

RAPPORT DE SEJOUR SCIENTIFIQUE DE HAUT NIVEAU

Nom et prénom : REZOUALI Karim

Département : Tronc communs L1 L2

Laboratoire : Laboratoire de Physique Théorique.

Lieu du séjour: Juelich, Allemagne

Etablissement (université/Centre/Institut, faculté, département) Institute for Advanced Simulation (IAS-1), Forschungszentrum Jülich GmbH Wilhelm-Johnen-Straße 52428 Jülich, Germany

Laboratoire : Functional Nanoscale Structure Probe and Simulation Laboratory (Funsilab)

Période : Du 21 /10 /2018 **Au** 04/11 /2018

Responsable du stage : Prof. Dr. Samir Lounis

Objectifs fixés :

Initiation aux méthodes basées sur la fonction de Green de Korringa-Kohn-Rostoker et sur le traitement Tight-binding. Ces méthodes sont idéales pour le traitement des matériaux via un schéma d'intégration rendus possible grace à l'utilisation de l'équation de Dyson.

Objectifs atteints :

- Introduction aux différents thèmes de recherche développés au laboratoire funsilab forschungszentrum juelich via l'organisation de meetings avec les différents acteurs du groupe.
- Installation du code quantum espresso sur le cluster du laboratoire et conduite de quelques calculs pilotes sur le matériau ciblé (CrI3).

Signature du stagiaire

Signature et cachet du responsable du stage

Peter G. Berg Institut &
Institute for Advanced Simulation
PGI-1 / IAS-1
FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH GMBH
D-52425 Jülich