Règle de Cauchy-Born pour des systèmes incommensurables de chaînes élastiques couplées

Paul Cazeaux, University of Minnesota

Mitch Luskin, University of Minnesota

Ilia Nikiforov, University of Minnesota

La découverte récente de matériaux 2D tels que graphene, boron nitride, etc. suscite un grand intérêt, notamment car la possibilité de superposer quelques monocouches de ces matriaux pourrait permettre de contrôler les caractéristiques des *hétérostructures* ainsi créees [**?**] : élasticité, conductivité, structure électronique ('band gap'), magnétiques, optiques, etc. Pour explorer les possibilités de ce jeu de Lego à l'échelle atomique, il est nécessaire de développer des modèles multiéchelles et des méthodes numériques adaptées. Une difficulté (et une richesse) immédiatement rencontrée dans cette étude est le caractère en général *incommensurable* du couplage entre les réseaux périodiques associés aux différentes monocouches. La différence entre la structure cristalline des matériaux ou la rotation d'une couche par rapport à l'autre résulte ainsi en une structure apériodique, présentant parfois des effets de moiré ou un super-réseau.
Dans cet exposé, nous présenterons un premier pas vers la compréhension et l'analyse mathématique de ces structures. Nous nous intéresserons à la dérivation d'une règle de Cauchy-Born i.e. à la réponse élastique à un étirement pour deux chaînes atomiques périodiques couplées. Nous nous concentrerons en particulier sur le cas où les périodes respectives sont incommensurables. Les deux chaînes interagissent au moyen de potentiels empiriques type Lennard-Jones. Lorsque la longueur du système tend vers l'infini, nous montrerons que la réponse élastique tend uniformément vers une limite homogénéisée. Au moyen d'outils issus de la théorie de la discrépance [**?**], nous présenterons quelques résultats montrant l'impact du caractère incommensurable sur la vitesse de convergence des méthodes numériques et quelques idées pour optimiser celles-ci.
Deux cas seront particulièrement étudiés : d'abord, deux chaînes rigides, rectilignes et parallèles, puis un système relaxé en permettant des ondulations des chaînes dans le plan. Dans ce deuxième cas, les équations du système en font une application innovante du modèle de Frenkel-Kontorova généralisé [**?**], permettant ainsi d'étudier analytiquement et numériquement les configurations d'énergie minimum [**?**]. Nous présenterons quelques exemples numériques pour illustrer ces résultats ainsi que les méthodes numériques proposées, notamment avec la perspective d'une extension en 2D.

Références

[1] Geim, A.K. and Grigorieva, I.V., *Van der Waals heterostructures. Nature*, Vol. 499, 419–425, 2013

[2] L. Kuipers and H. Niederreiter, *Uniform distribution of sequences. New York, Interscience, Wiley*, 1974.

[3] Braun, Oleg M. and Kivshar, Yuri S., *The Frenkel-Kontorova model: concepts, methods, and applications*, *Springer Science & Business Media*, 2004.

[4] Aubry, S and Le Daeron, P.Y., *The discrete Frenkel-Kontorova model and its extensions. I. Exact results for the ground-states*, *Physica D*, Vol. 8, 381–422, 1983.

Paul Cazeaux, School of Mathematics, University of Minnesota, 331 Vincent Hall, 206 Church St. SE, Minneapolis, MN 55455, USA
`pcazeaux@umn.edu`
Mitch Luskin, School of Mathematics, University of Minnesota, 330 Vincent Hall, 206 Church St. SE, Minneapolis, MN 55455, USA
`luskin@umn.edu`
Ilia Nikiforov, Aerospace Engineering and Mechanics, University of Minnesota, 107 Akerman Hall, 110 Union St SE Minneapolis, MN 55455, USA
`nikif002@umn.edu`