décrite dans le chapitre 2. Tous les résultats que l'on présentera ont été obtenus dans l'Approximation du Gradient Généralisé (GGA) issue du travail de Perdew et Wang (1992).

Des pseudopotentiels ultra-doux (Vanderbilt (1990), Kresse et Hafner (1994a), Kresse et Hafner (1994b)) ont été employés pour décrire les interactions entre les électrons de cœur et ceux de valence. Pour Mg, Si et O, les rayons de cœur valent respectivement 1,058, 0,953 et 0,820Å. Pour Mg, on considère que les électrons de valence sont $2p^6$ et $3s^2$; pour Si, $3s^23p^2$ et pour O, $3s^23p^4$.

3.1.2 Convergence des calculs: points k et énergie de coupure

Le calcul est d'autant plus précis que le nombre de points k pour échantillonner la première zone de Brillouin et l'énergie de coupure sont importants. Néanmoins le calcul est aussi d'autant plus coûteux en ressources informatiques. Un compromis qui donne un temps de calcul raisonnable mais une précision acceptable sur les énergies calculées doit être trouvé. Dans ce but nous avons testé l'influence de plusieurs échantillonnages de la première zone de Brillouin ainsi que plusieurs énergies de coupure de 400eV à 650eV sur l'énergie interne du cristal infini simulé (Figure 3-1). Pour ce faire, les paramètres de maille ainsi que les positions atomiques sont autorisés à relaxer pour minimiser l'énergie interne. La symétrie orthorhombique est imposée au cours du calcul mais nous avons vérifié que laisser la cellule s'en éloigner n'avait strictement aucune incidence sur le résultat: la symétrie orthorhombique est conservée, l'énergie interne et les paramètres de maille sont identiques.

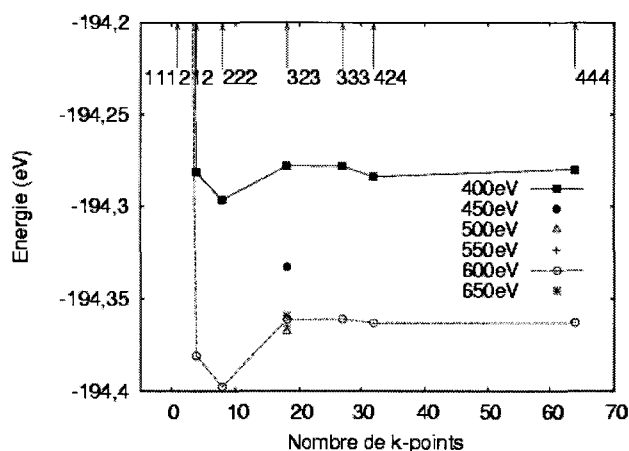


FIGURE 3-1

Influence du nombre de points k et de l'énergie de coupure sur l'énergie d'une maille élémentaire de forsterite.

La grille de points k est construite pour échantillonner uniformément la première zone de Brillouin grâce à la méthode définie par Monkhorst et Pack (1976). La maille du cristal de forsterite étant orthorhombique, le nombre de points k n'est pas obligatoirement identique selon les trois directions du réseau réciproque. Puisque les paramètres de maille a et c sont nettement inférieurs à b , la direction b^* sera échantillonnée avec un nombre moins important de points k (Figure 3-2). En accord avec la Figure 3-1, on choisira une grille de points k "3x2x3" (selon a , b et c respectivement) à partir de laquelle l'énergie interne du cristal varie peu. La sensibilité de l'énergie interne à l'énergie de coupure est moindre lorsque cette dernière est supérieure à 550eV. Dans toute la suite de l'étude, une grille de points k "3x2x3" et une énergie de coupure de 600eV ont été adoptées. En effet, pour de telles valeurs de grille de points k et d'énergie de coupure, l'énergie interne est convergée à $6.10^{-5} eV / \text{atome}$ près. En réalité nous verrons plus tard que l'échantillonnage de la première zone de Brillouin sera ajusté en fonction des dimensions de la supercellule utilisée pour conserver une densité de points k constante.

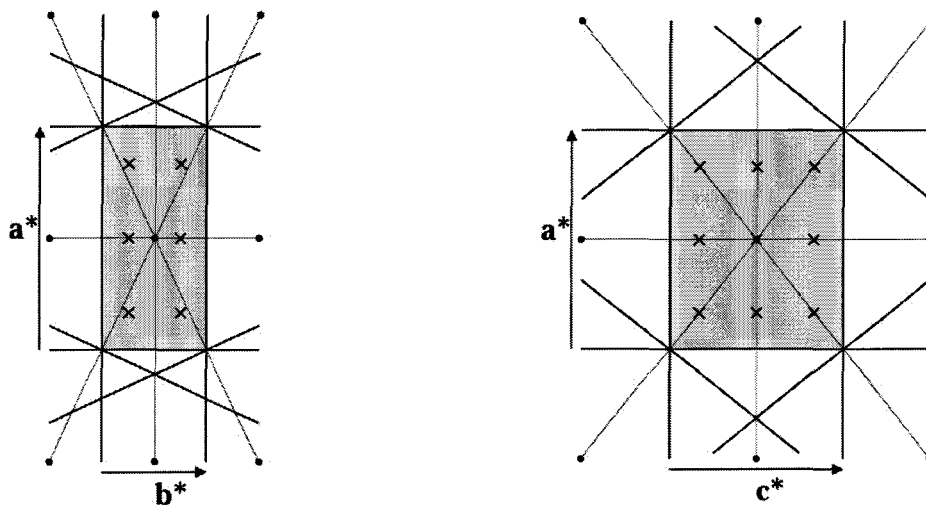


FIGURE 3-2

Schéma représentant l'échantillonnage de la première zone de Brillouin par une grille de points k 3x2x3. La méthode d'échantillonnage est celle proposée par Monkhorst et Pack (1976). $\vec{a}^* = \frac{2\pi}{b \wedge c} \vec{a}$, $\vec{b}^* = \frac{2\pi}{c \wedge a} \vec{b}$ et

$\vec{c}^* = \frac{2\pi}{a \wedge b} \vec{c}$. Les croix correspondent à l'emplacement des points k dans la première zone de Brillouin.

3.2 Propriétés de volume de la forsterite sous pression

3.2.1 Construction des cellules de référence sous pression

La construction des cellules (paramètres de maille et positions atomiques) sous pression a été réalisée en deux étapes. Les paramètres de maille ont d'abord été optimisés en laissant relaxer à la fois les positions atomiques et la forme de la cellule jusqu'à ce que la pression imposée comprise entre 0 et 20GPa soit atteinte à moins de 1% près et l'énergie interne minimale à $2,5.10^{-5} eV / \text{atome}$ près. La symétrie orthorhombique est conservée malgré le degré de liberté accordé à la forme de la cellule. Ensuite, les paramètres de maille sont fixés, la symétrie orthorhombique de la cellule est gardée constante au cours du calcul et seules les positions atomiques sont autorisées à relaxer pour calculer l'énergie interne E_0 de référence de la cellule sous pression. Lors de cette seconde étape, la pression est imposée par le volume de la cellule déterminé dans la première étape et elle est égale à celle désirée à moins de 0,5% près.

Les paramètres de maille déterminés par le calcul figurent dans le Tableau 3-1 et sont comparés sur la Figure 3-3 à d'autres résultats issus de l'expérience (Downs *et al.* (1996)) et d'un calcul *ab initio* réalisé dans l'approximation LDA (Brodholt *et al.* (1996)).

P (GPa)	a (Å)	b (Å)	c (Å)	V (Å ³)
0	4,7932	10,2807	6,0408	297,6756
5	4,7467	10,1243	5,9511	285,9938
10	4,7148	9,9799	5,8807	276,7080
15	4,6821	9,8536	5,8213	268,5732
20	4,6549	9,7356	5,7681	261,3962

TABLEAU 3-1

Evolution des paramètres de maille et du volume calculés en fonction de la pression.

La Figure 3-3 montre que les résultats expérimentaux sont encadrés par les résultats des deux types de calcul réalisés dans les approximations LDA et GGA. Il est connu que l'approximation GGA surestime les paramètres de maille alors que, à l'inverse, l'approximation LDA les sous-estime. C'est pourquoi, dans cette étude, le volume de la maille élémentaire trouvé est supérieur à celui obtenu en LDA. Par analogie avec les résultats de Downs *et al.* (1996) et Brodholt *et al.* (1996), le volume obtenu en fonction de la pression a été modélisé par un ajustement

de Birch-Murnaghan¹. Pour un volume à l'équilibre V_0 de $297,6756 \text{ \AA}^3$, le module de compressibilité K_0 vaut $116,7 \pm 1,4$ GPa et K_0' , $4,12 \pm 0,21$. Pour comparaison, les valeurs de K_0 et K_0' valent 134,4 GPa et 3,88 pour les résultats obtenus en LDA et 125 GPa et 4 pour les résultats expérimentaux.

¹ La loi de Birch-Murnaghan $V(P) = V_0 (1 + K_0' P/K_0)^{-1/K_0}$ est basée sur le fait que l'énergie varie comme le carré de l'écart de volume au volume d'équilibre V_0 . K_0 est le module de compressibilité et $K_0' = dK_0/dP$, sa dérivée.

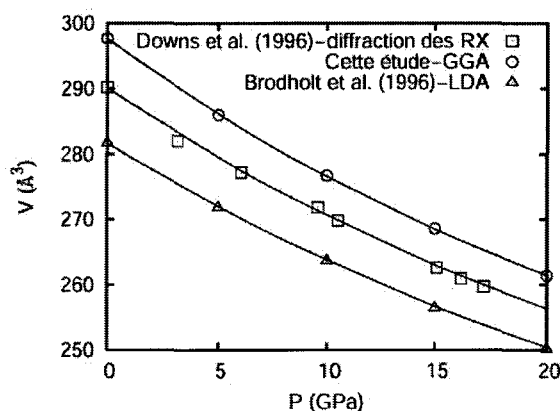


FIGURE 3-3

Comparaison du volume de la maille calculé dans cette étude dans l'approximation GGA (cercles), du volume calculé dans l'approximation LDA (triangles) et du volume mesuré expérimentalement (carrés) en fonction de la pression.

Le comportement sous pression du cristal de forsterite est anisotrope. Il est alors intéressant de représenter l'évolution des paramètres de maille avec la pression (Figure 3-4). On remarque une nouvelle fois un bon accord avec les résultats numériques en LDA et les résultats expérimentaux. Néanmoins, alors que l'évolution avec la pression des rapports a/a_0 et b/b_0 est identique selon que le calcul est effectué en LDA ou en GGA, elle devient assez différente pour le rapport c/c_0 sans que l'on puisse pour autant l'expliquer. La différence entre les valeurs calculées en GGA et celles déterminées expérimentalement pour ce rapport reste tout de même acceptable.

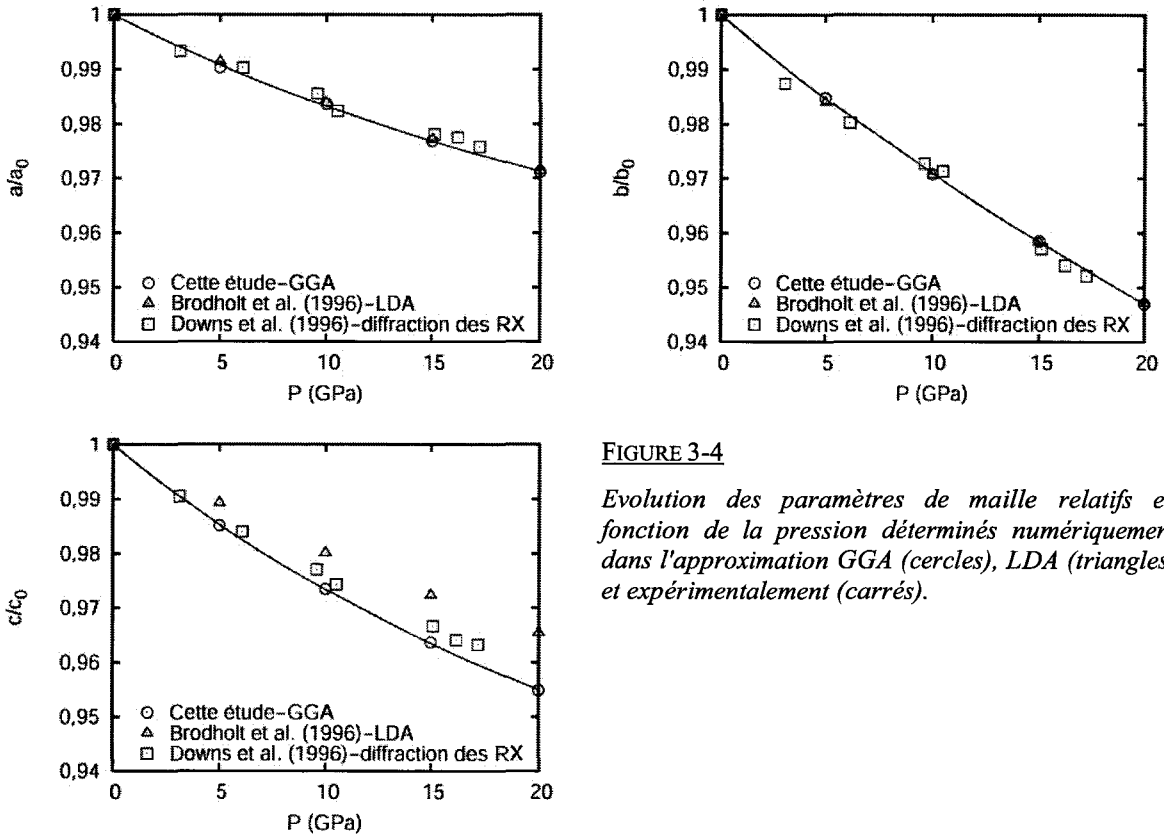


FIGURE 3-4

Evolution des paramètres de maille relatifs en fonction de la pression déterminés numériquement dans l'approximation GGA (cercles), LDA (triangles) et expérimentalement (carrés).

Les cellules ainsi construites pour des pressions comprises entre 0 et 20 GPa sont telles qu'elles satisfont certaines propriétés de volume (évolution du volume de la maille et des paramètres de maille avec la pression). Ces premières vérifications permettent d'accorder une bonne confiance à ce modèle sous pression qui constituera la base des calculs réalisés ultérieurement.

3.2.2 Calcul des constantes élastiques

3.2.2.1 Définition des constantes élastiques

Dans le chapitre 1 (cf §1.2), nous avons rappelé qu'il existait plusieurs façons de déterminer expérimentalement les constantes élastiques. Les méthodes statiques, qui permettent de déterminer les relations entre la contrainte et la déformation, aboutissent au calcul des constantes élastiques isothermes c_{ijkl}^T (les échelles de temps relativement longues lors de telles expériences satisfont toujours l'équilibre thermique). D'un autre côté, les méthodes dynamiques, à hautes fréquences, telles que celles qui utilisent la vitesse des ondes acoustiques, donnent des constantes élastiques adiabatiques c_{ijkl}^S . Il est possible également de définir des constantes élastiques adiabatiques C_{ijkl}^S et isothermes C_{ijkl}^T comme étant respectivement la dérivée seconde par rapport à une déformation infinitésimale e de l'énergie interne E et de l'énergie libre de Helmholtz A :

$$C_{ijkl}^S = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial e_{ij} \partial e_{kl}} \right)_S \quad (3-1)$$

$$C_{ijkl}^T = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 A}{\partial e_{ij} \partial e_{kl}} \right)_T \quad (3-2)$$

Barron et Klein (1965) ont montré que les définitions précédentes des constantes élastiques c_{ijkl} et C_{ijkl} sont différentes en présence d'une contrainte appliquée mais demeurent équivalentes à contrainte nulle.

Dans le cas d'une pression hydrostatique (contrainte isotrope), les constantes élastiques déterminées par les méthodes statique et dynamique sont identiques mais restent différentes de celles définies en (3-1) et (3-2). On peut alors considérer l'expression suivante pour la relation entre déformation e , rotation ω et densité d'énergie interne E :

$$\frac{\Delta E}{V} = -p e_{ii} + \frac{1}{2} \left(c_{ijkl}^S - \frac{1}{2} p (2\delta_{ij}\delta_{kl} - \delta_{il}\delta_{jk} - \delta_{jl}\delta_{ik}) \right) e_{ij} e_{kl} - \frac{1}{2} p \omega_{ik} \omega_{ik} \quad (3-3)$$

où $\Delta E = E - E_0$ est la différence entre l'énergie interne du cristal déformé et le cristal de départ et δ_{ik} , le coefficient de Kronecker qui vaut 1 lorsque $i = k$ et 0 lorsque $i \neq k$.

Ainsi, il vient:

$$C_{ijkl}^S = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial e_{ij} \partial e_{kl}} \right)_S = c_{ijkl}^S + \frac{1}{2} p (2\delta_{ij}\delta_{kl} - \delta_{il}\delta_{jk} - \delta_{jl}\delta_{ik}) \quad (3-4)$$

3.2.2.2 Principe du calcul des constantes élastiques

En élasticité linéaire et dans un milieu continu, on peut définir un vecteur déplacement $u_i = x_i - X_i$ ($i = 1, 2, 3$) pour tout point à la position initiale X_i dans le solide non déformé et à la position finale x_i après déformation.

On peut définir alors le tenseur des distorsions $\beta_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ qui est la somme d'un tenseur des déformations

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \text{ et d'un tenseur des rotations } \omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right).$$

On conçoit bien qu'il suffit d'effectuer une déformation e adéquate (ainsi qu'une rotation ω) et de calculer la variation d'énergie interne (qui correspond à l'énergie élastique emmagasinée par le cristal) pour déterminer les constantes élastiques c_{ijkl}^S grâce à l'équation (3-3). La forsterite étant orthorhombique, il y a neuf constantes élastiques à calculer (cf 1.2):

- les trois constantes élastiques c_{iii}^S (c_{11} , c_{22} et c_{33} dans la notation de Voigt) que l'on détermine par la seule application d'une déformation e_{ii} (avec $i = 1, 2, 3$):

$$\frac{\Delta E}{V} = -pe_{ii} + \frac{1}{2}c_{iii}^S e_{ii}^2 \text{ (Figure 3-5-a),}$$

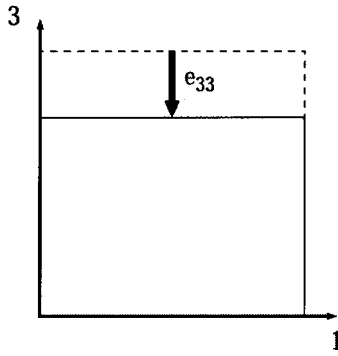
- les trois constantes élastiques c_{ijj}^S (c_{44} , c_{55} et c_{66} dans la notation de Voigt) que l'on détermine par la seule application d'une déformation e_{ij} et d'une rotation ω_{ij} (avec $i = 1,2,3$ et $j = 1,2,3$ et $i \neq j$):

$$\frac{\Delta E}{V} = 2\left(c_{ijj}^S + \frac{1}{2}p\right)e_{ij}^2 - p\omega_{ij}^2 \text{ (Figure 3-5-b),}$$

- les trois constantes élastiques c_{ijj}^S (c_{12} , c_{13} et c_{23} dans la notation de Voigt) que l'on détermine par l'application de deux déformations conjointes e_{ii} et e_{jj} (avec $i = 1,2,3$, $j = 1,2,3$ et $i \neq j$) et grâce à la connaissance de c_{iii}^S et c_{jjj}^S :

$$\frac{\Delta E}{V} = -p(e_{ii} + e_{jj}) + \frac{1}{2}\left(c_{iii}^S e_{ii}^2 + c_{jjj}^S e_{jj}^2 + 2(c_{ijj}^S - p)e_{ii}e_{jj}\right) \text{ (Figure 3-5-c).}$$

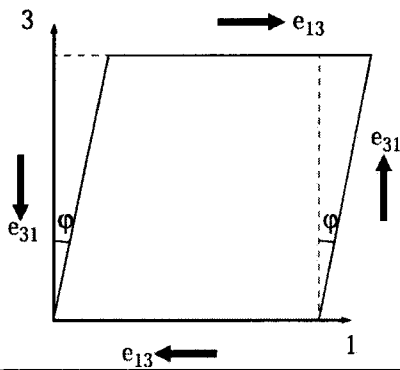
a)



$$u = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ x_3 e_{33} \end{pmatrix} \text{ donc } e = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e_{33} \end{pmatrix} \text{ et } \omega_{ij} = 0$$

$$\frac{\Delta E}{V} = -p e_{33} + \frac{1}{2} c_{33}^S e_{33}^2$$

b)

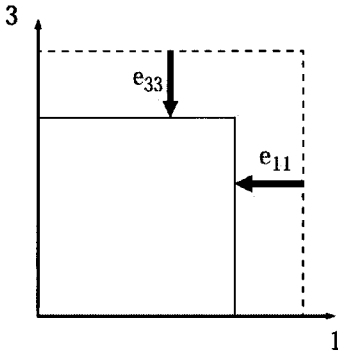


$$u = \begin{pmatrix} x_3 \tan \varphi \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ donc } e = \begin{pmatrix} 0 & 0 & e_{13} \\ 0 & 0 & 0 \\ e_{13} & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ et } \omega = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \omega_{13} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\omega_{13} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{avec } e_{13} = \omega_{13} = \frac{1}{2} \tan \varphi$$

$$\frac{\Delta E}{V} = 2 \left(c_{55}^S + \frac{1}{2} p \right) e_{13}^2 - p \omega_{13}^2 = 2 c_{55}^S e_{13}^2$$

c)



$$u = \begin{pmatrix} x_1 e_{11} \\ 0 \\ x_3 e_{33} \end{pmatrix} \text{ donc } e = \begin{pmatrix} e_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e_{33} \end{pmatrix} \text{ et } \omega_{ij} = 0$$

$$\frac{\Delta E}{V} = -2 p e_{11} + \frac{1}{2} (c_{11}^S + c_{33}^S + 2 c_{13}^S - 2 p) e_{11}^2 \text{ avec } e_{11} = e_{33}$$

FIGURE 3-5

Schéma représentant la méthode de calcul des constantes élastiques par application d'une déformation. En a), une déformation e_{33} permet de déterminer c_{33}^S . En b), une déformation e_{13} permet de déterminer c_{55}^S . En c), des déformations e_{33} et e_{11} permettent de déterminer c_{13}^S .

Pour calculer l'énergie élastique $\Delta E = E - E_0$ aux différentes pressions comprises entre 0 et 20 GPa, on procède de la façon suivante. Pour chaque pression, les cellules de référence qui ont été présentées au paragraphe 3.2.1 et dont on connaît l'énergie E_0 sont déformées suivant la procédure définie en Figure 3-5. Les limites de la cellule déformée sont fixées pendant le calcul et l'énergie E du cristal est minimisée en laissant relaxer les positions atomiques jusqu'à ce que les forces deviennent négligeables. Plusieurs valeurs de déformation sont appliquées à

la cellule de référence dans le but de réaliser un ajustement de $\frac{\Delta E}{V}$ en fonction de la déformation et obtenir les valeurs des constantes élastiques. La Figure 3-6 montre les ajustements réalisés pour la détermination de c_{33} , c_{55} et c_{13} . $\frac{\Delta E}{V}$ dépend du carré de la déformation, d'où la forme parabolique des courbes. Dans le cas de la détermination de c_{33} et c_{55} (et par extension de c_{11} , c_{22} et de c_{44} , c_{66}), la courbure de ces paraboles est proportionnelle à ces constantes élastiques (cf les équations des Figure 3-5-a et b). Dans le cas de c_{13} (et de c_{12} et c_{23}), la courbure est plus complexe puisqu'elle dépend également d'autres constantes élastiques et de la pression (cf équation de la Figure 3-5-c). Pour c_{33} et c_{13} , $\frac{\Delta E}{V}$ dépend linéairement de la déformation; c'est la raison pour laquelle les paraboles sont inclinées. La pente de ces inclinaisons est proportionnelle à la pression p . De tels ajustements permettent d'ailleurs de retrouver les valeurs de pression fixées au départ à mieux que 10% près. Les constantes élastiques sont, quant à elles, déterminées avec une précision supérieure à 2% pour c_{11} , c_{22} , c_{33} , c_{44} , c_{55} et c_{66} et à 5% pour c_{12} , c_{13} et c_{23} .

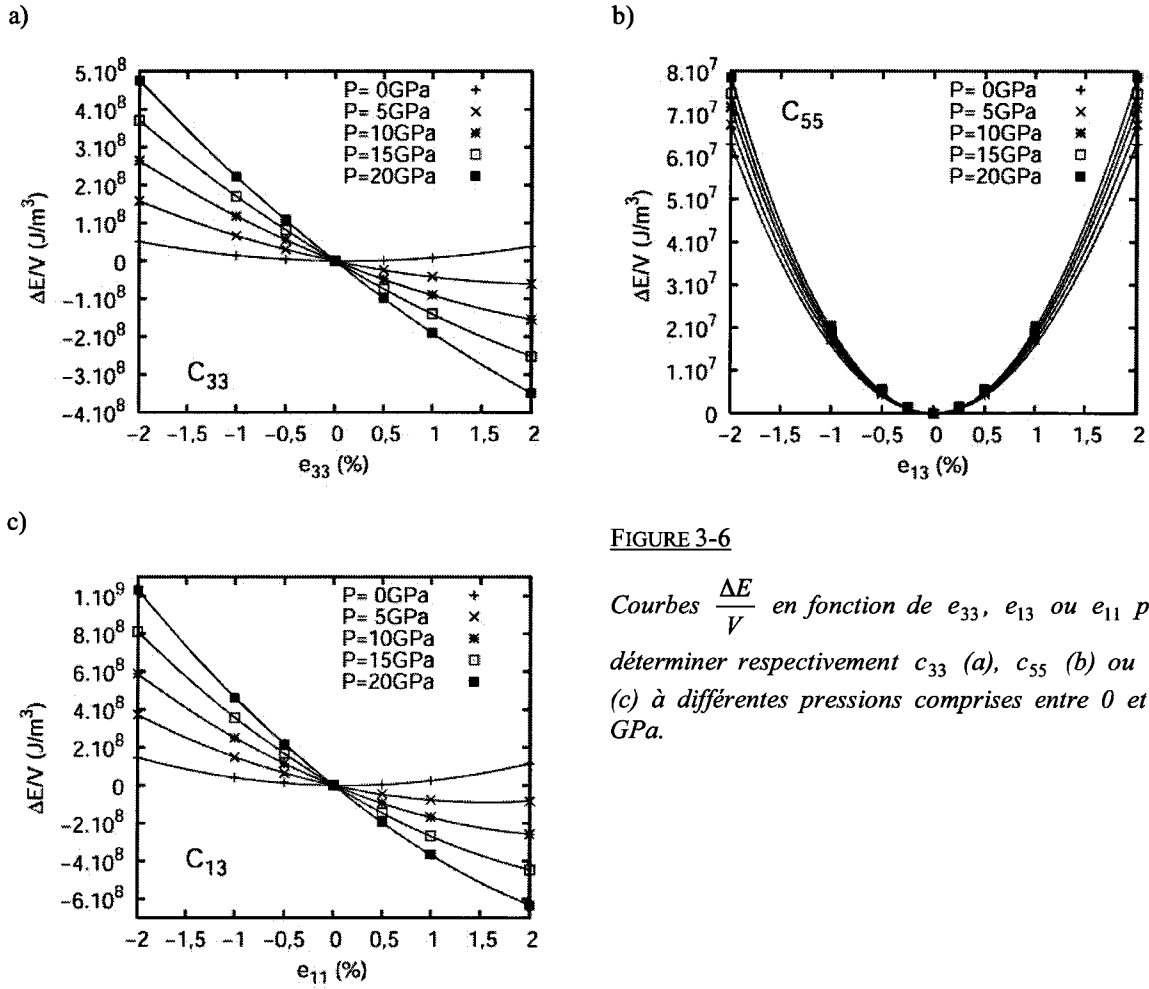
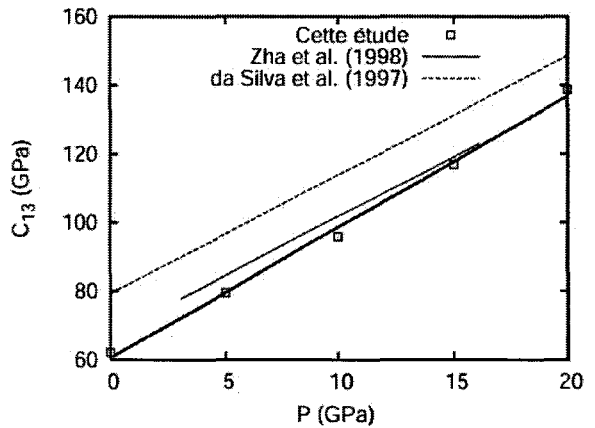
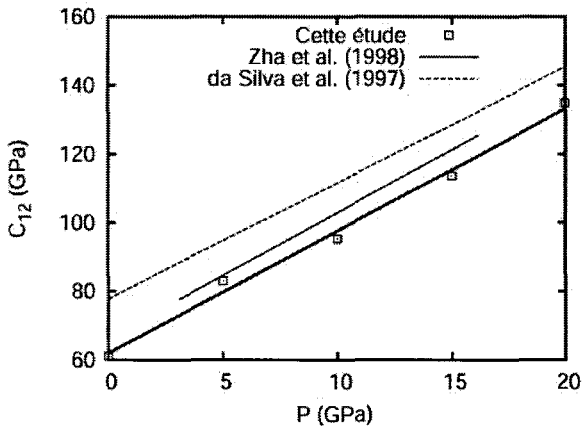
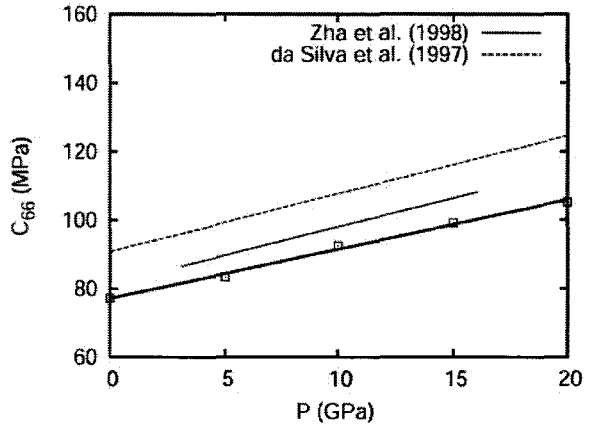
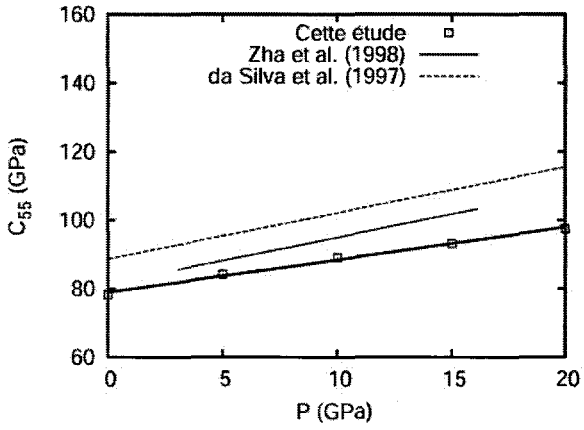
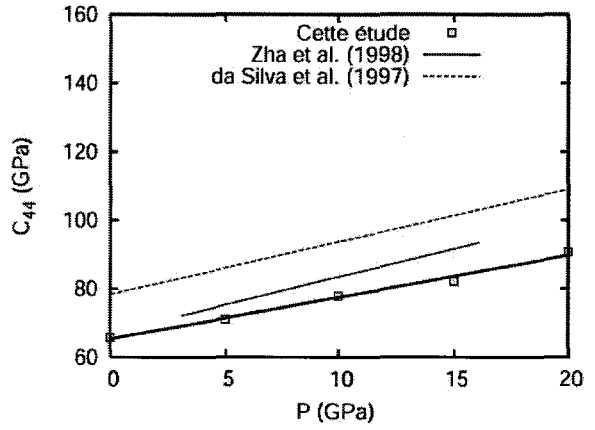
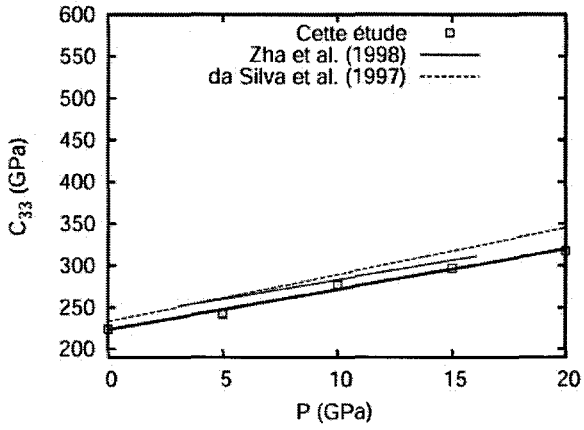
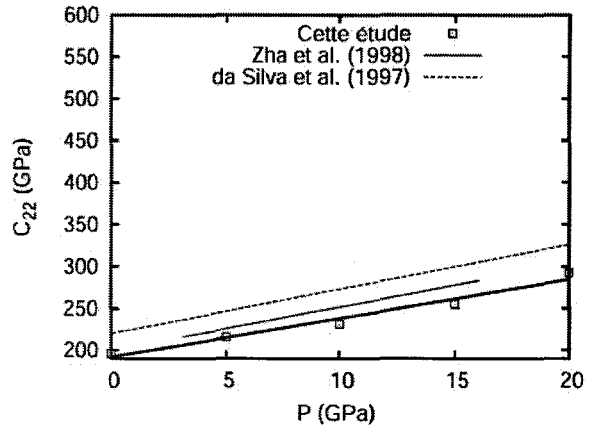
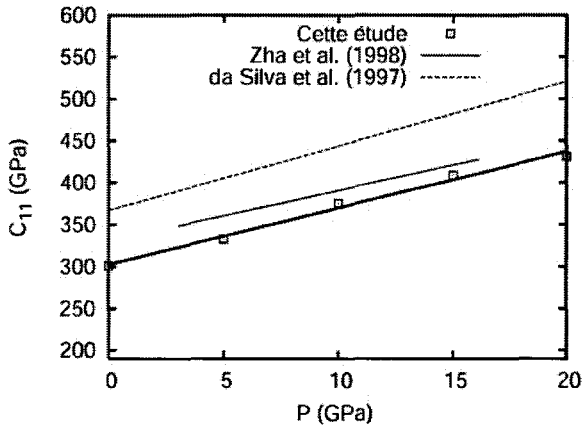


FIGURE 3-6

Courbes $\frac{\Delta E}{V}$ en fonction de e_{33} , e_{13} ou e_{11} pour déterminer respectivement c_{33} (a), c_{55} (b) ou c_{13} (c) à différentes pressions comprises entre 0 et 20 GPa.

Les valeurs des constantes élastiques obtenues en fonction de la pression sont comparées à des résultats expérimentaux (Zha *et al.* (1998)) à température ambiante et numériques (da Silva *et al.* (1997)) avec une approche semblable à la nôtre. Si l'on néglige le fait que nos simulations donnent des résultats à 0K et qu'elles sont comparées à des résultats obtenus à température ambiante, les constantes élastiques calculées sont à 10% près celles mesurées expérimentalement. Nos résultats sont systématiquement au dessous de ceux de Zha *et al.* (1998), conséquence de l'utilisation de l'approximation GGA. A l'inverse, ceux de da Silva *et al.* (1997) sont toujours supérieurs, conséquence bien connue de l'approximation LDA.



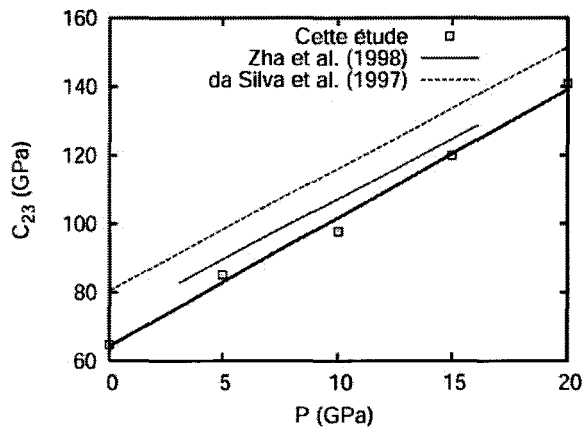


FIGURE 3-7

(Cette page et la précédente) Comparaison des neuf constantes élastiques déterminés lors de cette étude, en fonction de la pression avec des résultats expérimentaux (Zha et al. (1998)) et numériques en LDA (da Silva et al. (1997)).

Nous avons montré que le modèle numérique du cristal de forsterite était valable en calculant certaines propriétés de volume (paramètres de maille, module de compressibilité, constantes élastiques et leur évolution avec la pression) et en les confrontant à des données expérimentales. Nous proposons maintenant d'exploiter ce modèle pour calculer des énergies de faute d'empilement généralisées.

3.3 L'approche des énergies de faute d'empilement généralisées

Nous proposons dans ce paragraphe d'aborder la modélisation de la plasticité de l'olivine en nous basant sur le concept de faute d'empilement généralisée. Ces fautes sont associées au cisaillement plastique rigide (c'est-à-dire sans dislocations) dans une direction et un plan donné. Elles permettent de déterminer une limite supérieure à la limite d'élasticité en considérant la contrainte de cisaillement idéal (théorique) du cristal parfait (sans dislocation) qui est la dérivée de l'énergie de faute d'empilement en fonction de la valeur du cisaillement. Bien que ces valeurs soient rarement atteintes en pratique, ce concept a montré son importance dans la théorie de la déformation plastique et récemment un intérêt croissant y a été porté principalement dans le cas des métaux: Al (Paxton et al. (1991), Sun et Kaxiras (1997), Hartford et al. (1998), Ogata et al. (2002)), Cu (Paxton et al. (1991), Ogata et al. (2002)), Mo (Xu et Moriarty (1996)), Pd (Hartford et al. (1998)), Ta (Söderlind et Moriarty (1998)), NiAl et FeAl (Medvedeva et al. (1996)). D'autres matériaux (oxydes, céramiques, semi-conducteurs) ont été plus rarement considérés (Kocer et al. (2003) pour le nitrure de silicium). Le concept de faute d'empilement généralisée permet surtout, comme nous le verrons, de mettre en évidence l'influence de la cristallochimie sur le cisaillement plastique sans traiter complètement le problème de la structure de cœur des dislocations. Problème qui dépasse nos possibilités.

3.3.1 Technique de calcul

3.3.1.1 Construction des supercellules

Le calcul des énergies de faute d'empilement généralisées est réalisé de la façon suivante. Deux directions du réseau cristallin contenues dans le plan de faute (dans notre cas il s'agit de (100), (010), (001), (021) ou (110))

sont choisies comme étant les principales directions Ox_s et Oy_s de la supercellule (où $\{O, x_s, y_s, z_s\}$ est le repère orthonormé attaché à la supercellule). Un exemple de supercellule est présenté sur la Figure 3-8.

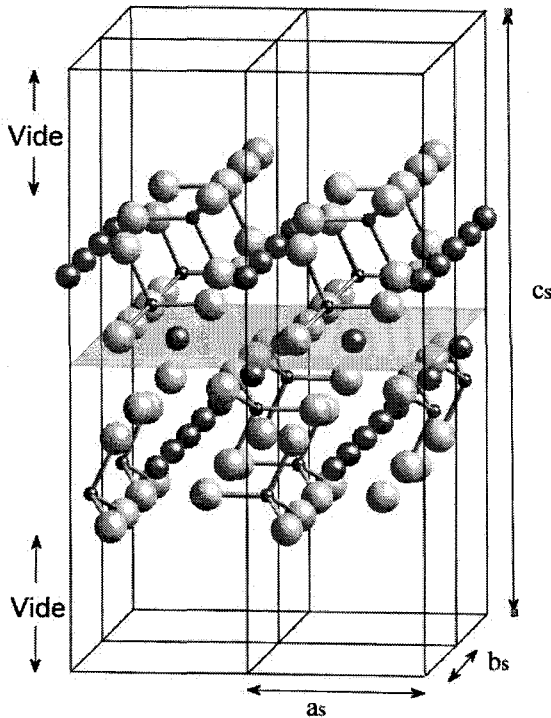


FIGURE 3-8

Quatre supercellules répétées périodiquement suivant Ox_s et Oy_s dans le cas du calcul des énergies de faute d'empilement dans $(010)[100]$. Dans ce cas a_s est la dimension de la supercellule suivant Ox_s , correspondant à la direction $[100]$ du cristal, b_s la dimension suivant Oy_s , correspondant à la direction $[001]$ du cristal et c_s la dimension suivant Oz_s , correspondant à la direction $[010]$ du cristal.

Ce plan de faute est placé à un certain niveau dans le cristal de telle sorte qu'il n'y ait pas rupture avec les liaisons covalentes Si-O. Il divise alors le cristal en une partie "supérieure" et une partie "inférieure" qui se déplaceront l'une par rapport à l'autre suivant la direction du vecteur de faute d'une quantité f . Dans tous les cas, la direction Ox_s correspond à la direction du vecteur de faute utilisé. Puisque la forsterite n'est pas de symétrie cubique, la normale Oz_s au plan de faute n'est pas forcément une direction du réseau. Ainsi, lorsque les conditions aux limites périodiques sont utilisées, la partie supérieure du cristal ne s'accorde pas nécessairement avec la partie inférieure. Une solution aurait été de choisir une supercellule de forme monoclinique plutôt qu'orthorhombique avec une direction Oz_s qui ne serait plus normale au plan de faute mais qui serait une direction du réseau. Mais comme nous le verrons dans le prochain paragraphe, prendre une direction perpendiculaire au plan de faute facilite le contrôle de la relaxation des positions atomiques. Pour éviter alors cette difficulté, une épaisseur de vide de 6 Å est placée de part et d'autre de la supercellule suivant Oz_s . Nous avons vérifié qu'augmenter l'épaisseur de vide n'influait pas de façon significative les valeurs de l'énergie de la supercellule non fautée et l'énergie de faute d'empilement calculée (Figure 3-9).

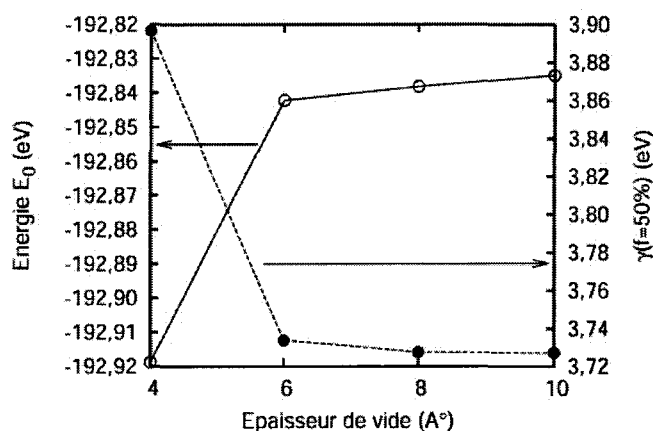


FIGURE 3-9

Influence de l'épaisseur du vide sur l'énergie de la supercellule de référence non fautée et sur l'énergie d'excès due à une faute d'empilement correspondant à $\frac{1}{2}[100]$ dans le plan (010).

Les différentes supercellules ont été construites à pression nulle et à 10GPa à partir des mailles élémentaires correspondantes présentées dans le paragraphe 3.2.1. Elles représentent en fait, par application des conditions aux limites périodiques, une tranche de cristal d'épaisseur donnée et de dimensions infinies suivant les directions du plan de faute. Pour chaque faute d'empilement étudiée, la supercellule a des dimensions a_s , b_s et c_s (respectivement suivant Ox_s , Oy_s et Oz_s) différentes et les valeurs adoptées figurent sur le Tableau 3-2. Les grilles de points k utilisées pour échantillonner la zone de Brillouin sont adaptées aux supercellules en se basant sur le fait que nombre de points k peut être d'autant plus bas que les dimensions sont grandes (Tableau 3-2).

Direction du vecteur de faute ou de glissement u	Plan de faute d'empilement	a_s (Å)	b_s (Å)	c_s (Å)	Grille de points k	Atomes dans la supercellule
[100]	(001)	4,7932 (4,7148)	10,2807 (9,9799)	12,54 (12,50)	3x2x1	10Mg, 4Si, 20O
	(010)	4,7932 (4,7148)	6,0408 (5,8807)	17,10 (16,80)	3x3x1	10Mg, 4Si, 16O
	(021)	4,7932 (4,7148)	15,8639 (15,4249)	13,30 (13,30)	3x1x1	14Mg, 8Si, 32O
[001]	(100)	6,0408 (5,8807)	10,2807 (9,9799)	11,20 (11,20)	3x2x2	8Mg, 4Si, 24O
	(010)	6,0408 (5,8807)	4,7932 (4,7148)	17,10 (16,80)	3x3x1	10Mg, 4Si, 16O
	(110)	6,0408 (5,8807)	11,3432 (11,0376)	14,60 (14,55)	3x2x1	12Mg, 8Si, 32O

TABLEAU 3-2

Dimensions des supercellules utilisées à 0 GPa et à 10 GPa (entre parenthèses) pour déterminer les énergies de faute d'empilement. L'échantillonnage de la grille de points k et le nombre et la nature des atomes de la supercellule sont également présentés.

La faute d'empilement est créée en déplaçant d'une quantité f tous les atomes d'une partie du cristal par rapport à l'autre. L'énergie surfacique d'excès est égale à $\frac{E - E_0}{S}$ (où E_0 est l'énergie de référence de la supercellule non fautée, E celle de la supercellule fautée et S la surface du plan de faute de la supercellule). L'énergie des supercellules est calculée en fixant les dimensions de la supercellule et en laissant relaxer les positions atomiques

pour minimiser les forces qui s'exercent sur les ions. Plusieurs méthodes de relaxation ont été testées avant d'aboutir à une procédure qui permet de satisfaire certaines conditions.

3.3.1.2 Relaxation des positions atomiques

Cai *et al.* (2002) ont étudié les effets de la relaxation des positions atomiques sur les fautes d'empilement et la structure de Pd et Pt. Ils ont constaté que, pour Pt, la relaxation des positions atomiques entraînait d'importantes variations de l'énergie de faute d'empilement et de l'espacement entre les premier et deuxième plans atomiques les plus proches du plan de faute. Ils avancent l'argument que, pour obtenir une énergie de faute d'empilement précise, il est nécessaire d'inclure la relaxation des positions atomiques et que celle-ci est d'autant plus nécessaire que la structure étudiée est constituée d'atomes de tailles différentes.

Dans la forsterite, les rayons des ions sont très différents puisque $R_{Si} < R_{Mg} \ll R_O$ et on s'attend alors à ce que la relaxation des positions atomiques ait un effet important sur les énergies de faute d'empilement et sur la structure.

Le choix de la direction de relaxation des positions atomiques est un point crucial puisqu'il va conditionner le niveau de relaxation de l'énergie de faute d'empilement. Nous avons alors testé plusieurs types de relaxations. Le code de calcul VASP offre la possibilité d'avoir un contrôle sur les trois degrés de liberté des atomes, en autorisant ou pas leur déplacement suivant les directions Ox_s , Oy_s et Oz_s de la supercellule. Néanmoins, quel que soit ce choix, on peut admettre que cette énergie sera inévitablement réduite par rapport à celle obtenue pour le cisaillement rigide (sans relaxation).

Une multitude de possibilités peut être envisagée et, pour déterminer une procédure de relaxation des positions atomiques, il est nécessaire de faire certaines hypothèses quant aux déplacements des atomes lorsqu'une faute d'empilement est créée. La structure cristallographique de la forsterite peut être décrite comme étant constituée d'atomes de Si fortement liés aux atomes d'O (à cause des liaisons covalentes Si-O) au centre des tétraèdres SiO_4 et d'atomes de Mg, situés dans les sites octaédriques et liés faiblement aux atomes d'oxygène par des liaisons ioniques. Les tétraèdres SiO_4 sont considérés comme les éléments du cristal les plus rigides (à cause des fortes liaisons covalentes Si-O) et peuvent alors être vus comme constituant le squelette du cristal.

Pour empêcher que la supercellule fautive ne revienne dans sa configuration initiale non fautive (énergétiquement plus stable) et préserver la nature de la faute d'empilement créée tout au long du calcul, il est nécessaire de ne pas autoriser les atomes à se déplacer dans le plan de faute. On peut dans un premier temps s'inspirer du type de relaxation qui est généralement adopté pour le calcul des énergies de fautes d'empilement dans les métaux. Dans ce cas, chaque atome est uniquement autorisé à se déplacer perpendiculairement au plan de faute (Domain *et al.* (2004)). Cette procédure n'est certainement pas bien adaptée à notre cas pour lequel il est nécessaire de tenir compte des degrés de libertés différents de la structure (tétraèdres SiO_4 et atomes de Mg). Ainsi plutôt que d'envisager cette contrainte pour tous les atomes de la structure, nous avons choisi de fixer uniquement les atomes de Si, les centres des tétraèdres, dans le plan de faute et de les autoriser à se déplacer perpendiculairement au plan de faute. Cette restriction plus souple permet ainsi aux tétraèdres d'effectuer des rotations autour de leur centre.

Les atomes de Mg sont libres de se déplacer dans toutes les directions de l'espace. Les trois types d'atomes ayant des rayons très différents, le cisaillement d'une partie du cristal sur l'autre doit laisser des vides relativement importants et il semble judicieux de laisser les atomes de Mg minimiser le volume inoccupé.

Pour garder constantes les composantes diagonales $\sigma_{x_s x_s}$ et $\sigma_{y_s y_s}$ (parallèles au plan de faute) du tenseur des contraintes, les paramètres a_s et b_s sont fixés. Néanmoins, à cause de la faible taille de nos systèmes, de la présence d'une épaisseur de vide et en l'absence de conditions de relaxation strictes sur les atomes situés aux limites avec le vide de la supercellule, ces derniers auront tendance à remplir le vide et à faire baisser la pression lorsqu'une faute d'empilement sera créée. Cet effet sera plus important à 10GPa qu'à 0GPa. Pour éviter ce problème et pour remplacer l'influence des atomes manquant du volume suivant \mathbf{Oz}_g , les positions des atomes du bord de la supercellule seront complètement fixées au cours du calcul.

La Figure 3-10 présente les différentes conditions de relaxation qui ont été testées pour le calcul de l'énergie de faute d'empilement (010)[100]. Pour chacun des cas, nous avons suivi, en fonction de l'amplitude du vecteur de faute f , l'évolution du déplacement Δz suivant \mathbf{Oz}_g du centre des tétraèdres et des atomes de Mg ainsi que l'évolution de la variation relative de volume $\Delta V/V_0$ des tétraèdres (où V_0 est le volume du tétraèdre avant relaxation). De la relaxation de type A vers la relaxation de type C, les conditions de relaxation sont de plus en plus strictes. Dans le cas A, aucun atome à la limite avec l'épaisseur de vide n'est fixé et les déplacements verticaux Δz sont plus importants que dans les cas B et C. Inversement, plus les conditions sont strictes, plus la relaxation sera assurée par les tétraèdres (par déformation ou rotation).

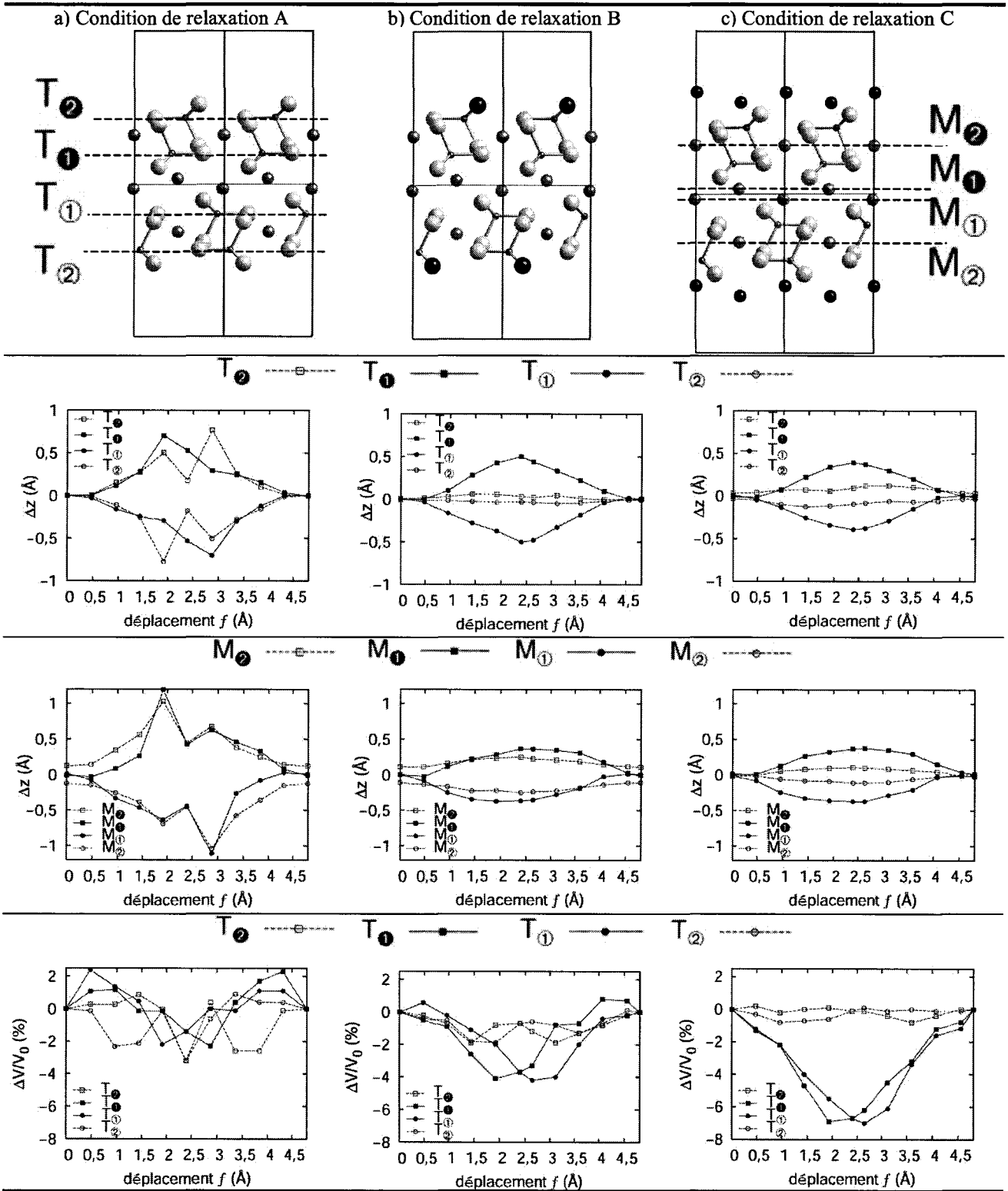


FIGURE 3-10

Différentes conditions de relaxation appliquées aux supercellules construites pour le calcul des énergies de faute d'empilement dans (010)[100]. Les conséquences de telles relaxations sont quantifiées par l'évolution du déplacement vertical Δz des tétraèdres T, du déplacement vertical Δz des atomes de magnésium M et de la variation relative de volume relative $\Delta V/V_0$ des tétraèdres.

La Figure 3-11 montre l'effet des différentes conditions de relaxation sur les énergies de faute d'empilement calculées. Les barrières d'énergie sont d'autant plus élevées que les conditions de relaxation sont strictes. Néanmoins ces variations restent relativement faibles comparées au niveau de l'énergie de faute d'empilement atteint lorsque aucun déplacement atomique n'est autorisé (cas "Non relaxée" de la Figure 3-11).

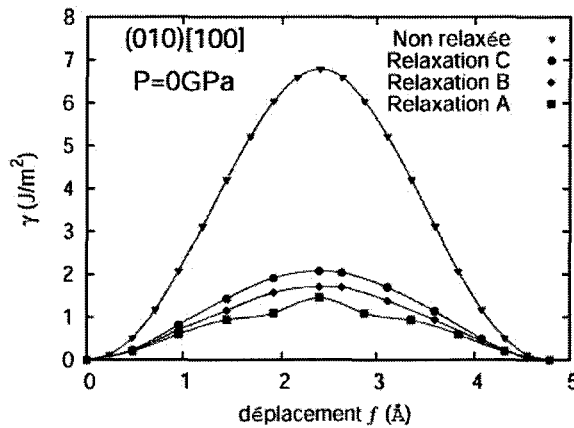


FIGURE 3-11

Barrières d'énergie de faute d'empilement calculées avec les différentes relaxations présentées sur la Figure 3-10. La barrière d'énergie dans le cas où aucune relaxation n'est autorisée est également présentée pour comparaison.

C'est la condition de relaxation C (la plus stricte), pour laquelle les atomes en contact avec le vide sont fixés, qui a été retenue avec pour toute la suite de l'étude. On pourra considérer que cette procédure de relaxation donnera les limites supérieures des énergies de faute d'empilement.

3.3.2 Résultats

3.3.2.1A pression nulle

Dans un premier temps, nous avons calculé les énergies de faute d'empilement sans autoriser de relaxation des positions atomiques, suivant les directions et les plans correspondant aux systèmes de glissement les plus communément observés expérimentalement dans la forsterite (cf. chapitre 1): (010)[100], (001)[100], {021}[100], (010)[001], (100)[001] et {110}[001] et à ceux plus rares: (100)[010] et (001)[010]. Les résultats de ces calculs ont fait l'objet d'une publication (Durinck *et al.* (2005)) et nous ne présenterons qu'en partie l'ensemble des résultats obtenus. Les forces qui agissent sur les atomes ne sont pas relaxées et ce type de calcul semble ainsi relativement éloigné de la réalité. Néanmoins il permet de faire un premier classement des différents systèmes en fonction de leur résistance à un cisaillement plastique sans dislocation. On montre surtout que le cisaillement suivant [010] est le plus difficile (Figure 3-12).

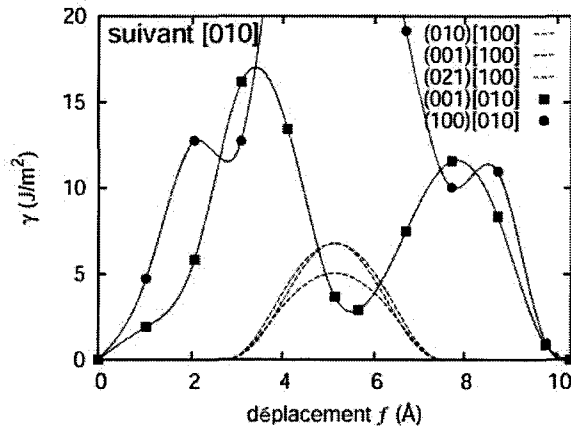


FIGURE 3-12

Comparaison des barrières d'énergie non relaxées associées au cisaillement suivant [010] dans les plans (100) et (001) avec les barrières d'énergie non relaxées associées au cisaillement suivant [100] dans les plans (010), (001) et {021}.

Ce premier résultat est en accord avec les résultats expérimentaux qui proposent un glissement de dislocations de vecteur de Burgers [010] rare ou très difficile et un glissement de dislocation de vecteur de Burgers [001] plus actif à basse température que celui de vecteur de Burgers [100].

Pour calculer des énergies de faute d'empilement plus réalistes, il est nécessaire de prendre en compte la relaxation des positions atomiques selon la procédure définie dans le précédent paragraphe. Les résultats pour les cisaillements [100] et [001] sont présentés sur la Figure 3-13.

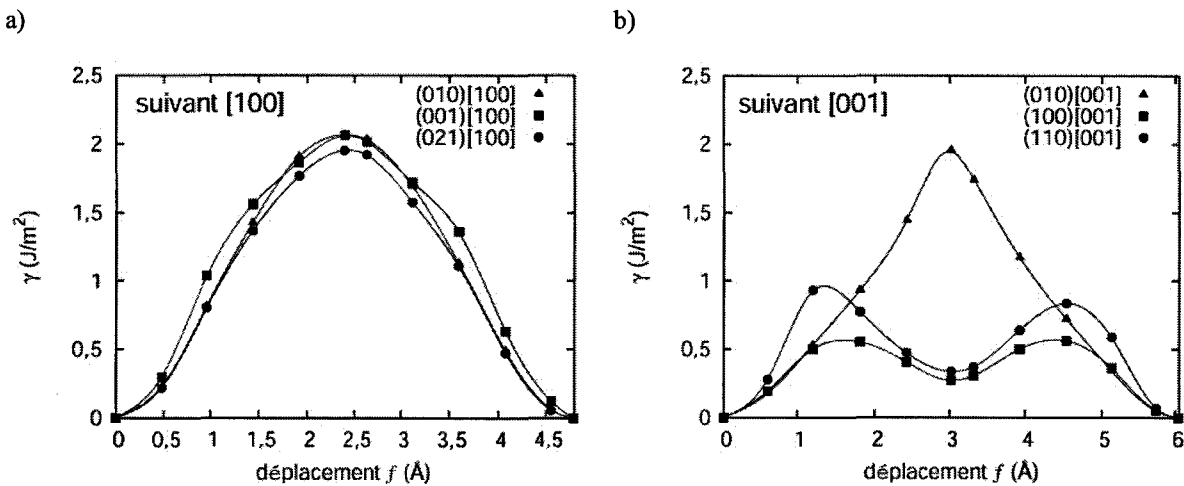


FIGURE 3-13

Barrières d'énergie de faute d'empilement associées au cisaillement suivant [100] (a) et suivant [001] (b).

Dans les trois plans (001), (010) et {021}, les barrières d'énergie associées à un cisaillement [100] sont comparables. Dans le chapitre 1, nous avons montré que les expériences de déformation ne donnaient accès qu'à la contrainte projetée dans le système de glissement (010)[100] grâce à l'utilisation d'un axe de sollicitation [110]c et, sans information supplémentaire, nous avons supposé que les contraintes projetées dans les systèmes de vecteur de Burgers [100] étaient identiques quel que soit le plan de glissement. Cette hypothèse se justifie

maintenant grâce aux barrières d'énergie calculées qui proposent un cisaillement rigide du cristal identique suivant [100] dans les plans (001), (010) et {021}.

Les barrières d'énergie associées à (100)[001] et {110}[001] sont intéressantes car elles présentent un minimum local suggérant une faute d'empilement plus stable. Nous verrons plus tard qu'il est possible d'en tirer certaines conclusions sur les dislocations. Sauf pour le système (010)[001], les barrières d'énergie associées au cisaillement suivant [001] semblent être plus basses que celles associées au cisaillement suivant [100]. Cependant il est difficile de comparer des barrières d'énergie de direction de cisaillement différentes car elles s'étendent sur des distances qui sont différentes. Il est plus aisé de comparer leur dérivée $-\frac{\partial\gamma}{\partial f}$ dont la valeur

maximale, que l'on appelle communément *ISS* (pour "Ideal Shear Strength"), représente en fait la résistance maximale qu'oppose le cristal au cisaillement plastique (Paxton *et al.* (1991)). Le calcul a été réalisé dans tous les systèmes de glissement considérés et les résultats sont consignés dans le Tableau 3-3.

Système de glissement	(010)[100]	(001)[100]	(021)[100]	(010)[001]	(100)[001]	(110)[001]
Module de cisaillement $\mu_{(hkl)[uvw]}$ à 0 GPa	77,3	78,3	77,9	65,8	78,3	67,7
<i>ISS</i> en GPa à P = 0 GPa	14	18	14	11	6	11,5
$ISS / \mu_{(hkl)[uvw]}$	0,18	0,23	0,18	0,17	0,08	0,17

TABLEAU 3-3

Modules de cisaillement projetés $\mu_{(hkl)[uvw]}$, *Ideal Shear Strength* $ISS = \max\left(-\frac{\partial\gamma}{\partial f}\right)$ et *Ideal Shear Strength* normalisées $ISS / \mu_{(hkl)[uvw]}$ dans les différents systèmes de glissement $(hkl)[uvw]$ à 0 GPa.

A la vue des valeurs des *ISS*, on peut affirmer que le cisaillement suivant [001] est intrinsèquement plus facile que celui suivant [100] en accord avec les expériences de déformation à basse température (Phakey *et al.* (1972), Gaboriaud *et al.* (1981), Gaboriaud (1986)). Une manière de comparer ces résultats avec d'autres matériaux est d'utiliser des nombres sans dimensions. Dans ce but, nous avons normalisé les valeurs des *ISS* avec les modules de cisaillement $\mu_{(hkl)[uvw]}$ projetés dans les différents systèmes de glissement $(hkl)[uvw]$ à partir des constantes élastiques déterminées dans le paragraphe 3.2.2. Il est intéressant de remarquer que toutes les valeurs normalisées des *ISS* sont comprises entre 0,08 et 0,23 μ . Ce comportement est très comparable à la plupart des métaux pour lesquels ces valeurs sont de l'ordre de 0,09-0,17 μ (Paxton *et al.* (1991), Söderlind et Moriarty (1998), Krenn *et al.* (2001), Roundy *et al.* (1999)).

Le système de glissement le plus facile à activer semble être (100)[001], qui correspond au glissement basal dans la structure pseudo-hexagonale compacte de forstérite. Ceci confirme en partie les systèmes de glissement proposés par Poirier (1975) mais l'avantage du calcul des énergies de faute d'empilement généralisée est de permettre d'avoir des informations plus quantitatives sur la facilité de cisaillement du cristal dans les différents systèmes de glissement.

3.3.2.2 A 10 GPa

Un des intérêts de ce type d'étude est qu'il permet de calculer les mêmes barrières d'énergie sous pression.

Lors du calcul des énergies de faute d'empilement, des atomes peuvent être très proches pour certaines valeurs et directions du vecteur de faute. Sous pression, l'effet peut être encore plus prononcé et longueurs des liaisons peuvent être plus courtes que lorsque les conditions sont normales. Nous avons alors vérifié que les pseudopotentiels ultra-doux qui ne tiennent compte que des électrons de valence étaient encore valables. Dans ce but nous avons réalisé des calculs d'énergie de faute d'empilement avec la méthode PAW² (Kresse et Joubert (1999), Alfe *et al.* (2000)) dans le cas d'une configuration défavorable (à 10 GPa et une faute d'empilement qui approchent fortement certains atomes). Les résultats sont identiques à ceux obtenus avec les pseudopotentiels ultra-doux à 3% près. Les énergies de faute d'empilement obtenues à 10GPa sont présentées sur la Figure 3-14 et comparées à celles calculées à 0GPa.

² Pour Projector-Augmented Wave. Cette méthode est proche d'un calcul qui prendrait en compte tous les électrons et a été appliqué avec succès à l'étude du comportement du Fe pur jusqu'à 300 GPa (Alfe *et al.*, 2000)

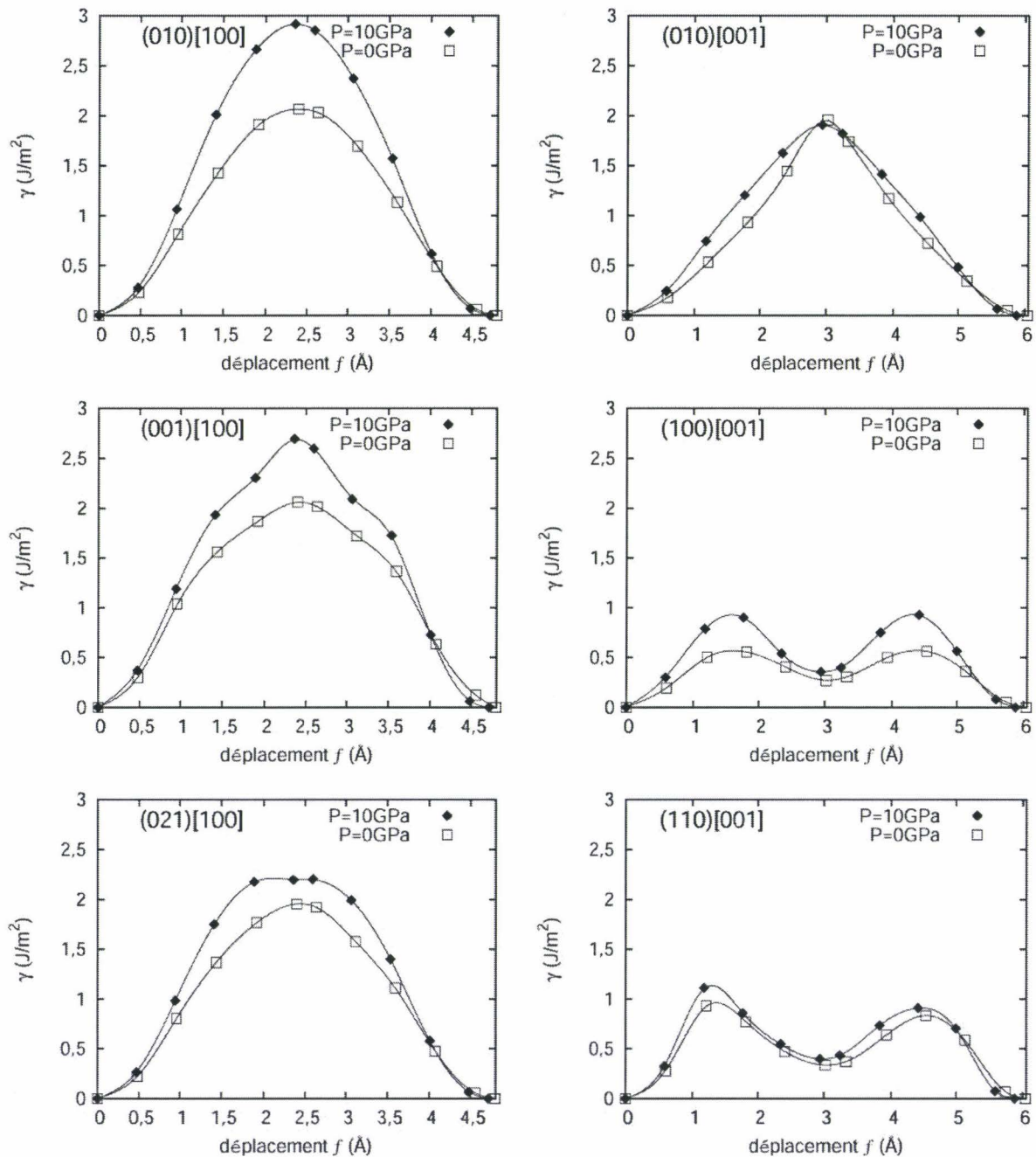


FIGURE 3-14

Barrières d'énergie de faute d'empilement associées aux différents systèmes de glissement à 10 GPa comparées à celles obtenues à 0 GPa.

On peut remarquer que les énergies de faute d'empilement évoluent de différentes manières avec la pression. Pour quantifier l'effet de la pression sur la résistance à un cisaillement rigide sans dislocation, on peut déterminer les ISS et s'intéresser à leur évolution avec la pression (Tableau 3-4)

Système de glissement	(010)[100]	(001)[100]	(021)[100]	(010)[001]	(100)[001]	(110)[001]
Module de cisaillement $\mu_{(hkl)[uvw]}$ à 10 GPa	97,6	94,1	94,3	82,9	94,1	84,7
ISS en GPa à P = 10 GPa	21	22	18	9	9	13,5
$\frac{ISS}{\mu_{(hkl)[uvw]}}$	0,21	0,23	0,19	0,11	0,10	0,16
$\frac{\left(\frac{ISS}{\mu}\right)_{10GPa} - \left(\frac{ISS}{\mu}\right)_{0GPa}}{\left(\frac{ISS}{\mu}\right)_{0GPa}}$	19%	2%	6%	-35%	25%	-6%

TABLEAU 3-4

Modules de cisaillement projetés $\mu_{(hkl)[uvw]}$, Ideal Shear Strength $ISS = \max\left(-\frac{\partial\gamma}{\partial f}\right)$, Ideal Shear Strength normalisées $\frac{ISS}{\mu_{(hkl)[uvw]}}$ à 10 GPa et évolution relative des ISS normalisées avec la pression dans les différents systèmes de glissement $(hkl)[uvw]$.

Le classement des différents systèmes de glissement en fonction de la résistance à un cisaillement rigide n'est pas fondamentalement bouleversé par l'augmentation de pression. Le cisaillement suivant la direction [001] demeure plus facile que celui suivant [100]. Cependant la pression n'a pas la même influence sur tous les types de cisaillement. Ceci se constate facilement si l'on regarde la variation relative des ISS normalisées qui permet de s'affranchir de la part non négligeable de l'augmentation des modules de cisaillement avec la pression et de se consacrer uniquement à l'expression de la cristallographie complexe de la forsterite. Certains cisaillements (comme (010)[100] et (100)[001]), "durcissent" significativement et d'autres peu (comme (001)[100] et (021)[100]). Certains s'adoucissent légèrement (comme (110)[001]). Quant au cisaillement suivant [001] dans le plan (010), il s'adoucit nettement avec la pression.

Ce résultat donne ainsi une information complexe quant à l'effet de la pression sur la résistance au cisaillement dans les différents systèmes de glissement correspondant. Ainsi il est plus judicieux de le considérer en détail pour chaque système de glissement. Pour l'illustrer, nous nous sommes intéressés à l'effet plus spectaculaire que peut avoir la pression dans le plan de cisaillement (010). Dans ce plan, le cisaillement [100] présente un fort durcissement lorsqu'on élève la pression alors que le cisaillement [001] présente un important adoucissement. Un examen détaillé des déplacements atomiques au cours du cisaillement à 0GPa montre que, suivant [100], les atomes proches de la faute ont tendance à s'en écarter (Figure 3-15-a) entraînant une compression des tétraèdres SiO_4 (Figure 3-15-b). A l'inverse, dans le cas du cisaillement suivant [001], on voit que les tétraèdres se rapprochent de la faute et se dilatent au cours du cisaillement (Figure 3-15-a et b). Nous avons déjà fait mention du caractère fort des liaisons covalentes Si-O qui constituent les tétraèdres. C'est la raison pour laquelle il est énergétiquement défavorable de comprimer ou dilater les tétraèdres. On peut alors imaginer que lorsque la pression augmente, la compression des tétraèdres lors d'un cisaillement suivant [100] est d'autant plus défavorable, ce qui explique l'augmentation de la barrière d'énergie et de la valeur de l'ISS associée. A l'inverse, la dilatation des tétraèdres constatée à 0GPa pour un cisaillement suivant [001] est réduite lorsque la pression augmente. Cela explique alors que l'ISS soit diminuée.

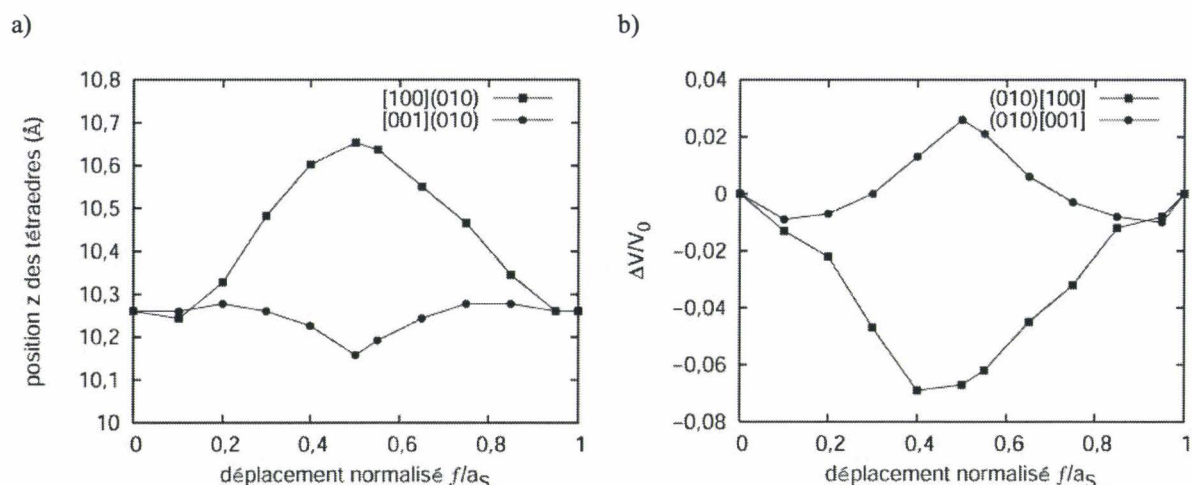


FIGURE 3-15

Position suivant Oz_s (a) et variation relative du volume (b) des tétraèdres les plus proches de la faute en fonction de la norme f du vecteur de faute pour les cisaillements associés aux systèmes de glissement (010)[100] (carrés) et (010)[001] (cercles).

Dans le calcul des barrières d'énergie associées à un cisaillement suivant une direction dans un plan donné, il n'y a aucune dislocation. Ainsi bien que la détermination des *ISS* constitue une approche extrêmement simple de la plasticité de la forsterite, nous avons vu qu'elle représente un outil intéressant pour faire un classement des différents systèmes de glissement et étudier l'influence de la pression dans un matériau à cristallographie complexe tel que la forsterite.

Pour pousser plus loin l'exploitation des énergies de faute d'empilement, on peut réintroduire la notion de dislocation en utilisant le modèle de Peierls-Nabarro.

3.4 Vers une description du cœur des dislocations: le modèle de Peierls-Nabarro

Les valeurs des *ISS* peuvent être assimilées à la contrainte nécessaire pour cisailier rigidement le cristal plan sur plan. En pratique ces contraintes ne sont jamais atteintes lors de la déformation d'un cristal car des dislocations sont créées et se déplacent bien avant. La notion de dislocation doit être introduite si l'on veut décrire la plasticité de manière plus réaliste.

La théorie de l'élasticité linéaire permet de décrire les interactions à longue distance entre les dislocations, mais elle ne s'applique plus à des distances proches du centre des dislocations, dans la zone que l'on nomme le cœur. Il est très important de pouvoir modéliser le cœur des dislocations car, entre autres, il contrôle la mobilité des dislocations.

Il existe deux approches théoriques pour modéliser un cœur de dislocation. La première est une méthode directe qui consiste à utiliser les potentiels empiriques ou les calculs *ab initio* pour déterminer la configuration du cœur. C'est une méthode très coûteuse en ressources numériques ou difficile à mettre en œuvre. Dans la forsterite, une

première tentative de ce type d'approche a été entreprise et a abouti à des résultats plus ou moins satisfaisants (Walker (2004)). L'alternative à cette première méthode est d'utiliser le modèle de Peierls-Nabarro. Nous avons adopté cette deuxième approche pour modéliser de façon indirecte, à partir des énergies de faute d'empilement généralisée, les étalements de cœur des dislocations et les contraintes de Peierls nécessaires pour les déplacer.

3.4.1 Généralités

Considérons une dislocation glissant dans un plan repéré par xOz dans un repère cartésien xyz.(Figure 3-16). La contrainte σ_{by} produite par la dislocation dans son plan de glissement peut être calculée dans le cadre de l'élasticité isotrope (Hirth et Lothe (1982), p.218). Avec la notation adoptée dans la figure 1, nous avons :

Pour une coin dont le vecteur de Burgers est suivant x: $\sigma_{by} = \sigma_{xy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{x}$,

Pour une vis dont le vecteur de Burgers est suivant z: $\sigma_{by} = \sigma_{zy} = \frac{\mu b}{2\pi} \frac{1}{x}$,

Pour une mixte dont le vecteur de Burgers fait un angle θ avec la ligne de dislocation:

$$\sigma_{by} = \sigma_{xy} \sin \theta + \sigma_{zy} \cos \theta = \frac{\mu b}{2\pi} \left[\frac{\sin^2 \theta}{(1-\nu)} + \cos^2 \theta \right] \frac{1}{x} \tag{3-5}$$

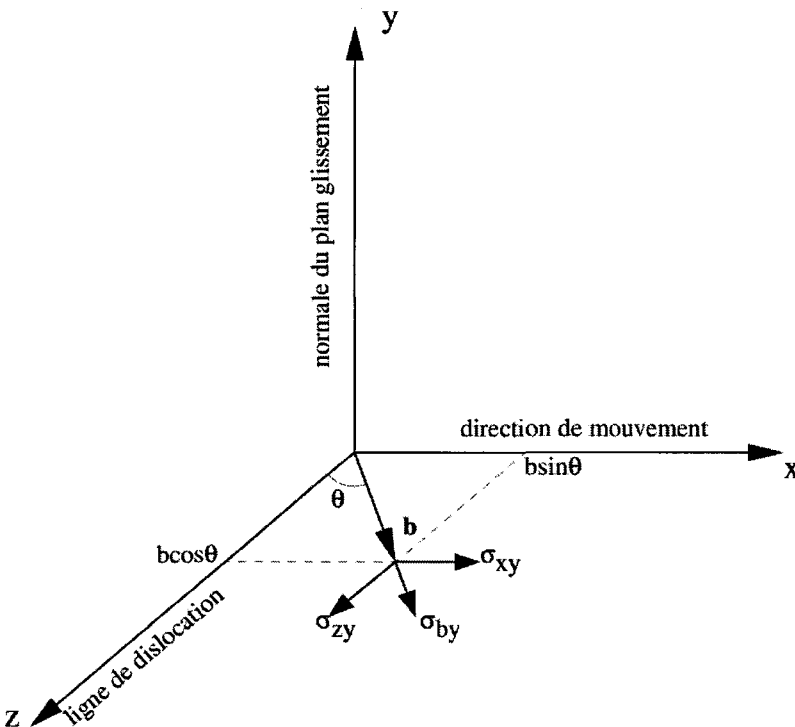


FIGURE 3-16

Repère cartésien dans lequel la dislocation est repérée. Sa ligne est suivant Oz, la normale au plan de glissement suivant Oy et la direction de mouvement suivant Ox. Le vecteur de Burgers b fait un angle θ avec la ligne de la dislocation.

Considérons maintenant deux parties de cristal sans dislocation dont le paramètre suivant la direction x vaut b . Un désaccord initial entre les plans de la partie inférieure et ceux de la partie supérieure existe (Figure 3-17-a) et vaut $b/2$. Les atomes, de part et d'autre de l'interface (plan de glissement), se déplacent d'une quantité $u(x)$ pour raccorder les deux parties de cristal et pour former une dislocation coin (Figure 3-17-b). Le modèle de Peierls-Nabarro (P-N) suppose implicitement que le cœur de la dislocation est étalé dans le plan de glissement. Ce cœur



correspond à des déplacements atomiques au travers du plan de glissement qui dépassent le cadre des approximations de l'élasticité linéaire. Les forces de désaccord qui résultent de ces déplacements ne peuvent donc être calculées en élasticité linéaire, elles doivent cependant (par continuité) s'équilibrer au niveau du plan de glissement avec la contrainte calculée en élasticité linéaire.

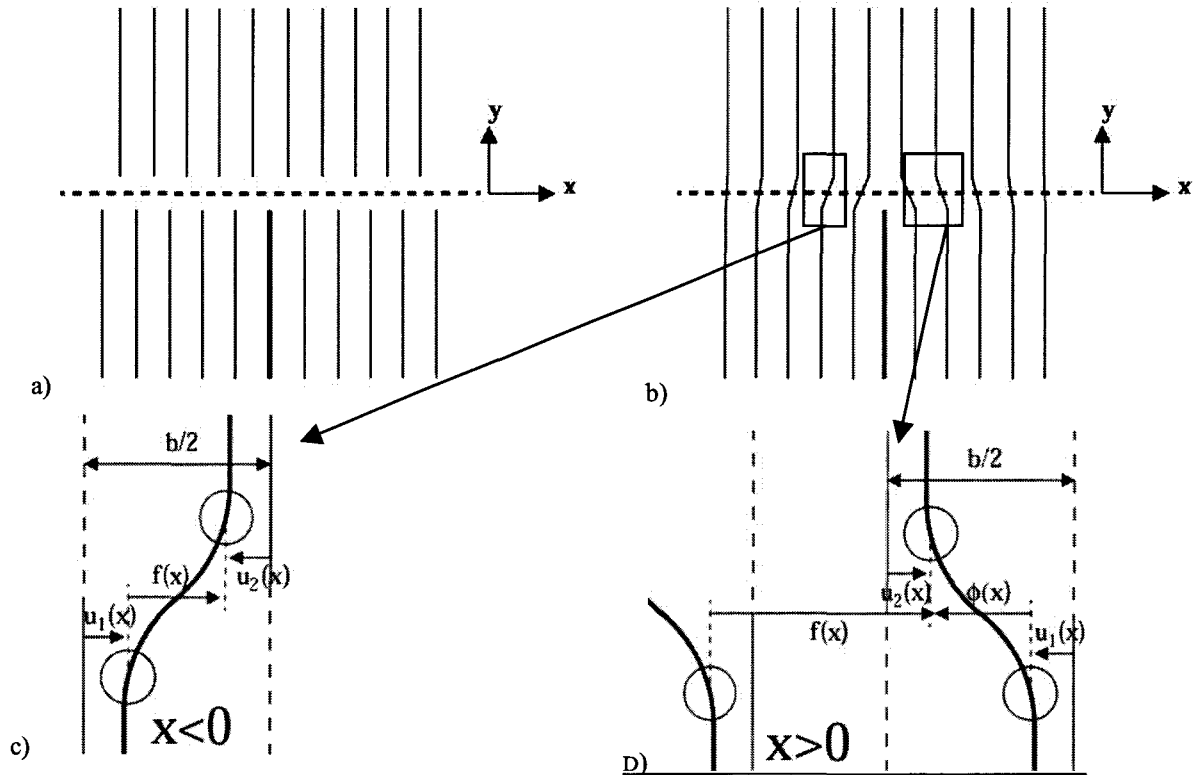


FIGURE 3-17

Schéma représentant deux parties de cristal déplacées l'une sur l'autre (a) et rejointes pour former une dislocation coin (b). (c) et (d) représentent le champ de déplacement et le désaccord du réseau près d'une dislocation.

Dans le modèle de P-N, on caractérise le cœur d'une dislocation à l'aide des quantités suivantes (Figure 3-17-c et d): $f(x)$ est le désaccord entre un plan de la partie inférieure et le plan suivant de la partie supérieure selon la direction x , $\phi(x)$ est le désaccord entre deux plans liés à l'interface (il vaut $-f(x)$ pour $x < 0$ et $f(x) - b$ pour $x > 0$). Leurs évolutions en fonction de la distance au centre de la dislocation sont représentées sur la Figure 3-18.

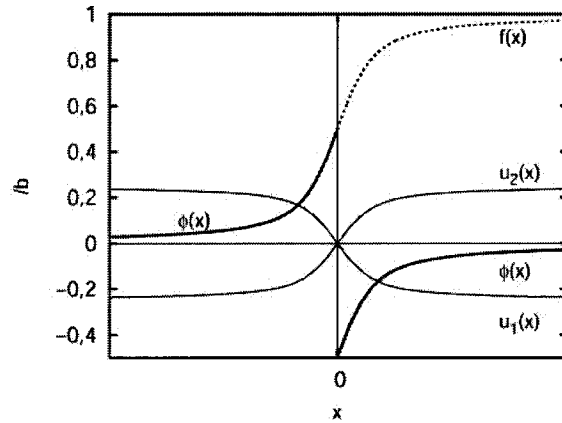


FIGURE 3-18

Schéma représentant l'évolution des désaccords $f(x)$ et $\phi(x)$ ainsi que les champs de déplacement $u_1(x)$ de la partie inférieure et $u_2(x)$ de la partie supérieure en fonction de la distance x au centre de la dislocation.

On peut représenter le désaccord f de la partie supérieure du cristal par rapport à la partie inférieure comme étant le résultat d'une distribution continue de dislocations infinitésimales $\rho(x')$ de vecteurs de Burgers :

$$\rho(x')dx' = \left[\frac{df}{dx} \right]_{x'} dx' \text{ localisées en chaque point } x'.$$

La contrainte induite par cette distribution équilibre la force $F_b(f(x))$ qui résulte du désaccord des plans atomiques au travers du plan de glissement :

$$\sigma_{by}(x) = F_b(f(x))$$

Cette condition d'équilibre se traduit, dans le modèle de P-N par l'équation intégral-différentielle :

$$\frac{K}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x-x'} \frac{df(x')}{dx'} dx' = F_b(f(x)) \tag{3-6}$$

avec la condition de normalisation $\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x') dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{df(x')}{dx'} dx' = b.$

Notons que dans le cas d'un cristal isotrope le facteur $K = \mu \left[\frac{\sin^2 \theta}{(1-\nu)} + \cos^2 \theta \right]$ permet d'étendre le résultat à

une dislocation mixte définie par son caractère θ .

Dans le modèle initial proposé par Peierls et Nabarro, la force de désaccord est supposée sinusoïdale. Son amplitude est ajustée de manière à retrouver les résultats de l'élasticité linéaire pour les petits déplacements.

Pour une dislocation coin dans un cristal isotrope, cette approche correspond à:

$$\sigma_{xy}(x,0) = \frac{\mu b}{2\pi d} \sin \frac{2\pi f(x)}{b} = \tau_{\max} \sin \frac{2\pi f(x)}{b} \tag{3-7}$$

(d étant la distance entre plans dans la direction perpendiculaire à l'interface et τ_{\max} , la contrainte maximale qui peut être générée à l'interface).

La résolution de l'équation (3-6) conduit à la solution classique :

$$f(x) = \frac{b}{\pi} \tan^{-1} \frac{x}{\zeta} + \frac{b}{2} \quad \text{ou} \quad \rho(x) = \frac{df(x)}{dx} = \frac{b\zeta}{\pi(\zeta^2 + x^2)} \quad (3-8)$$

$$\text{avec } \zeta = \frac{Kb}{4\pi\tau_{\max}} = \frac{d}{2(1-\nu)} \quad (3-9)$$

qui peut être considérée comme la demi largeur du cœur de la dislocation. Pour chaque dislocation dont la force de désaccord est sinusoïdale, une solution de ce type peut être déterminée. Cependant, dans le cas général, cette force de désaccord n'est pas sinusoïdale, mais il est possible, comme l'ont montré Christian et Vitek (1970) de la déterminer à partir des énergies de faute d'empilement généralisée :

$$F_b(f) = -\frac{d\gamma}{df} \quad (3-10)$$

Dans le cas où la force de désaccord n'est plus sinusoïdale, la solution à l'équation de P-N (3-6) n'est plus celle définie par (3-8). Néanmoins elle peut servir de base pour proposer une solution approchée:

$$f(x) = \frac{b}{2} + \frac{b}{\pi} \sum_{i=1}^N \alpha_i \tan^{-1} \frac{x-x_i}{c_i} \quad \text{ou} \quad \rho(x) = \frac{df(x)}{dx} = \frac{b}{\pi} \sum_{i=1}^N \alpha_i \frac{c_i}{c_i^2 + (x-x_i)^2} \quad (3-11)$$

La forme de cette solution n'a pas réellement de sens physique mais on peut la voir comme étant la somme d'une distribution de dislocations partielles i . Dans ce cas, la condition, $\sum_{i=1}^N \alpha_i = 1$ doit être satisfaite et les coefficients

α_i doivent être positifs. L'équation de P-N devient alors:

$$\frac{Kb}{2\pi} \sum_{i=1}^N \alpha_i \frac{x-x_i}{(x-x_i)^2 + c_i^2} = F_b(f(x)) \quad (3-12)$$

En mécanique des milieux continus, la matière est distribuée de façon homogène à l'interface. Si $f(x)$ est solution du champ de déplacement, alors $f(x-u)$, correspondant au champ de déplacement d'une dislocation traduite de u , l'est aussi. Pour calculer une énergie de désaccord, il faut réintroduire la discrétisation due au réseau cristallin. Ceci est réalisé naturellement en posant que, lorsqu'une dislocation est introduite à la position u , les plans de la partie supérieure du cristal aux positions ma' sont déplacés de $f(ma'-u)$ suivant \vec{b} par rapport à la partie inférieure du cristal (a' étant la distance entre deux plans successifs en l'absence de dislocation suivant la direction de mouvement de la ligne). On obtient alors l'énergie de désaccord de la dislocation en ne sommant les énergies de désaccord qu'aux positions des plans atomiques espacés de a' :

$$W(u) = \sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} \gamma(f(ma'-u))a' \tag{3-13}$$

La contrainte de Peierls est alors la contrainte maximale requise pour passer la barrière d'énergie périodique $W(u)$:

$$\sigma_P = \max \left\{ \frac{1}{b} \frac{dW}{du} \right\} \tag{3-14}$$

On peut noter également que ces relations ne sont valables que dans le cas du cristal isotrope. Néanmoins il est possible de les étendre au cas de cristaux anisotropes en utilisant des valeurs de K appropriées au système de glissement considéré et calculées en élasticité anisotrope. Ces valeurs ont été déterminées à l'aide du logiciel Disdi (J. Douin, ONERA).

3.4.2 Application aux dislocations dans la forsterite

Les énergies de faute d'empilement présentées dans le paragraphe 3.3 ont été modélisées par une série de cosinus:

$$\gamma(f) = \sum_{i=0}^n A_i \cos\left(\frac{2\pi i f}{b}\right) \tag{3-15}$$

Pour des énergies de faute d'empilement γ en J/m^2 , f et b sont respectivement le vecteur de faute et le vecteur de Burgers en Å et A_i , des coefficients ajustables en J/m^2 . L'ajustement de $\gamma(f)$ est réalisé avec une bonne précision (l'erreur moyenne est toujours inférieure à 6%) pour $n = 4$. La force de désaccord F_b est obtenue en dérivant γ par rapport à f .

3.4.2.1 Profils de dislocation

Le but ici est de déterminer la fonction f de désaccord entre les plans de la partie supérieure du cristal et ceux de la partie inférieure en fonction de la distance x par rapport au centre de la dislocation. En fait il s'agit de déterminer l'étalement de cœur des dislocations. On cherche une solution du type de celle définie dans la relation (3-11) en résolvant l'équation de P-N (3-12). Cette résolution a été réalisée numériquement de façon itérative pour déterminer les paramètres α_i , x_i et c_i , en minimisant la relation: $\left| F'_b(x, \alpha_i, x_i, c_i) - F_b(f(x, \alpha_i, x_i, c_i)) \right|$

(avec $F'_b = \frac{Kb}{2\pi} \sum_{i=1}^N \alpha_i \frac{x-x_i}{(x-x_i)^2 + c_i^2}$). En général, $N = 3$ et $\alpha_i > 0$ sont suffisants pour obtenir un ajustement satisfaisant, mais dans les cas où $\gamma(f)$ possède un minimum local (pour les systèmes de glissement (100)[001]

et $\{110\}[001]$) il est préférable de choisir $N = 6$ et de laisser α_i prendre des valeurs négatives. La Figure 3-19 montre la distribution $f(x)$ de vecteurs de Burgers en fonction de la distance avec le centre de la dislocation dans deux cas différents avec ou sans minimum local sur $\gamma(f)$ (respectivement pour $(100)[001]$ ou $(010)[100]$).

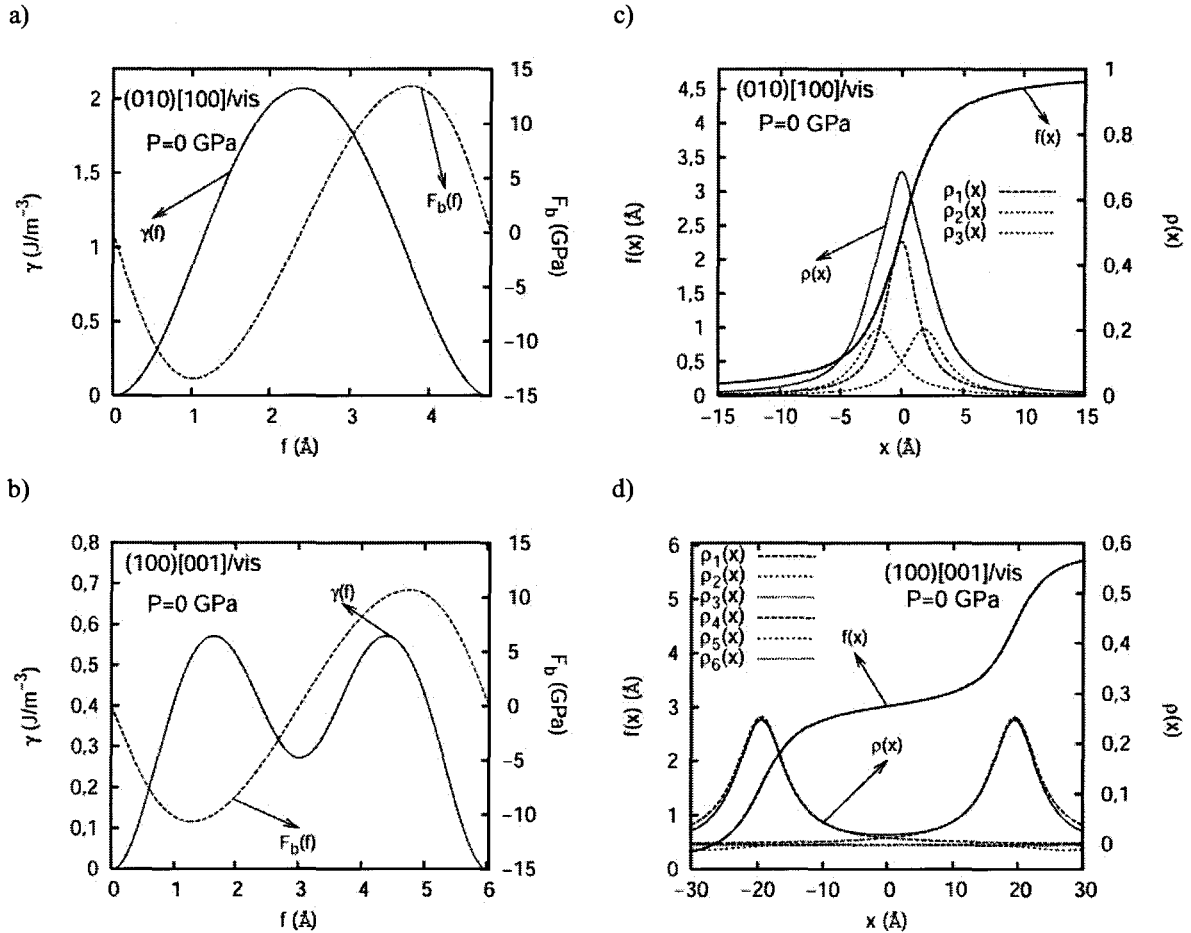


FIGURE 3-19

a) et b) Energies de faute d'empilement γ et forces de désaccord F_b pour les dislocations vis dans les systèmes de glissement $(010)[100]$ et $(100)[001]$ à 0 GPa.

c) et d) Répartition de vecteurs de Burgers $f(x)$ et densité de vecteurs de Burgers $\rho(x)$ en fonction de la distance x au centre de la dislocation. Dans le cas de la dislocation vis du système de glissement $(010)[100]$, $N=3$. Dans le cas de la dislocation vis du système de glissement $(100)[001]$ pour lequel $\gamma(f)$ présente un minimum local, $N=6$ (voir texte).

Pour localiser le centre du cœur de la dislocation, il est plus facile de s'intéresser au maximum de la densité de vecteur de Burgers $\rho(x)$. On peut remarquer ainsi, sur la Figure 3-19, que la présence d'un minimum local sur $\gamma(f)$ révèle la présence d'une dissociation en deux dislocations partielles. La largeur de la dissociation équivaut alors à la distance entre les deux pics de densité de vecteur de Burgers. Il est possible de déterminer l'étalement du cœur de la dislocation (parfaite ou partielle) en prenant la largeur à mi-hauteur du pic de la densité $\rho(x)$.

La Figure 3-20 récapitule les différents étalements de cœur des dislocations des différents systèmes de glissement considérés et le Tableau 3-5 présente entre autres les valeurs des étalements de cœur 2ζ .

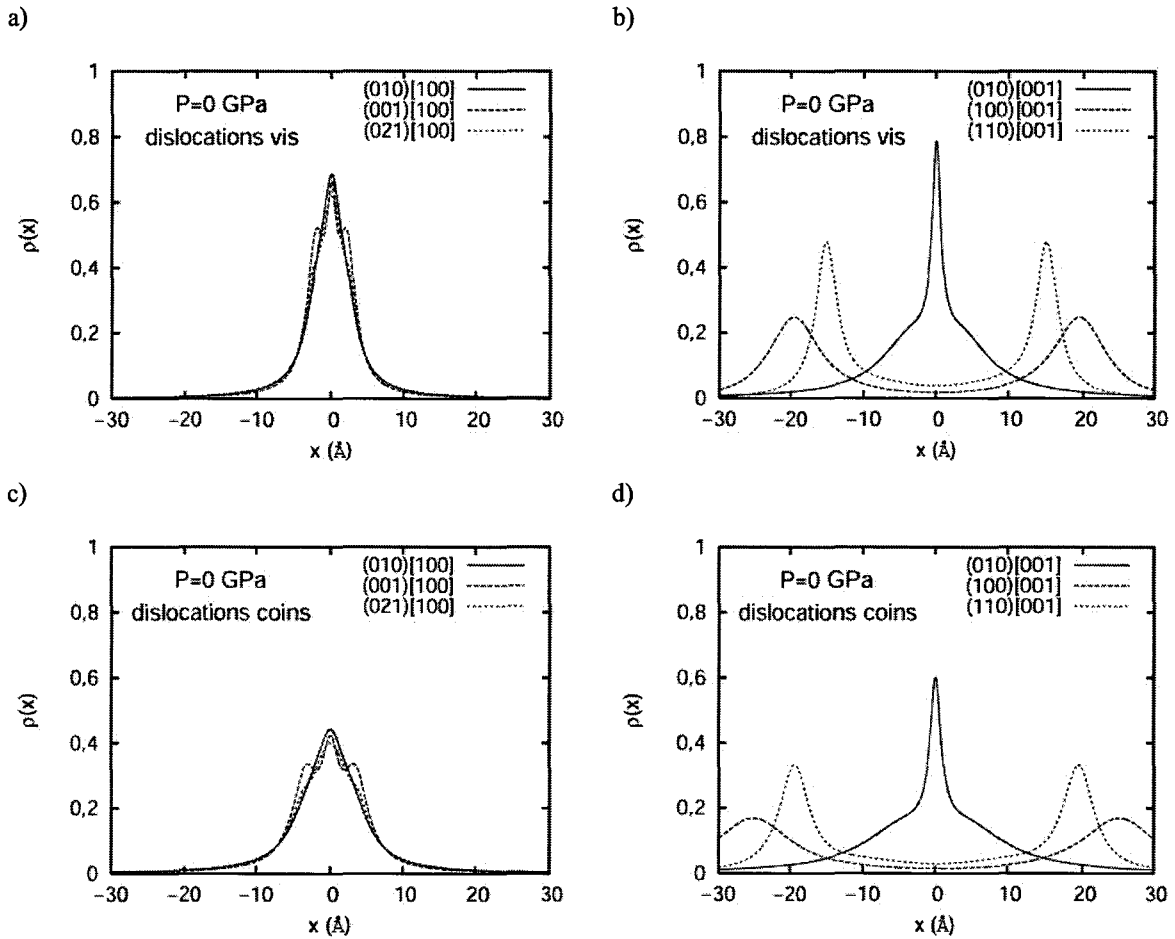


FIGURE 3-20

Densités de vecteurs de Burgers $\rho(x)$ pour les dislocations vis dans les systèmes de vecteurs de Burgers [100] (a) et [001] (b) à 0 GPa. Même chose pour les dislocations coins (c et d).

Plusieurs informations se dégagent de la Figure 3-20 et du Tableau 3-5. Tout d'abord, le cœur est généralement plus étalé pour les dislocations coins parce que le facteur K est plus important pour les dislocations coins que pour les dislocations vis. Ensuite le cœur des dislocations de vecteur de Burgers [100] est de même largeur et non dissocié quelque soit leur plan de glissement. Par contre les dislocations de vecteur de Burgers [001] ont des cœurs différents selon leur plan de glissement. En effet, dans les plans (100) et {110}, le cœur des dislocations est dissocié. Sur la barrière d'énergie de faute d'empilement $\gamma(f)$, le minimum se situe en $f = b/2$ signifiant que la réaction de la dissociation est: $b \rightarrow b/2 + b/2$. La largeur d'une telle dissociation est comprise entre 30 Å et 50 Å selon le plan de glissement et le caractère de la dislocation. Vander Sande et Kohlstedt (1976) ont mis en évidence, par microscopie électronique en transmission avec la technique du faisceau faible, une telle dissociation des dislocations de vecteur de Burgers [001] et ont déterminé une largeur de dissociation de 40 Å, comparable à celle que l'on a pu obtenir grâce au modèle de P-N.

Dislocation		K (10^9J/m^3 ou GPa)	τ_{\max} (10^9J/m^3 ou GPa)	b (Å)	Largeur de dissociation (Å)	2ζ (Å)
(010)[100]	Vis	77,8	13,5	4,79		5,1
	Coin	120,1				8,1
(001)[100]	Vis	77,8	16	4,79		6,3
	Coin	122,2				9,8
{021}[100]	Vis	77,8	12,5	4,79		5,9
	Coin	120,6				9,2
(010)[001]	Vis	71,8	10,7	6,04		2,1
	Coin	94,9				2,7
(100)[001]	Vis	71,8	5,5	3,02	39	8,7
	Coin	105,5			50,4	12,7
{110}[001]	Vis	71,8	10	3,02	33,4	3,6
	Coin	103,3			38,8	5,3

TABLEAU 3-5

Principales données d'entrée du modèle de Peierls-Nabarro (K, b) et les résultats obtenus (largeur de dissociation et étalement de cœur 2ζ) à 0 GPa.

Il faut rappeler que la densité de vecteur de Burgers $\rho(x)$ a été déterminée dans les différents plans de glissement en considérant que le cœur de dislocation est uniquement étalé dans ce plan. C'est une hypothèse très sévère car, dans ce cas, la possibilité d'avoir un cœur tridimensionnel est complètement écartée. Cette remarque est d'autant plus vraie que le caractère de la dislocation est vis. En effet, les dislocations vis n'ont pas d'appartenance stricte à un plan de glissement et leur cœur peut potentiellement être étalé dans les différents plans de glissement.

A partir des étalements de cœur coplanaires obtenus et en l'absence de l'utilisation d'un modèle de P-N à trois dimensions, il est tout de même possible d'avoir une idée de ce à quoi peut ressembler le cœur des dislocations vis. Dans le cas des dislocations de vecteur de Burgers [100], les étalements de cœur sont identiques dans les différents plans de glissement. Ceci laisse à penser que le cœur tridimensionnel de telles dislocations n'a pas une tendance à l'étalement dans un plan plus que dans un autre. Dans le cas des dislocations de vecteur de Burgers [001], le cœur de la dislocation vis a tendance à être dissocié dans les plans (100) et {110}. A trois dimensions, plutôt que de parler de dissociation, il est plus juste de parler de tendance plus forte à l'étalement dans les plans (100) et {110} par rapport à l'étalement dans (010). Le cœur tridimensionnel serait alors plutôt anisotrope.

Il est intéressant de regarder comment évoluent ces cœurs de dislocation lorsque l'on augmente la pression. Pour cela, nous avons comparé les densités de vecteurs de Burgers calculées à partir des énergies de faute d'empilement obtenues à une pression de 10 GPa avec celles obtenues à 0 GPa (Figure 3-21). Les largeurs de cœurs et de dissociation à 10GPa sont consignées dans le Tableau 3-6.

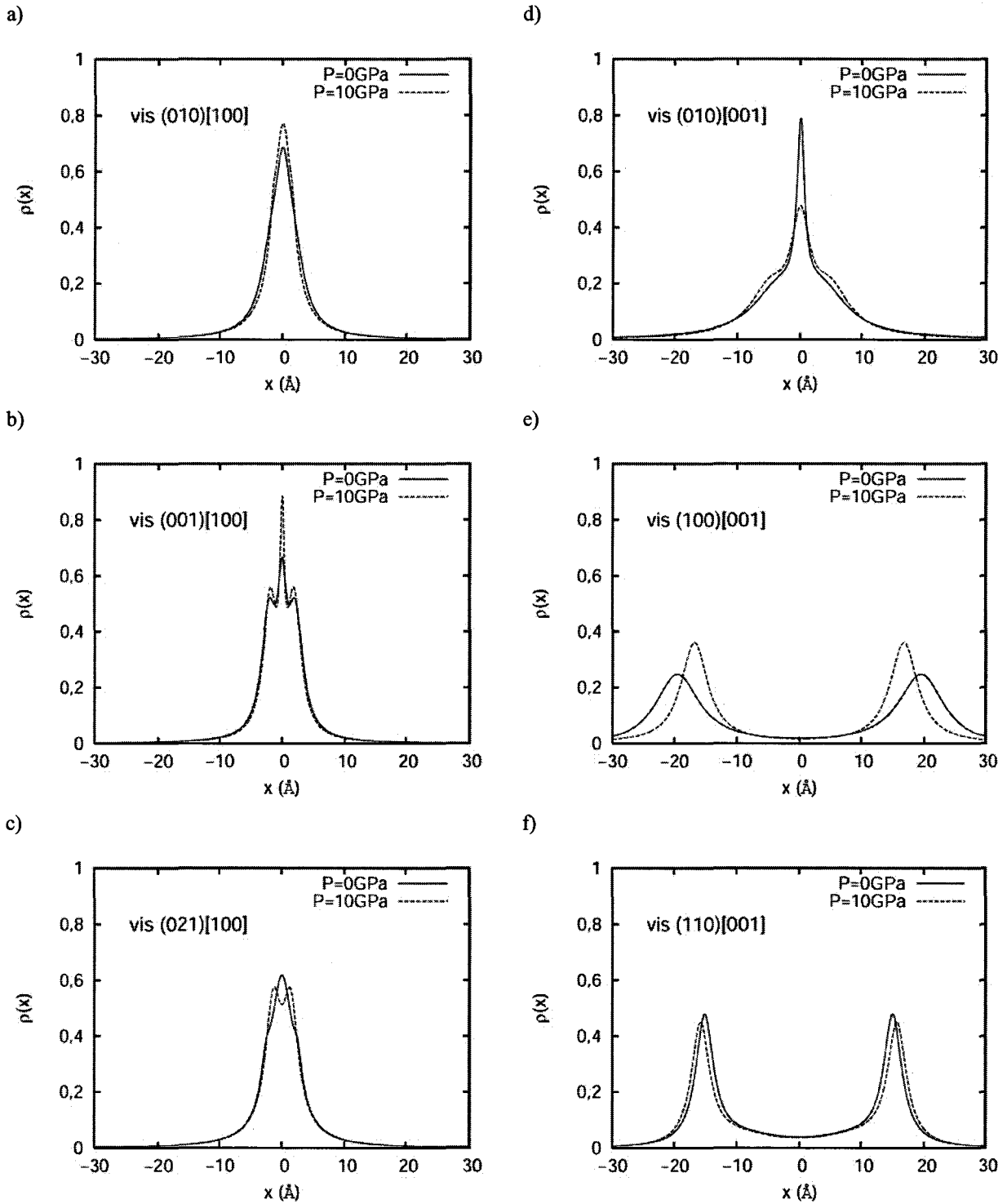


FIGURE 3-21

Densités de vecteurs de Burgers $\rho(x)$ pour les dislocations vis dans les systèmes de vecteurs de Burgers [100] (a) et [001] (b) à 10 GPa.

Les observations sont identiques à celles faites à 0 GPa: les cœurs de dislocation de vecteur de Burgers [100] ne sont pas dissociés et ont tous une largeur identique quel que soit le plan de glissement alors que les cœurs de dislocation de vecteur de Burgers [001] sont dissociés dans les plans {110} et (100) et non dissociés dans (010).

Néanmoins si on les compare à celles obtenues à 0 GPa, on peut noter qu'en général les cœurs de dislocations sont sensiblement plus étroits. Deux autres effets, tous deux concernant les dislocations de vecteur de Burgers [001], doivent être soulignés. Tout d'abord, on constate que la largeur de dissociation des deux partielles de vecteur de Burgers $\frac{1}{2}[001]$ dans (100) est plus faible (33,5 Å au lieu de 39 Å pour une dislocation vis) alors qu'elle demeure identique dans le plan {110} (33,4 Å au lieu de 31,4 Å pour une dislocation vis). Ensuite, on voit que la largeur de cœur de la dislocation de vecteur de Burgers [001] dans (010) est plus importante à 10 GPa qu'à 0 GPa (Tableau 3-6). On peut alors imaginer que la structure de cœur à trois dimensions d'une dislocation de vecteur de Burgers [001] va être modifiée lorsque la pression est augmentée. Elle aura certainement tendance à s'étaler dans le plan (010) davantage à 10 GPa qu'à 0 GPa, au détriment des plans (100) ou {110}.

Dislocation		K (10^9 J/m ³ ou GPa)	τ_{\max} (10^9 J/m ³ ou GPa)	b (Å)	Largeur de dissociation (Å)	2ζ (Å)
(010)[100]	Vis	95,8	20,9	4,71		4,2
	Coin	147,9				6,3
(001)[100]	Vis	95,8	21,2	4,71		5,0
	Coin	149,0				7,9
{021}[100]	Vis	95,8	17,6	4,71		5,9
	Coin	148,7				9,9
(010)[001]	Vis	88,3	9,0	5,88		7,6
	Coin	115,3				9,3
(100)[001]	Vis	88,3	9,3	2,99	33,5	5,3
	Coin	128,1			48,3	7,6
{110}[001]	Vis	88,3	12,0	2,99	31,4	3,8
	Coin	125,7			40,9	5,3

TABLEAU 3-6

Principales données d'entrée du modèle de Peierls-Nabarro (K, b) et les résultats obtenus (largeur de dissociation et étalement de cœur 2ζ à 10 GPa.

3.4.2.2 Contraintes de Peierls

Le modèle de P-N permet également de déterminer les contraintes de Peierls à partir des énergies de faute d'empilement, de l'étalement du cœur et des équations (3-13) et (3-14). Pour calculer l'énergie de désaccord de la dislocation il est nécessaire de sommer les énergies de désaccord (ou de faute d'empilement) γ là où il existe un plan atomique. On réintroduit ainsi la discrétisation du réseau en considérant l'espacement a' entre deux plans atomiques successifs et de même nature. L'énergie de désaccord due à la présence de la dislocation dans le cristal est alors périodique de a' et on peut également voir cette valeur comme la distance qui sépare deux vallées de Peierls suivant la direction de déplacement de la dislocation. Cette méthode a déjà permis de fournir les contraintes de Peierls dans différentes structures: Si (Joos *et al.* (1994)), MgO (Miranda et Scandolo (2005)), Pd et Al (Hartford *et al.* (1998)) par exemple.

Le paramètre a' est défini comme la plus petite projection selon la direction de déplacement de la dislocation d'un vecteur translation du réseau. Le Tableau 3-7 présente les différentes valeurs de a' ainsi que la contrainte de Peierls calculée pour chaque type de dislocation.

Dislocation		$\mu_{(hkl)[uvw]}$ (GPa)	τ_{max} (GPa)	Direction de mouvement	a' (Å)	ξ/a'	σ_p (GPa)
(010)[100]	Vis	77,3	13,5	[001]	6,04 (5,88)	0,4 (0,4)	5,7 (10,9)
	Coin	(97,6)	(20,9)	[100]	4,79 (4,71)	0,8 (0,7)	0,7 (2)
(001)[100]	Vis	78,3	16	[010]	10,28 (9,98)	0,3 (0,3)	13,7 (20,7)
	Coin	(94,1)	(21,2)	[100]	4,79 (4,71)	1 (0,8)	0,3 (2,8)
{021}[100]	Vis	77,9	12,5	<012>	15,86 (15,42)	0,2 (0,2)	15,8 (24,4)
	Coin	(94,3)	(17,6)	[100]	4,79 (4,71)	1 (1,1)	0,3 (2,3)
(010)[001]	Vis	65,8	10,7	[100]	4,79 (4,71)	0,2 (0,8)	5,4 (1,7)
	Coin	(82,9)	(9,0)	[001]	6,04 (5,88)	0,2 (0,8)	5,1 (1,5)
(100)[001]	Vis	78,3	5,5	[010]	10,28 (9,98)	0,4 (0,3)	1,4 (3,4)
	Coin	(94,1)	(9,3)	[001]	6,04 (5,88)	1,1 (0,6)	0,01 (0,9)
{110}[001]	Vis	67,7	10	<110>	11,34 (11,04)	0,2 (0,2)	4,4 (6,4)
	Coin	(84,7)	(12,0)	[001]	6,04 (5,88)	0,4 (0,5)	0,9 (2,9)

TABLEAU 3-7

Contraintes de Peierls σ_p calculées pour les dislocations vis et coin des différents systèmes de glissement considérés à 0GPa et à 10GPa (entre parenthèses).

Dans le cas des systèmes de glissement (100)[001] et {110}[001] pour lesquels il existe une dissociation, on considère idéalement que les deux partielles sont fortement couplées: quelle que soit la position de la partielle de tête dans le cristal, le calcul de l'énergie et de la contrainte de Peierls est réalisé en supposant invariante la distance entre les deux partielles. Ainsi il est possible de se retrouver par exemple dans la situation où une des deux partielles est en train de grimper la barrière d'énergie pendant que l'autre la descend, ce qui a pour effet de diminuer la barrière d'énergie totale (donc la contrainte de Peierls). Les deux partielles peuvent aussi être en train de gravir en même temps la barrière d'énergie, ce qui augmente la barrière d'énergie totale (donc la contrainte de Peierls). Le type de situation rencontré dépend alors de la distance de séparation des deux partielles (Hartford *et al.* (1998)).

Le calcul des contraintes de Peierls dépend de l'étalement de cœur mais aussi beaucoup de la valeur de a' . σ_p est d'autant plus importante que le rapport ξ/a' est petit. Ainsi les contraintes de Peierls sont en général plus faibles pour les dislocations coins que pour les dislocations vis car ξ/a' est plus grand.

Bulatov et Kaxiras (1997) se sont d'ailleurs posé la question de savoir si l'utilisation de la théorie de P-N demeurerait valide lorsque le cœur des dislocations est étroit ($\xi/a' \ll 1$) et suggèrent que les contraintes de Peierls sont d'autant plus surestimées que le cœur des dislocations est étroit. Ils proposent alors une nouvelle théorie qui tient compte du déplacement vertical et latéral des rangées atomiques autour du cœur de dislocation et montre que l'on peut ainsi obtenir des contraintes de Peierls plus réalistes pour certaines dislocations dans le Si pour lesquelles ξ/a' vaut environ 0,05 (Joos *et al.* (1994)). Dans notre cas, ξ/a' est inférieur à 1 mais pas autant que

dans le Si et la surestimation des contraintes de Peierls est certainement moins catastrophique. On accordera néanmoins plus de confiance dans les contraintes de Peierls déterminées lorsque le cœur est plus large.

De plus, pour les dislocations vis, le cœur est certainement étalé dans plusieurs plans en zone avec la direction de ligne et la contrainte nécessaire pour déplacer réellement une dislocation vis dépend fortement de la géométrie tridimensionnelle de son cœur. La contrainte de Peierls que l'on a calculée donne alors la contrainte nécessaire pour que la dislocation vis passe d'une vallée de Peierls à l'autre une fois que son cœur est entièrement recombinaison (plus aucune composante hors du plan de glissement). On peut ainsi la voir comme une limite inférieure de la contrainte réelle. σ_p est plus importante pour les dislocations vis de vecteur de Burgers [100] que pour celles de vecteur de Burgers [001].

Pour les dislocations coins, le calcul de la contrainte de Peierls se justifie si l'on considère qu'il n'existe pas d'étalement du cœur hors du plan de glissement (en montée). σ_p pour les dislocations coins du système de glissement (100)[001] est la plus basse ($\sigma_p = 2.10^{-4} \mu$), résultat du fort étalement du cœur des deux partielles dans le plan (100) ($2\zeta = 12,72 \text{ \AA}$). Mais en général ce sont plutôt les dislocations coins de vecteur de Burgers [100] qui ont la contrainte de Peierls la plus faible.

A cause des différentes approximations inhérentes au modèle de P-N, le calcul des contraintes de Peierls fournit des informations relativement complexes qu'il est difficile de discuter. Pour les dislocations vis, d'un côté les valeurs de σ_p peuvent être surestimées à cause de valeurs de $\frac{5}{a}$, faibles, de l'autre elles sont sous-estimées à cause de la non prise en compte du caractère tridimensionnel des cœurs de dislocation vis. Pour les dislocations coins, même si on sait que les valeurs de contrainte de Peierls peuvent être surestimées, on peut tenter de les discuter en considérant que le cœur d'une dislocation coin a tendance à être moins étalé hors du plan de glissement que celui d'une dislocation vis. Les contraintes de Peierls des dislocations coins de vecteur de Burgers [100] sont comprises entre $0,3.10^{-2} \mu$ et $0,9.10^{-2} \mu$ alors que celles des dislocations de vecteur de Burgers [001] sont comprises entre $7,7.10^{-2} \mu$ et $0,02.10^{-2} \mu$. Ces valeurs se situent entre celles obtenues dans le cas des matériaux covalents ($8,8.10^{-2} \mu - 37.10^{-2} \mu$ déterminée par Joos *et al.* (1994) pour le silicium) et celles obtenues pour certains matériaux de structure cubique à faces centrées ($0,009.10^{-2} \mu - 0,13.10^{-2} \mu$ déterminée par Hartford *et al.* (1998) pour Pd et Al). Les contraintes de Peierls qui s'opposent au mouvement des dislocations coins dans la forstérite sont ainsi presque aussi basses que celles que l'on rencontre dans Al ou Pd.

Pour rapprocher les résultats obtenus grâce au modèle de P-N des contraintes critiques projetées expérimentales (voir chapitre 1), on ne peut pas raisonner que sur les dislocations coins. Ceci est d'autant plus vrai que les dislocations qui participent majoritairement à la déformation plastique du cristal de forstérite à basse température sont des dislocations vis de vecteur de Burgers [001] (voir chapitre 1). Il est donc important d'en savoir davantage sur la structure à trois dimensions du cœur des dislocations vis.

Les contraintes de Peierls pour la majorité des dislocations augmentent avec la pression. Au contraire, on constate que la pression a l'effet inverse sur les dislocations du système de glissement (010)[001]. A 0GPa, la contrainte de Peierls des dislocations coins dans ce système était la plus importante mais devient une des plus faibles à 10GPa. On peut imaginer que l'activité du système de glissement (010)[001] devient de plus en plus actif lorsque la pression augmente.

Chapitre 4

Modélisation de la plasticité du monocristal de forstérite par dynamique des dislocations

La géométrie du glissement est très anisotrope dans la forstérite. En effet, nous avons vu, dans le chapitre 1, que seules deux directions de glissement contribuaient à la déformation plastique : [100] et [001]. De plus, plusieurs études ont montré que la forstérite se déforme exclusivement par glissement de dislocations de vecteur de Burgers [001] à basse température et majoritairement par glissement de dislocations de vecteur de Burgers [100] à haute température. L'utilisation de la simulation de la dynamique des dislocations est l'occasion d'éclaircir ce point en tentant de proposer des lois de vitesse pour de telles dislocations. C'est ce que nous ferons après avoir montré comment la géométrie de glissement de la forstérite a été implémentée dans le code de simulation.

La plasticité du monocristal de forstérite a souvent été étudiée grâce à des essais de déformation (fluage, vitesse de déformation imposée) réalisés suivant des axes de sollicitation particuliers, à 45° des axes cristallographiques: [110]c, [011]c et [101]c. L'axe le plus intéressant est peut-être [101]c qui, contrairement aux deux autres, sollicite de la même manière les glissements [100] et [001]. C'est la raison pour laquelle des essais numériques de déformation à vitesse constante n'ont été réalisés que suivant l'axe [101]c. Cette orientation particulière permettra d'étudier notamment l'interaction entre les dislocations de ces deux vecteurs de Burgers différents. Nous ferons peu de cas du glissement de vecteur de Burgers [100] ou [001] dans le plan (010) puisqu'il n'est pas activé suivant [101]c. La gamme des températures pour laquelle la plasticité du monocristal sera modélisée sera également plus restreinte que pour les expériences. En effet, dans le chapitre 1, il a été montré que la montée semblait avoir de l'importance lors de la déformation de la forstérite dès 1300°C. Aujourd'hui, la simulation de la dynamique des dislocations discrète ne permet pas de tenir compte de ce mécanisme de déformation supplémentaire des dislocations. Cette température constituera alors une limite supérieure au-delà de laquelle le simple glissement des dislocations ne sera pas considéré comme permettant de modéliser correctement le comportement plastique du monocristal.

4.1 Géométrie de glissement dans le monocristal de forstérite

4.1.1 Pertinence des différents systèmes de glissement et choix de la géométrie de glissement pour la simulation

Les systèmes de glissement communément observés sont (100)[001], (010)[001], {110}[001], (001)[100], (010)[100] et {0kl}[100]. Nous ne rappellerons pas les conditions de déformation (vitesse de déformation, température, direction de l'axe de sollicitation, ...) dans lesquelles tel ou tel système de glissement est le plus activé. Pour cela, on pourra se reporter au chapitre 1 qui présente une synthèse de la question. Tous ces systèmes de glissement sont pris en compte dans la simulation avec une seule restriction pour les systèmes {0kl}[100]. Parmi les plans de glissement {0kl}, les études expérimentales ont montré qu'ils pouvaient être {011}, {021} ou {031}. Dans la simulation, le fait d'ajouter un système de glissement rend la base de vecteurs plus complexe. Pour ces raisons techniques, nous avons choisi d'implémenter uniquement le système {011}[100] qui est plus facile à prendre en compte que les deux autres (Tableau 4-1).

	C1	C2	C3	C4	A1	A2	A3	A4
b	[001]	[001]	[001]	[001]	[100]	[100]	[100]	[100]
plan	(100)	(010)	(110)	(1 $\bar{1}$ 0)	(001)	(010)	(011)	(0 $\bar{1}$ 1)

TABLEAU 4-1

*Systèmes de glissement considérés (vecteurs de Burgers **b** et plans de glissement) dans la simulation et la notation adoptée.*

4.1.2 Construction de la base de vecteurs

Le choix de la base de vecteurs ligne est conditionné par la géométrie de glissement que nous avons choisi pour modéliser la plasticité du monocristal. Chaque système de glissement est discrétisé par un jeu de 8 segments (2 segments vis, 2 segments coins et 2 paires de segments mixtes) qui viennent se positionner sur le réseau cubique $\{0, x, y, z\}$ de la simulation de paramètre a_{DD} . Lors de la construction de la base de vecteurs, il faut veiller à ce qu'elle donne accès aux directions qui correspondent aux intersections entre les plans de glissement (Tableau 4-2). Ces directions sont en effet primordiales pour l'établissement potentiel des réactions entre dislocations appartenant à des systèmes de glissement sécants (jonctions et/ou annihilations).

C1	C2	C3	C4	A1	A2	A3	A4	
	[001]	[001]	[001]	[010]	[001]	[0 $\bar{1}$ 1]	[011]	C1
770[03 $\bar{3}$]		[001]	[001]	[100]		[100]	[100]	C2
770[03 $\bar{3}$]	770[03 $\bar{3}$]		[001]	[1 $\bar{1}$ 0]	[001]	[1 $\bar{1}$ 1]	[$\bar{1}$ 11]	C3
770[03 $\bar{3}$]	770[03 $\bar{3}$]	770[03 $\bar{3}$]		[110]	[001]	[11 $\bar{1}$]	[111]	C4
770[$\bar{6}$ 33]	770[$\bar{2}$ 22]	770[45 $\bar{5}$]	770[$\bar{8}$ 11]		[100]	[100]	[100]	A1
770[03 $\bar{3}$]		770[03 $\bar{3}$]	770[03 $\bar{3}$]	770[$\bar{2}$ 22]		[100]	[100]	A2
770[60 $\bar{6}$]	770[222]	770[42 $\bar{8}$]	770[824]	770[222]	770[$\bar{2}$ 22]		[100]	A3
770[03 $\bar{3}$]	770[$\bar{2}$ 22]	770[48 $\bar{2}$]	770[84 $\bar{2}$]	770[222]	770[$\bar{2}$ 22]	770[222]		A4

TABLEAU 4-2

Directions cristallographiques correspondant aux intersections entre les différents plans de glissement (dans le repère orthorhombique dans la partie supérieure et pour la simulation dans la partie inférieure). Avec la notation pour les systèmes de glissement : C1 pour (100)[001], C2 pour (010)[001], C3 pour (110)[001], C4 pour (1 $\bar{1}$ 0)[001], A1 pour (001)[100], A2 pour (010)[100], A3 pour (011)[100] et A4 pour (0 $\bar{1}$ 1)[100].

Les segments qui servent à discrétiser les dislocations se déplacent par translations discrètes sur un sous-réseau qui possède généralement les mêmes éléments de symétrie que le cristal. La forstérite est de structure orthorhombique et sa maille élémentaire a pour dimensions : $a = 4,76 \text{ \AA}$; $b = 10,2 \text{ \AA}$; $c = 5,99 \text{ \AA}$. Nous construisons alors, sur le réseau cubique de la simulation, une base de vecteurs constituée de nombres entiers les plus petits possibles de telle sorte que le sous-réseau de la simulation soit homothétique de la structure orthorhombique du cristal. Pour passer du réseau cubique de la simulation au réseau orthorhombique du sous-

réseau, on applique la matrice de changement de repère : $M = 770 \begin{pmatrix} \bar{2} & \bar{6} & 0 \\ \bar{2} & 3 & 3 \\ \bar{2} & 3 & \bar{3} \end{pmatrix}$. Cette matrice correspond à deux

rotations successives (de $125,3^\circ$ environ autour de Oz et de 135° autour de Ox) puis à une homothétie dont la

matrice est $770 \begin{pmatrix} 2\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 3\sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & 3\sqrt{2} \end{pmatrix}$. La rotation conservant les angles et les distances, c'est l'opération

d'homothétie qui constituera la source des différentes erreurs. Les directions [100], [010] et [001] dans le repère orthorhombique $\{\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}\}$ du cristal sont exprimées respectivement, dans le réseau cubique $\{O, x, y, z\}$ de la simulation, $770[\bar{2}22]$, $770[\bar{6}33]$ et $770[03\bar{3}]$ (on notera le repère de la simulation : $\{\bar{a}_s, \bar{b}_s, \bar{c}_s\}$). Les erreurs

commises sur les rapports $\frac{a_s}{b_s}$ et $\frac{b_s}{c_s}$ par rapport aux rapports $\frac{a}{b}$ et $\frac{b}{c}$ sont respectivement d'environ 1% et

1,7%. Les angles entre chaque direction de la base de vecteurs et les vecteurs de base \bar{a}_s , \bar{b}_s et \bar{c}_s sont égaux à leurs équivalents dans le réseau du cristal réel à une erreur maximale de 0,9% près.

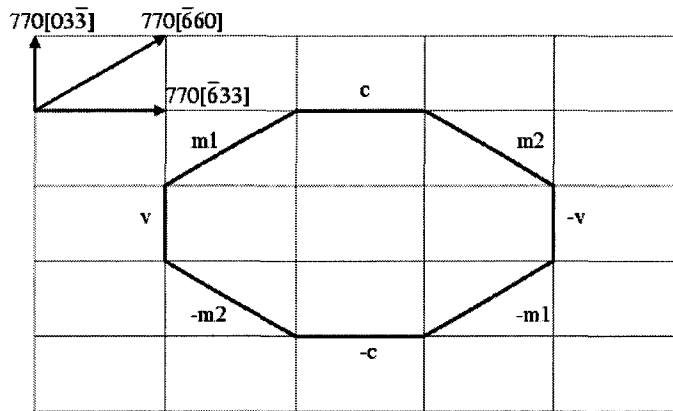
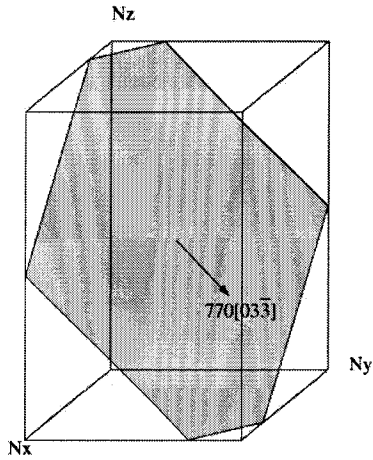


FIGURE 4-1

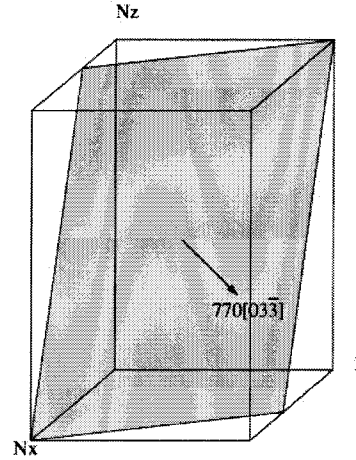
Exemple du système $(100)[001]$: les dislocations sont discrétisées à l'aide de 8 segments de directions prédéfinies (« v » pour « vis », « c » pour « coin » et « m » pour « mixte »).

La Figure 4-1 représente la boucle élémentaire constituée des segments élémentaires avec lesquels une dislocation du système de glissement $(100)[001]$ est discrétisée dans la simulation. La totalité de la base de vecteurs ligne est consignée en annexe 1 et la Figure 4-2 donne l'orientation des plans de glissement dans le volume simulé ainsi que le vecteur de Burgers du système de glissement correspondant. Les normales des plans de glissement font des angles quelconques avec les arêtes du volume simulé et nous verrons, dans le prochain paragraphe, qu'il est possible d'en tirer certains avantages.

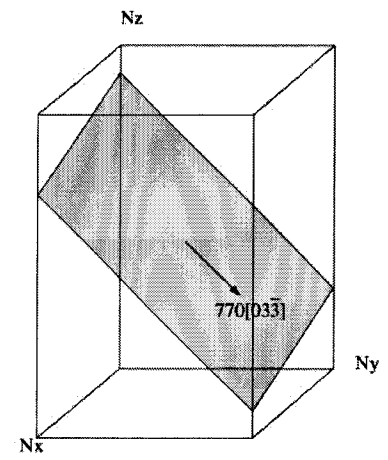
a) C1: (100)[001]



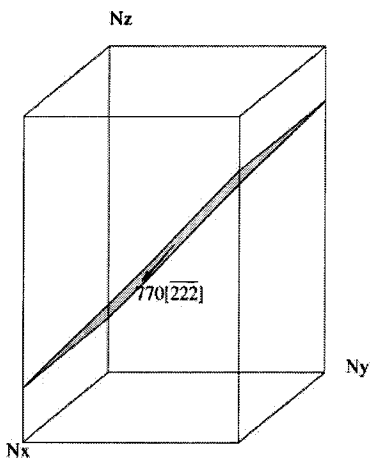
b) C3: (110)[001]



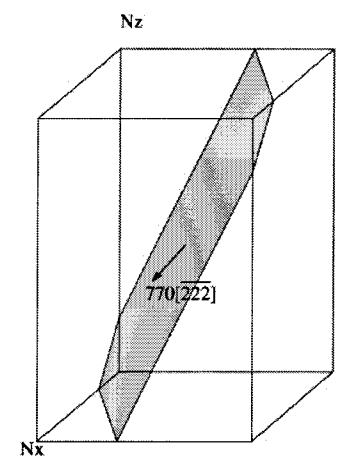
c) C4: (1-1 0)[001]



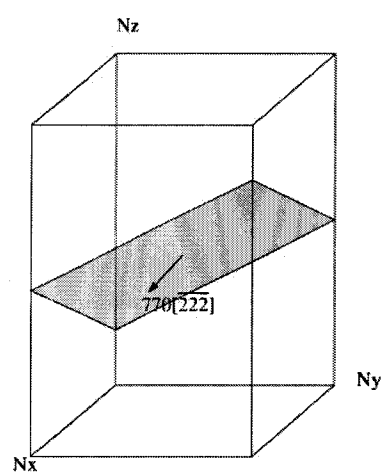
d) A1: (001)[100]



e) A3: (011)[100]



f) A4: (0-1 1)[100]



g) C2: (010)[001] et A2: (010)[100]

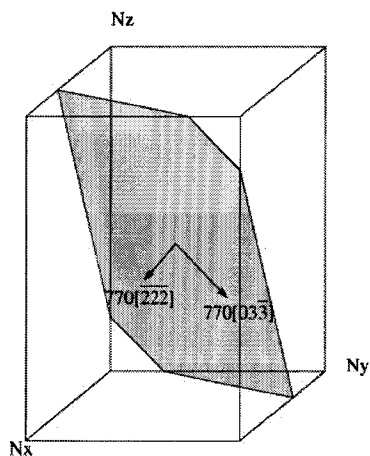


FIGURE 4-2

Orientation des plans de glissement et des vecteurs de Burgers dans le volume simulé pour chaque système de glissement (C1 en a, C3 en b, C4 en c, A1 en d, A3 en e, A4 en f et C2 et A2 en g).

Le passage de l'espace de la simulation à l'espace physique du cristal se fait grâce au paramètre de réseau a_{DD} . Aucune distance critique d'annihilation des dipôles coins ou aucune autre distance caractéristique permettant de donner à la simulation la limite pour laquelle la théorie de l'élasticité ne s'applique plus n'est disponible pour la

forstérite. Néanmoins on peut se fixer la règle suivante: deux dislocations n'interagissent plus élastiquement et leurs cœurs se recombinent lorsqu'elles sont à une distance inférieure à la norme du vecteur de Burgers. Ainsi pour que cette règle soit respectée dans tous les cas, le vecteur déplacement élémentaire le plus petit (sa norme vaut environ 2000) a été choisi comme correspondant à $5,99 \text{ \AA}$ (norme du vecteur de Burgers d'une dislocation [001]). Le paramètre de réseau a_{DD} est alors égale à 3.10^{-13} m . Cette distance n'a aucun sens physique dans le cadre de l'étude de la plasticité du monocristal puisqu'elle est même inférieure aux vecteurs de Burgers des dislocations considérées. Néanmoins, elle n'est pas atteinte par la simulation car les dislocations se déplacent sur un réseau défini par la base de vecteurs présentée précédemment.

4.1.3 Conditions aux limites périodiques et libres parcours moyens des segments de dislocation

Le fait d'utiliser des conditions aux limites périodiques pour gérer le passage des dislocations à travers les surfaces du volume simulé engendre des problèmes d'auto-réaction entre des portions de dislocation et ses images. Ce problème est bien connu et les distances avant auto-réaction peuvent être calculées (Madec *et al.* (2003a)). Ces distances sont des fonctions non triviales qui dépendent de la géométrie de glissement, des dimensions du volume simulé et de la forme des boucles de dislocation considérées (isotrope ou anisotrope).

Il est nécessaire ici de devancer le paragraphe dédié à la mobilité des dislocations et de présenter brièvement la configuration des boucles de dislocations que nous adopterons dans la simulation. Généralement, les dislocations vis dans tous les systèmes de glissement considérés sont soumises à une forte friction de réseau alors que les dislocations coins ne le sont pas (sauf pour le système (010)[100] pour lequel la situation est inversée). Ainsi les boucles de dislocation sont de forme anisotrope, allongée suivant la direction vis ou coin et il existe pour chaque système de glissement une direction rapide de glissement et une autre plus lente.

Comme l'ont montré Monnet *et al.* (2004), le libre parcours moyen λ avant auto-annihilation des parties très mobiles d'une boucle de dislocation est un paramètre important qui influence fortement le domaine de prédéformation causé par le seul déplacement des caractères les plus rapides et qu'il faut pouvoir contrôler.

La base de vecteurs associée à la géométrie de glissement adoptée dans la simulation pour la forstérite est telle que les directions de glissement des segments font des angles non triviaux avec les normales des faces du volume simulé. Ainsi lorsqu'une partie de la boucle de dislocation quitte le volume de simulation, son image apparaît et glisse dans un autre plan de glissement (Figure 4-3). Eventuellement, cette image va finir par s'auto-annihiler avec la boucle de dislocation après avoir traversé les limites du volume simulé un certain nombre de fois et avoir parcouru une distance λ .

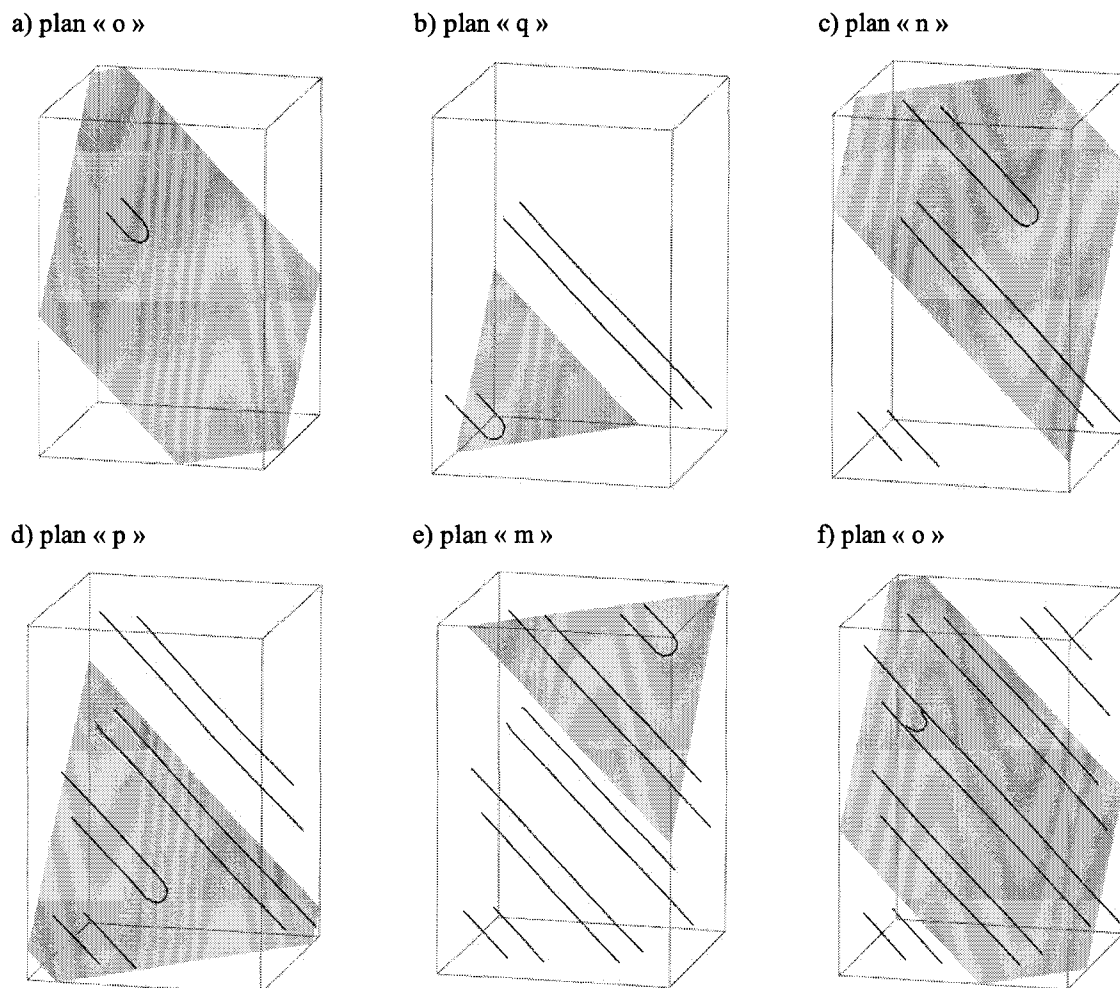


FIGURE 4-3

Une dislocation source de caractère coin du système de glissement $(100)[001]$ s'étend et balaie, à cause des conditions aux limites périodiques, une succession de plans (o,q,n,p,m) avant de revenir dans son plan de départ (o) et de s'auto-annihiler.

Pour pouvoir visualiser plus facilement les distances parcourues par la dislocation coin, il est possible de « mettre à plat » l'ensemble des plans balayés (Figure 4-4).

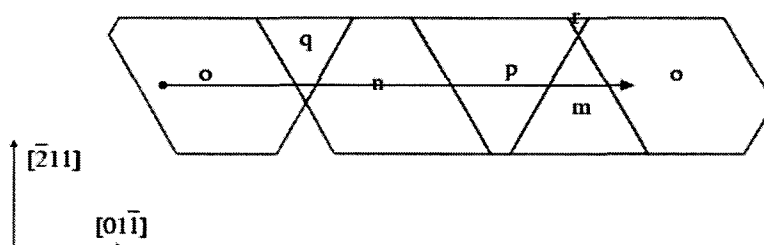


FIGURE 4-4

Il est possible de déplier l'ensemble des plans balayés par la dislocation coin (Figure 4-3). Sur la figure, sont représentés le point de départ de la source et le point d'auto-annihilation, dans le plan « o ». Exemple du système $(100)[001]$

Dans le cas de boucles anisotropes, connaissant les dimensions de la boîte de simulation, il est possible de calculer le libre parcours moyen λ avant auto-annihilation d'une dislocation se déplaçant suivant une direction donnée (Madec *et al.* (2003a)). En reprenant la notation adoptée par Monnet *et al.* (2004), on considère :

- (L_x, L_y, L_z) , les dimensions de la boîte de simulation qui sont des multiples entiers du paramètre de réseau

$$a_{DD} : L_x = N_x a_{DD}, L_y = N_y a_{DD}, L_z = N_z a_{DD},$$

- $\vec{d} = (d_x, d_y, d_z)$, la direction de glissement normalisée de la dislocation et l , la norme de son déplacement au moment de la première auto-annihilation (on a alors : $\lambda = l a_{DD}$),

- (u, v, w) le nombre de fois que la dislocation traverse les limites du volume de simulation. élasticité

Après un certain nombre de passages des limites de la boîte, la dislocation (ou plutôt une de ses images) revient dans son plan de glissement initial et la condition d'auto-annihilation s'écrit :

$$l \begin{pmatrix} d_x \\ d_y \\ d_z \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_x \\ N_y \\ N_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4-1)$$

En éliminant l , on obtient les relations suivantes :

$$\begin{cases} u = \frac{N_y d_x}{N_x d_y} v \\ v = \frac{N_z d_y}{N_y d_z} w \end{cases} \quad (4-2)$$

Il existe une infinité de solutions entières (u, v, w) et seule, la première auto-annihilation nous intéresse. Elle correspond à l'ensemble de trois nombres entiers les plus petits (u_0, v_0, w_0) .

Le libre parcours moyen avant auto-annihilation vaut alors :

$$\lambda = \sqrt{(u_0 L_x)^2 + (v_0 L_y)^2 + (w_0 L_z)^2} \quad (4-3)$$

Il est nécessaire de pouvoir contrôler le libre parcours moyen des segments les plus mobiles. Dans le cas de la forstérite, il existe deux directions suivant lesquelles les segments de dislocation peuvent se déplacer rapidement : $[100]$ ($[\bar{1} \bar{1} \bar{1}]$ pour la simulation) et $[001]$ ($[01 \bar{1}]$ pour la simulation). En choisissant une boîte

de simulation de dimensions $N_x = N_y = \frac{2}{3} N_z$, on obtient alors respectivement pour les directions $[100]$ et

$[001]$, les solutions $\{u_0 = 3; v_0 = 3; w_0 = 2\}$ et $\{u_0 = 0; v_0 = 3; w_0 = 2\}$ et les libres parcours moyens

$\lambda_{[100]} = 41 \mu m$ et $\lambda_{[001]} = 34 \mu m$ (selon (4-3)) environ avec $L_x = L_y = \frac{2}{3} L_z = 8 \mu m$.

Avant de s'auto-annihiler, la dislocation coin (ou plus précisément la dislocation de caractère le plus mobile) laisse derrière elle deux longs segments vis de mobilité plus faible qui ont la longueur du libre parcours moyen des dislocations coins. Lorsque celles-ci sont mobiles, elles se déplacent jusqu'à ce que des portions de l'une s'annihilent avec des portions de l'autre, en se rencontrant dans des plans communs (Figure 4-5). Dans le cas du système de glissement $(001)[001]$, le libre parcours moyen d'une dislocation vis vaut $9,9\mu\text{m}$ (avec

$$L_x = L_y = \frac{2}{3}L_z = 8\mu\text{m}).$$

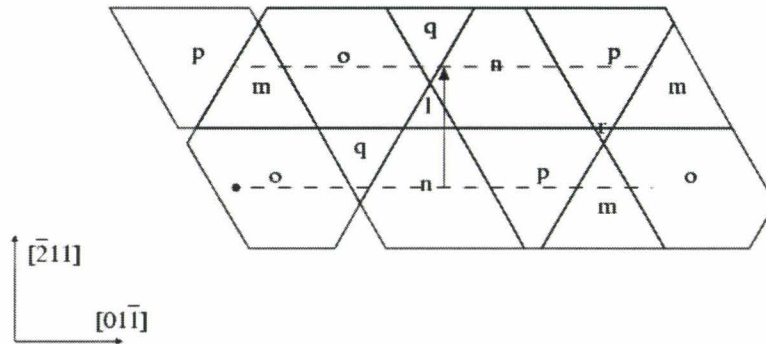


FIGURE 4-5

Une dislocation vis s'annihile avec des parties d'une même boucle lorsque des portions de cette dislocation balaient de nouveau des plans déjà explorés. Exemple du système $(100)[001]$.

Il n'existe que deux directions rapides pour tous les systèmes de glissement considérés, mais les directions lentes ne sont jamais les mêmes. Avec la même approche que pour $(100)[001]$, le libre parcours moyen des dislocations lentes a été déterminé pour les autres systèmes de glissement (Figure 4-6). Les valeurs ainsi obtenues sont consignées dans le Tableau 4-3.

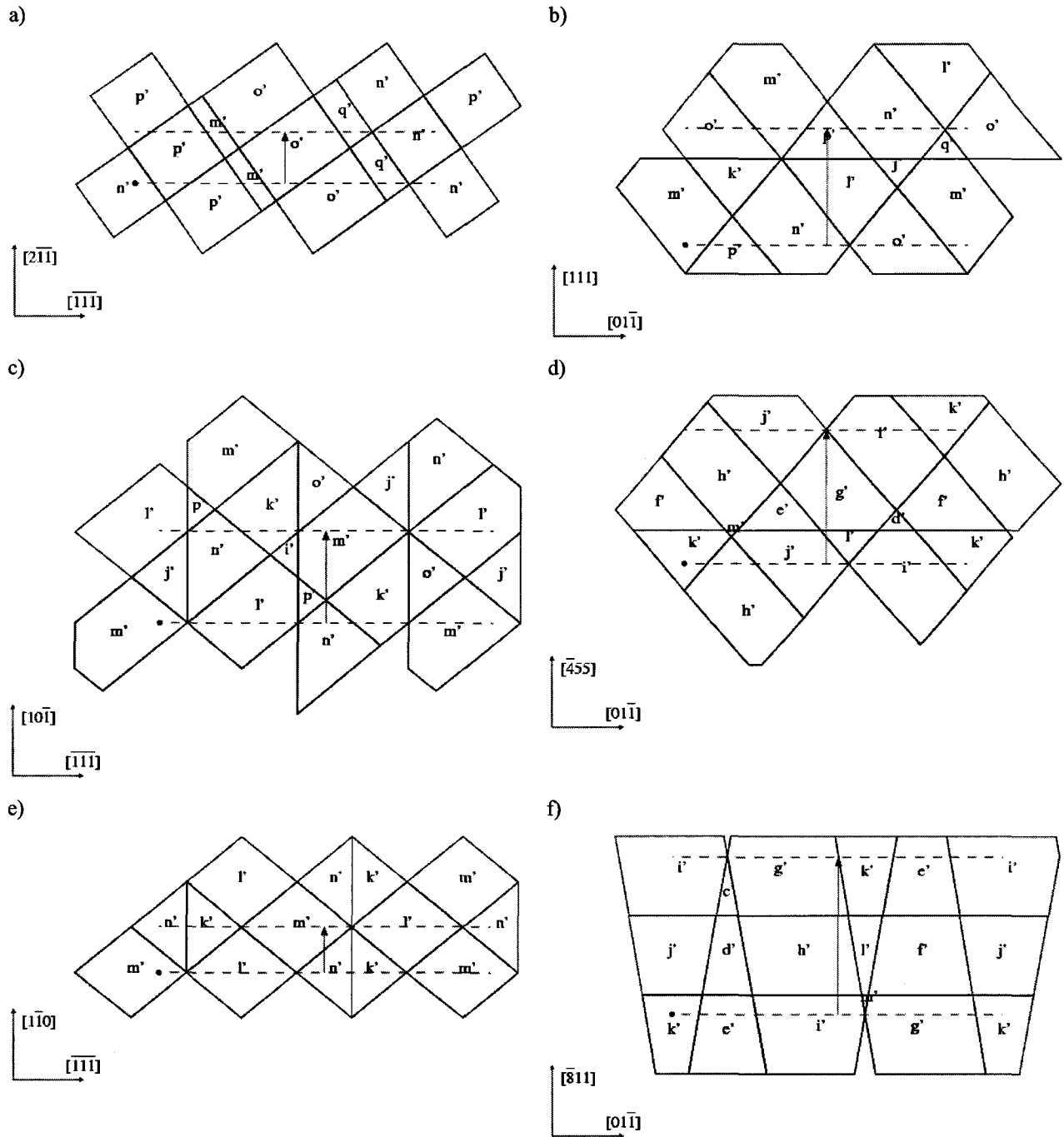


FIGURE 4-6

Identique à la Figure 4-5. Sont considérés les systèmes de glissement A1 en (a), C2 et A2 en (b), A3 en (c), C3 en (d), A4 en (e) et C4 en (f).

Le libre parcours moyen d'une dislocation de mobilité faible est bien moins grand que celui de la dislocation rapide du même système de glissement. Néanmoins, avant auto-annihilation des deux types de dislocation, l'aire qu'a balayée les dislocations "lentes" et très longues est toujours largement supérieure à celle des dislocations "rapides" plus courtes.

		C1	C2	C3	C4	A1	A2	A3	A4
rapide	direction	$[01\bar{1}]$	$[01\bar{1}]$	$[01\bar{1}]$	$[01\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	$[01\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
	caractère	coin	coin	coin	coin	coin	vis	coin	coin
	λ	$34\mu\text{m}$	$34\mu\text{m}$	$34\mu\text{m}$	$34\mu\text{m}$	$41\mu\text{m}$	$34\mu\text{m}$	$41\mu\text{m}$	$41\mu\text{m}$
lente	direction	$[\bar{2}11]$	$[111]$	$[\bar{4}55]$	$[\bar{8}11]$	$[2\bar{1}\bar{1}]$	$[111]$	$[10\bar{1}]$	$[1\bar{1}0]$
	caractère	vis	vis	vis	vis	vis	coin	vis	vis
	λ	$9,9\mu\text{m}$	$14\mu\text{m}$	$16,1\mu\text{m}$	$16,1\mu\text{m}$	$6,8\mu\text{m}$	$14\mu\text{m}$	$11,2\mu\text{m}$	$5,6\mu\text{m}$

TABLEAU 4-3

Libre parcours moyen λ pour les dislocations rapides et lentes de chaque système de glissement. La direction de glissement et le caractère de la dislocation sont également précisés.

4.1.4 L'élasticité dans la simulation

La simulation de la dynamique des dislocations ne gère pas l'élasticité anisotrope. Le module de cisaillement, que nous considérerons alors, sera le module de cisaillement moyen d'un solide polycristallin isotrope déterminé à partir des constantes élastiques obtenues par Isaak *et al.* (1989). Sa valeur et sa dépendance avec la température sont: $\mu = \mu^0 - 0,0135T$ ($\mu^0 = 81,1$ GPa à 0K). Le coefficient de Poisson, pour les mêmes raisons, sera celui déterminé par Kumazawa et Anderson (1969) pour un polycristal de comportement élastique isotrope. Il vaut 0,25.

4.2 Glissement simple et calibration des lois de vitesse des dislocations

4.2.1 Rappel des microstructures observées

Que ce soit à des basses températures inférieures à 800°C (Gaboriaud *et al.* (1981), Gaboriaud (1986)) et à des températures intermédiaires de l'ordre de 800°C à 1300°C (Phakey *et al.* (1972), Evans et Goetze (1979), Wang *et al.* (1988), Durham *et al.* (1977)) dans des monocristaux d'olivine ou à de hautes températures supérieures à 1400°C (Darot et Gueguen (1981), Gueguen et Darot (1982)) dans des monocristaux de forstérite, les boucles de glissement des dislocations de vecteur de Burgers [001] se caractérisent par des parties vis longues et droites et des parties coins courbes et courtes dans les plans de glissement {110}, (010) et (100). Dès 1000°C, le glissement dévié intervient (Phakey *et al.* (1972)) faisant perdre aux dislocations vis leur caractère parfaitement rectiligne et la montée opère à partir de 1300°C (Evans et Goetze (1979)).

Contrairement au glissement de vecteur de Burgers [001], aucune observation de ce type de glissement n'est disponible à des températures inférieures à 800°C. Aux moyennes et hautes températures ($T > 800^\circ\text{C}$), nous disposons d'observations réalisées en microscopie optique (décoration des dislocations) et quelques autres en

microscopie électronique en transmission. Les boucles de dislocation n'ont pas le même aspect selon qu'elles glissent dans tel ou tel plan.

Plan de glissement (010)

Des observations en microscopie optique (Darot et Gueguen (1981), Durham *et al.* (1977)) ont montré que les boucles de glissement de vecteur de Burgers [100] dans le plan (010) étaient composées de parties coins longues et droites et de parties vis plus courtes et courbes, à des températures élevées supérieures à 1400°C. Même si le caractère rectiligne n'est pas si marqué à ces températures (montée), la microscopie électronique en transmission confirme cet aspect des boucles de glissement (Kashima *et al.* (1983), Gueguen et Darot (1982)).

A des températures plus basses (1000°C – 1150°C), des observations en microscopie optique (Evans, 1976 dans Durham *et al.* (1977)) et en microscopie électronique en transmission (Phakey *et al.* (1972)) semblent indiquer que les vis sont plus droites qu'à haute température et soumises à la friction de réseau.

Plan de glissement (001)

Selon Durham *et al.* (1977), les boucles de dislocation du système de glissement (001)[100] se caractérisent en général par des parties vis longues et droites. Ils ont également constaté qu'à très haute température (1600°C), les parties coins étaient plus courbes et courtes alors qu'à des températures intermédiaires (1150°C), les parties coins disparaissent au profit de parties mixtes droites et marquées suivant la direction cristallographique <110>.

Plans de glissement {0kl} : {011}, {021} et {031}

Les seules informations dont on dispose sur les dislocations de vecteur de Burgers [100] dans ces plans de glissement sont issues d'observations de microstructures de températures élevées ($T > 1400^\circ\text{C}$) réalisées en microscopie optique grâce à la technique de décoration des dislocations. A ces températures, Darot et Gueguen (1981) ont constaté que les dislocations étaient essentiellement de caractère mixte suivant les directions cristallographiques <111>, <112> et <113> respectivement dans les plans {011}, {021} et {031}. Néanmoins nous n'avons aucune idée de ce à quoi peut ressembler une dislocation glissant dans ces plans à des températures plus basses.

4.2.2 Des lois de vitesse thermiquement activées

Le glissement des dislocations dans la forstérite est ainsi contrôlé par le mouvement de dislocations de caractères marqués cristallographiquement. Hirsch (1960) a montré que la structure de cœur des dislocations (dissociations dans des plans autres que le plan de glissement) peut expliquer le fait que certains caractères d'une boucle de dislocation soient soumis à une forte friction de réseau à basse température. C'est le cas notamment des dislocations vis dans les structures cubiques centrées et des dislocations vis dans les plans de glissement prismatiques des structures hexagonales compactes. A basse température, un seul double décrochement est généré sur la dislocation vis. Les deux décrochements de caractère coin sont nettement plus mobiles que la dislocation de caractère vis et ils vont glisser quasi-instantanément jusqu'à ce qu'ils rencontrent un obstacle (Figure 4-7-a). En réalité les obstacles sont les extrémités de la dislocation vis et le libre parcours moyen du double décrochement correspond à la longueur L de la dislocation vis. Ceci revient à dire que les dislocations vis

se déplacent par bloc de longueur L . La mobilité des dislocations vis est alors gouvernée par la génération de doubles décrochements sur la ligne de dislocation vis. La loi de vitesse possède alors un caractère thermiquement activé en faisant intervenir une statistique de Boltzman (laquelle permet de rendre compte d'une probabilité de formation de doubles décrochements sur la ligne de dislocation). Elle dépend de la longueur L de la dislocation vis car le taux de génération est proportionnel au nombre de sites probables où il peut y avoir formation d'un double décrochement.

$$v = b \frac{L}{l_c} \nu_D \frac{b}{l_c} \exp\left(-\frac{\Delta H(\tau)}{kT}\right) = \nu_0 \frac{L}{l_c} \exp\left(-\frac{\Delta H(\tau)}{kT}\right) \quad (4-4)$$

où $\nu_0 = \nu_D \frac{b^2}{l_c}$, b est le vecteur de Burgers, ν_D est la fréquence de Debye, L est la longueur de la dislocation, l_c est la longueur critique pour la nucléation d'un double décrochement, k est la constante de Boltzmann, T est la température en Kelvin et $\Delta H(\tau)$ est l'enthalpie d'activation pour la nucléation d'un double décrochement sous une contrainte projetée τ . $\nu_D \frac{b}{l_c}$ est la fréquence de vibration de la dislocation pendant l'activation et $\frac{L}{l_c}$ est le nombre de sites d'activation le long de la ligne de dislocation L . Cette loi dépend linéairement de la longueur L de la dislocation et fortement de la température et de la contrainte dans le terme exponentiel.

A plus haute température, le rapport des vitesses entre les dislocations vis et les doubles décrochements diminue. Dans ce cas, plusieurs doubles décrochements peuvent se former en même temps sur la dislocation vis et la dislocation devient plus courbe (Figure 4-7-b).

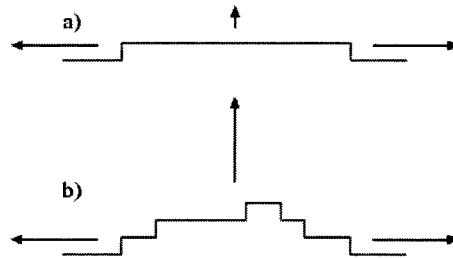


FIGURE 4-7

Glissement d'une dislocation vis par un mécanisme de doubles décrochements. A basse température (a), un seul double décrochement qui va laisser deux segments de dislocation coin très mobiles est généré sur la ligne de dislocation. A haute température (b), la mobilité de la dislocation vis est plus importante et comparable à celle des dislocations coin. Plusieurs double décrochements sont générés en même temps et la ligne se courbe.

Dans la forstérite, nous connaissons peu de choses quant à la structure de cœur des dislocations (dissociations de glissement dans différents plans, dissociations de montée, liaisons Si-O coupées ?). Néanmoins, on constate que certains caractères sont plus mobiles que d'autres soumis à une forte friction de réseau. Ainsi, nous adopterons la loi de vitesse gouvernée par le mécanisme de formation de doubles décrochements pour les dislocations vis des systèmes de glissement de vecteur de Burgers $[001]$ dans les plans (100) , (010) et $\{110\}$, les dislocations coins

du système (010)[100] et les dislocations vis des systèmes (001)[100] et {011}[100] (en faisant l'hypothèse que les boucles de glissement de vecteur de Burgers [100] ont le même aspect dans les plans (001) et {011}).

Les parties les plus rapides des dislocations (de caractère coin en général, sauf pour le système (010)[100]) ne semblent pas être soumises à la friction de réseau et une loi de vitesse du type de celles adoptées dans les structures CFC devraient être adoptées. Néanmoins, d'un point de vue technique, il n'est pas possible de trouver un pas de temps qui soit compatible avec les mobilités différentes des parties d'une même boucle de dislocation. En effet les deux types de loi de vitesse dépendent linéairement de la contrainte dans un cas (type "CFC") et exponentiellement dans l'autre (doubles décrochements). Pour contourner le problème, une loi de vitesse ayant la même dépendance en contrainte que celle des parties les plus lentes de la boucle de dislocation sera choisie pour les parties les plus rapides. Un rapport K suffisant entre les deux vitesses sera ajusté pour reproduire correctement la forme des boucles.

4.2.3 Calibration des lois de vitesse

4.2.3.1 Ajustements de l'enthalpie d'activation sur les CRSS

Selon Kocks *et al.* (1975), la dépendance en contrainte de l'énergie d'activation du mécanisme de doubles décrochements peut être exprimée par l'expression suivante :

$$\Delta H(\tau) = \Delta H_c \left[1 - \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^p \right]^q \quad (4-5)$$

où ΔH_c est l'enthalpie d'activation du mécanisme de double décrochement non assistée par la contrainte, τ_0 la contrainte de Peierls à 0K, p et q des paramètres libres.

A partir de l'équation d'Orowan et de celle de la mobilité des dislocations (4-4), on peut écrire que la vitesse de déformation est:

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \exp\left(-\frac{\Delta H(\tau)}{kT}\right) \quad (4-6)$$

Pour une valeur de $\dot{\epsilon}$ donnée, $\ln\left(\frac{\dot{\epsilon}_0}{\dot{\epsilon}}\right) = \frac{\Delta H(\tau)}{kT} = C$ est une constante comprise environ entre 20 et 30 (Tang *et al.* (1998)).

$$\frac{T}{T_c} = \left[1 - \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^p \right]^q \quad (4-7)$$

où T_c est la température à partir de laquelle la dépendance de τ en température devient moins importante (τ atteint la valeur du palier athermique τ_μ). A cette température, l'enthalpie d'activation du mécanisme de double décrochement non assisté par la contrainte vaut:

$$\Delta H_c = CkT_c \quad (4-8)$$

Pour déterminer les paramètres inconnus de la relation (4-7), nous avons réalisé des ajustements sur les contraintes critiques projetées en fonction de la température. Le chapitre 1 a entre autre montré que le fait de considérer une loi identique pour tous les systèmes de glissement de vecteur de Burgers [001] se justifiait par le fait que la contrainte calculée pour le polycristal était proche des contraintes déterminées expérimentalement. Pour les systèmes de vecteur de Burgers [100], le manque de données ne permet pas de différencier leurs différentes contraintes critiques projetées (à supposer que cela soit nécessaire) et une même loi pour les dislocations appartenant à de tels systèmes sera également considérée. Ces ajustements ont été obtenus par la méthode de minimisation de la somme des carrés des résidus. Puisque la relation (4-7) n'est pas linéaire, la procédure de minimisation consiste en une méthode itérative qui débute avec des estimations des paramètres à ajuster.

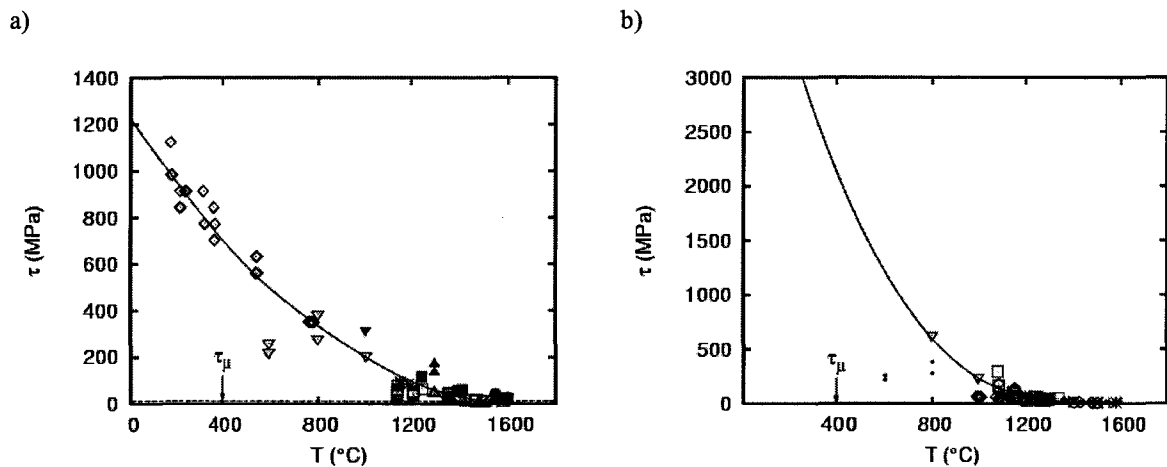


FIGURE 4-8

Contraintes critiques projetées dans les systèmes de glissement de vecteurs de Burgers [001] (a) et [100] (b).

Les données expérimentales utilisées pour déterminer les paramètres de l'équation (4-7) sont rappelées sur la Figure 4-8 ainsi que la courbe correspondant à l'ajustement. Notons que, avant de réaliser l'ajustement, nous avons ôté la contrainte τ_μ du palier athermique à la contrainte critique projetée τ (Figure 4-9).

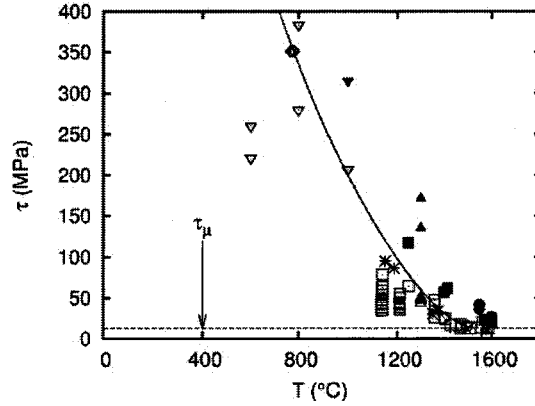


FIGURE 4-9

Zoom de la Figure 4-8-a pour montrer la contrainte τ_{μ} du palier athermique.

Les meilleurs ajustements de l'équation (4-7) pour les dislocations de vecteur de Burgers [100] et les dislocations de vecteur de Burgers [001] sont consignés dans le Tableau 4-4.

	b = [100]	b = [001]
τ_0	7170 ± 894 MPa	1730 ± 41 MPa
T_c	1870 ± 59 K	1810 ± 40 K
p	0,2936	0,5988
q	0,8475	1,1506

TABLEAU 4-4

Paramètres des ajustements de la relation (4-7), pour les deux types de dislocation. Les erreurs indiquées pour τ_0 et T_c ont été obtenues à partir de la matrice de variance/covariance, en considérant les valeurs de p et q avec une précision importante.

Sans surprise, la détermination de τ_0 (contrainte critique projetée à 0K ou contrainte de Peierls) pour les dislocations de vecteur de Burgers [100] souffre d'une incertitude importante. En effet, cela s'explique par le fait qu'il n'y a aucune donnée sur la contrainte critique projetée à des températures inférieures à 800°C qui permettrait de mieux contraindre sa valeur. Quoi qu'il en soit, en l'absence de données supplémentaires permettant de fournir davantage de précision sur la dépendance en contrainte de l'enthalpie d'activation du phénomène de doubles décrochements, ces ajustements sont les seuls à notre disposition pour pouvoir donner une forme aux lois de vitesse des dislocations dans la forstérite. Néanmoins le fait d'avoir déterminé une contrainte de Peierls plus importante pour les dislocations de vecteur de Burgers [100] que pour les dislocations de vecteur de Burgers [001] est en accord avec les résultats obtenus à l'échelle atomique (cf. chapitre 3).

La longueur critique l_c pour la nucléation d'un double décrochement, contenue dans le terme pré-exponentiel de la loi de vitesse, peut être déterminée à partir du volume d'activation V en posant $l_c = \sqrt{V/b^2}$. Ce volume d'activation est défini comme étant la dérivée partielle de l'énergie libre par rapport à la contrainte à température constante. Sans entropie, l'énergie libre est égale à l'enthalpie libre et il vient que:

$$V = - \left(\frac{\partial \Delta H(\tau)}{\partial \tau} \right)_T = l_c b^2 \quad (4-9)$$

Le volume d'activation et, de fait, l_c dépendent normalement de la contrainte, mais nous choisirons de les considérer comme des constantes en première approximation selon l'approche développée par Tang *et al.* (1998). Dans le chapitre 1, il a été montré que l'enthalpie d'activation dépendait de la contrainte. Le modèle du glissement par le mécanisme de doubles décrochements rend compte de cette dépendance et peut être déterminée grâce aux données issues d'essais mécaniques. Malheureusement la valeur de l'enthalpie d'activation ΔH_c non assistée par la contrainte n'est pas connue mais la Figure 1-8 montre qu'elle doit être comprise entre 5 et 7 eV. Elle peut néanmoins être approchée grâce à la relation (4-8), en estimant la constante C dont la valeur sera affinée plus tard avec la simulation pour reproduire les limites d'élasticité prévues par les expérimentations.

4.2.3.2 Calibrations pour la simulation

Des simulations en glissement simple, à vitesse de déformation constante de $10^{-5} s^{-1}$, ont été réalisées pour calibrer les lois de vitesse des dislocations de vecteur de Burgers [001] et celles de vecteur de Burgers [100]. En général, les dislocations "lentes" sont de caractère vis et les dislocations "rapides" sont mixtes ou coins, sauf pour le système de glissement (010)[100] pour lequel ce sont les dislocations coins les plus lentes. Dans la suite, pour faciliter la lecture, nous nous placerons toujours dans le cas des vis "lentes" en gardant à l'esprit que les raisonnements sont transposables au cas du système (010)[100] en inversant les termes "vis" et "coin".

La population de départ consiste essentiellement en des segments de dislocations de caractère coin épinglés à leurs extrémités (Figure 4-10-a). La densité de départ est d'environ $10^{10} m^{-2}$, qui représente la densité de dislocations typique de départ dans une forstérite synthétique (Phakey *et al.* (1972)). La longueur L des sources est déterminée de telle sorte que leur contrainte de Frank-Read $\tau_{FR} \approx \frac{\mu b}{L}$ soit inférieure à la limite d'élasticité prévue par l'expérience. Cette précaution est nécessaire pour que ce ne soit pas la contrainte de Frank-Read des sources coins qui contrôlent la limite d'élasticité mais la mobilité des dislocations vis. Lors d'un essai de déformation à vitesse constante par exemple, les dislocations de caractère non-vis sont mobiles (à des niveaux de contrainte plus faibles) avant les dislocations de caractère vis. Elles peuvent même parcourir de grandes distances et traverser tout le monocristal ou le grain, donnant lieu à un domaine de microdéformation. Ces dislocations laissent derrière elles de longs segments vis qui ne sont pas encore mobiles à la contrainte à laquelle les premières peuvent se déplacer (Figure 4-10-b). Pour qu'il y ait multiplication il faut que les longs segments vis soient rendus mobiles, ce qui est réalisé à la limite d'élasticité (Adda *et al.* (1991)).

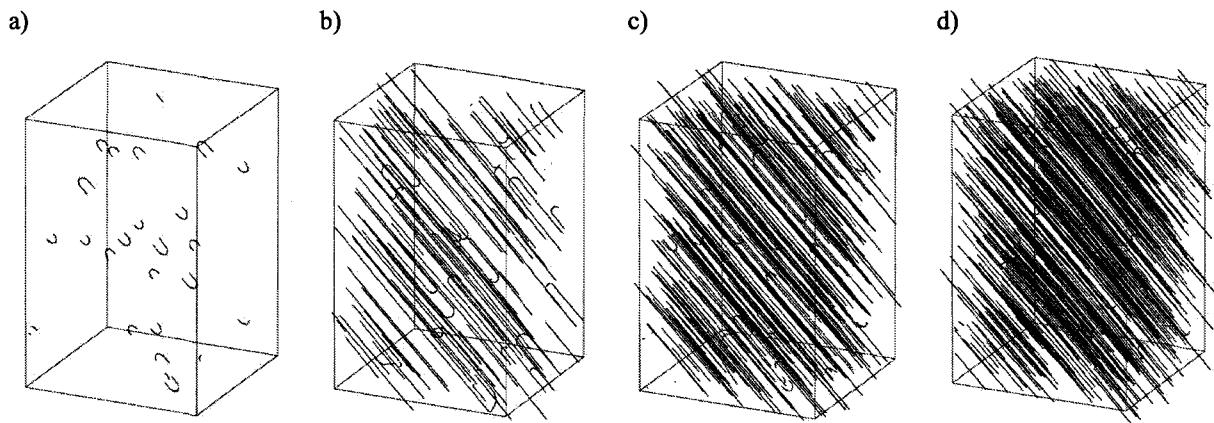


FIGURE 4-10

Différentes étapes d'une simulation en glissement simple, à 1027°C. Le système de glissement activé est (100)[001] et l'axe de sollicitation est selon [101]c. La microstructure finale (en d) consiste en de très longues et droites dislocations vis.

Les courbes de la contrainte, de l'évolution de la densité et de l'aire balayée par les dislocations en fonction de la déformation sont représentées sur la Figure 4-11. Différents stades qui correspondent aux instantanés de la microstructure simulée de la Figure 4-10 y sont repérés. Les sources coins activées à la déformation "0" produisent, à la déformation "1", des dislocations vis peu mobiles à une contrainte inférieure à la contrainte d'écoulement. Ces dernières, parce que leur mobilité et leur densité ne sont pas encore suffisantes, balaient une aire inférieure à celle des coins. A la déformation "2", les dislocations coins ont commencé à s'auto-annihiler après avoir parcouru la distance définie au paragraphe 4.1.3. La production de dislocations vis est moins rapide et il faut augmenter la contrainte pour rendre les dislocations vis plus mobiles et pour activer de nouveau les sources coins. L'aire balayée par les vis est maintenant supérieure à celle des coins. A la déformation "3", à la contrainte d'écoulement, la mobilité est suffisante pour que la vitesse de déformation imposée soit atteinte.

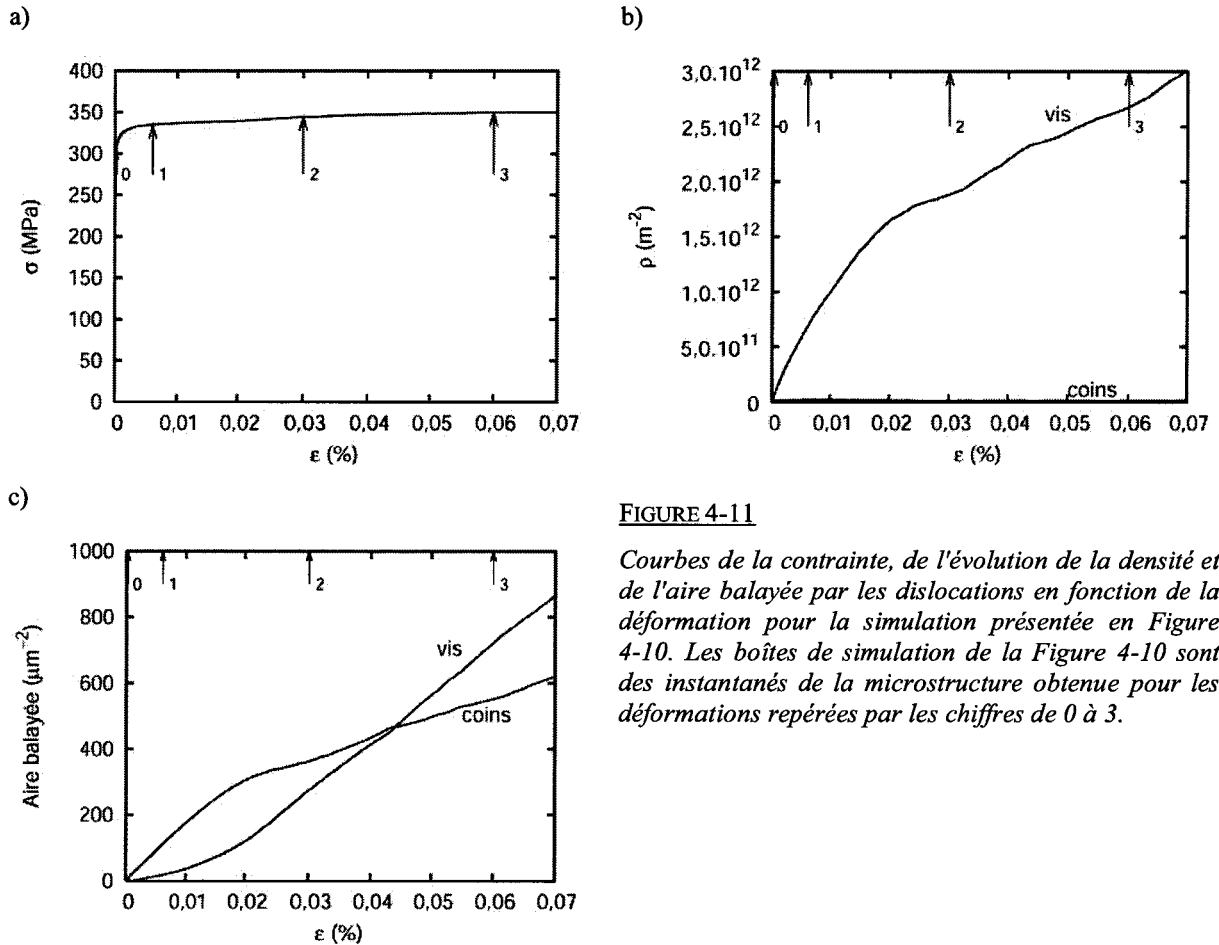


FIGURE 4-11

Courbes de la contrainte, de l'évolution de la densité et de l'aire balayée par les dislocations en fonction de la déformation pour la simulation présentée en Figure 4-10. Les boîtes de simulation de la Figure 4-10 sont des instantanés de la microstructure obtenue pour les déformations repérées par les chiffres de 0 à 3.

4.2.3.2.1 Influence du rapport K entre mobilité des vis et mobilité des non-vis

On affecte aux caractères non-vis une loi de vitesse dont la dépendance en contrainte est identique à celle des caractères vis. Pour reproduire la forme allongée suivant la direction vis des boucles de dislocation, on applique un facteur multiplicatif K à la mobilité des dislocations non-vis de telle sorte que leur mobilité soit K fois plus importante que celle qu'aurait une dislocation vis de longueur $10 \mu m$. Une valeur de K inférieure à 100 est insuffisante pour obtenir de longs segments vis droits et de courts segments courbes de caractère non-vis (Figure 4-12).

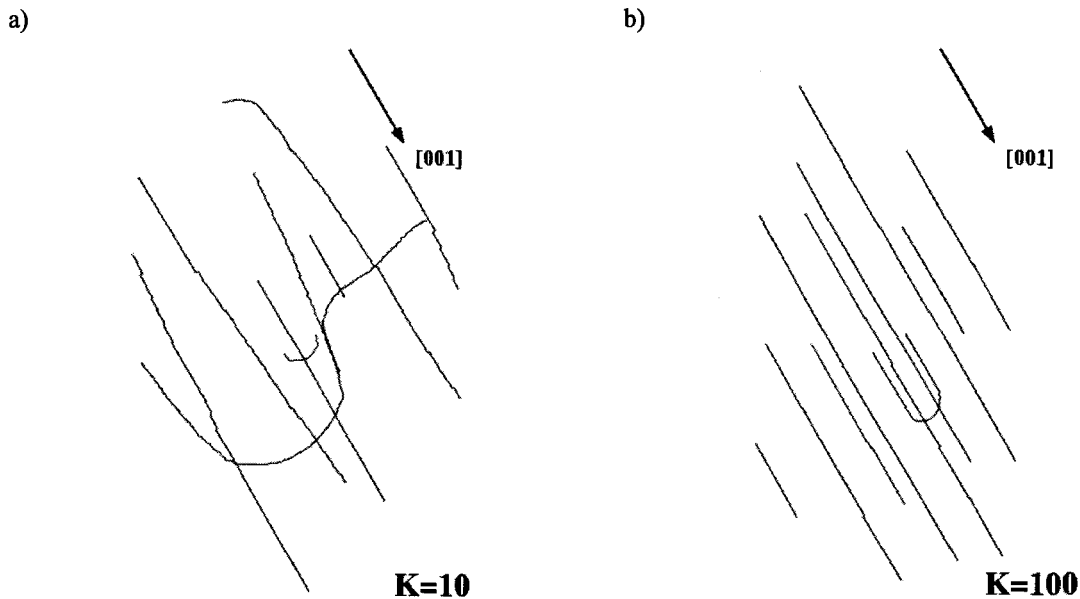


FIGURE 4-12

Influence de la valeur du rapport K entre la vitesse des dislocations coins et des dislocations vis. En (a) et (b), une source initiale de caractère coin du système de glissement $(100)[001]$ pour une valeur de K de 10 et 100 respectivement.

Comme l'ont déjà montré Monnet *et al.* (2004), la valeur de K influence fortement le domaine de microdéformation plastique comparé à son influence sur la contrainte d'écoulement. La Figure 4-13 montre les courbes contrainte-déformation simulées obtenues avec plusieurs valeurs de K différentes comprises entre 500 et 10000. Même si des valeurs de K de 500 et 1000 permettent de donner de longues et droites dislocations de caractère vis, elles surestiment la valeur de la contrainte d'écoulement. Le domaine de microdéformation causé par le déplacement des dislocations coins est inexistant pour de telles valeurs. A partir de $K=5000$, le domaine de microdéformation est présent et augmenter la valeur de K n'influence plus le niveau de la contrainte d'écoulement lorsque la vitesse de déformation imposée est atteinte. Néanmoins le domaine de microdéformation est d'autant plus étendu que K est important. La valeur de K ne doit pas être trop élevée pour que le pas de temps ne soit pas trop petit à cause de l'augmentation de la vitesse des dislocations de caractère non-vis. Un autre paramètre que nous n'avons pas testé et qui a des conséquences sur l'étendue du domaine de microdéformation est le libre parcours moyen λ des dislocations non-vis. De trop grandes valeurs de λ entraînent des domaines de microdéformation trop importants et de trop faibles valeurs ne permettent pas d'obtenir de longs et droits segments vis (Monnet *et al.* (2004)). Les libres parcours moyens de $34\mu\text{m}$ ou $41\mu\text{m}$ calculés dans le paragraphe 4.2.3 et une valeur de K de 5000 permettent d'obtenir un domaine de microdéformation d'étendue raisonnable et un pas de temps qui n'est pas trop petit.

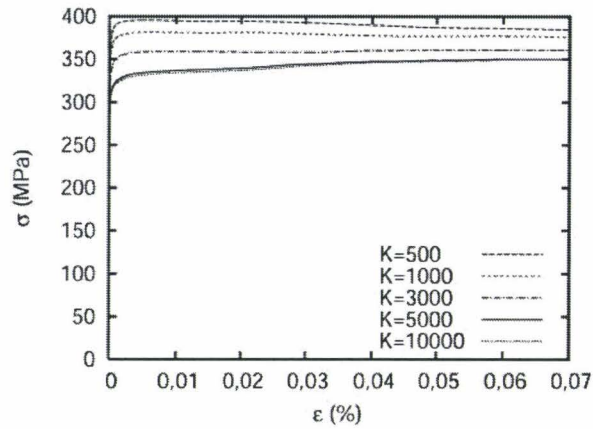


FIGURE 4-13

Influence du rapport K sur le domaine de microdéformation et la contrainte d'écoulement. Simulations réalisées à partir d'une population de sources coin du système $(100)[001]$ de densité $10^{10} m^{-2}$, à $1027^\circ C$ et à une vitesse de déformation de $10^{-5} s^{-1}$, avec un axe de sollicitation $[101]c$.

4.2.3.2 Détermination de la constante C et du préfacteur des lois de vitesse

Des simulations en glissement simple suivant $[101]c$ ont été réalisées entre $600^\circ C$ et $1250^\circ C$ en activant artificiellement soit le système de glissement $(100)[001]$ soit le système de glissement $(001)[100]$ pour ajuster la valeur de la constante C respectivement pour les glissements de vecteurs de Burgers $[001]$ et $[100]$. Nous avons vu dans le chapitre 1 qu'un axe de sollicitation $[101]c$ sollicite de la même manière (avec un facteur de Schmid maximal) ces deux systèmes de glissement. A basse température ($T < 1000^\circ C$), le glissement de vecteur de Burgers $[001]$ est majoritaire et son activité diminue à plus haute température ($T > 1000^\circ C$) au profit du glissement de vecteur de Burgers $[100]$. Les deux systèmes de glissement peuvent être activés ensemble mais, pour ajuster la constante C d'un type de glissement indépendamment de l'autre, nous avons artificiellement activé le premier sans le deuxième (et inversement).

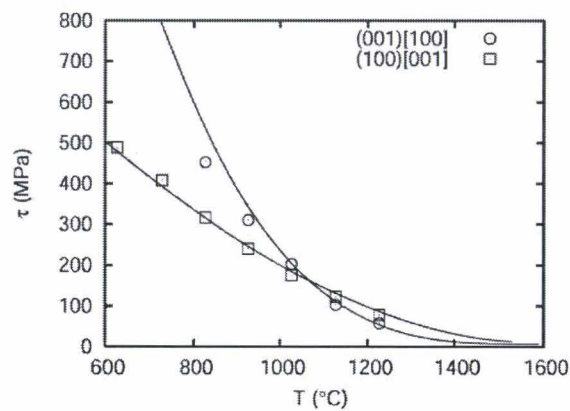


FIGURE 4-14

Comparaisons entre la contrainte critique projetée obtenue par la simulation et celle prédite par l'ajustement sur les données mécaniques pour les systèmes de glissement $(100)[001]$ et $(001)[100]$.

On trouve alors qu'une valeur de C d'environ 35 correspondant respectivement à des enthalpies d'activation de 5,4eV et 5,7eV pour les glissements de vecteur de Burgers [001] et [100] permettent de reproduire les contraintes d'écoulement prédites par l'ajustement sur les données expérimentales (Figure 4-14).

ΔH_c étant connue, nous avons déterminé les valeurs de l_c à partir du volume d'activation, considérées comme des constantes, en utilisant la relation (4-9). Puisqu'elle dépend normalement de la contrainte, nous avons choisi de les évaluer à une valeur de contrainte moyenne pour la forstérite de l'ordre de 150 MPa et nous trouvons $l_c = 1,95nm$ pour le glissement de vecteur de Burgers [001] (soit $l_c \approx 3b$) et $l_c = 1,22nm$ pour le glissement de vecteur de Burgers [100] (soit $l_c \approx 2b$). Les valeurs de v_0 qui correspondent à ces longueurs critiques sont de l'ordre de 2750 et 1650 m/s respectivement pour les glissements de vecteurs de Burgers [001] et [100].

4.2.3.2.3 Discussion sur les lois de vitesse des dislocations de vecteurs de Burgers [100] et [001]

La vitesse des dislocations dépend fortement de la contrainte. La Figure 4-15-a montre que la mobilité des dislocations vis de vecteurs de Burgers [001] et [100] ont des dépendances différentes en fonction de ce paramètre. Les dislocations vis de vecteur de Burgers [100] sont plus mobiles à basse contrainte, alors que les dislocations vis de vecteur de Burgers [001] le sont davantage à contrainte plus importante. Avoir déterminé de telles lois de vitesse est cohérent avec les observations expérimentales qui proposent un régime de basses contraintes et faibles vitesses de déformation dominé par le glissement de dislocations de vecteur de Burgers [100] et un régime de fortes contraintes et hautes vitesses de déformation régi par le glissement de dislocations de vecteur de Burgers [001]. D'ailleurs il est plus vrai de justifier la transition du glissement [100] au glissement [001] en termes de contrainte plutôt qu'en termes de température car, comme le montre la Figure 4-15-b, la valeur de la contrainte à la transition est indépendante de la température.

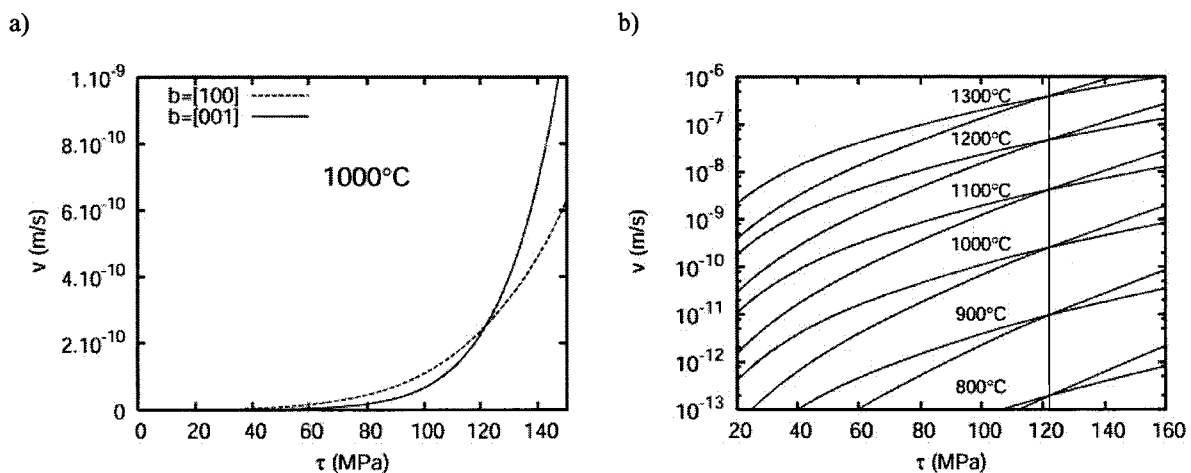


FIGURE 4-15

Vitesse en fonction de la contrainte projetée des dislocations vis de vecteurs de Burgers [100] et [001], de longueur $10\mu\text{m}$, à 1000°C (a). Le graphique en (b) permet de montrer que la contrainte de transition entre le glissement de vecteur de Burgers [100] et [001] est insensible à la température.

Pour calibrer les lois de vitesse, nous avons réalisé des simulations en glissement simple. Mais pour la plupart des orientations, le monocristal se déforme par activation de plusieurs systèmes de glissement. Parmi les

différents axes de sollicitation utilisés expérimentalement, l'orientation $[101]_c$ est celle qui sollicite le plus de systèmes de glissement différents: $(100)[001]$, $(001)[100]$, $\{110\}[001]$ et $\{011\}[100]$. L'axe $[111]_c$ permet d'activer davantage de systèmes de glissement encore, mais, expérimentalement, il n'a été utilisé qu'à des températures élevées ($> 1400^\circ\text{C}$) qui se situent hors du champ d'utilisation de la simulation. C'est la raison pour laquelle les simulations que nous avons entreprises ont été réalisées suivant $[101]_c$.

4.3 Glissement multiple pour une sollicitation suivant $[101]_c$

4.3.1 Influence de la température

Trois simulations ont été réalisées, suivant $[101]_c$, entre 927°C et 1127°C pour étudier l'effet de la température sur la déformation du monocristal. Plus précisément, l'axe $[101]_c$, sollicitant de la même manière le glissement des dislocations de vecteur de Burgers $[100]$ et celui des dislocations de vecteur de Burgers $[001]$, permet de regarder comment ces deux types de glissement s'activent avec la température.

Tous les systèmes de glissement sont peuplés d'une même densité initiale de dislocations coins (environ $0,5 \cdot 10^{10} \text{m}^{-2}$) et la vitesse de déformation est fixée à 10^{-5}s^{-1} . Les courbes de contrainte et de l'évolution des densités de dislocations en fonction de la déformation sont présentées respectivement sur les Figure 4-16 et Figure 4-17.

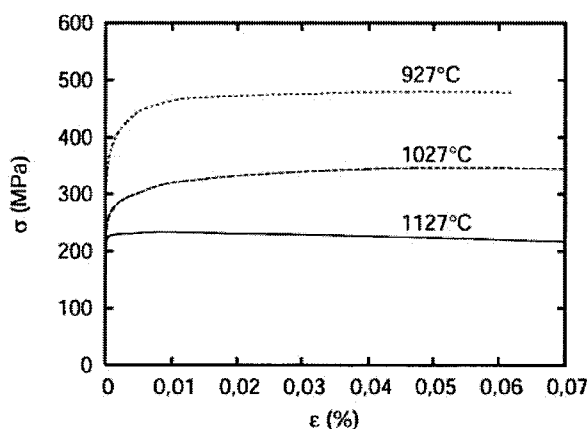


FIGURE 4-16

Courbes contrainte-déformation obtenues à partir de simulations à vitesse de déformation constante de 10^{-5}s^{-1} , à 927°C et 1127°C , suivant $[101]_c$.

Tout d'abord, la contrainte d'écoulement atteinte est d'autant plus importante que la température est basse (Figure 4-16). Ensuite, si l'on s'intéresse à l'évolution des densités de dislocations dans les différents systèmes de glissement (Figure 4-17), on constate qu'à 1127°C , le glissement de dislocations de vecteur de Burgers $[001]$ n'est pas activé alors qu'à 927°C il participe à la déformation du monocristal. A 1027°C , les systèmes de glissement de vecteurs de Burgers $[100]$ et $[001]$ se densifient tous, avec des degrés différents selon leur facteur de Schmid suivant l'axe de sollicitation $[101]_c$ (les plus sollicités étant $(100)[001]$ et $(001)[100]$). Ce résultat est

la conséquence de la forme des lois de vitesse des dislocations que nous avons adoptées et calibrées dans le paragraphe précédent.

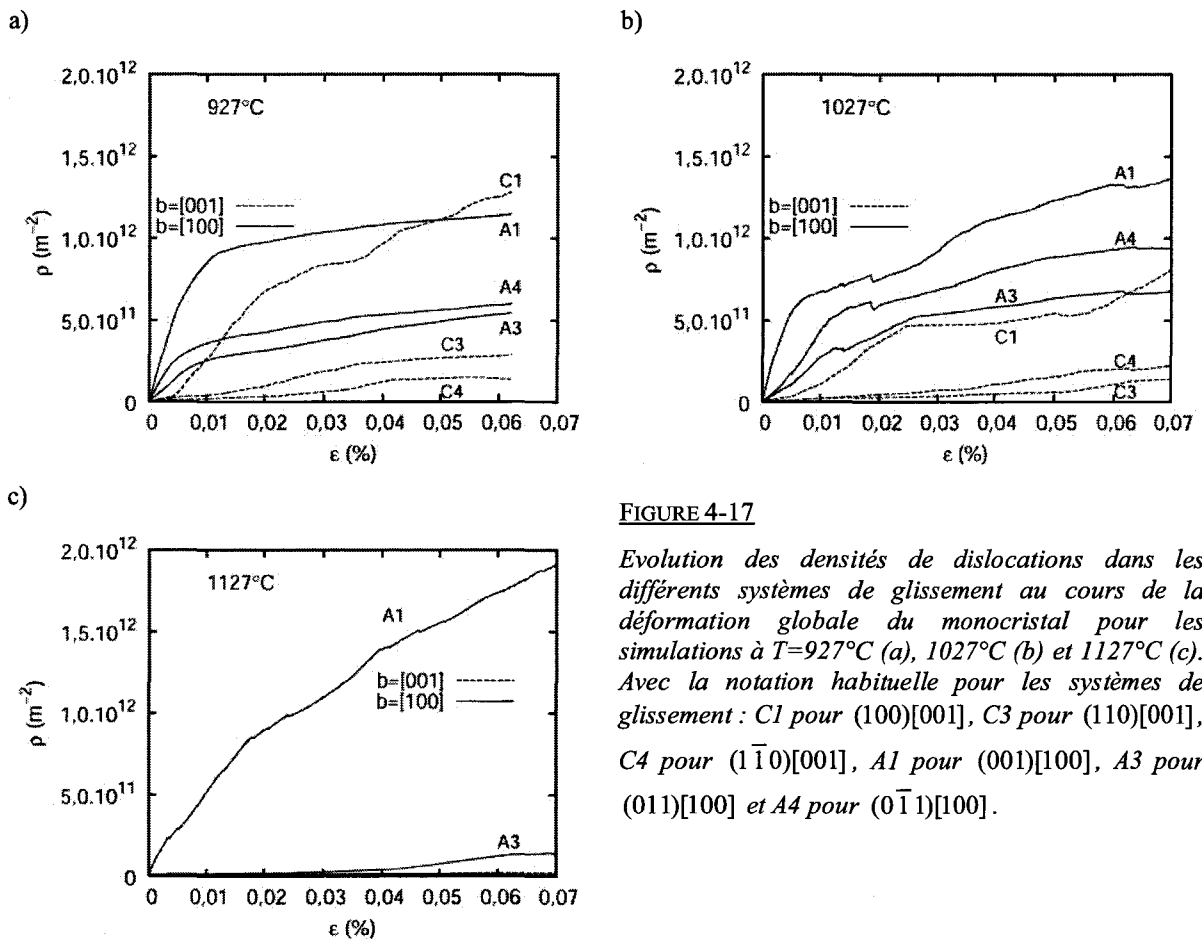


FIGURE 4-17

Evolution des densités de dislocations dans les différents systèmes de glissement au cours de la déformation globale du monocristal pour les simulations à $T=927^\circ\text{C}$ (a), 1027°C (b) et 1127°C (c). Avec la notation habituelle pour les systèmes de glissement : C1 pour (100)[001], C3 pour (110)[001], C4 pour $(1\bar{1}0)[001]$, A1 pour (001)[100], A3 pour (011)[100] et A4 pour $(0\bar{1}1)[100]$.

A 1127°C , après que la limite d'élasticité a été atteinte, les dislocations coins très mobiles ont laissé derrière elles de longues dislocations vis qui sont mobiles elles aussi à cette température. La vitesse de déformation est dépassée et la contrainte doit diminuer pour ralentir les dislocations.

A 927°C , les dislocations vis de vecteur de Burgers [100] sont moins mobiles à la contrainte d'écoulement que les dislocations de vecteur de Burgers [001] qui participent majoritairement à la déformation du monocristal. En réalité au cours de la simulation à cette température, les dislocations coins de vecteur de Burgers [100] sont mobiles avant les dislocations coins de vecteur de Burgers [001], à des contraintes inférieures à la contrainte d'écoulement, et contribuent à l'apparition d'un domaine de déformation préplastique. Une fois que les dislocations coins ont parcouru leur libre parcours moyen de $41\mu\text{m}$, elles s'auto-annihilent et laissent derrière elles de longs dipôles de dislocations vis peu mobiles. La multiplication des dislocations de vecteur de Burgers [100] ne peut s'opérer que si les dislocations vis deviennent mobiles. Ce n'est pas le cas et la densité de ces dislocations stagne ou augmente peu. Le système de glissement (001)[100] se densifie alors avant (100)[001] mais il se peuple de dislocations vis peu mobiles participant peu à la déformation. Pour atteindre la vitesse de déformation de 10^{-5}s^{-1} , il faut alors multiplier les dislocations vis de vecteur de Burgers [001] qui sont plus mobiles à cette température.

Ces résultats sont cohérents avec les résultats expérimentaux qui montraient que la forstérite se déformait par activation des systèmes de vecteur de Burgers [001] à basse température ($T < 1000^\circ\text{C}$) et par activation des systèmes de vecteur de Burgers [100] à plus haute température ($T > 1000^\circ\text{C}$).

A 1027°C , les deux types de dislocation ont des mobilités proches et sont activés en même temps. Cette température est intéressante car elle permet d'avoir en présence des systèmes de glissement de vecteurs de Burgers différents avec des densités de dislocations comparables et d'étudier ainsi les interactions qui existent entre eux. Nous ne décrivons pas en détail cette simulation car elle fait en partie l'objet du paragraphe suivant.

4.3.2 Influence de la vitesse de déformation

L'influence de la vitesse de déformation a été testée à 1027°C suivant l'orientation [101]c. Au départ de la simulation, tous les systèmes de glissement sont peuplés de manière équivalente de dislocations de caractère coin (environ $0,5 \cdot 10^{10} \text{m}^{-2}$ dans chaque système). Les vitesses de déformation appliquées sont 10^{-5}s^{-1} et 10^{-4}s^{-1} et les simulations ont été arrêtées peu après que la vitesse de déformation imposée a été atteinte. Les courbes contrainte-déformation correspondantes sont représentées sur la Figure 4-18.

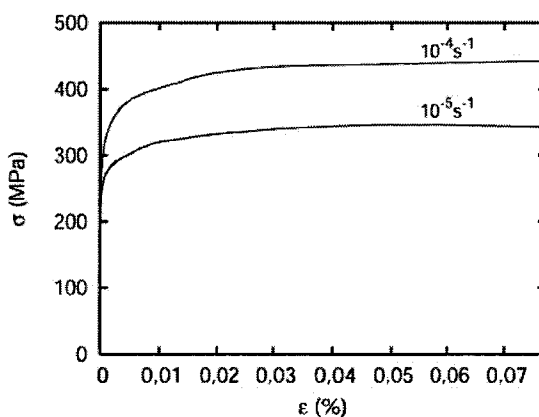


FIGURE 4-18

Courbes contrainte-déformation obtenues à partir de simulations à vitesses de déformation constantes de 10^{-5}s^{-1} et 10^{-4}s^{-1} , à 1027°C , suivant [101]c.

Comme attendu, la contrainte d'écoulement est d'autant plus importante que la vitesse de déformation imposée est grande. D'ailleurs cette augmentation est le résultat de la dépendance des lois de vitesse avec la contrainte. On peut d'ailleurs vérifier que le volume d'activation, déterminé à partir de ces simulations à deux vitesses de déformation différentes, est le même que celui prévu par la dépendance de l'enthalpie d'activation avec la contrainte. A partir de la relation $V = kT \left(\frac{\Delta \ln \dot{\gamma}}{\Delta \tau} \right)_T$, on trouve que le volume d'activation vaut 825\AA^3 en accord avec les paramètres d'entrée de la simulation pour le glissement de vecteur de Burgers [001] (Figure 4-19). Ceci montre que c'est le glissement de dislocations vis de vecteur de Burgers [001] qui contrôle la déformation du monocristal à cette température.

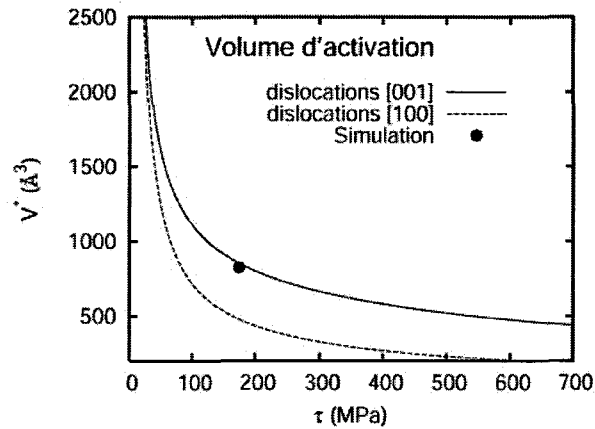


FIGURE 4-19

Volumes d'activation pour les dislocations de vecteurs de Burgers [100] et [001] déterminés avec $V = -\left(\frac{\partial \Delta H(\tau)}{\partial \tau}\right)_T$ à partir des formes des enthalpies d'activation. Le cercle plein est le volume d'activation qui a été obtenu à partir de deux simulations à deux vitesses de déformation différentes, à 1027°C.

La Figure 4-20 propose de suivre l'évolution de la densité des dislocations dans les différents systèmes de glissement. Tous les systèmes de glissement sollicités par l'axe de sollicitation [101]c se densifient au cours de la déformation avec une vitesse plus ou moins importante selon la dépendance en contrainte des lois de vitesse, la vitesse de déformation, le libre parcours moyen des dislocations coins et le facteur de Schmid.

Quelle que soit la valeur de la vitesse de déformation, ce sont les systèmes de glissement les plus sollicités qui se densifient le plus: A1 parmi les systèmes de glissement de vecteur de Burgers [100] et C1 parmi ceux de vecteur de Burgers [001]. Un premier stade de déformation (microdéformation) se caractérise par une augmentation rapide de la densité dans les systèmes A et une augmentation plus lente dans les systèmes C. Ceci s'explique par le fait que la mobilité des dislocations [100] est supérieure à celle des dislocations [001] aux basses contraintes ($\tau < 120 \text{ MPa}$). Ainsi, avant que la contrainte d'écoulement soit atteinte, les dislocations coins [100] sont mobiles avant les dislocations coins [001], en laissant derrière elles de plus longues dislocations vis ($41 \mu\text{m}$) que les dislocations [001] ($34 \mu\text{m}$) avant de s'auto-annihiler et contribuent alors à une augmentation de la densité de vis plus rapide.

A une vitesse de déformation de 10^{-5} s^{-1} , la densité de dislocations dans les systèmes C est inférieure à celle dans les systèmes A. Néanmoins lorsque la contrainte d'écoulement est atteinte, les dislocations de vecteur de Burgers [001] sont plus mobiles que les [100] et, même à densité plus faible, elles contribuent davantage à la déformation ($\gamma = f(\epsilon)$ sur la Figure 4-20). A 10^{-4} s^{-1} , les dislocations [001] sont encore plus mobiles que les dislocations [100] car la contrainte nécessaire pour déformer à la vitesse imposée est encore plus importante et la mobilité des dislocations vis de vecteur de Burgers [001] augmente plus rapidement avec la contrainte que celles des dislocations vis de vecteur de Burgers [100]. Les systèmes C se densifient plus rapidement et les dislocations [001] participent majoritairement à la déformation.

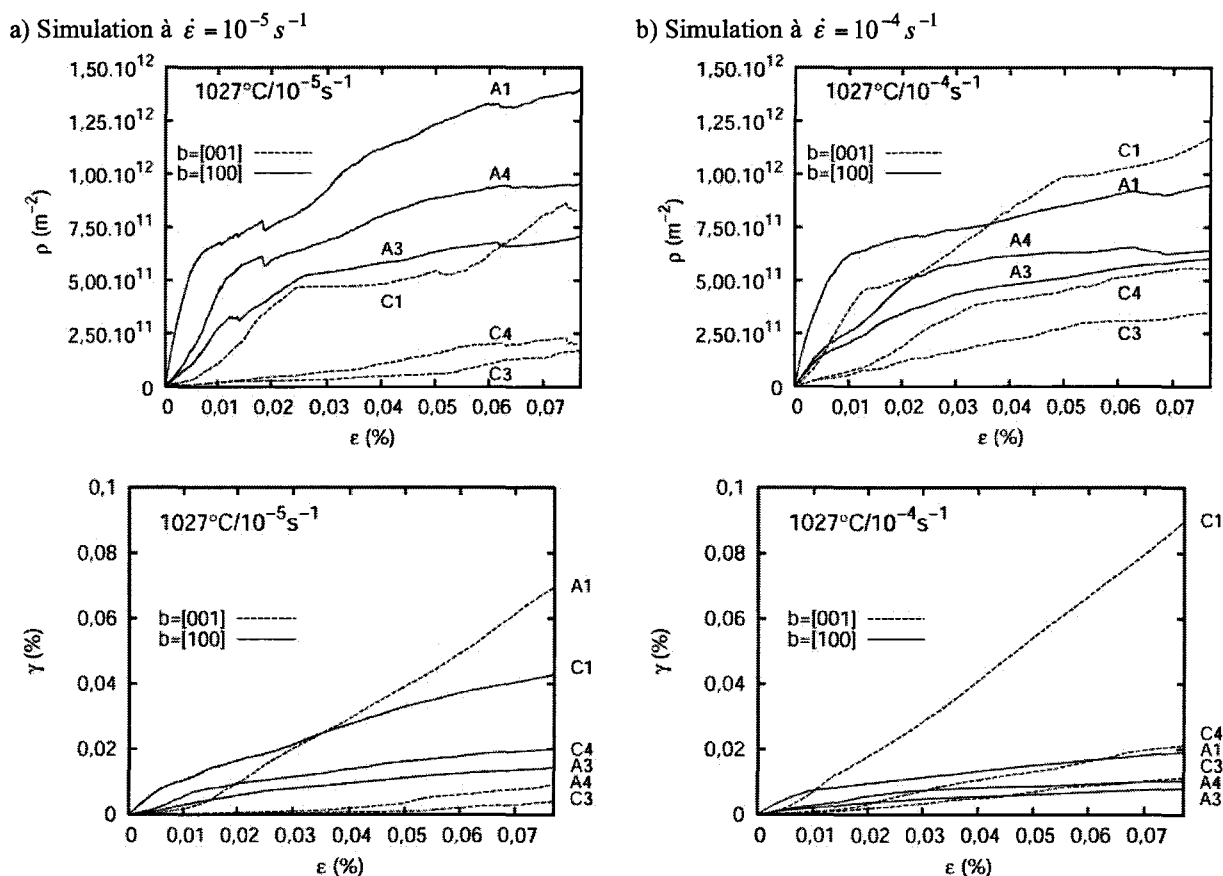


FIGURE 4-20

Evolution des densités de dislocations et du cisaillement plastique dans les différents systèmes de glissement au cours de la déformation globale du monocristal pour les simulations à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} s^{-1}$ (a) et $\dot{\epsilon} = 10^{-4} s^{-1}$ (b). Avec la notation habituelle pour les systèmes de glissement : C1 pour $(100)[001]$, C3 pour $(110)[001]$, C4 pour $(\bar{1}\bar{1}0)[001]$, A1 pour $(001)[100]$, A3 pour $(011)[100]$ et A4 pour $(0\bar{1}1)[100]$.

A cette température, des systèmes de glissement sécants sont activés simultanément et les dislocations qui y glissent se croisent et peuvent interagir. Par analogie avec les structures CFC, de l'écroutissage sur la courbe contrainte-déformation est attendu. Au lieu de cela, un phénomène d'adoucissement sur la courbe à $10^{-5} s^{-1}$, correspondant à une multiplication continue des dislocations vis et une absence de stockage, est observé. Les microstructures obtenues lors de ces simulations (Figure 4-21) montrent qu'il n'existe pas ou peu d'interaction entre les différents systèmes de glissement. Ces dernières consistent en des dislocations de caractère vis de vecteurs de Burgers $[100]$ et $[001]$. Sur la lame mince de la Figure 4-21-b, aucune dislocation coin (plus précisément non-vis) n'est observée, laissant supposer une absence d'interaction forte qui entraverait leur déplacement. Les dislocations vis demeurent très droites, avec par endroit de petits décrochements sur la ligne correspondant à une interaction répulsive ou attractive mais pas à la formation de jonction. Ces décrochements "cassent" la longueur des dislocations vis et, puisque la mobilité en dépend, cela pourrait avoir un effet durcissant. Néanmoins ces dernières se libèrent facilement à la contrainte d'écoulement qui permet de déformer le monocristal à la vitesse de déformation imposée à $1027^\circ C$ et l'effet est très temporaire. Ainsi la forêt de

dislocations de vecteur de Burgers $[100]$ ne constitue un obstacle ni à la production de dislocations vis de vecteur de Burgers $[001]$ (due au glissement des dislocations non-vis), ni à leur mobilité.

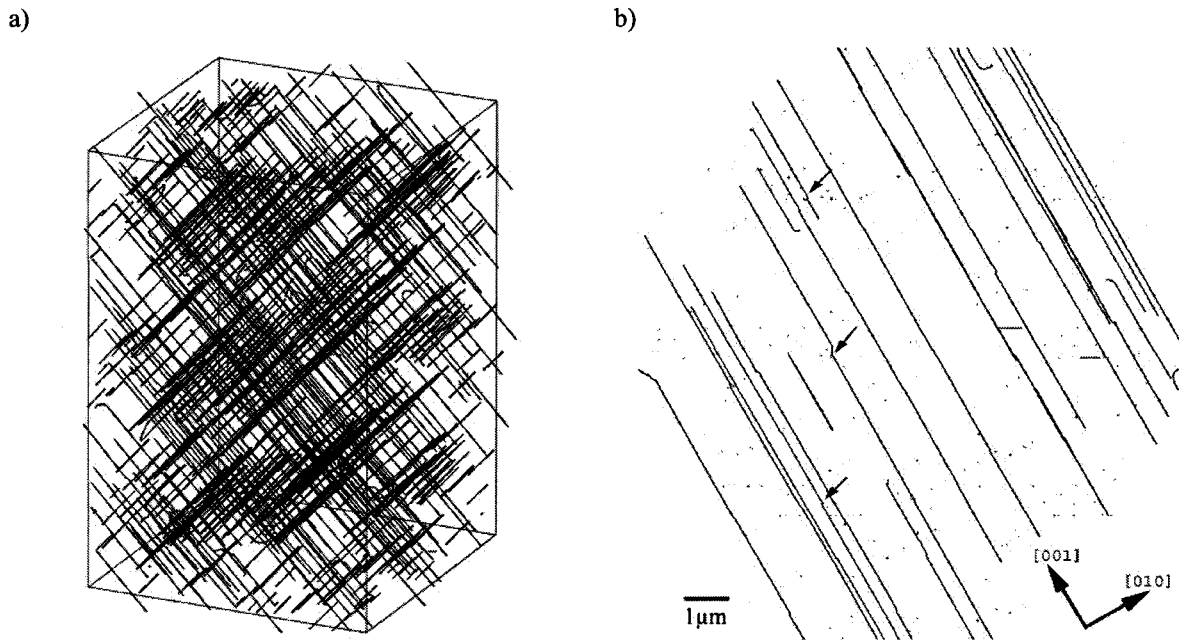


FIGURE 4-21

a) Microstructure simulée lors d'un essai de déformation numérique suivant $[101]_c$, à 1027°C , à $\dot{\epsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ et pour $\epsilon = 0.07\%$. Les systèmes sollicités sont $(100)[001]$ (C1), $(001)[100]$ (A1), $\{110\}[001]$ (C3 et C4) et $\{011\}[100]$ (A3 et A4).

b) Lamelle mince de $1 \mu\text{m}$ d'épaisseur extraite de la boîte de simulation. Le plan de la lamelle est le plan (100). Les points correspondent aux dislocations vis de vecteur de Burgers $[100]$ vues de bout. Les lignes de dislocations droites sont les dislocations vis de vecteur de Burgers $[001]$. Les flèches désignent des décrochements sur les lignes de dislocations vis $[001]$ dus aux interactions avec les dislocations vis $[100]$ de la forêt.

On remarque également que des systèmes de même vecteur de Burgers (A1, A3 et A4 ou C1, C3 et C4) se densifient et que les dislocations qui y glissent peuvent interagir et s'annihiler suivant leur direction vis. Ces interactions dites "colinéaires" que nous étudierons plus en détail dans le paragraphe suivant semblent participer fortement au durcissement de la forêt dans les structures cubiques à faces centrées (Madec *et al.* (2003b)). Néanmoins elles sont très rares dans les simulations en glissement multiple que nous avons réalisées.

Pour en comprendre davantage sur les interactions entre les différents systèmes de glissement, le paragraphe 4.4 propose de les étudier spécifiquement.

4.4 Intersections entre systèmes de glissement

4.4.1 Les différents types d'intersection entre dislocations dans la forstérite

Lorsque deux dislocations $[100]$ et $[001]$ glissant dans des plans sécants se rencontrent, elles peuvent former une jonction de vecteur de Burgers $\{101\}$ dont la direction de ligne est l'intersection des deux plans de glissement (Figure 4-22-a). Il est difficile de discuter du caractère glissile ou sessile des jonctions qui peuvent se former. Néanmoins on peut aborder le problème d'un point de vue géométrique en proposant un plan de glissement potentiel qui contient la ligne et le vecteur de Burgers de la jonction. Si le plan de glissement correspond à un plan dense (soit un plan d'un des systèmes de glissement considérés) la jonction sera glissile, sinon elle sera sessile.

Deux dislocations de même vecteur de Burgers ($[100]$ ou $[001]$) appartenant à des plans de glissement différents s'annihilent lorsque la configuration est attractive. L'axe d'annihilation est l'intersection des deux plans de glissement qui est aussi la direction vis des deux dislocations qui réagissent. On parle d'annihilation colinéaire (Figure 4-22-b). Ce type de réaction est tout à fait comparable à la formation d'une jonction de vecteur de Burgers nul qui laisserait deux paires de bras de dislocation interconnectés par un nœud double ne pouvant se déplacer que suivant l'intersection des deux plans de glissement.

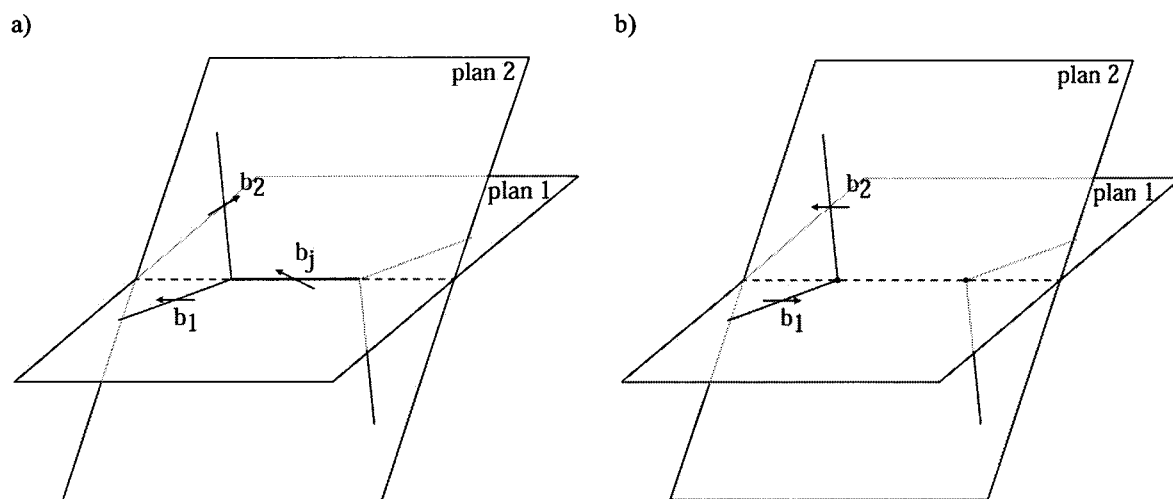


FIGURE 4-22

Deux dislocations qui se croisent peuvent potentiellement former une jonction à l'intersection des deux plans de glissement si les deux vecteurs de Burgers sont différents (a) ou s'annihilent et laisser deux paires de bras interconnectés en un nœud qui ne peut se déplacer que sur l'intersection des deux plans lorsque les deux vecteurs de Burgers sont identiques et la configuration attractive (b).

Le Tableau 4-5 récapitule les différentes réactions qui peuvent exister entre les dislocations des différents systèmes de glissement. Le caractère sessile ou glissile des jonctions ainsi que leur direction de ligne \vec{l}_j y est reporté. Les deux systèmes A2 et C2 sont coplanaires et deux dislocations de ces deux systèmes peuvent former une jonction qui sera forcément glissile. Les interactions entre un système de glissement C avec A2 et entre un

système de glissement A avec C2 donnent toutes des configurations de jonction qui sont glissiles. Toutes les autres combinaisons entre systèmes de glissement de vecteurs de Burgers différents entraînent potentiellement la formation d'une jonction qui sera sessile.

C1 (100)[001]	C2 (010)[001]	C3 (110)[001]	C4 (1 $\bar{1}$ 0)[001]	A1 (001)[100]	A2 (010)[100]	A3 (011)[100]	A4 (0 $\bar{1}$ 1)[100]	
	AC	AC	AC	J / sessile $\vec{l}_j = [010]$	J / glissile $\vec{l}_j = [001]$	J / sessile $\vec{l}_j = [01\bar{1}]$	J / sessile $\vec{l}_j = [011]$	C1 (100)[001]
		AC	AC	J / glissile $\vec{l}_j = [100]$	J coplanaire	J / glissile $\vec{l}_j = [100]$	J / glissile $\vec{l}_j = [100]$	C2 (010)[001]
			AC	J / sessile $\vec{l}_j = [1\bar{1}0]$	J / glissile $\vec{l}_j = [001]$	J / sessile $\vec{l}_j = [1\bar{1}1]$	J / sessile $\vec{l}_j = [\bar{1}11]$	C3 (110)[001]
				J / sessile $\vec{l}_j = [110]$	J / glissile $\vec{l}_j = [001]$	J / sessile $\vec{l}_j = [11\bar{1}]$	J / sessile $\vec{l}_j = [111]$	C4 (1 $\bar{1}$ 0)[001]
				AC	AC	AC		A1 (001)[100]
					AC	AC		A2 (010)[100]
						AC		A3 (011)[100]
							AC	A4 (0 $\bar{1}$ 1)[100]

TABLEAU 4-5

Types de réaction entre dislocations des différents systèmes: AC pour annihilation colinéaire et J pour jonction.

4.4.2 Simulation des intersections entre dislocations

4.4.2.1 Calcul élastique des interactions entre dislocations

Un traitement simplifié, permettant d'étudier les conditions de formation d'une jonction, a été proposé par Wickham *et al.* (1999) et appliqué à plusieurs structures différentes (Madec *et al.* (2002a); Kubin *et al.* (2003); Monnet *et al.* (2004); Carrez *et al.* (2005)).

Pour qu'une jonction se forme, deux conditions doivent être satisfaites. Tout d'abord, la configuration formée par les deux dislocations qui se rencontrent (Figure 4-23-a) doit être attractive. Dans le cas contraire, les deux dislocations se repousseront et pourront se rapprocher, écartant toute chance de formation de jonction. Cette première condition étant remplie, la jonction se formera si l'énergie est minimisée par la nouvelle configuration (Figure 4-23-b). Un bilan d'énergie élastique peut alors être appliqué pour étudier la formation des jonctions. C'est ce qu'exprime de manière très simplifiée le critère de Franck en proposant que la formation de la jonction est favorable lorsque l'inégalité $b_j^2 < b_1^2 + b_2^2$ est vérifiée: ($E_i \propto b_i^2$ en élasticité isotrope). Ce critère ne permet néanmoins pas de tenir compte de l'orientation des lignes de dislocation et de la dépendance de leur énergie élastique avec le caractère. Mieux vaut alors adopter la forme suivante pour l'énergie de ligne:

$$E_i = \frac{\mu b_i^2}{4\pi(1-\nu)} f(\beta_i) \quad (4-10)$$

avec

$$f(\beta_i) = (1 - \nu \cos^2 \beta_i) \quad (4-11)$$

où μ et ν sont respectivement le module de cisaillement et le module de Poisson en élasticité isotrope, β_i le caractère et b_i le vecteur de Burgers de la dislocation i (pour $i = 1, 2$ ou j).

Une approche parfaitement équivalente consiste à considérer l'équilibre des tensions de ligne aux nœuds triples plutôt qu'un bilan d'énergie (Madec *et al.* (2002a)). En réalité, on n'étudie uniquement cet équilibre pour un des deux nœuds car la configuration est inchangée par rotation conjointe des lignes de $(\phi_1 = \pm\pi, \phi_2 = \pm\pi)$ (Figure 4-23-b).

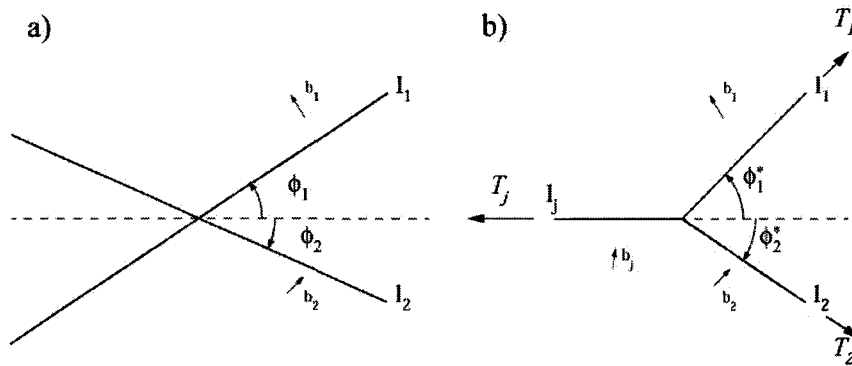


FIGURE 4-23

Un nœud quadruple (a) formé par l'intersection de deux lignes de dislocation peut évoluer en deux nœuds triples (b) lorsque la jonction se forme.

Puisque le nœud triple ne peut se déplacer que suivant la direction de la ligne de jonction, il suffit de projeter les tensions de ligne suivant cette direction pour obtenir la condition d'équilibre:

$$T_j = T_1 \cos(\phi_1^*) + T_2 \cos(\phi_2^*) \quad (4-12)$$

avec

$$T_i = \frac{dE_i}{l_i} = \frac{\mu b_i^2}{4\pi(1-\nu)} [f(\beta_i) - \tan(\phi_i^*) f'(\beta_i)] \text{ avec } i = 1, 2 \quad (4-13)$$

$$T_j = \frac{dE_j}{l_j} = \frac{\mu b_j^2}{4\pi(1-\nu)} f(\beta_j)$$

L'équation (4-13) (et donc l'équation (4-12)) peut être exprimée uniquement en fonction de ϕ_1^* et de ϕ_2^* en posant: $\beta_i = \phi_i^* + \theta_i$ avec $i = 1, 2$ (Figure 4-24).

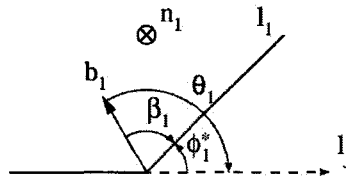


FIGURE 4-24

Repérages des différents angles intervenant dans le calcul de la formation des lobes de jonction.

La condition d'équilibre devient alors:

$$\sum_{i=1,2} b_i^2 [f(\theta_i + \phi_i^*) \cos(\phi_i^*) - f'(\theta_i + \phi_i^*) \sin(\phi_i^*)] - b_j^2 f(\theta_j + \phi_j^*) = 0 \quad (4-14)$$

Elle définit la frontière délimitant le domaine des couples (ϕ_1, ϕ_2) où la formation d'une jonction est favorable de celui où elle ne l'est pas. Cette frontière représente toujours un lobe sur un graphique (ϕ_1, ϕ_2) . Pour que ce modèle élastique de la formation des jonctions soit complet, il faut savoir localiser, en fonction de ϕ_1 et ϕ_2 , les régions où la configuration est répulsive et celles où elle est attractive. Un calcul proposé par Kroupa (1961) permet de connaître la force d'interaction entre deux dislocations supposées rigides et infinies, de directions de ligne $\vec{\xi}_1$ et $\vec{\xi}_2$:

$$\vec{F}_{12} = \frac{\mu}{|\vec{\xi}_1 \times \vec{\xi}_2|} \frac{\vec{R}_{12}}{R_{12}} \left\{ \frac{1}{2} (\vec{b}_1 \cdot \vec{\xi}_1) (\vec{b}_2 \cdot \vec{\xi}_2) - (\vec{b}_1 \times \vec{b}_2) \cdot (\vec{\xi}_1 \times \vec{\xi}_2) + \frac{1}{1-\nu} \left[(\vec{b}_1 \times \vec{\xi}_1) \cdot \frac{\vec{R}_{12}}{R_{12}} \right] \left[(\vec{b}_2 \times \vec{\xi}_2) \cdot \frac{\vec{R}_{12}}{R_{12}} \right] \right\} \quad (4-15)$$

où \vec{R}_{12} est le plus court vecteur séparant les deux lignes de dislocation.

Les frontières entre domaines répulsifs (en niveaux de gris selon la force de répulsion) et domaines attractifs (en blanc) définies par $|\vec{F}_{12}| = 0$ peuvent être tracées sur le même graphique (ϕ_1, ϕ_2) que les lobes de jonction et donner de ce fait un modèle relativement précis de la formation des jonctions. La Figure 4-25 montre que l'intersection entre une dislocation du système (110)[001] (C3) et du système de glissement (011)[100] (A3) peut être à l'origine de la formation d'une jonction lorsque les deux lignes de dislocation font des angles ϕ_1 et ϕ_2 avec la direction de jonction $[1\bar{1}1]$ inférieurs à 30° (pour des couples (ϕ_1, ϕ_2) contenus dans le lobe et dans les domaines attractifs). Ces cartographies sont périodiques de périodes $(\phi_1 = \pm\pi, \phi_2 = \pm\pi)$ pour les raisons de symétrie invoquées précédemment.

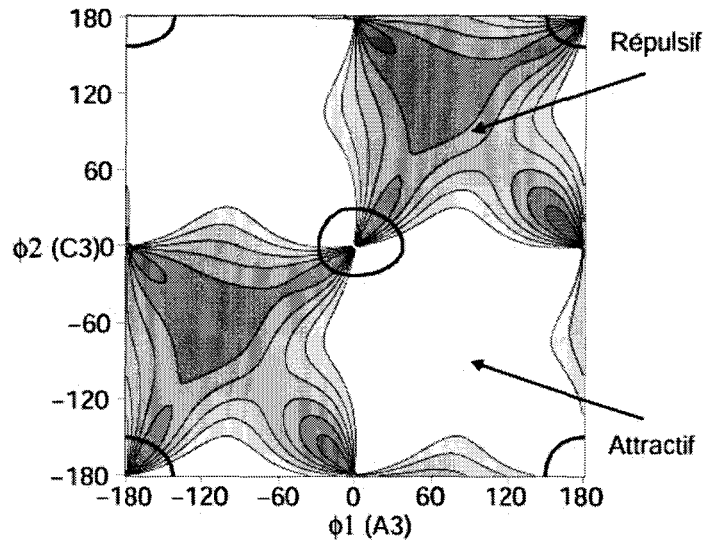


FIGURE 4-25

Exemple d'une cartographie de jonction pour la réaction entre les systèmes $(110)[001]$ (C3) et $(011)[100]$ (A3). Les forces de répulsion sont d'autant plus fortes que les domaines sont foncés. Dans les domaines blancs, les forces sont attractives. L'intérieur du lobe (trait gras), dont les limites sont définies grâce à la relation d'équilibre aux nœuds triples (4-14), correspond aux couples (ϕ_1, ϕ_2) pour lesquels la formation d'une jonction est possible.

On peut, de la même façon, construire les cartographies d'annihilation. Deux dislocations de même vecteur de Burgers s'annihilent à l'intersection des deux plans de glissement si la configuration est attractive. Cela constitue l'unique condition et les frontières entre domaines répulsifs et domaines attractifs sont déterminées grâce à l'équation (4-15). Les frontières construites à partir de la condition d'équilibre des tensions de ligne aux nœuds triples peuvent être ajoutées à ces cartographies. Dans le cas particulier de l'annihilation colinéaire, il s'agit plutôt d'un équilibre des tensions de lignes à un nœud double (puisqu'il n'y a pas formation d'une jonction à l'intersection des deux plans de glissement mais annihilation donc une absence de dislocation). Le long de ces lignes, les projections des tensions de ligne des deux dislocations avant réaction s'équilibrent parfaitement le long de la direction d'annihilation et les conditions d'annihilation y sont alors extrêmement ténues. La Figure 4-26 représente la cartographie d'annihilation obtenue pour deux dislocations appartenant aux systèmes $(011)[100]$ (A3) et $(\bar{0}\bar{1}1)[100]$ (A4). La direction d'annihilation est $[100]$ et pour des angles ϕ_1 et ϕ_2 égaux à 0° avec cette direction, les deux dislocations ont des sens de ligne identiques et se repoussent (domaine gris au centre de la cartographie). Dans les domaines blancs, la configuration est attractive et les deux dislocations peuvent s'annihiler.

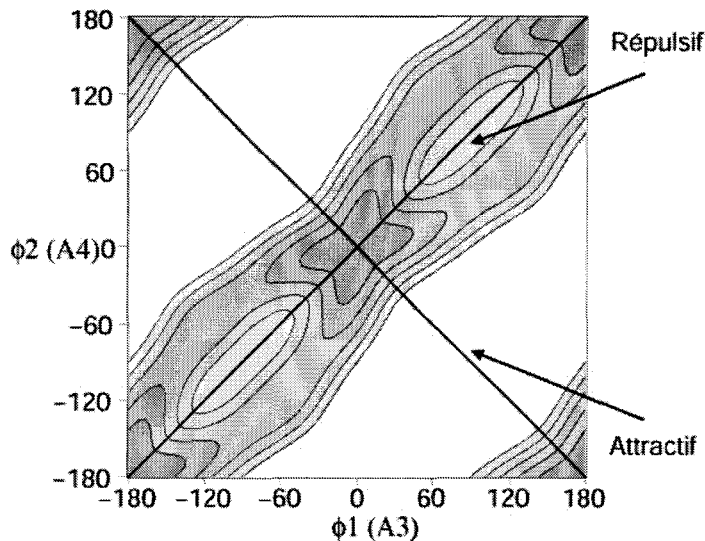


FIGURE 4-26

Exemple d'une cartographie d'annihilation colinéaire pour la réaction entre les systèmes $(011)[100]$ (A3) et $(0\bar{1}1)[100]$ (A4). Les forces de répulsion sont d'autant plus fortes que les domaines sont foncés. Dans les domaines blancs, les forces sont attractives. Les traits gras correspondent aux limites définies grâce à la relation d'équilibre aux nœuds triples (4-14).

4.4.2.2 Simulation des interactions entre dislocations

Il est possible d'étudier les interactions entre dislocations dans la forstérite grâce à la simulation à trois dimensions de la dynamique des dislocations. Contrairement au modèle élastique simplifié précédent, la simulation de la dynamique des dislocations permet de prendre en compte la courbure des dislocations et de décrire de façon plus réaliste les interactions entre dislocations.

Une configuration de départ est générée. Elle consiste en deux dislocations, de $10\mu\text{m}$ de long, appartenant aux deux systèmes de glissement, épinglées à leurs extrémités. Les deux dislocations étant en configuration pour réagir l'une avec l'autre (proches l'une de l'autre), on laisse relaxer la configuration jusqu'à ce que les forces de Peach-Koehler s'appliquant sur les segments soient nulles. Si la distance entre les deux dislocations augmente au cours de la simulation, la configuration est répulsive (Figure 4-27-a). Inversement, si elle diminue, la configuration est attractive. Dans ce cas, il faut alors distinguer deux éventualités:

- les dislocations se courbent suivant la direction d'intersection des deux plans de glissement et se superposent (formation d'une jonction) lorsque les vecteurs de Burgers sont différents (Figure 4-27-b) ou s'annihilent (annihilation colinéaire) quand les vecteurs de Burgers sont égaux et opposés (Figure 4-27-a),
- les deux dislocations ne réagissent pas (sans se repousser): il s'agit d'un état croisé.

La loi de vitesse qui est utilisée pour de telles simulations de réactions entre dislocations est celle employée pour les structures CFC (cf. chapitre 2). Il s'agit ici de modéliser les réactions entre dislocations dans un cas général où il n'y a pas de friction de réseau et où aucun caractère n'est plus mobile qu'un autre. Néanmoins nous connaissons avec un bon degré de confiance la configuration de glissement des boucles de dislocation de vecteur de Burgers $[001]$. Elle consiste essentiellement en des vis longues et droites peu mobiles et des coins courts et

courbes rapides. Nous tenterons de déterminer l'influence de l'importance de ces deux directions de ligne de dislocation de vecteur de Burgers [001] sur les interactions avec les dislocations de vecteur de Burgers [100].

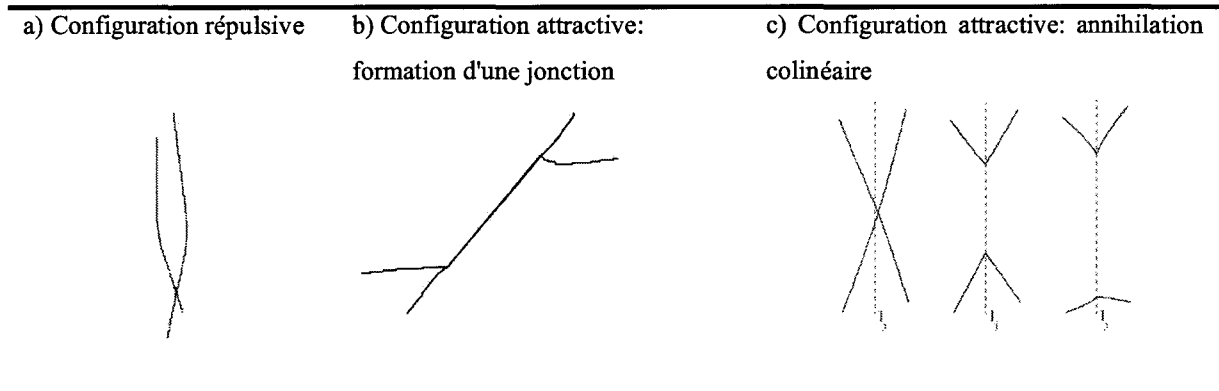


FIGURE 4-27

Interaction entre des dislocations de deux systèmes de glissement différents. En (a), les deux dislocations se repoussent. En (b), elles s'attirent et forment une jonction lorsque les deux vecteurs de Burgers sont différents. En (c), les deux dislocations s'attirent et s'annihilent lorsque les vecteurs de Burgers sont colinéaires.

Les types de jonction peuvent être regroupés suivant le caractère de la jonction, l'angle entre les plans de glissement et le caractère des dislocations 1 et 2 lorsque leur ligne est suivant \vec{l}_j (Tableau 4-6).

Notation	Systèmes de glissement en interaction	Caractère de la jonction	Angle entre les plans de glissement	Remarques
J1	A1-C1	Coin	90°	Les deux dislocations sont coins suivant \vec{l}_j
J2	C1-A2, A1-C2	Mixte (<60°)	90°	Une dislocation est coin, l'autre est vis suivant \vec{l}_j
J3	C1-A3 (C1-A4) A1-C3 (A1-C4)	Mixte (>60°)	90°	Une dislocation est coin, l'autre est mixte suivant \vec{l}_j
J4	C2-A3 (C2-A4) A2-C3 (A2-C4)	Mixte (<60°)	Proche de 60°	Une dislocation est coin, l'autre est vis suivant \vec{l}_j
J5	C3-A3, C4-A4 C3-A4, C4-A3	Mixte (<60°)	78°	Les deux dislocations sont mixtes suivant \vec{l}_j

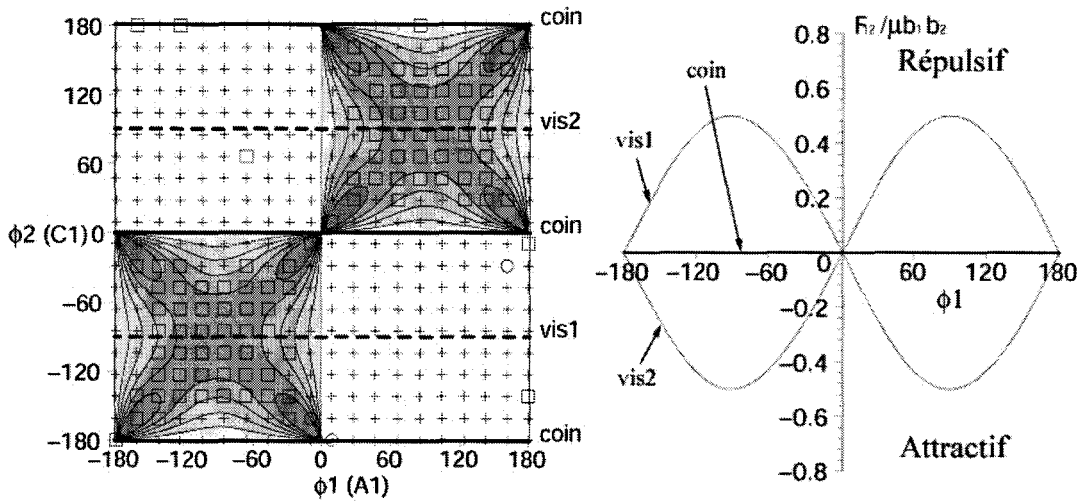
TABLEAU 4-6

Les différentes réactions entre les différents systèmes de glissement peuvent être regroupées selon le caractère des jonctions qui peuvent se former, l'angle entre les plans de glissement et l'angle entre la direction de la ligne de jonction \vec{l}_j et le vecteur de Burgers des deux dislocations qui interagissent.

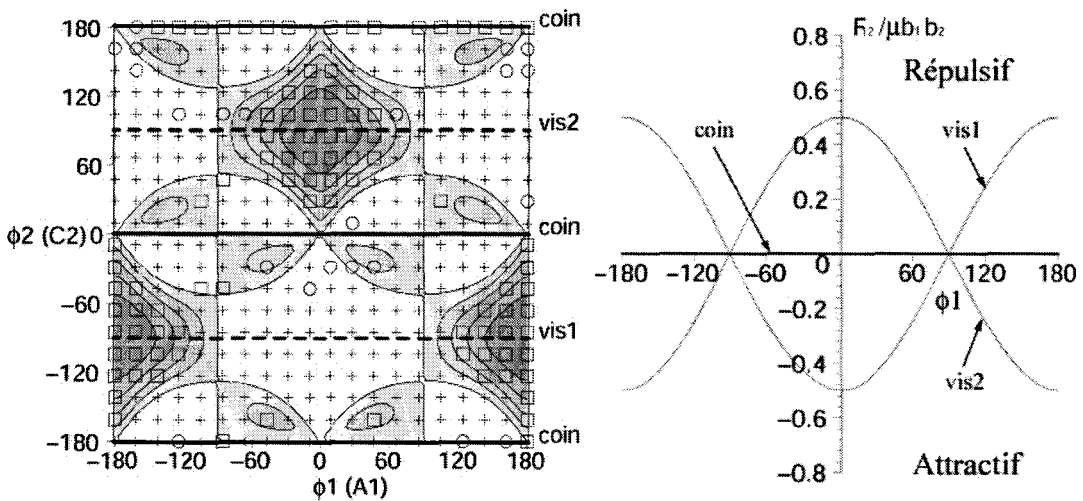
Les cartographies sont identiques au sein d'un même groupe "J_i": la forme des domaines de répulsion et d'attraction ou celle des lobes de jonction, ainsi que les niveaux des forces sont semblables. Ainsi une seule cartographie de jonction, représentative de chaque groupe, est présentée sur la Figure 4-28. Des courbes de niveau sont représentées dans les domaines répulsifs gris. Ceci permet de visualiser comment varie la force de répulsion entre les deux dislocations en fonction des angles ϕ_1 et ϕ_2 (elle est d'autant plus importante que la

teinte est foncée). Les domaines attractifs blancs sont laissés vierges de courbes de niveau, ce qui ne signifie pas que la force d'attraction entre les deux dislocations ne varie pas.

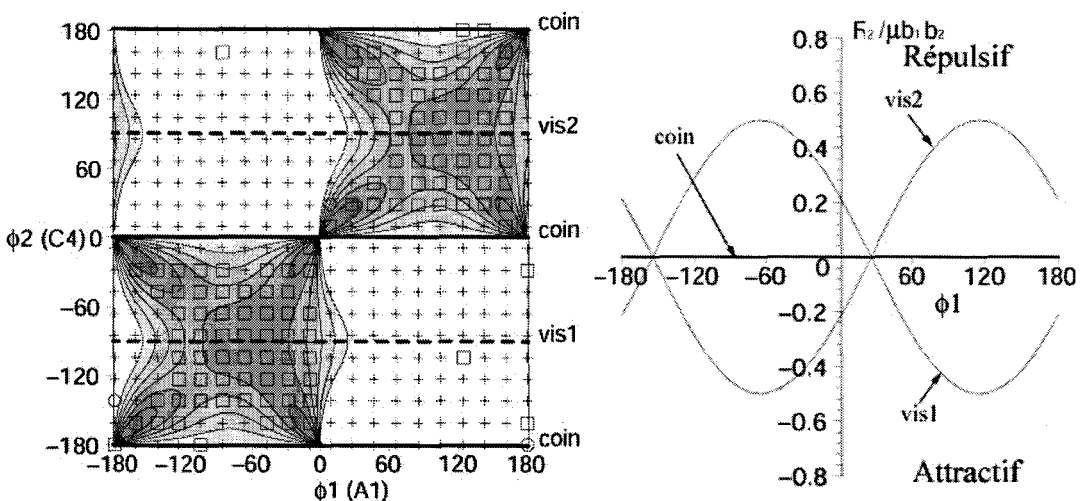
a) Interaction A1-C1 (groupe J1)



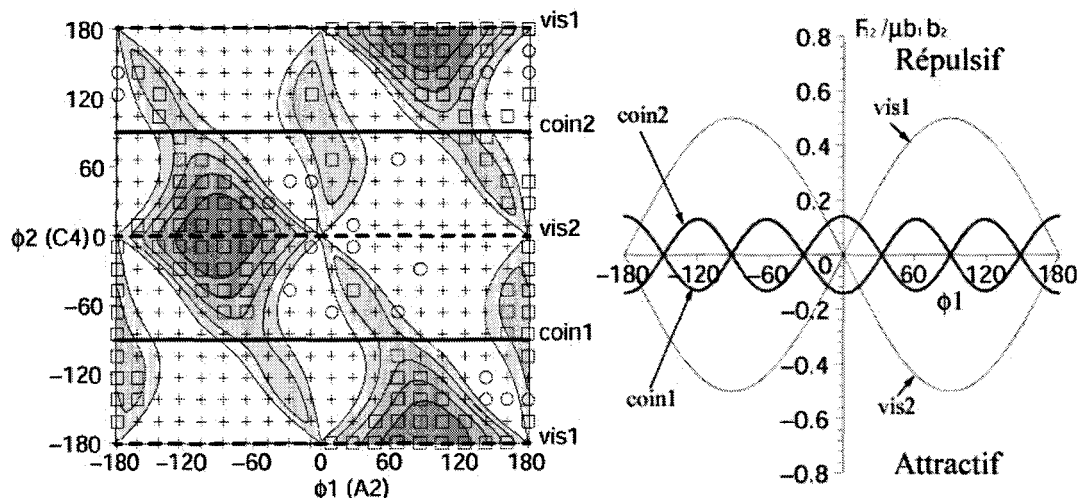
b) Interaction A1-C2 (groupe J2)



c) Interaction A1-C4 (groupe J3)



d) Interaction A2-C4 (groupe J4)



e) Interaction A3-C3 (groupe J5)

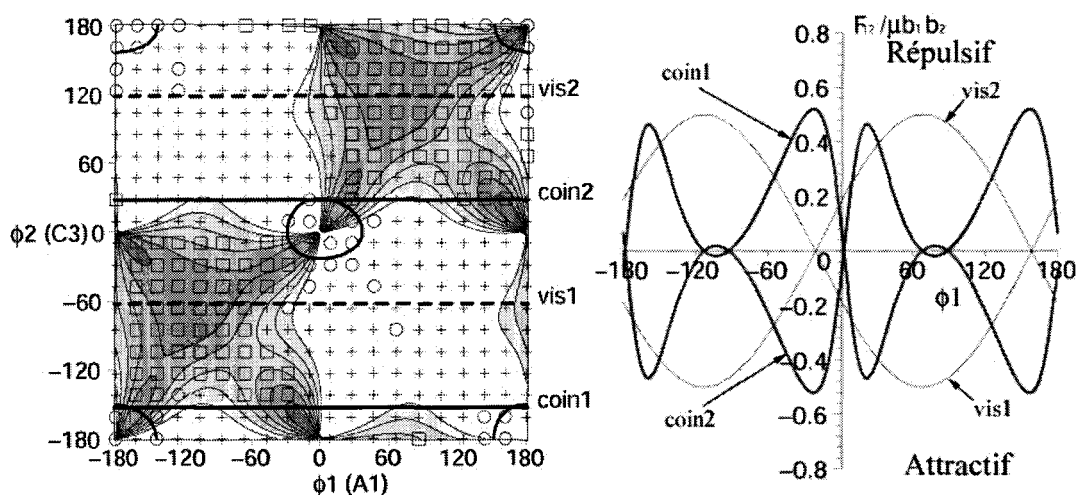


FIGURE 4-28

(Cette page et la précédente) Cartographies de jonction pour chacun des 6 groupes constitués dans le Tableau 4-6. ϕ_1 et ϕ_2 sont les angles que font respectivement les directions de ligne de dislocation des systèmes A et C avec la direction de la ligne de jonction. Les domaines répulsifs sont en gris, les domaines attractifs en blanc et les lobes de jonction en trait gras. Le long des traits horizontaux le caractère des dislocations de vecteur de Burgers [001] est coin (en trait plein) ou vis (en traits pointillés). Le long de ces lignes, la force d'interaction entre les dislocations de vecteur de Burgers [100] et les dislocations vis ou coin de vecteur de Burgers [001] a également été représentée. Les résultats obtenus par la simulation sont représentés par:

- \bullet pour les jonctions,
- \square pour les états répulsifs,
- $+$ pour les états croisés.

Les résultats issus de la simulation et ceux correspondant au modèle élastique simplifié sont en bon accord: les domaines répulsifs et attractifs coïncident relativement bien. Ainsi les petites approximations générées lors de la construction de la base de vecteurs n'ont pas d'incidence sur la modélisation des interactions entre les systèmes de glissement. La simulation donne parfois des jonctions là où elles ne sont pas attendues par le modèle élastique

simplifié (hors des lobes de jonction). Néanmoins sauf pour le groupe J5 où le rapport l_j/l_i des longueurs de jonctions sur la longueur des segments sources peut être supérieur à 0,1 (soit plus de 1 μm), l_j/l_i est toujours inférieur à 0,005 (soit inférieur à 50nm). L'application d'une contrainte aura pour effet de détruire ces jonctions "fragiles".

Un premier constat se dessine à cette étape de l'étude. Selon le modèle élastique, aucune intersection entre dislocations n'entraîne la formation de jonction, à l'exception du groupe J5. Un tel résultat pouvait être suspecté puisque, selon le critère de Franck, l'énergie de ligne d'une jonction de vecteur de Burgers $\{101\}$ est toujours supérieure à la somme des énergies de ligne des dislocations de vecteurs de Burgers $[100]$ et $[001]$. Ainsi pour qu'une jonction se forme, certaines conditions "strictes" doivent être remplies. Tout d'abord les configurations qui peuvent entraîner la formation d'une jonction de caractère coin (ou même supérieure à 60°) sont défavorables car l'énergie de ligne d'une telle jonction est toujours supérieure à celle d'une jonction de caractère vis ou inférieure à 60° (J1 et J3). Ensuite il est souvent préférable, lorsque ϕ_i est nul (i étant une des deux dislocations du binôme 1-2), que la dislocation i ne soit pas de caractère vis. Pour qu'une configuration de deux dislocations qui se croisent évolue en jonction, la somme des projections des tensions de ligne des deux dislocations sur l'intersection des deux plans de glissement doit être supérieure à la tension de ligne de la jonction. Or la projection de la tension de ligne d'une dislocation de caractère vis suivant \vec{l}_j est toujours inférieure à celle d'une dislocation de caractère mixte ou coin. Ceci explique le fait que les interactions des groupes J2 et J4 ne conduisent pas à la formation d'une jonction. Ces deux conditions sont satisfaites pour les interactions du groupe J5 (deux dislocations de caractère mixte suivant \vec{l}_j peuvent conduire à la formation d'une jonction de caractère inférieur à 60°), mais le lobe de jonction reste relativement petit (ϕ_1 et ϕ_2 sont inférieurs à 30° environ). De plus, puisque les directions vis des systèmes C ne coupent pas ce lobe et que les directions coins l'effleurent à peine, on peut supposer qu'avec la configuration particulière des boucles de glissement de vecteur de Burgers $[001]$, la formation de jonction est extrêmement improbable. Ce résultat est conforté par le fait qu'aucune observation en microscopie électronique n'a mentionné la présence de jonction dans les microstructures. Même si les interactions entre dislocations de vecteur de Burgers $[001]$ et $[001]$ ne conduisent pas à la formation de jonctions, elles peuvent toujours être de nature répulsives ou attractives et constituer une entrave au glissement. Ainsi selon la Figure 4-28, les dislocations vis des systèmes de glissement C peuvent être repoussées ou attirées par les dislocations des systèmes de glissement A. Par contre, dans certains cas (J1, J2, J3), les dislocations coins ne sont soumises à aucune force d'interaction à courte distance avec les dislocations de vecteur de Burgers $[100]$. Dans le cas de l'interaction J1, par exemple, entre $(100)[001]$ et $(001)[100]$ (les deux systèmes les plus sollicités pour un axe de sollicitation $[101]_c$), les dislocations coins de vecteur de Burgers $[001]$ ne sont pas gênées dans leur déplacement au travers d'une forêt de dislocations de vecteur de Burgers $[100]$ et produiront sans entrave des dislocations vis. Dans d'autres cas, elles interagissent soit de façon relativement faible (J4) ou plus importante (J5).

De même que nous avons regroupé les différentes jonctions selon leur caractère et celui des deux dislocations du binôme, les interactions colinéaires peuvent être "classées" selon l'angle que font les normales aux deux plans de glissement (Tableau 4-7).

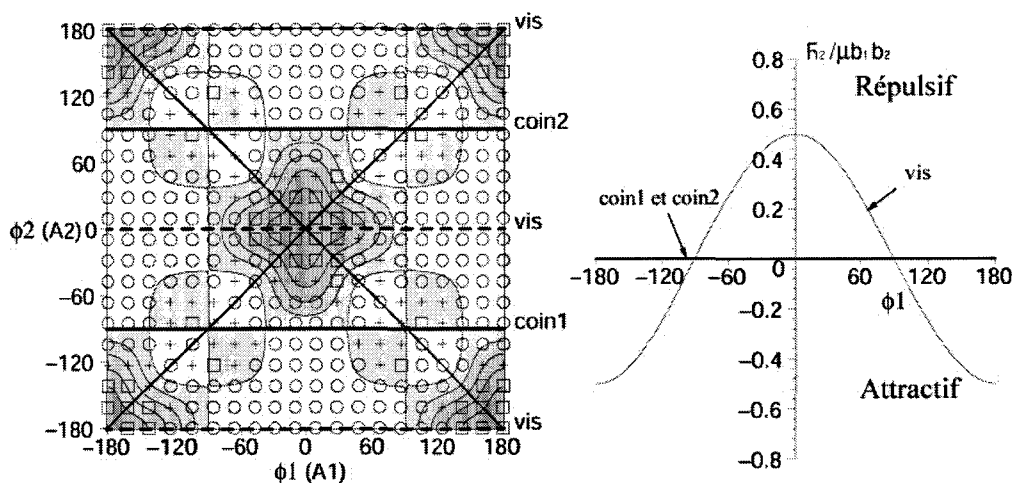
Notation	Systèmes de glissement en interaction	Angle entre les plans de glissement
AC1	C1-C2, A1-A2	90°
AC2	C1-C3, C1-C4	25°
	A1-A3, A1-A4	30°
AC3	C2-C3, C2-C4	65°
	A2-A3, A2-A4	60°
	A3-A4	60°
AC4	C3-C4	50°

TABLEAU 4-7

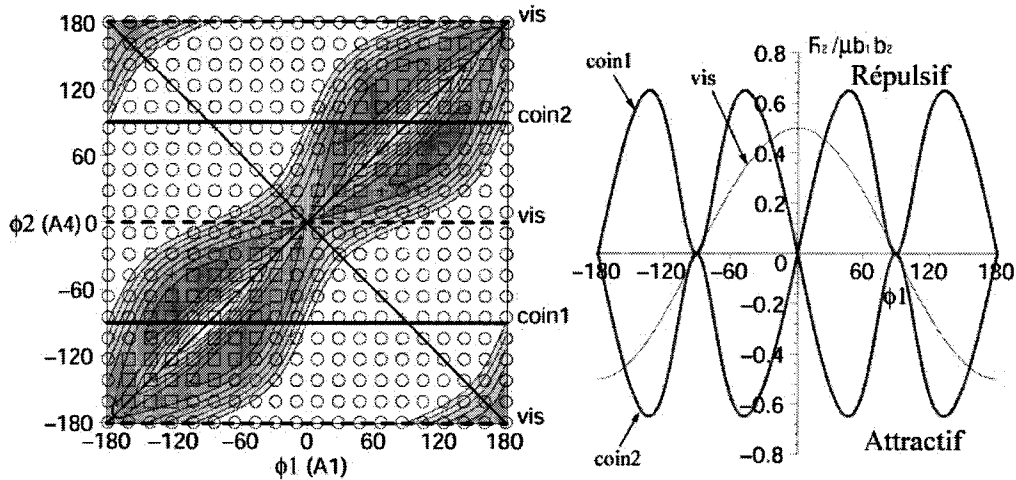
Les différentes annihilations colinéaires entre les différents systèmes de glissement peuvent être regroupées selon, l'angle entre es plans de glissement..

Quatre groupes au sein desquels les interactions conduisent à des cartographies d'annihilation identiques ont été constitués. Ils correspondent à des angles entre plans de glissement de 25° ou 30°, 50°, 60° ou 65° et 90°. Les cartographies représentatives de chaque groupe sont visibles sur la Figure 4-29. La force d'interaction normalisée $F_{12}/\mu b_1 b_2$ obtenue à partir de la relation (4-15) entre les deux dislocations y est également représentée pour des orientations particulières de la ligne qui correspondent aux caractères coin et vis de la dislocation d'un des deux systèmes.

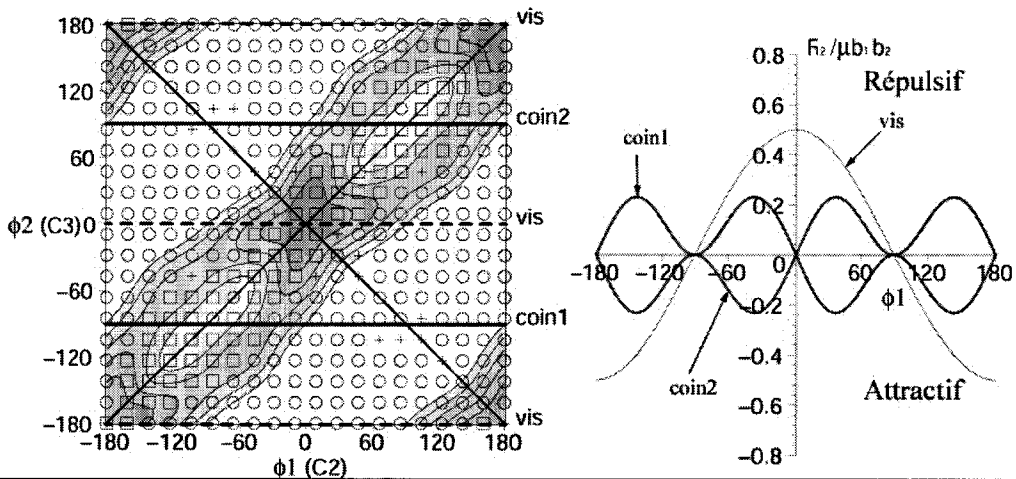
a) interaction A1-A2 (groupe AC1)



b) interaction A1-A4 (groupe AC2)



c) interaction C2-C3 (groupe AC3)



d) interaction C3-C4 (groupe AC4)

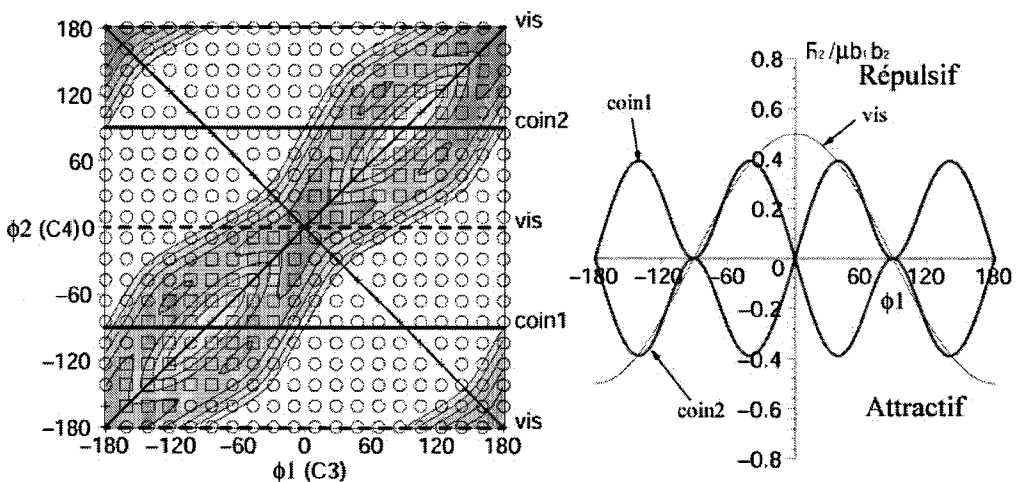


FIGURE 4-29

(Cette page et la précédente) Cartographies pour les annihilations colinéaires. Les résultats obtenus avec la simulation sont représentés par des \circ pour les annihilations, des \square pour les états répulsifs et des $+$ pour les états croisés. Les forces d'interaction normalisées $F_{12}/\mu b_1 b_2$ (attractives ou répulsives) entre les deux dislocations en fonction de ϕ_1 pour $\phi_2=90^\circ$ ou 0° (correspondant aux directions vis et coin respectivement) sont également représentées pour chaque cartographie.

On constate une nouvelle fois un bon accord entre le modèle élastique simplifié et la simulation. Les annihilations constatées grâce à la simulation correspondent aux domaines attractifs (ou faiblement répulsifs) prévus par le modèle élastique simplifié. Dans les domaines attractifs ou répulsifs, on constate parfois que la simulation donne un état croisé plutôt qu'une annihilation ou une répulsion. Ceci peut s'expliquer par le fait que la force d'attraction est très faible. C'est le cas de l'interaction A1-A2 (Figure 4-29-a) où, pour des couples (ϕ_1, ϕ_2) proches de $(\pm 90^\circ, \pm 90^\circ)$, les forces de répulsion ou d'attraction sont si faibles que la simulation conduit à une région relativement étendue d'états croisés. Ces régions sont plus localisées dans le cas des interactions AC2 et AC3 et correspondent au moment où la force d'interaction entre les deux dislocations s'annule (Figure 4-29-b et c). Les états croisés peuvent s'aligner suivant la ligne du lobe de jonction, là où les conditions d'annihilation sont plus ténues (interaction AC4 sur la Figure 4-29-d).

Contrairement à la formation des jonctions, les annihilations entre dislocations de même vecteur de Burgers et appartenant à deux plans de glissement sécants sont faciles. Néanmoins nous avons mentionné, dans le paragraphe 4.3.2, que, pour un axe de sollicitation suivant $[101]_c$, de telles annihilations étaient plutôt rares. Deux explications peuvent être invoquées dans ce cas. D'abord lorsqu'il y a de la friction de réseau sur les dislocations vis, la densité de dislocations non-vis reste faible et la probabilité que deux segments de dislocations non-vis se rencontrent est basse. Ensuite les dislocations vis sont très droites et elles ont également peu de chances de se croiser car leurs lignes sont toutes de même direction.

4.4.2.3 Effet de l'anisotropie élastique et de la pression sur la formation des jonctions

La démarche précédente pour aboutir à la relation finale (4-12) a été réalisée en élasticité isotrope. Or nous avons vu que la forstérite est élastiquement anisotrope (cf. 1.2) et les énergies de ligne des dislocations ne sont pas identiques quel que soit le système de glissement. Le logiciel *DisDi*, développé par J. Douin (LEM/CNRS-ONERA), permet de calculer des propriétés élastiques des dislocations (énergies de ligne, forme d'équilibre d'une boucle de dislocation dissociée ou pas, avec ou sans contrainte appliquée) dans le cas anisotrope, à partir du tenseur des constantes élastiques. Les énergies de ligne en fonction du caractère des dislocations issues de ce calcul sont représentées sur la Figure 4-30. Les dislocations vis n'étant pas confinées à un unique plan de glissement, leur énergie de ligne est la même quel que soit le système de glissement. Les énergies de ligne des dislocations de vecteur de Burgers $[100]$ sont identiques mais différentes de celles des dislocations de vecteurs de Burgers $[001]$. Ces différences ne sont d'ailleurs pas les mêmes selon les plans de glissement des dislocations de vecteur de Burgers $[001]$. Ainsi le calcul de la formation des jonctions en élasticité isotrope peut sembler inexact. Pour évaluer la pertinence de l'approximation de l'élasticité isotrope, on se propose d'étudier la formation des jonctions dans la forstérite à partir des énergies de ligne calculées par *DisDi* en élasticité anisotrope.

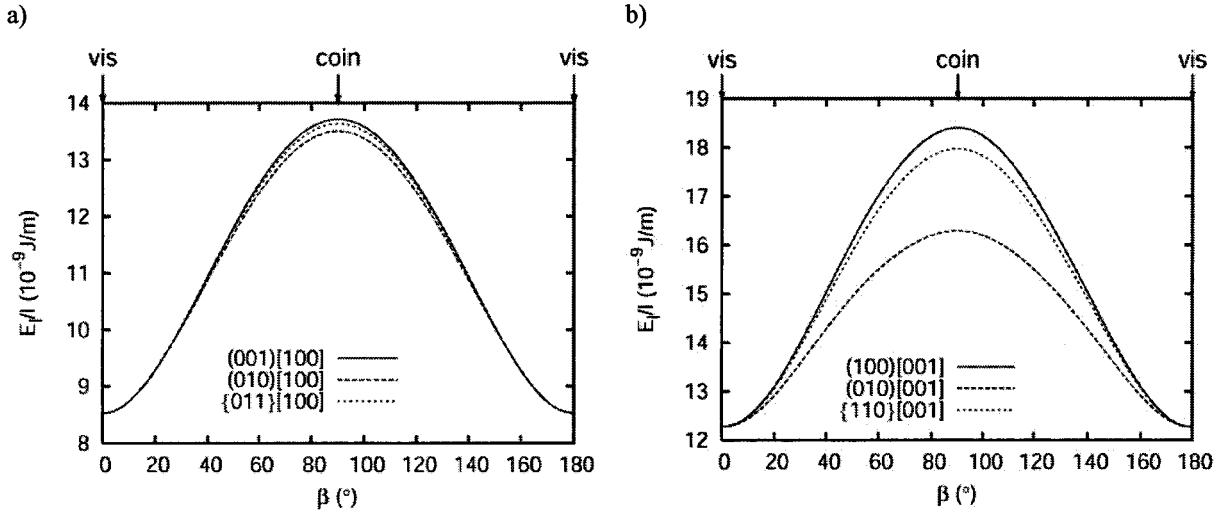


FIGURE 4-30

Energies de ligne des dislocations de vecteurs de Burgers [100] (a) et [001] (b), calculées avec DisDi en élasticité anisotrope, à partir des constantes élastiques déterminées par Graham et Barsch (1969).

Dans le cas anisotrope, l'équation (4-12) est toujours valable mais on ne peut pas utiliser les relations (4-13) pour exprimer les tensions de ligne. Elles sont alors déterminées à partir des énergies de ligne de la Figure 4-30 ajustées par une série périodique:

$$\frac{E_l}{l} = \sum_{i=0}^2 a_i (\cos \beta)^{2i} = g(\beta) \quad (4-16)$$

La tension de ligne est égale à la dérivée totale de l'énergie de ligne par rapport à l :

$$\frac{dE_l}{dl} = \frac{\partial E_l}{\partial l} + \frac{\partial E_l}{\partial \phi} \frac{d\phi}{dl} \quad (4-17)$$

Puisque $h = l \cdot \sin \phi$ est une constante et $E_l = l \cdot g(\beta)$, alors :

$$T = \frac{dE_l}{dl} = g(\beta) - \tan(\phi^*) g'(\beta) \quad (4-18)$$

On aboutit à une condition d'équilibre identique à la relation (4-12):

$$\sum_{i=1,2} \left[g(\theta_i + \phi_i^*) \cos(\phi_i^*) - g'(\theta_i + \phi_i^*) \sin(\phi_i^*) \right] - g(\theta_j + \phi_j^*) = 0 \quad (4-19)$$

Cette condition d'équilibre est également valable lorsqu'il s'agit d'étudier la formation des jonctions lorsque la pression est non nulle. Il suffit alors de calculer avec DisDi les énergies de ligne des différentes dislocations à

partir du tenseur des constantes élastiques sous pression (nous avons choisi les données de Zha *et al.* (1998) à 10GPa).

La relation (4-19) définit la frontière délimitant le domaine des couples (ϕ_1, ϕ_2) où la formation d'une jonction est favorable de celui où elle ne l'est pas, en élasticité anisotrope

Nous avons représenté sur la Figure 4-31 les lobes de jonction correspondant aux différents types de jonction qui peuvent se former et qui ont été définis dans le Tableau 4-5, en superposant ceux obtenus en élasticité anisotrope à pression nulle et à 10GPa à ceux obtenus précédemment en élasticité isotrope.

En élasticité isotrope, il n'y a formation de jonction que pour le cas de l'interaction entre (011)[100] et (110)[001] (A3-C3) ou $(0\bar{1}1)[100]$ et $(1\bar{1}0)[001]$ (A4-C4). Dans le cas anisotrope à 0GPa, il y a aussi un lobe pour ces deux mêmes types d'interaction mais on constate également, contrairement au cas isotrope, que la formation de jonction peut se faire pour d'autres interactions. Il faut nuancer ce résultat en précisant que ces lobes restent petits et que la formation de jonction en anisotrope n'est possible que pour des valeurs de ϕ_1^* et de ϕ_2^* proches de 0° . Ces lobes disparaissent complètement lorsqu'une pression de 10GPa est appliquée.

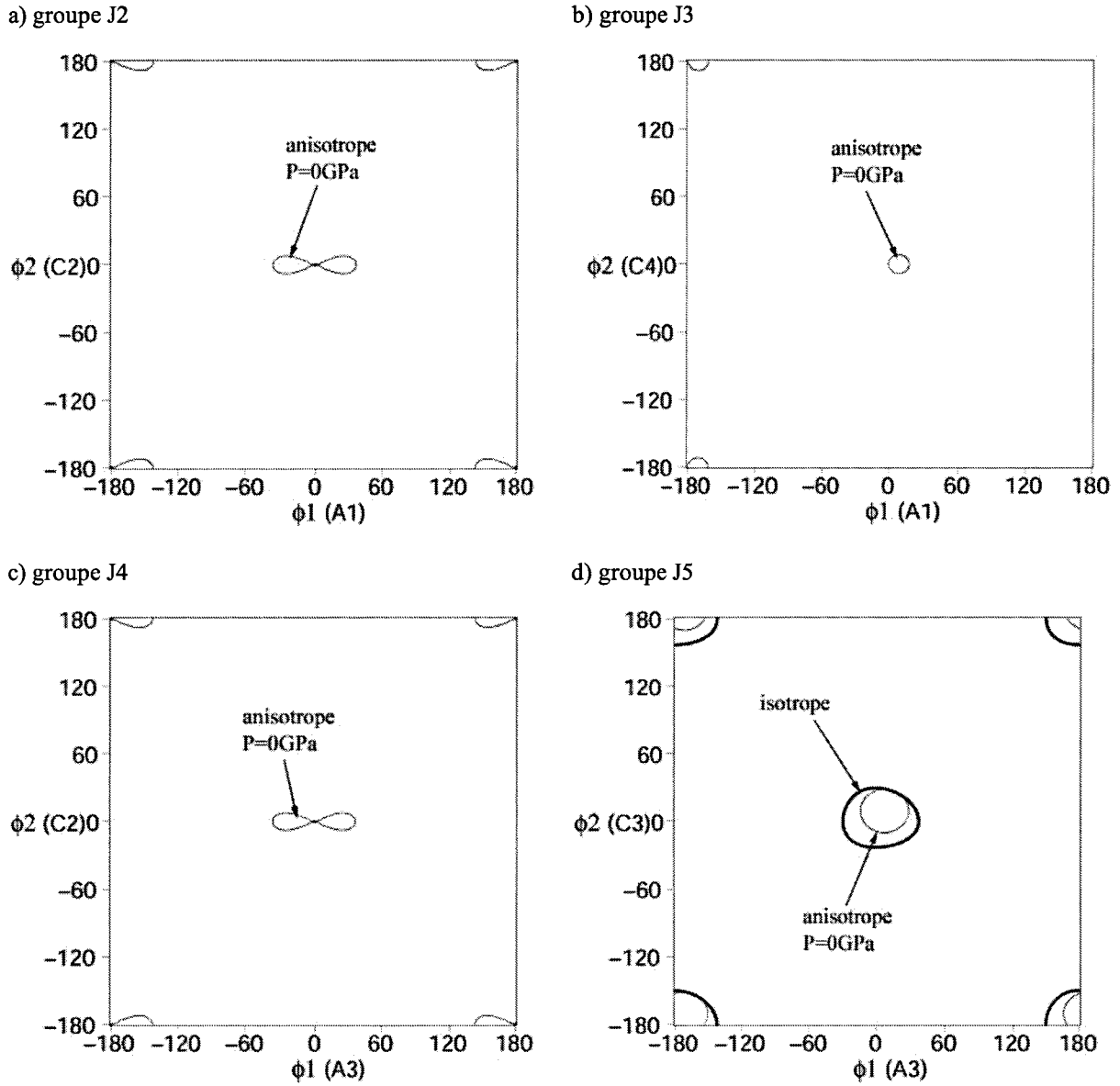


FIGURE 4-31:

Lobes de jonction obtenus en élasticité isotrope (trait épais) et en élasticité anisotrope à 0 GPa (en trait fin). Dans le cas de l'élasticité anisotrope à 10 GPa, aucun lobe de jonction ne se forme. Les figures correspondent aux interactions entre A1 et C2 (a), A1 et C4 (b), A3 et C2 (c), C3 et A3 (d).

Chapitre 5

Discussion

Nous avons montré dans les chapitres précédents que l'on pouvait obtenir des informations aux échelles nanoscopique et mésoscopique sur la plasticité de la forstérite.

Dans ce chapitre, nous nous sommes posés la question de savoir comment ces résultats pouvaient s'inscrire dans un schéma plus global de la plasticité de ce minéral. Pour ce faire, nous avons repris certaines observations expérimentales que nous avons discutées à la lumière de notre travail.

Ainsi c'est notamment l'occasion de revenir sur l'anisotropie plastique de la forstérite, connue mais peut-être mal comprise.

Récemment, des essais de déformation ont mis en évidence un effet de pression et nous tenterons d'y apporter des éléments d'explication supplémentaires grâce à nos résultats à l'échelle atomique.

L'utilisation de la simulation de la dynamique des dislocations nous a permis d'en comprendre davantage sur le comportement collectif des dislocations, leur mobilité et leurs interactions. Néanmoins plusieurs questions laissées en suspens, à cause d'un manque de données expérimentales, demeurent et nous profiterons de ce chapitre pour proposer plusieurs pistes à explorer à l'avenir.

5.1 Les systèmes de glissement de la forstérite

5.1.1 Influence respective du glissement $b=[100]$ et du glissement $b=[001]$

Dans le chapitre 1, nous avons présenté des résultats expérimentaux qui concourent tous à affirmer que le glissement de dislocations de vecteur de Burgers [001] est majoritaire aux basses températures ($T < 1000^\circ\text{C}$) et que le glissement des dislocations de vecteur de Burgers [100] domine aux hautes températures ($T > 1000^\circ\text{C}$). Nos résultats permettent-ils d'apporter des éléments de réponse supplémentaires à la compréhension de ce phénomène ?

Le calcul des *ISS* (Ideal Shear Strength), homogènes à une contrainte, obtenues en dérivant γ par rapport au vecteur de faute f , a montré qu'il était intrinsèquement plus facile de cisailer le cristal suivant [001] que suivant [100], ce qui est en accord avec les résultats expérimentaux. De telles valeurs ne représentent pas la contrainte nécessaire pour faire bouger les dislocations mais donnent plutôt une indication sur la résistance qu'oppose le cristal à son cisaillement rigide dans un plan suivant une direction donnée. De telles contraintes ne sont jamais atteintes dans la réalité car les dislocations sont créées et deviennent mobiles bien avant. Ainsi même si les *ISS* n'ont aucune valeur directe pour l'expérimentateur, elles constituent cependant un outil théorique intéressant d'appréciation de l'influence de la cristalochimie sur la facilité relative des différents systèmes de glissement.

En réalité, la notion de dislocation n'est réellement introduite qu'à partir du moment où le modèle de P-N est utilisé. Ce dernier donne une information relativement complexe sur les contraintes de Peierls des dislocations des différents systèmes de glissement. Les contraintes de Peierls calculées pour les dislocations coins ne permettent pas d'affirmer que le glissement des dislocations de vecteur de Burgers [100] est plus difficile que celui des dislocations de vecteur de Burgers [001] à basse température. Mais les contraintes des dislocations coins sont de peu d'importance aux basses températures, domaine dans lequel la déformation de la forstérite est contrôlée essentiellement par des dislocations vis de vecteur de Burgers [001]. Les contraintes de Peierls des dislocations vis semblent quant à elles indiquer qu'il faille exercer des contraintes plus importantes pour déplacer les dislocations de vecteur de Burgers [100] que pour déplacer celles de vecteur de Burgers [001]. Malheureusement on sait que les dislocations vis ont certainement un cœur à trois dimensions que ne prend pas en compte le modèle de P-N. Il est ainsi difficile de conclure sans équivoque, d'un point de vue théorique, sur la différence de facilité de glissement des dislocations de vecteur de Burgers [001] par rapport à celle de dislocations de vecteur de Burgers [100].

Expérimentalement, la transition du glissement de dislocations de vecteur de Burgers [001] vers le glissement de dislocations de vecteur de Burgers [100] a généralement été interprétée comme un effet de la température. L'utilisation de lois de vitesse, déterminées de façon phénoménologique à partir des données mécaniques et basées sur le modèle de formation et propagation de doubles décrochements, a permis de suggérer qu'elle résulte essentiellement d'un effet de contrainte. Ce phénomène avait déjà été suggéré pour expliquer l'activation du glissement de vecteur de Burgers [001] à des températures supérieures à 1000°C par Zeuch et Green (1979).

5.1.2 Le glissement [001]

A l'issue du chapitre 1, aucune anisotropie plastique entre les systèmes de glissement de vecteur de Burgers [001] n'a été envisagée. En effet, par manque de données mécaniques discriminantes, nous avons proposé que les contraintes critiques projetées étaient identiques dans les trois systèmes de glissement (010)[001], (100)[001] et {110}[001]. Ceci nous avait conduit à modéliser la mobilité des dislocations vis par des lois dont l'enthalpie d'activation dépendait de la même façon de la contrainte et de la température. Pourtant plusieurs études microstructurales à basse température ($T < 1000^\circ\text{C}$) n'abondent pas dans ce sens.

Les essais de micro-indentation, réalisés par Gaboriaud *et al.* (1981) suivant une orientation analogue à [101]c à basse température, montrent que le système de glissement (100)[001] est le seul activé depuis la température ambiante jusqu'à 900°C . A partir de 600°C , le système de glissement {110}[001] est lui aussi activé. Evans et Goetze (1979) ont également utilisé des essais de micro-indentation pour des orientations quelconques et ont constaté majoritairement l'activation du système de glissement {110}[001] à des températures inférieures à 1300°C . Dans ces deux études, le système de glissement (010)[001] n'avait jamais été activé. Phakey *et al.* (1972) ont déformé à vitesse constante un monocristal d'olivine suivant l'orientation [011]c qui sollicite le système (010)[001] avec un facteur de Schmid maximal. A 800°C , ils ne constatent que l'activation des systèmes de glissement (100)[001] et {110}[001] qui sont peu (voire pas du tout) sollicités. Il est également intéressant de remarquer que déformer le monocristal suivant [011]c est plus difficile que de le déformer suivant [101]c, à 1000°C (Figure 5-1).

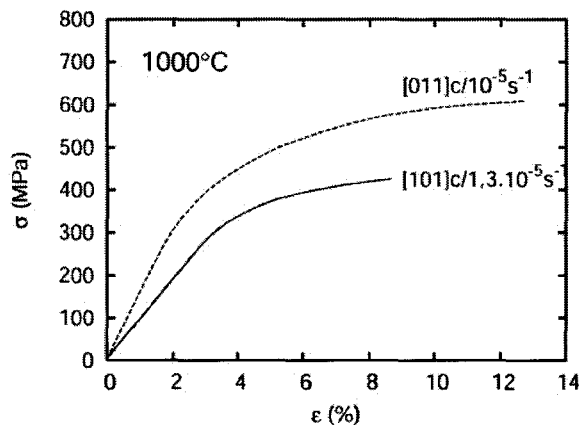


FIGURE 5-1

*Courbes contrainte déformation à 1000°C , une vitesse de déformation d'environ $10^{-5} s^{-1}$, et suivant [011]c et [101]c (Phakey *et al.* (1972)).*

Dans tous les cas, les microstructures montrent que les dislocations de vecteur de Burgers [001] sont longues et droites et qu'elles participent majoritairement à la déformation du monocristal.

Les énergies de faute d'empilement généralisées ont été calculées dans les plans (010), (100) et {110} pour des vecteurs de faute parallèles à [001]. L'analyse basée sur le modèle de P-N a suggéré qu'une dislocation de vecteur de Burgers [001] avait tendance à se dissocier dans les plans (100) et {110} en deux dislocations partielles de vecteur de Burgers $\frac{1}{2}[001]$.

Vander Sande et Kohlstedt (1976) ont déjà mis en évidence une dissociation dont la réaction serait $[001] \rightarrow \frac{1}{2}[001] + \frac{1}{2}[001]$. Ils ont approximativement mesuré la largeur du ruban de faute séparant les deux partielles et trouvé une valeur d'environ 40 Å, en accord avec l'énergie de faute d'empilement que nous avons calculée. Cependant, à notre connaissance, il n'existe aucune autre vérification expérimentale à l'hypothèse d'un cœur dissocié. Depuis peu, la modélisation de cœurs de dislocation dans la forstérite a été entreprise en utilisant des potentiels empiriques (Walker (2004)). Dans le cas du cœur d'une dislocation vis de vecteur de Burgers $[001]$, il existe des différences notables entre ce modèle et le modèle de P-N. En effet alors que l'on prédit des dissociations en deux partielles dans les plans (100) et $\{110\}$, une telle tendance ne semble pas être prévue par les potentiels empiriques. Walker (2004) émet toutefois certaines réserves quant à la validité de son modèle du cœur de la dislocation vis de vecteur de Burgers $[001]$. En effet il trouve que les déplacements des atomes sont très importants et il suggère que la simulation ne soit pas de taille suffisante pour décrire le cœur de cette dislocation.

Le calcul des contraintes de Peierls donne des valeurs plus importantes lorsque la dislocation vis est parfaite et glisse dans (010) (5,4 GPa) que lorsqu'elle est dissociée et se déplace dans (100) et $\{110\}$ (respectivement 1,4 et 4,4 GPa). De telles contraintes ont été calculées en considérant que le cœur des dislocations vis était planaire. Cependant le fait que les dislocations vis soient très droites suggère qu'elles sont dans une configuration sessile et qu'elles ont un cœur dissocié (ou étalé) dans plusieurs plans en zone avec la direction de ligne (Vitek (1974)). Dans ce cas, les valeurs des contraintes de Peierls sont sous-estimées car pour qu'une dislocation vis puisse glisser dans un plan de glissement, son cœur doit être recombéné.

La réaction de dissociation $[001] \rightarrow \frac{1}{2}[001] + \frac{1}{2}[001]$ dans les plans (100) ou $\{110\}$ n'est pas suffisante pour expliquer que les dislocations vis soient sessiles lorsqu'elles glissent dans ces plans de glissement. Il faut alors considérer que les partielles se dissocient (ou s'étalent) à leur tour dans un autre plan que le plan initial de dissociation de la dislocation parfaite. Pour glisser dans (010) , le cœur doit recombéné un ruban de faute dans (100) ou $\{110\}$ qui correspond à une énergie de faute d'empilement stable. Ceci nécessite des contraintes plus importantes que celles nécessaires à la recombinaison d'un cœur moins étalé dans (010) , (100) ou $\{110\}$.

A des températures de 800°C, Phakey *et al.* (1972) constatent que le glissement dévié des dislocations vis apparaît en même temps que l'activation du système de glissement $\{110\}[001]$. Ces deux phénomènes sont certainement liés et il est intéressant de remarquer que le passage d'une configuration d'un cœur étalé (ou dissocié) essentiellement dans (100) à celle d'un cœur étalé (ou dissocié) dans $\{110\}$ permet de rendre compte de l'apparition du glissement dévié dans le plan $\{110\}$.

Les barrières d'énergie de faute d'empilement n'ont été calculées que pour un vecteur de faute parallèle à la direction du vecteur de Burgers de la dislocation parfaite. C'est la raison pour laquelle seules des dissociations en dislocations partielles de caractère vis n'ont été envisagées. On peut toutefois concevoir qu'elles puissent posséder également des composantes coins. Pour le déterminer, le calcul des γ -surfaces est nécessaire.

Pour des températures plus importantes supérieures à 1300°C, Bai et Kohlstedt (1992b) ont constaté l'activation du système de glissement $(010)[001]$ pour un axe de sollicitation orienté suivant la direction $[011]_c$. A 0K, la recombinaison du cœur de dislocation doit se faire le long de toute la ligne de dislocation en même temps

(Escaig (1968)). A température non nulle, les dislocations se déplacent par l'activation du mécanisme de double décrochement et il devient alors de plus en plus facile de faire passer un double décrochement dans le plan (010). L'effet d'orientation de la contrainte appliquée, important à basse température, peut progressivement diminuer par activation thermique.

5.1.3 Le glissement [100]

Le glissement de dislocations de vecteur de Burgers [100] est celui qui participe majoritairement à la déformation de l'olivine à haute température ($T > 1000^\circ\text{C}$). Il est généralement complètement absent à basse température au profit du glissement de dislocations de vecteur de Burgers [001]. Mais l'utilisation d'un axe de sollicitation orienté suivant la direction [110]c permet de désactiver ce dernier et de solliciter au maximum le système de glissement (010)[100]. Pourtant, à 800°C , il demeure peu activé et des dislocations de vecteur de Burgers [010] ont été caractérisées par microscopie électronique en transmission (Phakey *et al.* (1972)). C'est une des rares fois où ces dislocations ont été rencontrées car elles sont énergétiquement très défavorables. Nous avons d'ailleurs montré que cisailier de façon rigide le cristal suivant cette direction était bien plus difficile que suivant les directions [001] et [100].

Nous ne disposons donc pas de données valables à basse température et, dans le chapitre 1, nous avons fait le choix de considérer une même contrainte critique projetée dans les différents systèmes de glissement de vecteur de Burgers [100], ce qui nous a permis de déterminer une contrainte d'écoulement du polycristal proche de celle déterminée expérimentalement. Néanmoins il s'agit d'une hypothèse forte. En effet les observations microstructurales montrent que les boucles de dislocations ont des formes différentes selon le plan de glissement dans lequel elles glissent. Dans (010), la présence, à 800°C , de boucles carrées suggèrent que les dislocations vis et coins sont soumises à de la friction de réseau (Phakey *et al.* (1972)) alors qu'à plus haute température (1300°C) seules les dislocations coins tendent à être longues et plutôt droites (Durham *et al.* (1977), Kashima *et al.* (1983)). Dans (100), les dislocations vis sont plutôt droites (Durham *et al.* (1977)) et les dislocations coins sont courbes à très haute température (1600°C) mais disparaissent au profit de directions mixtes $\langle 110 \rangle$ vers 1150°C . A très haute température, d'autres systèmes $\{0kl\}[100]$ sont activés et se caractérisent par des dislocations mixtes droites de directions de ligne dépendant de la nature du plan de glissement. A partir de ces observations, il semble que le cœur des dislocations de vecteur de Burgers [100] soit complexe et dépende fortement du plan de glissement. Ceci laisse présager une anisotropie plastique parmi les systèmes de glissement de vecteur de Burgers [100].

Pourtant notre étude suggère que le cœur des dislocations de vecteur de Burgers [100] est peu étalé et que la largeur du cœur est identique quel que soit le plan de glissement où le cœur réside. Les simulations d'un cœur de dislocation vis par potentiels empiriques ne présentent pas non plus de déplacements atomiques importants selon la direction du vecteur de Burgers (Walker (2004)). Dans ce type de simulation, la dislocation est créée en déplaçant les atomes selon le champ de déplacement prédit par l'élasticité linéaire. Les positions des atomes sont ensuite relaxées pour déterminer la configuration du cœur de la dislocation. Les déplacements calculés en fonction de la distance au centre de la dislocation représentent alors la différence entre les positions "élastiques" et les positions relaxées (Figure 5-2). De tels déplacements d'atomes ne sont pas accessibles par le modèle de Peierls-Nabarro mais, qualitativement, on peut dire que les deux modèles montrent que les déplacements

atomiques intervenant dans le cœur de la dislocation vis de vecteur de Burgers [100] sont moins importants que dans celui de la dislocation vis de vecteur de Burgers [001].

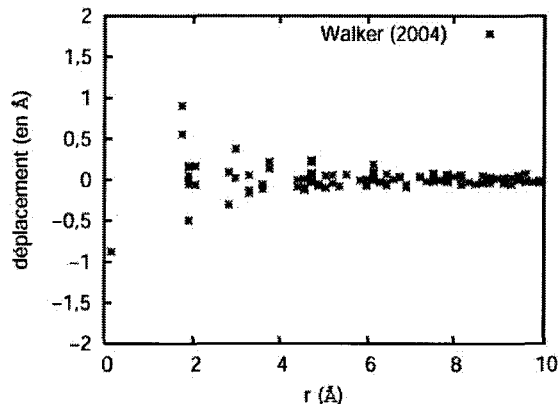


FIGURE 5-2

La simulation par potentiels empiriques donne les déplacements des atomes suivant la direction du vecteur de Burgers, autour d'un cœur de dislocation vis de vecteur de Burgers [100]. "r" représente la distance au centre de la dislocation. Reproduit à partir de Walker (2004).

Néanmoins ces deux modèles ne montrent pas que le cœur des dislocations vis de vecteur de Burgers [100] puisse être sessile et étalé dans certains plans plutôt que d'autres. La simulation par potentiels empiriques donne accès aux déplacements atomiques dans le cœur relaxé. Plutôt que de représenter le déplacement de chaque atome en fonction de la distance au centre de la dislocation en oubliant sa position autour du cœur, il serait peut-être plus productif d'analyser le cœur de la dislocation en utilisant la notation de Vitek *et al.* (1970). Cette dernière consiste à représenter, sur une projection du cœur de la dislocation vis suivant la direction de ligne, les déplacements relatifs de chaque atome avec ses voisins par des vecteurs de norme proportionnelle à la valeur du déplacement. Ce type de représentation a déjà été utilisé pour étudier les configurations de cœur dans des structures cristallographiques compactes (Vitek (1974), Duesbery (1998), Duesbery et Vitek (1998)) et désigne facilement les plans dans lesquels les déplacements atomiques sont plus importants. Cette façon d'appréhender la structure de cœur à trois dimensions doit certainement être modifiée pour être appliquée à une structure plus complexe comme la forstérite mais semble concevable et utile pour exploiter au maximum les résultats des simulations de Walker (2004).

5.1.4 Effet de la pression

Les barrières d'énergie de faute d'empilement (et donc les ISS) sont plus ou moins sensibles à la pression. En général les valeurs des ISS augmentent avec la pression, sauf dans le cas du cisaillement rigide correspondant au système de glissement (010)[001] pour lequel la pression a un effet adoucissant. Nous avons alors remarqué que, lorsque l'on augmentait la pression, le cisaillement suivant [100] devenait plus difficile dans le plan (010) et le cisaillement suivant [001] plus facile dans le même plan. Nous avons expliqué cet effet par une composante de dilatation importante au voisinage de la faute d'empilement (010)[100] contrairement au cas du cisaillement suivant [001] dans (010).

Récemment, des monocristaux orientés de forstérite ont été déformés par Paul Raterron (Raterron *et al.* (2005)) dans une machine de déformation D-DIA. Deux monocristaux sont déformés ensemble, dans le même assemblage, à la même contrainte, à 1400°C, pour des pressions comprises entre 3 GPa et 7 GPa approximativement. L'un est orienté suivant l'axe [110]_c pour solliciter majoritairement le système de glissement (010)[100] alors que l'autre est orienté suivant [011]_c pour solliciter majoritairement le système de glissement (010)[001]. L'intérêt de la machine de déformation D-DIA est qu'elle est placée sur une ligne synchrotron et que l'utilisation des rayons X permet de suivre in-situ l'évolution de la contrainte et de la déformation (par radiographie) de chacun des deux échantillons (Wang *et al.* (2003)). Lorsque la pression augmente, les résultats montrent que la vitesse de déformation du monocristal orienté pour activer le système de glissement (010)[001] croît jusqu'à dépasser celle de l'autre monocristal orienté pour favoriser (010)[100]. Il est alors intéressant de constater que c'est ce qui était pressenti par le calcul des ISS à partir des énergies de faute d'empilement. En effet, on avait constaté que l'ISS du système de glissement (010)[001] diminuait lorsque la pression était plus importante alors qu'elle augmentait pour tous les autres systèmes de glissement. Même si apparemment les ISS permettent d'expliquer un effet de pression, ce dernier doit trouver son explication physique dans un changement de la structure de cœur des dislocations de vecteur de Burgers [001] (ou de celle des dislocation de vecteur de Burgers [100]).

Sous pression de l'ordre de 10 GPa, on constate que les dislocations vis de vecteur de Burgers [001] sont toujours très droites et qu'elles participent majoritairement à la déformation (Covy *et al.* (2004)). Pour que celles-ci glissent plus facilement dans le plan (010), on peut imaginer que leur cœur s'étale (ou se dissocie) davantage dans ce plan au détriment des deux autres plans (100) et {110}. On a constaté d'ailleurs, à l'aide du modèle de P-N, que lorsque le cœur de la dislocation vis était uniquement étalé dans le plan (010), il avait tendance à être plus étendu sous pression. Pour les dislocations de vecteur de Burgers [100], le modèle de P-N montre que leur cœur planaire a tendance à être plus étroit lorsque la pression augmente, ce qui a pour effet d'élever la contrainte de Peierls. Ces deux résultats permettent d'expliquer l'effet de pression sur l'activité relative des dislocations de vecteur de Burgers [001] par rapport à celles de vecteur de Burgers [100].

Ainsi plusieurs paramètres jouent sur l'anisotropie plastique de la forstérite:

- la température: le glissement des dislocations de vecteur de Burgers [100] est favorisé et la loi de Schmid est mieux vérifiée pour les dislocations de vecteur de Burgers [001] lorsque l'on augmente la température.
- la vitesse de déformation: le glissement des dislocations de vecteur de Burgers [001] est favorisé lorsque l'on augmente la vitesse de déformation.
- La pression: le glissement des dislocations de vecteur de Burgers [001] est favorisé lorsque l'on augmente la pression.

Les météorites choquées réunissent deux conditions extrêmes en même temps. Au moment de leur impact avec la surface de la Terre, elles sont soumises à des vitesses de déformation et des pressions très importantes. Malgré les températures élevées qui doivent être mises en jeu lors du choc, on constate qu'elles se sont déformées essentiellement par glissement de dislocations de vecteur de Burgers [001].

Dans la partie profonde du manteau supérieur, les vitesses de déformation sont très lentes (de l'ordre de 10^{-14} s⁻¹), les contraintes très faibles et les pressions élevées (13 GPa). Les deux premières conditions favorisent le

glissement des dislocations de vecteur de Burgers [100] alors que la troisième favorise le glissement des dislocations de vecteur de Burgers [001] et il est difficile de savoir quelle est l'activité relative des deux types de glissement dans de telles conditions de déformation. Pour sonder l'intérieur de la Terre, l'utilisation des ondes sismiques est le seul outil disponible. L'anisotropie des vitesses de ces ondes est liée à la texture des roches qu'elles traversent dans le manteau. Cette anisotropie est d'autant plus faible que la profondeur atteinte dans le manteau est importante. Ceci a été jusqu'à récemment toujours interprété par le fait que les minéraux (dont l'olivine est le composant majoritaire) n'étaient pas texturés et qu'ils se déformaient par diffusion en volume et pas par glissement de dislocations. Il y a peu de temps cependant, une étude a montré que le fait de considérer que l'olivine se déforme essentiellement par glissement de dislocations de vecteur de Burgers [001] pouvait expliquer la faible anisotropie des vitesses des ondes sismiques (Mainprice *et al.* (2005)). Il est donc concevable que, dans les conditions du manteau supérieur profond, l'olivine se déforme surtout par glissement de vecteur de Burgers [001]. Dans ce cas, la pression favoriserait plus le glissement des dislocations de vecteur de Burgers [001] que les faibles vitesses de déformation et les hautes températures ne favorise le glissement de vecteur de Burgers [100].

5.2 Pertinence de la relation de Taylor dans la forstérite

Les microstructures sont une source d'informations précieuse pour décrypter l'histoire de roches. Les dislocations sont supposées témoigner de l'histoire thermomécanique et, en particulier, de la contrainte, paramètre particulièrement mal connu. On utilise parfois la distance moyenne entre sous-joints, mais le plus souvent, c'est à partir de la densité de dislocations que cette estimation est faite.

La relation de Taylor (1934) relie la contrainte appliquée à la densité de dislocations et s'écrit: $\frac{\tau}{\mu} = \alpha b \sqrt{\rho}$. Elle

est fondée sur les interactions à longue distance $\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)r}$ entre dislocations (Haasen (1968)). Plus la densité

de dislocations est importante, plus les distances qui les séparent sont petites et plus les forces d'interaction sont importantes. Dans ce cas, la valeur de α est de l'ordre de $\frac{1}{2\pi(1-\nu)}$. Elle s'applique également au modèle de

la forêt dans lequel les dislocations d'un système de glissement actif s'ancrent aux arbres de la forêt espacés statistiquement d'une distance $\frac{1}{\sqrt{\rho}}$ et se courbent sous l'effet de la contrainte. ρ est alors la densité de la

forêt constituée de dislocations du système de glissement sécant et α est un paramètre sans dimensions, valant $0,35 \pm 0,15$, qui traduit la force d'interaction avec la forêt. La formation de jonctions conditionne fortement la valeur du coefficient α dans les structures cubiques à faces centrées (Madec *et al.* (2002c)) ou dans les cubiques centrés dans le régime athermique (Püschl (1985), Püschl (2000)). Plus récemment, Madec *et al.* (2003b) ont montré que l'annihilation colinéaire pouvait participer de façon significative à la valeur de α .

Kohlstedt et Goetze (1974) ont montré, à partir d'essais de fluage sur des monocristaux d'olivine de composition Fe_{92} , que la contrainte d'écoulement était proportionnelle à $\sqrt{\rho}$ (où ρ est la densité totale de dislocations). Cette relation qui est indépendante de la température a été confirmée par d'autres études sur monocristaux déformés suivant les orientations [011]c, [110]c et [101]c (Durham *et al.* (1977); Bai et Kohlstedt (1992b); Kashima *et al.* (1983)) et sur polycristaux (Zeuch et Green (1979)).

Afin de comprendre quels sont les mécanismes qui permettent d'expliquer la relation entre la contrainte et la densité de dislocations dans la forstérite, nous proposons ici de compiler différents résultats obtenus par certains auteurs. Nous avons représenté, sur la Figure 5-3, la contrainte normalisée $\frac{\tau}{\mu}$ en fonction de la densité de dislocations totale ρ . Pour les monocristaux orientés, τ est choisie comme étant la contrainte résolue dans le système le plus activé. Pour les polycristaux, τ est considérée comme une moyenne en divisant la contrainte appliquée par le facteur de Taylor tel qu'il a été défini au chapitre 1 (cf 1.4.2).

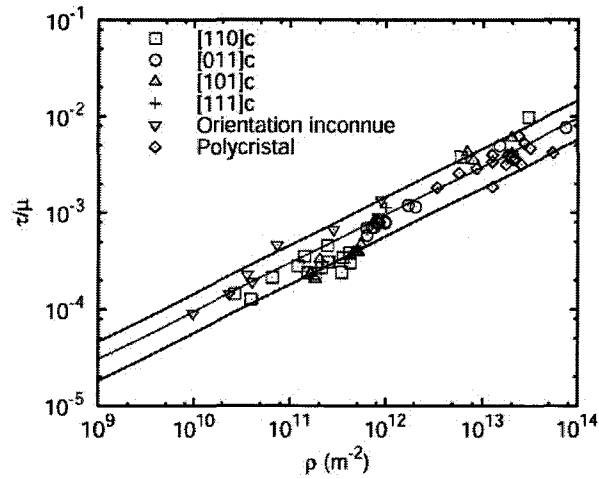


FIGURE 5-3

Contrainte résolue $\frac{\tau}{\mu}$ en fonction de la densité totale de dislocations ρ . Les données expérimentales sont issues de Zeuch et Green (1979) pour le polycristal, de Phakey et al. (1972), Kashima et al. (1983), Bai et Kohlstedt (1992b) et Durham et al. (1977) pour les monocristaux orienté suivant $\{110\}c$, et de Kohlstedt et Goetze (1974) pour le monocristal d'orientation inconnue. Ces données ont été ajustées et encadrées par des lois de la forme $\frac{\tau}{\mu} = \alpha b\sqrt{\rho}$ (voir texte).

Le meilleur ajustement est réalisé grâce à la relation: $\frac{\tau}{\mu} = 1,84b\sqrt{\rho}$. Alors qu'elles sont issues d'essais de déformation réalisés dans des conditions très différentes (glissement multiple ou simple, avec de la montée à haute température ou du glissement dévié), les données semblent s'aligner assez bien suivant cette relation sur un graphique "log/log". Mais l'utilisation d'une échelle logarithmique a tendance à réduire les écarts et, en général, les données sont comprises entre les deux droites (en trait gras) dont les équations sont $\frac{\tau}{\mu} = 1,1b\sqrt{\rho}$ et

$$\frac{\tau}{\mu} = 2,8b\sqrt{\rho}.$$

On peut faire quelques remarques quant aux valeurs de α et à la validité de la relation de Taylor:

- les valeurs de α déterminées à partir de données expérimentales sont étonnamment élevées. Pourtant nous avons montré qu'il n'y avait pas de formation de jonctions et qu'en présence de friction de réseau, les interactions colinéaires étaient rares. Les interactions à longue distance ne permettent pas non plus d'expliquer de telles valeurs ($\alpha \approx 0,2$).
- En présence de friction de réseau, la forme classique de la relation de Taylor n'est plus valable. En effet, lorsque les dislocations vis sont droites par exemple, la longueur des segments ancrés entre les arbres de la forêt n'est plus $\frac{1}{\sqrt{\rho}}$ (Kubin, communication personnelle). Il existe alors des formes plus compliquées qui permettent d'expliquer le durcissement de la forêt (Tang et al. (1999), Kubin et Devincere (1999)). Dans la forstérite, les dislocations sont soumises à la friction de réseau même à relativement haute température et la relation de Taylor ne s'applique plus dans ce domaine.

Comment expliquer la forte dépendance de la contrainte appliquée avec la densité de dislocation ? Si l'on trace la température des essais dont sont issues les données expérimentales en fonction de la densité de dislocations, on s'aperçoit que les plus fortes densités correspondent toujours aux plus basses températures et, inversement, les plus faibles densités aux plus hautes températures (Figure 5-4). La densité de dislocations semble avant tout fortement corrélée à la température de l'essai et la courbe contrainte-densité de la Figure 5-3 montre en réalité la dépendance de la contrainte de friction de réseau avec la température. Il peut s'agir d'un artefact et les valeurs de α , telles qu'elles ont été déterminées, n'auraient pas le sens communément admis.

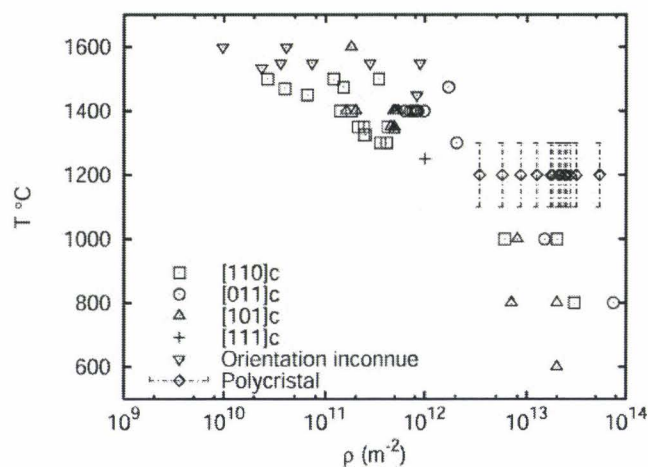


FIGURE 5-4

Température de l'essai de déformation en fonction de la densité de dislocations mesurée. On constate qu'il y a une corrélation entre les deux paramètres.

En fait, on écrit souvent que la contrainte projetée τ appliquée équilibre les forces de friction de réseau τ_f dépendantes de la température et les forces athermiques d'interaction avec la forêt de dislocation:

$$\tau = \tau_f + \alpha \mu b \sqrt{\rho} \quad (5-1)$$

Mais cela n'a un sens que si $\tau_f < \alpha \mu b \sqrt{\rho}$, c'est à dire quand la friction de réseau n'est pas trop importante. On peut alors séparer le domaine des basses températures ($T < 1000^\circ\text{C}$) du domaine des hautes températures pour étudier la validité d'une telle relation. On discutera des essais de déformation à vitesse constante réalisés par Phakey *et al.* (1972) pour les basses températures et de ceux de Kashima *et al.* (1983) pour les hautes températures.

- $T < 1000^\circ\text{C}$: le glissement de dislocations de vecteur de Burgers [001] (Phakey *et al.* (1972)):

A 600°C , il existe une forte friction de réseau sur les dislocations vis et la relation (5-1) ne s'applique pas. A partir de 800°C , les dislocations vis sont toujours aussi droites mais de petits accidents commencent à être visibles le long de la ligne. Cette température correspond à l'apparition du glissement dévié et on constate également la présence de petits débris (boucles prismatiques) et des entremêlements de dislocations. Ceci est le

témoin d'interactions entre dislocations faisant intervenir le glissement dévié. Les dislocations vis sont capables de se courber localement et d'interagir et la relation (5-1) peut s'appliquer lorsque $T > 800^\circ\text{C}$.

Dans ce domaine de température, les courbes contrainte-déformation présentent deux stades distincts. Pendant le stade 0, la contrainte augmente rapidement et les dislocations de caractère coin sont les seules mobiles laissant derrière elles de long dipôles vis sessiles. A la limite élastique, les dislocations vis commencent à être mobiles et les dislocations peuvent commencer à se multiplier. A cette contrainte, on peut donc considérer que la densité de dislocations est faible et proposer que $\tau_f \gg \alpha\mu b\sqrt{\rho}$. On peut alors déterminer la contrainte de friction τ_f comme étant égale à la limite élastique τ_{el} et calculer le coefficient α comme valant $\frac{\tau - \tau_{el}}{\mu b\sqrt{\rho}}$.

Malheureusement la limite d'élasticité est très mal définie à ces températures et le calcul de α devient très approximatif (Figure 5-5).

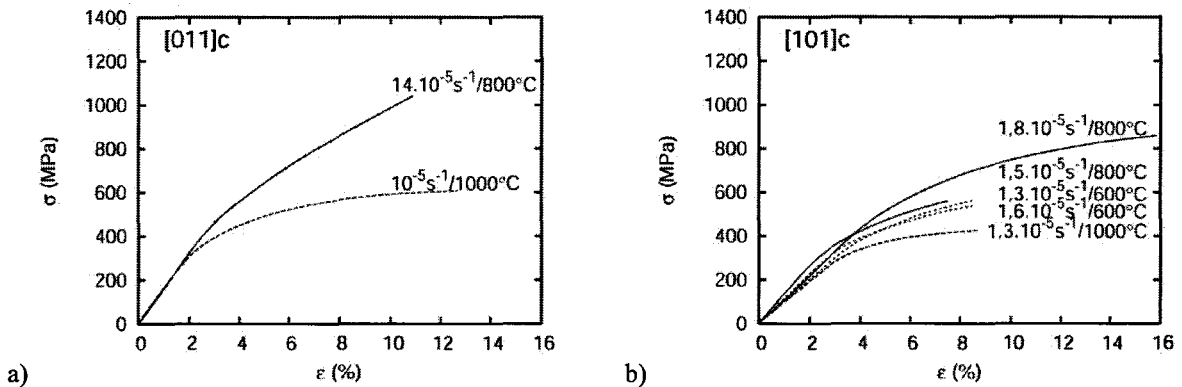


FIGURE 5-5

Courbes de compression à vitesse de déformation constante (Phakey) suivant l'orientation [011]c (a), [101]c (b). Les traits pleins correspondent à des essais réalisés à une température de 800°C , les traits en gros pointillés à une température de 1000°C et les traits en fins pointillés à une température de 600°C . On remarquera la difficulté de localiser la limite élastique

- $T > 1000^\circ\text{C}$: le glissement de dislocations de vecteur de Burgers [100] (Kashima *et al.* (1983)):

Les températures auxquelles ont été réalisés les essais de déformation à vitesse constante sont comprises entre 1350°C et 1500°C . Certains caractères de dislocations sont encore un peu soumis à de la friction de réseau (coins dans le système de glissement (010)[100] et vis dans le système de glissement (001)[100]) mais ils ne sont pas si droits que les dislocations vis de vecteur de Burgers [001] à basse température. Les courbes contrainte-déformation présentent presque toutes un crochet de compression et l'analyse microstructurale montre qu'au sommet du crochet, il n'existe aucune organisation de dislocations. Après le crochet de compression les dislocations coins du système de glissement (010)[100] s'organisent en sous-joints de flexion et les dislocations vis du système (001)[100] en sous-joints de torsion. On constate également qu'après la limite d'élasticité inférieure, les courbes contrainte-déformation présentent une légère consolidation, témoin d'éventuelles interactions entre dislocations (Figure 5-6).

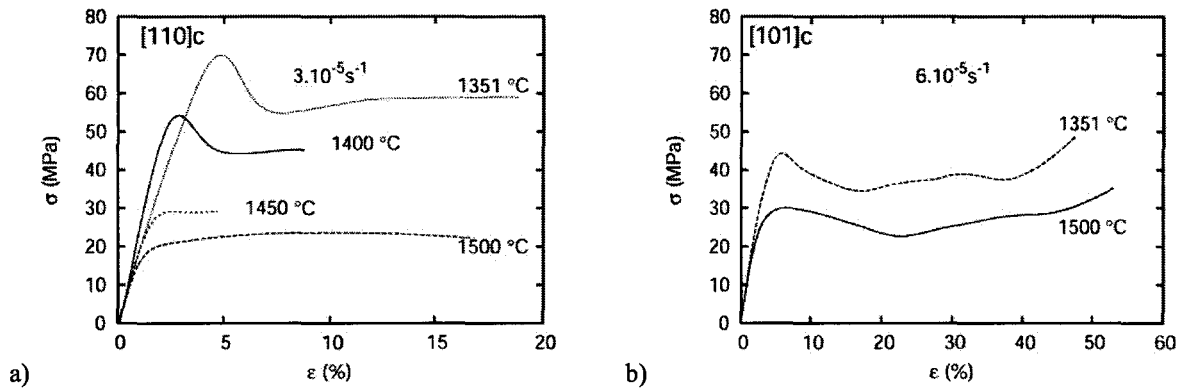


FIGURE 5-6

Courbes « contrainte-déformation » obtenues pour des monocristaux de forstérite synthétique déformés en compression suivant $[110]c$ (a) et suivant $[101]c$ (b).

Dans ce cas, on peut également définir la contrainte de friction comme étant égale à la limite d'élasticité

inférieure et calculer $\alpha = \frac{\tau - \tau_{el}}{\mu b \sqrt{\rho}}$. Kashima *et al.* (1983) n'ont mesuré les densités de dislocations que dans les

échantillons déformés suivant $[110]c$. On trouve dans ce cas des valeurs de α comprises entre 0,095 et 0,14, beaucoup plus basses que celles annoncées à partir des données brutes. Il est intéressant de remarquer que maintenant α est petit et du même ordre de grandeur que $\frac{1}{2\pi}$. Ceci est cohérent avec le fait que, suivant $[110]c$, le système de glissement $(010)[100]$ est le seul activé et que le faible durcissement calculé est issu des interactions dipolaires.

Certains points méritent d'être soulignés:

- L'emploi de la relation de Taylor, même si elle s'ajuste aux données expérimentales, ne se justifie pas à basse température et n'a aucun sens physique dans ce cas.
- Parmi toutes les données de la Figure 5-3, un nombre très restreint est exploitable et permet de déterminer un coefficient α . Une étude du durcissement plus poussée nécessiterait une campagne d'expérience dédiée au problème.
- Il semble qu'à basse température le glissement dévié des dislocations vis de vecteur de Burgers $[001]$ joue un rôle important dans l'interaction entre dislocations et la formation d'entremêlements. Ce mécanisme n'a pas été introduit dans les simulations de la dynamique des dislocations dans la forstérite et semble, à terme, incontournable.
- La montée de dislocations dans la forstérite a souvent été observée et, à 1500°C (0,75 fois la température de fusion de la forstérite), elle doit certainement jouer un rôle important dans la restauration de la contrainte interne et dans la formation de microstructures organisées.

5.3 Du monocristal au polycristal

La déformation plastique du monocristal est très anisotrope. Nous avons d'ailleurs montré que cette anisotropie évoluait en fonction de certains paramètres tels que la température, la pression ou la contrainte. D'autres paramètres, tels que la teneur en eau, la pression partielle d'oxygène ou la teneur en fer de l'olivine, peuvent également influencer l'activité relative des différents systèmes de glissement.

Nous avons constaté que la pression pouvait rendre le système de glissement (010)[001] plus facile et les autres plus difficiles, en accord avec les résultats expérimentaux de Paul Raterron sur monocristaux orientés. Comment cet effet de pression se traduit-il sur la déformation plastique du polycristal ? Est-ce que sous pression le système de glissement (010)[001] est favorisé par rapport aux autres ?

Le polycristal est un agrégat de grains d'orientations différentes. Lorsqu'il est soumis à une sollicitation mécanique, dans des conditions de température et de pression données, les grains vont se déformer par glissement de dislocations. Le monocristal de forstérite est plastiquement très anisotrope et les dislocations peuvent glisser sur quelques plans de glissement seulement. Ceci peut entraîner la formation d'orientations préférentielles au cours de la déformation.

Des calculs de ces orientations préférentielles ont été réalisés par Andrea Tommasi et David Mainprice (Laboratoire de Tectonophysique, Université de Montpellier) en utilisant un modèle auto-cohérent viscoplastique développé par Molinari *et al.* (1987) et par Lebensohn et Tomé (1993). La configuration de départ de ces simulations est une distribution de grains distribués au hasard sans orientation préférentielle. Les données d'entrée de la simulation sont les contraintes critiques d'activation dans les différents systèmes de glissement considérés. On peut alors suivre l'activité relative des différents systèmes de glissement au cours de la déformation.

Ceci peut nous permettre de savoir comment le système de glissement (010)[001] participe à la déformation du polycristal. A haute température (1400°C) et pression nulle, les systèmes (010)[001], (010)[100] et (001)[100] sont activés pour des contraintes critiques différentes (Tableau 5-1).

Systèmes de glissement	Contraintes critiques d'activation
(010)[100]	1
(001)[100]	1
(010)[001]	2
(100)[001]	3
{011}[100]	6
{110}[001]	6

TABLEAU 5-1

*Contraintes critiques d'activation relatives dans les différents systèmes de glissement utilisées dans le modèle VPSC.
(crédit: Andrea Tommasi)*

La Figure 5-7 montre l'influence du mode de sollicitation sur l'activation des différents systèmes de glissement. On constate que, dans certains cas (compression axiale ou transpression), le système de glissement (010)[001] devient plus actif que les autres systèmes de glissement au cours de la déformation. L'effet inverse peut également être constaté dans le cas de la transtension. Ceci montre que, bien que le système de glissement

(010)[001] ait une contrainte critique d'activation plus faible que celles de (010)[100] et (001)[100], il peut néanmoins participer de façon significative à la déformation du polycristal.

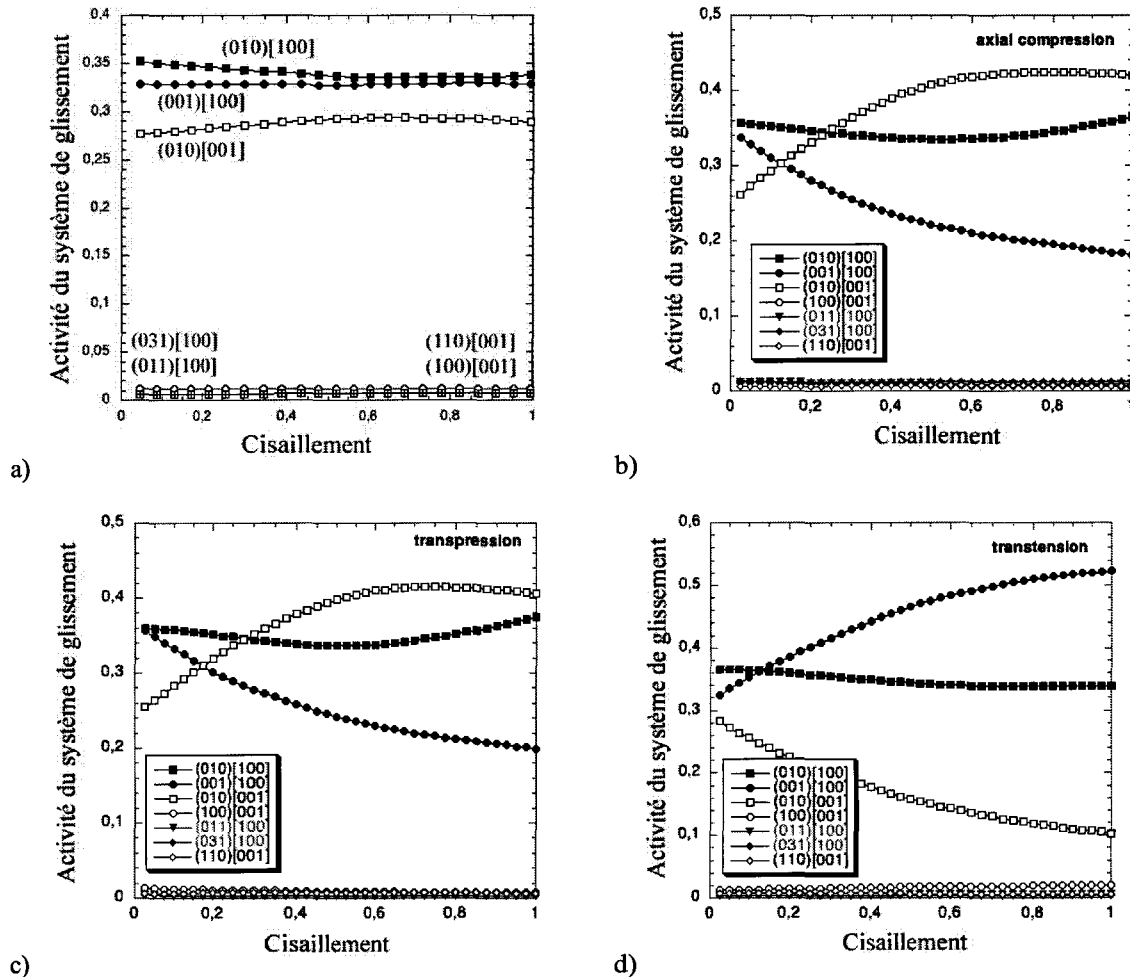


FIGURE 5-7

Evolution de l'activité des différents systèmes de glissement dans la forstérite en fonction du cisaillement dans la simulation VPSC.

Les symboles noirs correspondent à des systèmes de glissement de vecteur de Burgers [100] et les symboles vides pour ceux de vecteur de Burgers [001].

(a) Cisaillement simple, (b) Compression axiale, (c) Transpression, (d) Transtension¹

(crédit: Andrea Tommasi)

Le système de glissement (010)[001] devient d'autant plus facile que la pression est élevée et on conçoit bien maintenant qu'il participe encore davantage à la déformation du polycristal sous pression.

Couvy et al. (2004) ont constaté qu'à une température de 1400°C, domaine du glissement de dislocations de vecteur de Burgers [100] à pression ambiante, la forstérite se déformait par glissement de dislocations de vecteur de Burgers [001] à 13GPa. Les échantillons qui ont été utilisées dans ces essais de déformations contenaient des traces d'eau. Jung et Karato (2001b) ont suggéré que la présence d'eau pouvait induire une transition du glissement de vecteur de Burgers [100] vers celui de vecteur de Burgers [001] dans leurs échantillons. Jusqu'à

¹ La transpression et la transtension sont deux mots appartenant au vocabulaire des tectoniciens. Ils permettent de définir comment une plaque continentale est sollicitée. La transpression consiste en un cisaillement plus une compression et la transtension en un cisaillement plus une tension.

maintenant il était alors difficile de trancher entre un effet de pression et un effet de l'eau sur l'émergence inattendue du glissement de vecteur de Burgers [001] à partir des résultats de Couvy et al. (2004). Cependant le calcul des énergies de faute d'empilement ne fait intervenir ni d'activation thermique, ni d'activation par la contrainte, ni d'impuretés chimiques supplémentaires et a permis de mettre en valeur un effet intrinsèque de la pression sur la facilité du système de glissement (010)[001]. De plus les simulations de la plasticité du polycristal montrent que ce système est très impliqué dans la déformation de l'agrégat.

5.4 Perspectives

Dans cette étude, la modélisation multi-échelle de la plasticité de la forstérite en est à ses débuts et il existe un manque certain de compréhension autant à l'échelle nanoscopique qu'à l'échelle mésoscopique. Néanmoins certains points qui semblent être importants ont été soulevés et il est possible d'envisager dans le futur la construction de ponts entre les différentes échelles qui permettraient de comprendre certains mécanismes de la plasticité de la forstérite.

A basse température ($T < 1000^\circ\text{C}$), le monocristal se déforme uniquement par glissement de dislocations de vecteur de Burgers [001] dont les parties vis sont fortement soumises à la friction de réseau. Le glissement seul de ces dislocations confinées dans leur plan de glissement ne permet pas d'expliquer la formation de débris (boucles prismatiques) et d'enchevêtrements. Le glissement dévié peut être responsable de la formation d'une telle microstructure.

Son apparition à 800°C et celle du système de glissement $\{110\}[001]$ ont d'ailleurs été constatées par Phakey *et al.* (1972) suivant une orientation [101]_c. Lorsque les dislocations vis qui sont initialement mobiles dans leur plan de glissement (100) commencent à dévier dans un plan en zone $\{110\}$, elles laissent des segments dans le plan dévié qui peuvent interagir avec les dislocations du système primaire (dans notre cas: (100)[001]) et contribuer à entraver leur mouvement et à produire du durcissement. Ce type d'interaction a d'ailleurs été étudié statiquement dans le chapitre 4. La cartographie correspondant aux interactions colinéaires entre les dislocations du système primaire (100)[001] et d'un système dévié (110)[001] est rappelée sur la Figure 5-8. On remarque par exemple qu'une dislocation vis du système primaire s'annihile avec les dislocations mixtes du système dévié (dans les domaines blancs), lesquelles peuvent être produites par le glissement dévié.

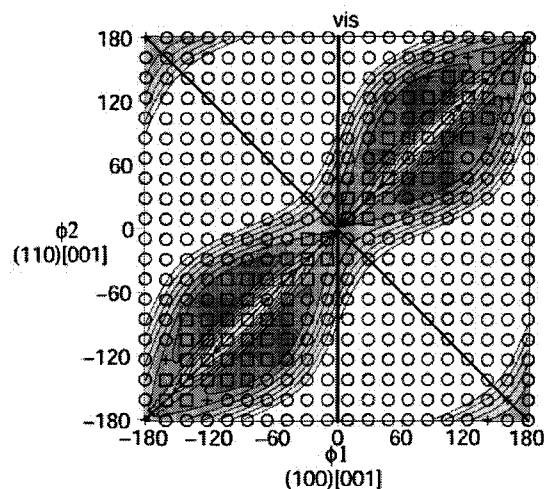


FIGURE 5-8

Cartographie des interactions colinéaires entre les systèmes de glissement primaire $(100)[001]$ et dévié $(110)[001]$. La direction de ligne vis du système primaire est représentée par la ligne verticale. Les domaines blancs sont les domaines attractifs et les domaines gris les domaines répulsifs (d'autant plus foncés que la force de répulsion entre les deux dislocations est forte). Les symboles correspondent aux résultats de la simulation: cercles pour une annihilation, carré pour une répulsion et croix pour un état croisé.

L'intégration du glissement dévié dans la simulation de la dynamique des dislocations est une étape supplémentaire dans l'étude du durcissement à basse température. D'un point de vue technique, la possibilité qu'ont les dislocations vis à changer de plan de glissement est déjà intégrée dans la simulation et, géométriquement, les plans déviés $\{110\}$ sont déjà pris en compte. Mais d'un point de vue théorique, on connaît peu de choses sur le glissement dévié des dislocations vis de vecteur de Burgers $[001]$. A quelle contrainte apparaît-il ? A quelle température ? Quel est l'effet de l'orientation sur la fréquence du phénomène ?

Qualitativement nous avons proposé que son apparition pouvait résulter du passage d'une configuration de cœur dissocié (ou étalé) dans le plan (100) à un cœur dissocié (ou étalé) dans le plan $\{110\}$. Que ce phénomène n'apparaisse qu'à partir de températures comprises entre 600°C et 800°C n'est pas élucidé dans l'état actuel des choses. Quantitativement, il est possible d'étudier le glissement dévié de plusieurs façons:

- La modélisation du cœur d'une dislocation vis $[001]$ grâce à des simulations utilisant des potentiels empiriques interatomiques doit permettre d'éclairer la configuration du cœur à trois dimensions. Walker (2004) a déjà développé un premier modèle qui est certes encore insuffisant pour étudier le cœur d'une dislocation vis $[001]$ mais qui est prometteur. A l'avenir, il serait intéressant d'envisager l'étude de ce cœur sous contrainte avec de telles simulations, à l'image du travail réalisé par Duesbery (1998) sur les structures cubiques à faces centrées.
- Lu *et al.* (2003) ont développé un modèle de P-N non-planaire en intégrant la connaissance des γ -surfaces dans les différents plans de glissement possibles. Ils ont alors étudié comment s'étalait le cœur de la dislocation sous contrainte pour étudier sa constriction et le glissement dévié d'une ligne de dislocation infinie. L'application de ce modèle à la forstérite est déjà envisageable car nous connaissons les énergies de faute d'empilement dans les différents plans de glissement d'une dislocation de vecteur de Burgers $[001]$. Néanmoins à terme, pour que ce modèle soit plus juste, il sera nécessaire de calculer les γ -surfaces pour savoir si le cœur de la dislocation ne possède pas de composantes coins.

- Expérimentalement, des essais mécaniques, couplés à des observations microstructurales au microscope électronique en transmission, sur monocristaux suivant des orientations qui solliciteraient différemment le cœur des dislocations pourraient donner des renseignements sur les conditions d'apparition du glissement dévié. Notamment sur l'effet de la température que ne prennent pas en compte les deux modèles théoriques à l'échelle atomique.

A haute température ($T > 1000^\circ\text{C}$), le glissement de vecteur de Burgers $[100]$ prend le pas sur le glissement de vecteur de Burgers $[001]$, jusqu'à être le seul actif à très haute température ($T > 1300^\circ\text{C}$). Il faut distinguer deux orientations différentes qui ne conduisent pas aux mêmes situations.

L'orientation $[110]_c$ sollicite surtout le système de glissement $(010)[100]$ qui est le seul activé la plupart du temps (Durham *et al.* (1977), Kashima *et al.* (1983), Gueguen et Darot (1982), Bai et Kohlstedt (1992b)). Nous avons montré que le durcissement était alors certainement dû à des interactions dipolaires entre dislocations du même système de glissement.

Il est plus intéressant de considérer l'orientation $[101]_c$ qui sollicite surtout les systèmes de glissement $(100)[001]$ et $(001)[100]$. Lorsque la température est proche de 1000°C , ces deux systèmes peuvent être activés ensemble. Les dislocations des deux systèmes de glissement se croisent, mais nous avons montré qu'il ne se formait aucune jonction et que les dislocations n'interagissaient que par l'intermédiaire des forces de répulsion ou d'attraction, trop faibles pour les ancrer. De plus dans la simulation de la dynamique des dislocations, à une température proche de 1000°C , les dislocations vis des deux systèmes sont soumises à une forte friction de réseau supérieure aux forces de répulsion ou d'annihilation, ce qui ne conduit pas à la moindre élévation de contrainte sur les courbes contrainte-déformation. Néanmoins, en se croisant, les deux types de dislocation peuvent former des crans sessiles le long de la ligne de dislocation.

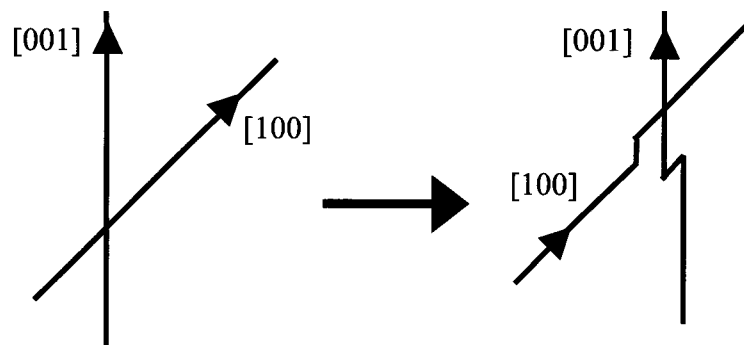


FIGURE 5-9

Formation de crans après intersection entre deux dislocations vis de vecteurs de Burgers $[100]$ et $[001]$. Ces crans ne sont pas dans le plan de glissement des deux dislocations vis et ne peuvent donc pas disparaître par glissement.

La formation d'un cran le long d'une dislocation vis droite a pour effet de diminuer sa longueur libre. En présence de friction de réseau, la loi de vitesse des dislocations est basée sur un mécanisme de formation et

propagation de doubles décrochements et elle dépend linéairement de la longueur de la dislocation. Les crans auront donc pour effet de baisser la vitesse des dislocations vis.

La possibilité de former des crans dans la simulation de la dynamique des dislocations n'est pas prise en compte géométriquement mais on peut en tenir compte de façon indirecte. En moyenne, le nombre de crans formés sur les dislocations d'un système de glissement correspond au nombre d'intersections qui se produisent entre celles-ci et celles de la forêt. Dans la simulation de la dynamique des dislocations, ce nombre est facilement accessible. Dans la situation où deux dislocations vis appartenant aux systèmes de glissement (100)[001] et (001)[100] se rencontrent, un cran qui ne se trouve plus dans le plan de glissement se forme sur chacune des deux dislocations vis. De tels crans ne sont pas capables de glisser et pour disparaître ils doivent se déplacer par montée. On peut alors introduire une durée de vie de ces crans, d'autant plus courte que la montée est active (donc que la température est importante). En pratique, on définit un pourcentage d'efficacité qui représente en fait la proportion de crans que l'on conserve d'un pas de temps de la simulation au suivant (100% signifie que l'on garde tous les crans et 0% que l'on ne prend pas en compte la formation des crans). Une simulation de la dynamique des dislocations a été réalisée à 1027°C, 10^{-5}s^{-1} , suivant l'orientation [101]c, avec une efficacité de crans de 20%. La courbe contrainte-déformation est présentée sur la Figure 5-10 et comparée à une simulation identique mais avec une efficacité des crans de 0%.

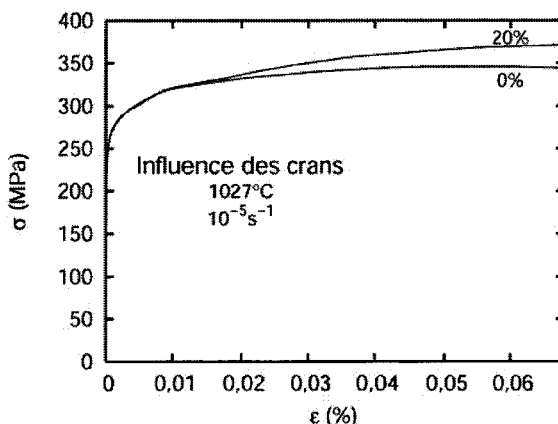


FIGURE 5-10

Courbes contrainte-déformation issues de deux simulations réalisées à 1027°C, 10^{-5}s^{-1} , suivant l'orientation [101]c, avec une efficacité de crans de 20% et de 0%.

Les deux systèmes de glissement (100)[001] et (001)[100] sont activés en même temps. Les dislocations vis sont soumises à de la friction de réseau et les dislocations coins sont les seules mobiles avant la limite d'élasticité. Le stade 0 des deux courbes est identique puisque aucune interaction entre les deux populations de dislocations vis n'est encore intervenu. Puis les dislocations vis des deux systèmes deviennent mobiles, se croisent et forment des crans. On remarque alors que, dans le cas où l'efficacité des crans n'est pas nulle, la contrainte d'écoulement est plus importante. Ceci montre que la formation de crans peut contribuer de façon significative au durcissement, même en présence de friction de réseau.

L'efficacité des crans est un paramètre qu'il faut ajuster. Il dépend surtout de la capacité des crans à s'éliminer, ce qui ne peut se faire que par montée. Il n'existe, à notre connaissance, aucune observation microstructurale ni

d'essai de déformation dans cette gamme de température ($T \approx 1000^\circ\text{C}$) qui confirmerait la présence de durcissement et permettrait de calibrer la simulation.

Kashima *et al.* (1983) ont montré qu'à plus haute température (1300°C - 1500°C) et taux de déformation important, les dislocations de vecteur de Burgers [001] pouvaient être activées en plus de celles de vecteur de Burgers [100], entraînant un durcissement sur les courbes contrainte-déformation (cf §1.3.2.2) plus important que suivant [110]c. A de telles températures, la montée doit être active et les crans ne constituent peut-être plus un mécanisme de durcissement efficace. Les dislocations ne sont plus autant soumises à de la friction de réseau et le durcissement apparent est peut-être le résultat des interactions élastiques de répulsion ou d'attraction entre dislocations de vecteurs de Burgers [100] et [001].

Conclusion

Ce travail présente la première tentative de modélisation numérique de la plasticité de la forstérite. Deux échelles spatiales pertinentes pour l'étude des mécanismes physiques ont été considérées. La structure de cœur des dislocations n'a pas été abordée directement à l'échelle atomique. Cette approche est encore trop lourde numériquement dans les minéraux. Nous avons choisi d'aborder le cisaillement plastique au travers du calcul des énergies de fautes d'empilements généralisées par calcul *ab initio*. L'application du modèle de Peierls a permis de déterminer les étalements de cœur planaire et les contraintes de Peierls des différents systèmes de glissement de l'olivine. La simulation de la dynamique des dislocations, quant à elle, a pu donner des informations sur l'activation respective des deux types de dislocation et sur leurs interactions.

Les résultats obtenus aux différentes échelles ont permis de dégager les points suivants:

- Le fait que le glissement de dislocations de vecteur de Burgers [001] soit favorisé aux hautes contraintes est difficilement vérifiable par le calcul des contraintes de Peierls à partir des énergies de faute d'empilement. Néanmoins le choix de lois de vitesse basées sur un mécanisme de formation et propagation de doubles décrochements et calibrées à partir des données mécaniques existantes permettent de rendre compte d'un effet de la contrainte et de la vitesse de déformation sur le type de dislocations activées. Ainsi, les dislocations de vecteurs de Burgers [001] participent d'autant plus à la déformation du monocristal que la contrainte est importante. Cet effet peut être obtenu par exemple en augmentant la vitesse de déformation.
- L'effet de la pression sur la plasticité des minéraux est un des enjeux majeurs en géophysique. Des résultats expérimentaux récents ont montré que le glissement de dislocations de vecteur de Burgers [001] prédomine aux pressions de la base du manteau supérieur. Cependant, la réalisation d'expériences de hautes pressions reste très délicate et tous les paramètres (eau, contrainte) ne sont pas encore parfaitement contrôlés. L'approche numérique s'est avérée ici très fructueuse. Le calcul des énergies de fautes d'empilements généralisées a montré, dans un premier temps, que le cisaillement rigide (quantifié par les valeurs des *JSS*) dans le plan (010) suivant la direction [001] devenait plus facile à haute pression (10 GPa). Puis nous avons mis en évidence que, contrairement aux dislocations de vecteur de Burgers [100], le cœur des dislocations de vecteur de Burgers [001] avait tendance à s'étaler davantage dans le plan (010) à haute pression. Ce résultat étaye, en fournissant une interprétation physique, l'hypothèse d'un effet intrinsèque de la pression sur les propriétés des dislocations. C'est un résultat important. Au niveau fondamental tout d'abord puisque les effets de la pression sur la plasticité sont encore très peu documentés. Au niveau des implications géophysiques ensuite car cet effet de la pression permet de rendre compte de l'évolution de l'anisotropie sismique avec la profondeur dans le manteau supérieur. Ces implications sont discutées dans un article récent paru dans *Nature* (Mainprice *et al.*, 2005).
- Les résultats expérimentaux concernant la déformation de monocristaux d'olivine orientés à des températures inférieures à 1000°C semblent montrer que l'orientation [011]_c est plus dure que

l'orientation [101]c. Nous avons expliqué ce fait en proposant que le cœur des dislocations vis de vecteur de Burgers [001] était dissocié ou préférentiellement étalé dans les plans (100) ou/et {110}. La loi de Schmid ne serait pas vérifiée pour ces dislocations vis. Quant aux dislocations de vecteur de Burgers [100], ni la détermination des étalements de cœur ni les résultats expérimentaux ne permettent de conclure à un effet de l'orientation sur leur activation.

- L'étude des interactions entre les dislocations de vecteurs de Burgers [100] et [001] a montré que la formation des jonctions n'est pas favorable, que la pression ne la favorise pas davantage et qu'elle ne doit donc pas contribuer au durcissement dans la forstérite (autant à pression ambiante qu'à haute pression).

La modélisation numérique de la plasticité de l'olivine aux deux échelles comporte bien sûr des lacunes que ce travail a permis de déceler et qu'il serait souhaitable de combler dans une étude future:

- Nous pensons que les dislocations [001] vis possèdent un cœur à trois dimensions qui peut être étalé dans plusieurs plans de glissement. Le développement futur d'un modèle de P-N généralisé à trois dimensions dans la forstérite sera certainement utile pour affiner notre compréhension de la structure de cœur avant d'entamer une modélisation complète à l'échelle atomique. De plus, la détermination du cœur ne prend en compte que des composantes vis. Rien ne dit que le cœur ne possède pas de composantes coins. Pour le savoir, il est nécessaire de calculer les γ -surfaces.
- La prise en compte du glissement dévié des dislocations vis de vecteur de Burgers [001] dans la simulation de la dynamique des dislocations semble incontournable pour pouvoir modéliser le durcissement à basse température. Les mécanismes physiques qui le contrôlent sont pour l'instant inaccessibles et de nouvelles études expérimentales couplées à un modèle de cœur à trois dimensions sont nécessaires pour progresser dans ce domaine.
- Un mécanisme de durcissement par les crans a également été envisagé lorsque les dislocations de vecteurs de Burgers [100] et [001] sont activées en même temps à des températures proches de 1000°C et pour une orientation [101]c du monocristal par rapport à l'axe de sollicitation. Un moyen de vérifier si ce mécanisme a lieu est de vérifier si les courbes contrainte-déformation présentent une consolidation lors d'essais de déformation à vitesse constante. Ceci nécessite de réaliser une nouvelle campagne d'essais car entre 1000°C et 1300°C il n'existe pas de telles informations.
- La calibration des lois de vitesse des dislocations de vecteur de Burgers [100] dans la simulation de la dynamique des dislocations est mal contrainte et la forme des équations de vitesse utilisée n'est pas certaine. Malgré une abondante littérature, les mécanismes élémentaires de la plasticité de l'olivine apparaissent insuffisamment documentés. A basse température ($T < 800^\circ\text{C}$), les dislocations de vecteur de Burgers [100] ne sont pas ou peu activées et il semble difficile de mieux contraindre leur mobilité à partir de données mécaniques. Néanmoins il apparaît utile d'avoir une idée plus précise de la configuration de glissement de ces dislocations à des températures plus importantes. L'utilisation de la microscopie électronique en transmission apparaît incontournable à ce stade, car il nous semble que l'utilisation généralisée d'observations en microscopie optique d'échantillons décorés a représenté un frein à l'obtention d'informations fiables sur les microstructures de dislocations. Cela permettra notamment de savoir avec plus de certitude si les dislocations vis sont réellement beaucoup moins

mobiles que les dislocations coins dans le plan (001) et, inversement, si les dislocations coins sont réellement moins mobiles que les dislocations vis dans (010).

- A haute température ($T > 1300^{\circ}\text{C}$), les courbes contrainte-déformation peuvent présenter une consolidation. Lorsque l'on déforme la forstérite suivant $[110]_c$, cette consolidation est suivie d'une stagnation ou d'une diminution de la contrainte qui peut être le résultat d'une restauration de la contrainte interne par montée ou glissement dévié. La détermination de l'évolution de la densité de dislocations en fonction de la déformation et en fonction d'un temps de recuit à une certaine température pourrait permettre de faire la part entre multiplication de dislocations et annihilation par montée ou glissement dévié. Lorsque l'on déforme la forstérite suivant $[101]_c$, la consolidation est plus importante. Il semblerait qu'elle corresponde à l'activation du système $(100)[001]$ et qu'elle soit le résultat de l'interaction des dislocations de ce système avec celles du système primaire $(001)[100]$. De la même façon, la détermination de l'évolution de la densité de dislocations de ces deux systèmes en fonction de la déformation pourrait fournir des informations intéressantes sur la compréhension de ce phénomène.

Enfin, nous avons fait peu de cas de la montée des dislocations. Ce mécanisme contribue-t-il à la déformation du cristal ou juste à une restauration de la contrainte interne ? A terme, il semble nécessaire d'introduire ce mécanisme dans la simulation de la dynamique des dislocations pour aborder le fluage des minéraux du manteau.



Bibliographie

- Adda, Y., J. M. Dupouy, J. Philibert et Y. Quéré, Eds. (1991). Eléments de métallurgie physique. INSTN-CEA Collection Enseignement.
- Alfe, D., G. Kresse et M. J. Gillan (2000). "Structure and dynamics of liquid iron under Earth's core conditions." Physical Review B **61**: 132-142.
- Amodeo, R. J. et N. M. Ghoniem (1990a). "Dislocation dynamics. 1. A proposed methodology for deformation micromechanics." Physical Review B **41**: 6958-6967.
- Amodeo, R. J. et N. M. Ghoniem (1990b). "Dislocation dynamics. 2. Applications to the formation of persistent slip bands, planar arrays, and dislocation cells." Physical Review B **41**: 6968-6976.
- Ashworth, J. R. et D. J. Barber (1975). "Electron petrography of shock-deformed olivine in some stony meteorites." Earth and Planetary Science Letters **27**: 43-50.
- Bai, Q. et D. L. Kohlstedt (1992a). "Substantial hydrogen solubility in olivine and implications for water storage in the mantle." Nature **357**: 672-674.
- Bai, Q. et D. L. Kohlstedt (1992b). "High-temperature creep of olivine single crystals, 2. Dislocation structures." Tectonophysics **206**: 1-29.
- Bai, Q., S. J. Mackwell et D. L. Kohlstedt (1991). "High-temperature creep of olivine single crystals, 1. Mechanical results for buffered samples." Journal of Geophysical Research **96**(B2): 2441-2463.
- Barbe, F., L. Decker, D. Jeulin et G. Cailletaud (2001a). "Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1: F.E. model." International Journal of Plasticity **17**: 513-536.
- Barbe, F., S. Forest et G. Cailletaud (2001b). "Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 2: results." International Journal of Plasticity **17**: 537-563.
- Barron, T. H. K. et M. L. Klein (1965). "Second-order elastic constants of a solid under stress." Proc. Phys. Soc. **85**: 523-532.
- Bass, J. D. (1995). Elasticity of minerals, glass, and melts. Mineral Physics and Crystallography: A Handbook of Physical Constants. T. J. Ahrens. Washington D.C., AGU: 46-63.
- Béjina, F., O. Jaoul et R. C. Liebermann (1999). "Activation volume of Si diffusion in San Carlos olivine: Implications for upper mantle rheology." Journal of Geophysical Research **104**: 25529-25542.
- Berveiller, M. et A. Zaoui (1997). Modélisation de la déformation plastique des polycristaux. Techniques de l'Ingénieur. **M48**.
- Blacic, J. B. (1972). Effect of water on the experimental deformation of olivine. Flow and Fracture of Rocks. H. C. Heard, I. Y. Borg, N. L. Carter and C. B. Raleigh, American Geophysical Union Monograph. **16**: 109-115.
- Boullier, A. M. et A. Nicolas (1975). "Classification of texture and fabrics of peridotite xenoliths from South African kimberlite." Physics and Chemistry of the Earth **9**: 467-468.
- Bowen, N. L. et J. F. Schairer (1932). "The system FeO-SiO₂." American Journal of Science **24**(141): 177-213.
- Brodholt, J., A. Patel et K. Refson (1996). "An ab initio study of the compressional behavior of forsterite." American Mineralogist **81**: 257-260.

- Brown, G. E. (1982). Olivine and silicate spinels. Orthosilicates. P. H. Ribbe. Washington, Mineralogical Society of America Review in Mineralogy (2nd edition). 5: 275.
- Bulatov, V., M. Rhee et W. Cai (2001a). "Periodic boundary conditions for dislocation dynamics simulations in three dimensions." Mat. Res. Symp. Proc. 653.
- Bulatov, V., M. Tang et H. M. Zbib (2001b). "Crystal plasticity from dislocation dynamics." MRS Bulletin 26: 191-195.
- Bulatov, V. V. et E. Kaxiras (1997). "Semidiscrete variational Peierls Framework for dislocation core properties." Physical Review Letters 78(22): 4221-4224.
- Bussod, G. Y., T. Katsura et D. C. Rubie (1993). "The large volume multi-anvil press as a high P-T deformation apparatus." Pure and Applied Geophysics 141: 579-599.
- Cai, W., C. Lu, P. H. Yap et Y. Y. Wang (2002). "How to affect stacking fault energy and structure by atom relaxation." Applied Physics Letters 81(19): 3543-3545.
- Caristan, Y. (1975). La déformation plastique des lherzolites de l'étang de Lers, Universités de Paris VI et Paris VII. **Thèse**.
- Carrez, P., P. Cordier, B. Devincré et L. P. Kubin (2005). "Dislocation reactions and junctions in MgO." Materials Science and Engineering A 400-401: 325-328.
- Carter, N. L. et H. G. Ave'Llallemant (1970). "High temperature flow of dunite and peridotite." Geological Society of America Bulletin 81: 2181-2202.
- Carter, N. L., C. B. Raleigh et P. S. Decarli (1968). "Deformation of olivine in stony meteorites." Journal of Geophysical Research 73(16): 5439-5461.
- Chopra, P. N. et M. S. Paterson (1984). "The role of water in the deformation of dunite." Journal of Geophysical Research 89(B9): 7861-7876.
- Christian, J. W. et V. Vitek (1970). "Dislocations and stacking faults." Rep. Prog. Phys. 33: 307-411.
- Couvy, H., H. J. Frost, F. Heidelbach, K. Nyilas, T. Ungár, S. J. Mackwell et P. Cordier (2004). "Shear deformation experiments of forsterite at 11 GPa - 1400 °C in the multianvil apparatus." European Journal of Mineralogy 16: 877-889.
- da Silva, C., L. Stixrude et R. M. Wentzcovitch (1997). "Elastic constants and anisotropy of forsterite at high pressure." Geophysical Research Letters 24(15): 1963-1966.
- Darot, M. (1980). Déformation expérimentale de l'olivine et de la forsterite. Nantes, France, Univ. de Nantes. **Thèse**.
- Darot, M. et Y. Gueguen (1981). "High-temperature creep of forsterite single crystals." Journal of Geophysical Research 86(B7): 6219-6234.
- Davies, G. F. (1999). Dynamic Earth. Plates, plumes and mantle convection, Cambridge University Press.
- Devincré, B. (1993). Simulations de la dynamique des dislocations ? une échelle mésoscopique: une étude de la déformation plastique. Orsay, Université de Paris XI. **Thèse**.
- Devincré, B. (1995). "Three-dimensional stress field expressions for straight dislocation segments." Solid State Communications 93(11): 875-878.
- Devincré, B. et M. Condat (1992). "Model validation of a 3D simulation of dislocation dynamics: discretization and line tension effects." Acta Metallurgica et Materialia 40(10): 2629-2637.

- Devincre, B. et L. P. Kubin (1994). "Simulations of forest interactions and strain hardening in FCC crystals." Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **2**: 559-570.
- Devincre, B. et L. P. Kubin (1997). "Mesoscopic simulations of dislocations and plasticity." Materials Science and Engineering A **234-236**: 8-14.
- Domain, C., R. Besson et A. Legris (2004). "Atomic-scale ab initio study of the Zr-H system: II. Interaction of H with plane defects and mechanical properties." Acta Materialia **52**: 1495-1502.
- Downs, R. T., C.-S. Zha, T. S. Duffy et L. W. Finger (1996). "The equation of state of forsterite to 17,2 GPa and effects of pressure media." American Mineralogist **81**: 51-55.
- Duesbery, M. S. (1998). "Dislocation motion, constriction and cross-slip in fcc metals." Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **6**: 35-49.
- Duesbery, M. S. et V. Vitek (1998). "Plastic anisotropy in bcc transition metals." Acta Materialia **46(5)**: 1481-1492.
- Duffy, T. S. et J. N. Wang (1998). Pressure-volume-temperature equations of state. Reviews of Mineralogy. R. J. Hemley, Mineralogical Society of America. **37**: 425-457.
- Duffy, T. S., C.-S. Zha, R. T. Downs, H.-K. Mao et R. Hemley (1995). "Elasticity of forsterite to 16 GPa and the composition of the upper mantle." Nature **378**: 170-173.
- Durham, W. B., C. Froidevaux et O. Jaoul (1979). "Transient and steady-state creep of pure forsterite at low stress." Physics of the Earth and Planetary Interiors **19**: 263-274.
- Durham, W. B. et C. Goetze (1977a). "Plastic flow of oriented single crystals of olivine - 1. Mechanical data." Journal of Geophysical Research **82(36)**: 5737-5753.
- Durham, W. B. et C. Goetze (1977b). "A comparison of creep properties of pure forsterite and iron bearing olivine." Tectonophysics **40**: 15-18.
- Durham, W. B., C. Goetze et B. Blake (1977). "Plastic flow of oriented single crystals of olivine - 2. Observations and interpretations of the dislocation structures." Journal of Geophysical Research **82(36)**: 5755-5770.
- Durinck, J., A. Legris et P. Cordier (2005). "Influence of crystal chemistry on ideal plastic shear anisotropy in forsterite: first principle calculations." American Mineralogist **90**: 1072-1077.
- Dziewonski, A. M. et D. L. Anderson (1981). "Preliminary reference Earth model." Physics of the Earth and Planetary Interiors **25**: 297-356.
- El-Azab, A. (2000). "The boundary value problem of dislocation dynamics." Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **8**: 37-54.
- Escaig, B. (1968). Contribution à l'étude des déviations dans la structure cubique faces centrées, cubique centrée, et hexagonale compacte. Paris, Université de Paris. **Thèse**.
- Essmann, U. et H. Mughrabi (1979). "Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities." Philosophical Magazine A **40(6)**: 731-756.
- Evans, B. et C. Goetze (1979). "The temperature variation of hardness of olivine and its implication for polycrystalline yield stress." Journal of Geophysical Research **84(B10)**: 5505-5524.
- Fivel, M. et G. Canova (1999). "Developing rigorous boundary conditions to simulations of discrete dislocation dynamics." Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **7**: 753-768.
- Fivel, M. et S. Forest (2004). Plasticité cristalline et transition d'échelle: cas du polycristal. Techniques de l'Ingénieur. **M4017**.

- Foreman, A. J. E. et M. J. Makin (1966). "Dislocation movement through random arrays of obstacles." Philosophical Magazine: 911-924.
- Gaboriaud, R.-J. (1986). "Dislocations in olivine single crystals indented between 25 and 1100°C." Bull. Mineral. **109**: 185-191.
- Gaboriaud, R.-J., M. Darot, Y. Gueguen et J. Woïrgard (1981). "Dislocations in olivine indented at low temperatures." Phys. Chem. Minerals **7**: 100-104.
- Goetze, C. (1978). "The mechanisms of creep in olivine." Phil. Trans. R. Soc. Lond. **A288**: 99-119.
- Goetze, C. et D. L. Kohlstedt (1973). "Laboratory study of dislocation climb and diffusion in olivine." Journal of Geophysical Research **78**(26): 5961-5971.
- Gomez-Garcia, D., B. Devincere et L. P. Kubin (1999). "Dislocation dynamics in confined geometry." J. Comput. Aided Mater. Des. **6**: 157-164.
- Graham, E. K. et G. R. Barsch (1969). "Elastic constants of single-crystal forsterite as a function of temperature and pressure." Journal of Geophysical Research **74**(25): 1969.
- Green, D. H. et E. Ringwood (1963). "Mineral assemblages in a model of mantle composition." Journal of Geophysical Research **68**: 937-945.
- Green, H. W. et R. S. Borch (1987). "The pressure dependence of creep." Acta Metallurgica **35**: 1301-1315.
- Gueguen, Y. (1977). "Dislocations in mantle peridotite nodules." Tectonophysics **39**(1-3): 231-254.
- Gueguen, Y. (1979). "Dislocations in naturally deformed terrestrial olivine: classification, interpretation, applications." Bull. Mineral. **102**: 178-183.
- Gueguen, Y. et M. Darot (1982). "Les dislocations dans la forstérite déformée à haute température." Philosophical Magazine A **45**(3): 419-442.
- Haasen, P. (1968). Dislocation dynamics in the diamond structure. Dislocation Dynamics. A. R. Rosenfield, G. T. Hahn, A. L. Bement and R. I. Jaffee. New York, McGraw Hill: 701-718.
- Hartford, J., B. von Sydow, G. Wahnström et B. I. Lundqvist (1998). "Peierls barriers and stresses for edge dislocations in Pd and Al calculated from first principles." Physical Review B **58**(5): 2487-2496.
- Hirsch, P. B. (1960). Fifth International Congress of Crystallography, Cambridge.
- Hirth, J. P. et J. Lothe (1982). Theory of dislocations. Florida, Krieger Publishing Company.
- Hohenberg, P. et W. Kohn (1964). "Inhomogeneous electron gas." Physical Review **136**(3B): 864-871.
- Isaak, D. G., O. L. Anderson et T. Goto (1989). "Elasticity of single-crystal forsterite measured to 1700 K." Journal of Geophysical Research **94**(B5): 5895-5906.
- Isaak, D. G., E. K. Graham, J. D. Bass et H. Wang (1993). "The elastic properties of single-crystal fayalite as determined by dynamical measurement techniques." Pure Appl. Geophys. **141**: 393-414.
- Jaoul, O., C. Froidevaux, W. B. Durham et M. Michaut (1980). "Oxygen self-diffusion in forsterite: implications for the high-temperature creep mechanism." Earth and Planetary Science Letters **47**: 391-397.
- Jaoul, O., M. Poumellec, C. Froidevaux et A. Havette (1981). Silicon diffusion in forsterite: a new constraint for understanding mantle deformation. Anelasticity in the Earth. F. D. Stacey. Washington D. C., AGU. **4**: 95-100.

- Joos, B., Q. Ren et M. S. Duesbery (1994). "Peierls-Nabarro model of dislocations in silicon with generalized stacking-fault restoring forces." Physical Review B **50**(9): 5890-5898.
- Joreau, P., H. Leroux et J.-C. Doukhan (1997). "A transmission electron microscope investigation of shock metamorphism in olivine of the Ilafegh 013 chondrite." Meteorites and Planetary Science **32**: 309-316.
- Jung, H. et S.-I. Karato (2001a). "Effects of water on dynamically recrystallized grain-size of olivine." Journal of Structural Geology **23**: 1337-1344.
- Jung, H. et S.-I. Karato (2001b). "Water-induced fabric transitions in olivine." Science **293**: 1460-1463.
- Karato, S.-I. et H. Jung (2003). "Effects of pressure on high-temperature dislocation creep in olivine." Philosophical Magazine **83**(3): 401-414.
- Kashima, K., I. Sunagawa et K. Sumino (1983). "Plastic deformation of olivine single crystals." Science Reports of the Tohoku University, series III **15**: 281-407.
- Kirby, S. H. et C. B. Raleigh (1973). "Mechanisms of high-temperature, solid state flow in minerals and ceramics and their bearing on creep behaviour of the mantle." Tectonophysics **19**: 165-194.
- Kocer, C., N. Hirosaki et S. Ogata (2003). "Ab initio calculation of the ideal tensile and shear strength of cubic silicon nitride." Physical Review B **67**: 035210-035214.
- Kocks, U. F., A. S. Argon et M. F. Ashby (1975). Thermodynamics and kinetics of slip. Oxford, Pergamon Press.
- Kohlstedt, D. L. et C. Goetze (1974). "Low-stress high-temperature creep in olivine single crystals." Journal of Geophysical Research **79**(14): 2045-2051.
- Kohlstedt, D. L., C. Goetze et W. B. Durham (1976). Experimental deformation of single crystal olivine with application of flow in the mantle. The physics and chemistry of minerals and rocks. R. Strens. New York, John Wiley.
- Kohn, W. et L. J. Sham (1965). "Self-consistent equations including exchange and correlation effects." Physical Review **140**(4A): A1133-A1138.
- Krenn, C. R., D. Roundy, J. W. Morris Jr. et M. L. Cohen (2001). "The nonlinear elastic behavior and ideal shear strength of Al and Cu." Materials Science and Engineering A **317**: 44-48.
- Kresse, G. et J. Furthmüller (1996a). "Efficiency of ab initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set." Computational Materials Science **6**: 15-50.
- Kresse, G. et J. Furthmüller (1996b). "Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set." Physical Review B **54**: 11169.
- Kresse, G. et J. Hafner (1993). "Ab initio molecular dynamics for liquid metals." Physical Review B **47**: 558.
- Kresse, G. et J. Hafner (1994a). "Ab initio molecular dynamics simulation of the liquid-metal amorphous-semiconductor transition in germanium." Physical Review B **49**: 14251.
- Kresse, G. et J. Hafner (1994b). "Norm-conserving and ultrasoft pseudopotential for first-row and transition elements." Journal of Physics: Condensed Matter **6**: 8245.
- Kresse, G. et D. Joubert (1999). "From ultrasoft pseudopotentials to the projector-augmented wave method." Physical Review B **59**: 1758-1775.
- Kroupa, F. (1961). Czech J. Phys. **B11**: 847.
- Kubin, L. P. et B. Devincere (1999). "From dislocation mechanisms to dislocation microstructures and strain hardening." 20th Riso International Symposium on Materials Science: 61-83.

- Kubin, L. P., R. Madec et B. Devincré (2003). Dislocation intersections and reactions in FCC and BCC crystals. Multiscale phenomena in materials-experiments and modeling related to mechanical behavior. H. M. Zbib, Mat. Res. Soc. Symp. **779**.
- Kumazawa, M. et O. L. Anderson (1969). "Elastic moduli, pressure derivatives, and temperature derivatives of single crystal olivine and single crystal forsterite." Journal of Geophysical Research **74**: 5961-5972.
- Langenhorst, F., P. Joreau et J.-C. Doukhan (1995). "Thermal and shock metamorphism of the Tenham chondrite: a TEM examination." Geochimica et Cosmochimica Acta. **59**(9): 1835-1845.
- Lebensohn, R. A. et C. N. Tomé (1993). "A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystal: application to zirconium alloys." Acta Metall. Mater. **41**: 2611-2624.
- Lépinoux, J. et L. P. Kubin (1987). "The dynamic organization of dislocation structures: a simulation." Scripta Metall. **21**: 833-837.
- Leroux, H. (2001). "Microstructural shock signatures of major minerals in meteorites." European Journal of Mineralogy **13**: 253-272.
- Li, B., G. D. Gwanmesia et R. C. Liebermann (1996). "Sound velocities of olivine and beta polymorphs of Mg₂SiO₄ at Earth's transition zone pressures." Geophysical Research Letters **23**: 2259-2262.
- Li, L., D. Weidner, P. Raterron, J. Chen, M. T. vaughan, M. Shenghua et B. Durham (2005). "Deformation of olivine at mantle pressure using D-DIA." European Journal of Mineralogy sous presse.
- Liebermann, R. C. (2000). "Elasticity of mantle minerals (experimental studies)." Earth's Deep Interior: Mineral Physics and Tomography From the Atomic to the Global Scale Geophysical Monograph 117: 181-199.
- Liebermann, R. C. et B. Li (1998). Elasticity at high pressures and temperatures. Reviews of Mineralogy. R. J. Hemley, Mineralogical Society of America. **37**: 459-492.
- Lu, G., V. V. Bulatov et N. Kioussis (2003). "A nonplanar Peierls-Nabarro model and its application to dislocation cross-slip." Philosophical Magazine **83**(31-34): 3539-3548.
- Mackwell, S. J., D. L. Kohlstedt et M. S. Paterson (1985). "The role of water in the deformation of olivine single crystals." Journal of Geophysical Research **90**(B13): 319-333.
- Madec, R. (2001). Des intersections entre dislocations à la plasticité du monocristal CFC; étude par dynamique des dislocations. Orsay, Université de Paris XI. **Thèse**.
- Madec, R., B. Devincré et L. P. Kubin (2001). "New line model for optimized dislocation dynamics simulations." Mat. Res. Symp. Proc. Vol. **653**.
- Madec, R., B. Devincré et L. P. Kubin (2002a). "On the nature of attractive dislocation crossed states." Computational Materials Science **23**: 219-224.
- Madec, R., B. Devincré et L. P. Kubin (2002b). "Simulation of dislocation patterns in multislip." Scripta Materiala **47**: 689-695.
- Madec, R., B. Devincré et L. P. Kubin (2002c). "From dislocation junctions to forest hardening." Physical Review Letters **89**(25).
- Madec, R., B. Devincré et L. P. Kubin (2003a). On the use of periodic boundary conditions in dislocation dynamics simulations. Proceedings of IUTAM Symposium on Mesoscopic Dynamics of Fracture Process and Materials Strength. H. Kitagawa and Y. Shibutani. NL-Dordrecht, Kluwer Academic Publishers: 35-44.

- Madec, R., B. Devincere, L. P. Kubin, T. Hoc et D. Rodney (2003b). "The role of collinear interaction in dislocation-induced hardening." *Science* **301**: 1879-1882.
- Madon, M. et J. P. Poirier (1983). "Transmission electron microscope observation of alpha, beta, gamma (Mg,Fe)₂SiO₄ in shocked meteorites: planar defects and polymorphic transitions." *Phys. Earth Planet. Int.* **33**: 31-44.
- Mainprice, D., A. Tommasi, H. Couvy, P. Cordier et H. J. Frost (2005). "Pressure sensitivity of olivine slip systems and seismic anisotropy of Earth's upper mantle." *Nature* **433**: 731-733.
- Medvedeva, N. I., O. N. Mryasov, Y. N. Gornostyrev, D. L. Novikov et A. J. Freeman (1996). "First-principles total-energy calculations for planar shear and cleavage decohesion processes in B2-ordered NiAl and FeAl." *Physical Review B* **54**(19): 506-514.
- Mei, S. et D. L. Kohlstedt (2000a). "Influence of water on plastic deformation of olivine aggregates - 1. Diffusion creep regime." *Journal of Geophysical Research* **105**(B9): 457-469.
- Mei, S. et D. L. Kohlstedt (2000b). "Influence of water on plastic deformation of olivine aggregates - 2. Dislocation creep regime." *Journal of Geophysical Research* **105**(B9): 471-481.
- Michaut, M. (1981). Etude du fluage de forsterite et d'olivine monocristallines. Orsay, Université Paris-sud. **Thèse.**
- Miranda, C. R. et S. Scandolo (2005). "Computational materials science meets geophysics: dislocations and slip planes of MgO." *Computer Physics Communications* **169**(1-3): 24-27.
- Molinari, A., G. R. Canova et S. Azhy (1987). "A self-consistent approach of the large deformation crystal polycrystal viscoplasticity." *Acta Metall.* **35**: 2983-2994.
- Monkhorst, H. J. et J. D. Pack (1976). "Special points for Brillouin-zone integrations." *Physical Review B* **13**(12): 5188-5192.
- Monnet, G., B. Devincere et L. P. Kubin (2004). "Dislocation study of prismatic slip systems and their interactions in hexagonal close packed metals: application to zirconium." *Acta Materialia* **52**: 4317-4328.
- Moulin, A., M. Condat et L. P. Kubin (1997). "Simulation of Frank-Read sources in silicon." *Acta Materialia* **45**(6): 2339-2348.
- Moulin, A., M. Condat et L. P. Kubin (1999). "Mesoscale modelling of the yield point properties of silicon crystals." *Acta Mater.* **47**(10): 2879-2888.
- Murakami, M., K. Hirose, K. Kawamura, N. Sata et Y. Ohishi (2004). "Post-perovskite phase transition in MgSiO₃." *Science* **304**: 855-858.
- Oganov, A. R. et S. Ono (2004). "Theoretical and experimental evidence for a post-perovskite phase of MgSiO₃ in Earth's D" layer." *Nature* **430**: 445-448.
- Ogata, S., J. Li et S. Yip (2002). "Ideal pure shear strength of aluminium and copper." *Science* **298**: 807-811.
- Ohno, I. (1976). "Free vibration of a rectangular parallelepiped crystal and its application to determination of elastic constants of orthorhombic crystals." *J. Phys. Earth* **24**: 355-379.
- Paxton, A. T., P. Gumbsch et M. Methfessel (1991). "A quantum mechanical calculation of the theoretical strength of metals." *Philosophical Magazine Letters* **63**(5): 267-274.
- Payne, M. C., M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias et J. D. Joannopoulos (1992). "Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients." *Reviews of Modern Physics* **64**(4): 1045-1097.

- Perdew, J. P. et Y. Wang (1992). "Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy." Physical Review B **45**: 13244-13249.
- Phakey, P., G. Dollinger et J. Christie (1972). "Transmission electron microscopy of experimentally deformed olivine crystals." Geophys. Monogr. Ser. - Flow and fracture of rocks **16**: 117-133.
- Philibert, J. (1979). Glissement des dislocations et frottement de r 33?seau. Dislocations et déformation plastique. P. Groh, L. P. Kubin and J. L. Martin. Paris, Les Editions de la Physique.
- Poirier, J. P. (1975). "On the slip systems of olivine." Journal of Geophysical Research **80**(29): 4059-4061.
- Poirier, J. P. (1985). Creep of crystals. High temperature deformation processes in metals, ceramics and minerals. Cambridge, Cambridge University Press.
- Poirier, J. P. et B. Vergobbi (1978). "Splitting of dislocations in olivine, cross-slip controlled creep and mantle rheology." Physics of the Earth and Planetary Interiors **16**: 370-378.
- Post, R. L., Jr (1973). High temperature creep of Mt Burnet dunite. Los Angeles, University of California.
- Püschl, W. (1985). "Reactions between glide dislocations and forest dislocations in anisotropic bcc metals." Phys. Stat. Sol. **90**: 181-189.
- Püschl, W. (2000). "The flow stress contribution of the dislocation 'forest' in bcc lattices." Philosophical Magazine Letters **80**(4): 199-203.
- Raleigh, C. B. (1968). "Mechanisms of plastic deformation of olivine." Journal of Geophysical Research **73**(14): 5391-5406.
- Raleigh, C. B. et S. H. Kirby (1970). "Creep in the upper mantle." Mineral. Soc. Am. Spec. Paper **3**: 113-121.
- Raterron, P., J. Chen, L. Li, E. Kaminski, D. Weidner et P. Cordier (2005). "High-pressure olivine rheology: toward a quantitative understanding of upper-mantle flow." soumis.
- Ross, J. V., H. G. Ave'Lallemant et N. L. Carter (1979). "Activation volume for creep in the upper mantle." Science **203**: 261-263.
- Roundy, D., C. R. Krenn, M. L. Cohen et J. W. Morris Jr. (1999). "Ideal shear strengths of fcc aluminium and copper." Physical Review Letters **82**(13): 2713-2716.
- Sachs, G. (1928). Z. Ver. Deu. Ing. **72-22**: 734.
- Schwarz, K. W. (1999). "Simulation of dislocations on the mesoscopic scale. I. Methods and examples." Journal of Applied Physics **85**(1): 108-119.
- Schwarz, K. W. (2003). "Discrete dislocation dynamics study of strained-layer relaxation." Physical Review Letters **91**(14): 5503.
- Shimizu, H., W. A. Bassett et E. M. Brody (1982). "Brillouin-scattering measurements of single-crystal forsterite to 40 kbar at room temperature." Journal of Applied Physics **53**: 620-626.
- Smyth, J. R. et R. M. Hazen (1973). "The crystal structures of forsterite and hortonolite at several temperatures up to 900°C." American Mineralogist **58**: 588-593.
- Söderlind, P. et J. A. Moriarty (1998). "First-principles theory of Ta up to 10 Mbars pressure: Structural and mechanical properties." Physical Review B **57**(17): 10340-10350.
- Sun, L. Z., N. M. Ghoniem, S.-H. Tong et B. N. Singh (2000). "3D dislocation dynamics study of plastic instability in irradiated copper." Journal of Nuclear Materials **283-287**: 741-745.

- Sun, Y. et E. Kaxiras (1997). "Slip energy barrier in aluminium and implications for ductile-brittle behaviour." Philosophical Magazine A **75**(4): 1117-1127.
- Tang, M., B. Devincre et L. P. Kubin (1999). "Simulation and modelling of forest hardening in body centre cubic crystals at low temperature." Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **7**: 893-908.
- Tang, M., M. Fivel et L. P. Kubin (2001). "From forest hardening to strain hardening in body centered cubic single crystals: simulation and modeling." Materials Science and Engineering **A309-310**: 256-260.
- Tang, M., L. P. Kubin et G. R. Canova (1998). "Dislocation mobility and the mechanical response of bcc crystals: a mesoscopic approach." Acta Mater. **46**(9): 3221-3235.
- Taylor, G. I. (1934). Proc. Roy. Soc. **A145**: 362.
- Taylor, G. I. (1938). "Plastic strain in metals." J. Inst. Met. **62**: 307-324.
- Tsuchiya, T., J. Tsuchiya, K. Umemoto et R. M. Wentzcovitch (2004). "Elasticity of post-perovskite MgSiO₃." Geophysical Research Letters **31**: L14603.
- Vander Sande, J. B. et D. L. Kohlstedt (1976). "Observation of dissociated dislocations in deformed olivine." Philosophical Magazine **34**(4): 653-658.
- Vanderbilt, D. (1990). "Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism." Physical Review B **41**: 7892-7895.
- Verdier, M., M. Fivel et I. Groma (1998). "Mesoscopic scale simulation of dislocation dynamics in FCC metals: Principles and applications." Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **6**: 755-770.
- Vitek, V. (1974). "Theory of the core structures of dislocations in body-centered-cubic metals." Crystal Lattice Defects **5**: 1-34.
- Vitek, V., R. C. Perrin et D. K. Bowen (1970). "The core structure of $1/2\langle 111 \rangle$ screw dislocations in bcc materials." Philosophical Magazine **21**: 1049.
- Von Mises, R. (1928). Zeitschr. Angew. Math. Mech. **8**: 161.
- Walker, A. (2004). Computational studies of point defects and dislocations in forsterite Mg₂SiO₄ and some implications for the rheology of mantle olivine. Davy-Faraday Research Laboratory. London, University of London. **Thèse**.
- Wang, Y., W. B. Durham, I. C. Getting et D. Weidner (2003). "The deformation-DIA: A new apparatus for high temperature triaxial deformation to pressure up to 15 GPa." Rev. Sci. Instrum. **74**: 3002-3011.
- Wang, Y., R. C. Liebermann et J. N. Boland (1988). "Olivine as an in situ piezometer in high pressure apparatus." Phys. Chem. Minerals **15**: 493-497.
- Webb, S. L. (1989). "The elasticity of the upper mantle orthosilicates olivine and garnet to 3 GPa." Phys. Chem. Minerals **16**: 684-692.
- Wickham, L. K., K. W. Schwarz et J. S. Stölken (1999). "Rules for forest interactions between dislocations." Physical Review Letters **83**(22): 4574-4577.
- Xu, W. et J. A. Moriarty (1996). "Atomistic simulation of ideal shear strength, point defects, and screw dislocations in bcc transition metals: Mo as a prototype." Physical Review B **54**(10): 6941-6951.
- Yoneda, A. et M. Morioka (1992). "Pressure derivatives of elastic constants of single crystal forsterite." Geophysical Monograph Series High pressure research: application to Earth and planetary sciences: 207-214.

- Zbib, H. M., T. D. de La Rubia, M. Rhee et J. P. Hirth (2000). "3D dislocation dynamics: stress-strain behavior and hardening mechanisms in fcc and bcc metals." Journal of Nuclear Materials **276**: 154-165.
- Zbib, H. M., M. Rhee et J. P. Hirth (1998). "On plastic deformation and the dynamics of 3D dislocations." Int. J. Mech. Sci. **40**(2-3): 113-127.
- Zeuch, D. H. et H. W. Green (1977). "Naturally decorated dislocations in olivine from peridotite xenoliths." Contrib Mineral Petrol **62**: 141-151.
- Zeuch, D. H. et H. W. Green (1979). "Experimental deformation of an "anhydrous" synthetic dunite." Bull. Mineral. **102**: 185-187.
- Zha, C.-S., T. S. Duffy, R. T. Downs, H.-K. Mao et R. Hemley (1996). "Sound velocity and elasticity of single-crystal forsterite to 16 GPa." Journal of Geophysical Research **101**(B8): 17535-17545.
- Zha, C.-S., T. S. Duffy, R. T. Downs, H.-K. Mao, R. Hemley et D. Weidner (1998). "Single-crystal elasticity of the alpha and beta of Mg₂SiO₄ polymorphs at high pressure." Geophysical Monograph Series Properties of Earth and Planetary Materials at High Pressure and Temperature: 9-16.

Annexe

Base de vecteurs de la simulation pour la forsterite

(100)[001]

plan : (-1 -1 -1)

	vecteurs ligne	vecteurs déplacement
1:	[0 2310 -2310]	[4620 -2310 -2310]
2:	[-4620 4620 0]	[1155 1155 -2310]
3:	[-4620 2310 2310]	[0 2310 -2310]
4:	[-4620 0 4620]	[-1155 2310 -1155]
5:	[0 -2310 2310]	[-4620 2310 2310]
6:	[4620 -4620 0]	[-1155 -1155 2310]
7:	[4620 -2310 -2310]	[0 -2310 2310]
8:	[4620 0 -4620]	[1155 -2310 1155]

(001)[100]

plan : (0 1 -1)

	vecteurs ligne	vecteurs déplacement
9:	[-1540 -1540 -1540]	[-4620 2310 2310]
10:	[3080 -3850 -3850]	[-2100 -840 -840]
11:	[4620 -2310 -2310]	[-1540 -1540 -1540]
12:	[6160 -770 -770]	[-420 -1680 -1680]
13:	[1540 1540 1540]	[4620 -2310 -2310]
14:	[-3080 3850 3850]	[2100 840 840]
15:	[-4620 2310 2310]	[1540 1540 1540]
16:	[-6160 770 770]	[420 1680 1680]

(010)[001]

plan : (-2 1 1)

	vecteurs ligne	vecteurs déplacement
17:	[0 2310 -2310]	[-1540 -1540 -1540]
18:	[1540 3850 -770]	[-924 0 -1848]
19:	[1540 1540 1540]	[0 2310 -2310]
20:	[1540 -770 3850]	[924 1848 0]
21:	[0 -2310 2310]	[1540 1540 1540]
22:	[-1540 -3850 770]	[924 0 1848]
23:	[-1540 -1540 -1540]	[0 -2310 2310]
24:	[-1540 770 -3850]	[-924 -1848 0]

(010)[001]

plan : (-2 1 1)

	vecteurs ligne	vecteurs déplacement
25:	[-1540 -1540 -1540]	[0 -2310 2310]
26:	[-1540 770 -3850]	[-924 -1848 0]
27:	[0 2310 -2310]	[-1540 -1540 -1540]
28:	[1540 3850 -770]	[-924 0 -1848]
29:	[1540 1540 1540]	[0 2310 -2310]
30:	[1540 -770 3850]	[924 1848 0]
31:	[0 -2310 2310]	[1540 1540 1540]
32:	[-1540 -3850 770]	[924 0 1848]

(011)[100]

plan : (-1 2 -1)

	vecteurs ligne	vecteurs déplacement
33:	[-1540 -1540 -1540]	[-4620 0 4620]
34:	[3080 -1540 -6160]	[-1980 -1320 -660]
35:	[4620 0 -4620]	[-1540 -1540 -1540]
36:	[6160 1540 -3080]	[-660 -1320 -1980]
37:	[1540 1540 1540]	[4620 0 -4620]
38:	[-3080 1540 6160]	[1980 1320 660]
39:	[-4620 0 4620]	[1540 1540 1540]
40:	[-6160 -1540 3080]	[660 1320 1980]

(0-11)[100]

plan : (1 1 -2)

	vecteurs ligne	vecteurs déplacement
41:	[-1540 -1540 -1540]	[-4620 4620 0]
42:	[3080 -6160 -1540]	[-1980 -660 -1320]
43:	[4620 -4620 0]	[-1540 -1540 -1540]
44:	[6160 -3080 1540]	[-660 -1980 -1320]
45:	[1540 1540 1540]	[4620 -4620 0]
46:	[-3080 6160 1540]	[1980 660 1320]
47:	[-4620 4620 0]	[1540 1540 1540]
48:	[-6160 3080 -1540]	[660 1980 1320]

(110)[001]

plan : (-5 -2 -2)

	vecteurs ligne	vecteurs déplacement
49:	[0 2310 -2310]	[3080 -3850 -3850]
50:	[-3080 6160 1540]	[660 990 -2640]
51:	[-3080 3850 3850]	[0 2310 -2310]
52:	[-3080 1540 6160]	[-660 2640 -990]
53:	[0 -2310 2310]	[-3080 3850 3850]
54:	[3080 -6160 -1540]	[-660 -990 2640]
55:	[3080 -3850 -3850]	[0 -2310 2310]
56:	[3080 -1540 -6160]	[660 -2640 990]

(1-10)[001]

plan : (-1 -4 -4)

	vecteurs ligne	vecteurs déplacement
57:	[0 2310 -2310]	[6160 -770 -770]
58:	[-6160 3080 -1540]	[1320 1650 -1980]
59:	[-6160 770 770]	[0 2310 -2310]
60:	[-6160 -1540 3080]	[-1320 1980 -1650]
61:	[0 -2310 2310]	[-6160 770 770]
62:	[6160 -3080 1540]	[-1320 -1650 1980]
63:	[6160 -770 -770]	[0 -2310 2310]
64:	[6160 1540 -3080]	[1320 -1980 1650]

