

Rapport de stage (training report)

Le stagiaire

Nom : Belkhir

Prénom : Mohamed Akli

Grade : Professeur

Faculté : Sciences exactes

Le stage

Lieu : Humboldt Universität zu Berlin, Institut für Physik, Allemagne.

Période du stage : 1^{er} septembre 2018 au 14 septembre 2018

Objectifs : Faire le point sur les activités de notre collaboration, discuter et interpréter les résultats en cours. Esquisser la rédaction d'un troisième article. Planifier les travaux futurs.

Déroulement du stage :

J'ai effectué mon stage à Humboldt Universität zu Berlin, Institut für Physik, Allemagne, au sein du groupe de Prof. Dr. Claudia Draxl. Tous les moyens ont été mis à ma disposition, ce qui m'a permis d'effectuer mon stage dans de bonnes conditions. Mon séjour a été l'occasion de discuter les travaux en cours et planifier les prochaines étapes.

Travail accompli au cours du stage :

Nous explorons les systèmes combinant deux matériaux 2D que sont le graphène et le nitrure de bore hexagonal (h-BN). L'étude est conduite à l'aide du code ab-initio 'exciting', un logiciel tout-électron très bien indiqué pour effectuer des calculs de premiers principes sur les propriétés électro-optiques.

Un premier travail a déjà été réalisé en 2017 et valorisé par une publication d'un article dans un journal de rang A+ (**facteur d'impact 8.53**) :

W. Aggoune, W. Cocchi, D. Nabok, K.Rezouali, M.A. Belkhir, C. Draxl, [Enhanced Light-Matter Interaction in Graphene-hBN van der Waals Heterostructures](#), 8(7), pp. 1464-1471, [Journal of Physical Chemistry Letters](#) (2017).

Un deuxième article intitulé : *Dimensionality of excitons in stacked van der Waals materials: The example of hexagonal boron nitride*, W. Aggoune, W. Cocchi, D. Nabok, K.Rezouali, M.A. Belkhir, C. Draxl, [vient d'être publié dans Physical Review B – Rapid Communications](#), ou seuls sont acceptés les articles auxquels on accorde une certaine priorité du fait de leur importance: Phys. Rev. B **97**, 241114(R) – Published 22 June 2018. C'est aussi un journal à haut facteur d'impact (>5).

Actuellement, nous travaillons sur un troisième article qui englobera et mettra l'accent sur les structures métalliques.

Additionnellement à tout ce qui précède, des calculs sont en cours sur deux systèmes. i) Une bicouche graphène/h-BN en empilement AB répétée avec du vide. ii) Une nouvelle phase de nitrure de bore nommée *primitive centered tetragonal* ou pct-BN en abrégé. La première étude est un prolongement de nos travaux antérieurs, le but étant de comparer le spectre excitonique avec celui obtenu avec les super-réseaux périodiques (i.e. sans vide). La seconde rentre dans le cadre d'une collaboration avec le groupe du Dr Marcelo Lopes de l'Institut Paul Drude de Berlin (PDI) qui a synthétisé cette nouvelle phase de nitrure de bore. Une étude à partir des premiers principes serait intéressante pour nous qui serons les premiers à calculer certaines propriétés et sans doute bénéfique pour le groupe de PDI afin de mieux évaluer leurs résultats.

Prof. M. A. Belkhir