



320 - Septembre 2022



BRÈVES DE L'IRAMIS

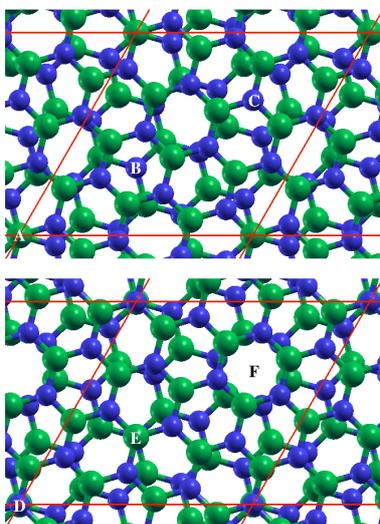


Moirés de bi-feuillets de nitrure de bore hexagonal

Sylvain Latil : tél : 01.69.08/3856, sylvain.latil@cea.fr

Jusqu'alors réservée aux bi-feuillets de graphène, pour lesquels des propriétés fascinantes ont été mises en évidence, l'étude des empilements moirés s'est étendue récemment à d'autres systèmes bi-dimensionnels, notamment le nitrure de bore hexagonal (h-BN). Plusieurs études théoriques de ces empilements, caractérisés par un léger angle de rotation entre les deux feuillets, ont montré que la position relative d'un plan par rapport à l'autre est de première importance : les propriétés électroniques sont en effet très différentes si un atome N est localisé au-dessus d'un autre atome N ou d'un atome B. Cependant, la totalité de ces études se sont limitées à deux géométries seulement (cf. figure). Or, dans le cas d'empilements de h-BN un travail récent en collaboration entre le SPEC et l'ONERA de Châtillon a démontré qu'il existe non pas deux, mais cinq formes d'empilement pour le même angle

de rotation. A titre de comparaison, pour les empilements de graphène, il y a seulement deux géométries. En explorant de façon exhaustive l'ensemble des géométries possibles, puis en analysant les groupes de symétrie associés, les auteurs ont établi l'existence de ces cinq empilements. Ils ont défini une classification structurale et une nomenclature pour ces géométries et montré par des calculs ab initio systématiques qu'elles ont toujours des structures électroniques différentes, et ce pour tous les angles de rotation.



En haut et en bas, deux géométries (parmi les 5 existantes) pour des empilements de h-BN avec un angle de 27.8° . Pour saisir les différences, il faut comparer ce qui se passe aux points A, B, C et D, E, F. Le passage d'une géométrie à l'autre se fait en décalant l'un des plans d'une distance interatomique.

Brèves des labos



Très grand succès pour le panorama de la spectroscopie laser des molécules en phase gazeuse dressé le 6 septembre 2022 à Orsay, autour de l'activité de Michel Mons : "40 years of gas phase laser spectroscopy: an ongoing story", avec une remarquable participation de scientifiques français et étrangers.



Le LLB vous invite aux Journées de la Diffusion Neutronique (JDN2022), organisées par la Société Française de Neutronique, avec la participation de la Société Espagnole de Diffusion Neutronique, qui auront lieu à Biarritz du 14 au 17 novembre 2022. En parallèle de sessions "matériaux et magnétisme", "matière molle et biologie", "instrumentation" et "nouvelles des centres", est prévue une journée d'exposés et de réflexion sur la diffraction en temps de vol, pour commencer à préparer la future génération d'utilisateurs de l'ESS. Ces JdN 2022 seront également l'occasion d'échanger avec des spécialistes de la spectroscopie optique et de la modélisation moléculaire. Plus d'informations (programme, liste des invités, inscription, soumission de contributions, etc.) sur : <https://jdn-conference.net>.