



Indiquer dans ce cadre une éventuelle
mention spéciale (Cotutelle, confidentiel)

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LILLE

NOM-PRENOM DU CANDIDAT(E) : MAHENDRAN Srinivasan

- Ecole doctorale : EDSMRE
- Unité de Recherche : UMET UMR8207
- Discipline : Physique et Science des matériaux
- Si cotutelle, établissement partenaire :

JURY :

- Directeur(s)-rice(s) de thèse : Philippe CARREZ, Patrick CORDIER
- Rapporteurs : Sandrine BROCHARD, Sandro SCANDOLO
- Examineurs (rices) : Andréa TOMMASI, Andrew WALKER

SOUTENANCE : 03/07/2018, 10H Amphi. Loison ENSCL

TITRE DE LA THESE :

Modélisation numérique des propriétés de cœurs de dislocations dans l'Olivine (Mg_2SiO_4)

RESUME :

Il est aujourd'hui largement accepté que les mécanismes de convection mantellique dans le manteau supérieur sont reliés aux propriétés plastiques de l'olivine constituant principale du manteau supérieur. Ce minéral, un silicate de composition $(Mg,Fe)_2SiO_4$, se déforme essentiellement par glissement de dislocations de vecteurs de Burgers [100] et [001]. Dans le cadre de ce travail de thèse, nous avons donc choisi de modéliser les propriétés de ces dislocations ainsi que les systèmes de glissement potentiels de l'olivine à partir de calculs à l'échelle atomique. L'ensemble des calculs ont été effectués à l'aide du potentiel THB1. Une fois les structures de cœurs des défauts déterminées, les paysages énergétiques associés au glissement des dislocations ont été analysés par la méthode « Nudge Elastic Band ». A basse pression, la modélisation atomique montre que les systèmes [100](010) et [001]{110} correspondent aux systèmes de glissement primaires de l'olivine. L'étude des paysages énergétiques des dislocations nous permet de plus de rationaliser les observations expérimentales de « pencil glide » reportées dans l'olivine depuis les années 70 et de proposer un mécanisme original de blocage-déblocage pour le glissement des dislocations de vecteurs de Burgers [001]. Enfin, l'application de ce type de modélisation aux conditions de pression du manteau supérieur (0-10 GPa) confirme l'existence d'un effet de durcissement de la pression sur le glissement des dislocations de vecteur de Burgers [100].



Enter here any special mention
(Co-tutelle thesis, confidential)

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE LILLE

NAME-SURNAME OF THE CANDIDATE: MAHENDRAN Srinivasan

- Doctoral School: EDSMRE
- Laboratory: UMET UMR8207
- Discipline: Physics and materials science
- In case of co-tutelle thesis, provide the partner institution:

THESIS COMMITTEE:

- Thesis supervisor(s): Philippe CARREZ, Patrick CORDIER
- Referees: Sandrine BROCHARD, Sandro SCANDOLO
- Examiners: Andréa TOMMASI, Andrew WALKER

DEFENSE: 03/07/2018, 10H Amphi. Loison ENSCL

TITLE OF THE THESIS:

Numerical modelling of dislocation core properties in olivine (Mg_2SiO_4)

ABSTRACT:

It is widely accepted that the dissipation of heat from the core to the surface of the Earth through a thermally insulating mantle is only possible by convection process. Mantle convection is responsible for a large number of geological activities that occur on the surface of the Earth such as plate tectonic, volcanism, etc. It involves plastic deformation of mantle minerals. In Earth's interior, the outer most layer beneath the thin crust is the upper mantle. One of the most common mineral found in the upper mantle is the olivine $(Mg,Fe)_2SiO_4$. Knowledge of the deformation mechanisms of olivine is important for the understanding of flow and seismic anisotropy in the upper mantle. The experimental studies on the plastic deformation of olivine highlighting the importance of dislocations of Burgers vector [100] and [001]. In this work, we report a numerical modelling at the atomic scale of dislocation core structures and slip system properties in forsterite, at pressures relevant to the upper mantle condition. Computations are performed using the THB1 empirical potential and molecular statics. The energy landscapes associated with the dislocation mobility are computed with the help of nudge elastic band calculations. Therefore, with this work, we were able to predict the different possible dislocation core structures and some of their intrinsic properties. In particular, we show that at ambient pressure [100](010) and [001]{110} correspond to the primary slip systems of forsterite. Moreover, we propose an explanation for the "pencil glide" mechanism based on the occurrence of several dislocation core configurations for the screw dislocation of [100] Burgers vector.