

# Invitation à la soutenance publique de thèse

Pour l'obtention du grade de Docteur en Sciences de l'Ingénieur

**Monsieur Abderrezak TORCHE**

Master en sciences et technologies, Science des matériaux et nanoobjets

## Simulations ab-initio des spectres Raman résonants dans le graphène, les multicouches de graphène et le graphite

Les multicouches de graphène en empilement rhomboédrique sont considérés comme une phase prometteuse du carbone. Cela est due à la particularité de cette phase de pouvoir exhiber des états à forte corrélation électronique comme le magnétisme ou la supraconductivité à haute température critique. Ce qui est due, a son tour, à l'occurrence d'un état de surface avec une dispersion d'énergie électroniques quasi-nulle à proximité du niveau de Fermi. Malgré que le graphite Bernal soit la forme la plus stable du graphite, des échantillons à trois et quatre couches de graphène en empilement rhomboédrique ont pu être synthétisés. Plus récemment, des flocons d'épaisseur dépassant les 17 couches ont été isolés et provisoirement attribués à des séquences d'empilement rhomboédrique. Cette attribution a été faite via des expériences de spectroscopie Raman sous champ magnétique, bien que l'empreinte Raman des multicouche de graphène en empilement rhomboédrique est actuellement inconnue. Même le cas simple du spectre Raman résonnant à deux phonons (le pic 2D) du graphite Bernal n'est pas totalement compris. Dans ce travail de thèse, nous fournissons une description ab-initio complète du pic Raman 2D dans les systèmes de graphène à trois et quatre couches pour tous les empilements possibles, ainsi que pour le graphite Bernal, rhomboédrique et une alternance de graphite Bernal et rhomboédrique.

Les calculs ont été effectués pour plusieurs énergie du laser et nous donnons à la fin des prescriptions pratiques pour l'identification des multicouches de graphène susceptible d'avoir un fort empilement rhomboédrique.

**Jeudi 5 octobre 2017 à 14h00**

Université Pierre et Marie Curie  
Paris  
France



### Membres du jury :

Prof. Matteo Calandra (IMPMC-UPMC, France), promoteur  
Prof. Jean-Christophe Charlier (UCL), promoteur  
Prof. Fabio Finocchi (UPMC, France, président)  
Prof. Gian-Marco Rignanese (UCL), secrétaire  
Prof. Laurent Alvarez (L2C Montpellier, France)  
Prof. Valentin Popov (Université de Sofia, Bulgarie)  
Prof. Marie-Aude Measson (Université Paris Diderot, Paris, France)