

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 : 22 juin 2017 au 04 juillet 2017

Objectifs : Faire le point sur les activités de notre collaboration, discuter et interpréter les résultats en cours. Finaliser la rédaction d'un 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 du professeur Dr. Claudia Draxl. On m'a offert tous les moyens et mon stage s'est déroulé dans de très 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 une couche de graphène avec deux couches de nitrure de bore hexagonal (BN) à l'aide du code ab-initio 'exciting', un logiciel tout-électron pour effectuer des calculs de premiers principes.

Nous avons étudié en tout 12 structures (**voir R. Quhe et al., NPG Asia Materials (2012), doi:10.1038/am.2012.10**) pour lesquelles nous avons calculé les propriétés structurales, les propriétés électroniques et les propriétés optiques. Notre travail a déjà porté ces fruits puisque nous avons réussi à publier 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/h-BN van der Waals HeterostructureS, 8(7), pp. 1464-1471, **Journal of Physical Chemistry Letters** (2017).

Durant mon stage, nous avons finalisé un deuxième article intitulé : *Tuning excitons by 3D layer stacking: The example of hexagonal boron nitride*, W. Aggoune, W. Cocchi, D. Nabok, K.Rezouali, M.A. Belkhir, C. Draxl, et qu'on s'apprête à soumettre à Physical Review Letters, un journal à haut facteur d'impact également (7,).

Nous avons esquissé le plan de rédaction d'une troisième publication qui portera sur les structures métalliques. Les résultats étant déjà disponibles, la rédaction sera entamée dès la soumission de l'article précédent.

Enfin, dans la prochaine étape nous envisageons de calculer les propriétés vibrationnelles pour les mêmes systèmes. Nous nous intéressons en particulier aux structures qui pourraient présenter des modes actifs en Raman.

Prof. M. A. Belkhir



Résultat essentiel du stage (10 à 20 mots)

Tuning 2D, 3D and/or CT (charge transfer) excitons by stacking of hexagonal boron nitride layers.

Bejaia, le 15 janvier 2018
M.A. Belkhir

A handwritten signature in black ink, consisting of a large, stylized initial 'M' followed by 'A.' and a horizontal line with a small tick mark at the end.