

Prof. BELABBAS Imad  
Département de Chimie

Alençon le 17/05/2019

## Rapport de Stage

Au cours de mon stage de courte durée qui s'est déroulé entre le 06/05/2019 et le 20/05/2019, au CIMAP-Alençon (Centre de Recherche sur les Ions, les Matériaux et la Photonique) à Alençon (France), j'ai pu mener différentes activités scientifiques ainsi que participer à différentes discussions.

- 1- Le 07/05/2019, je me suis réuni avec Prof. Jun CHEN, Directeur de l'IUT d'Alençon et Responsable de l'équipe du CIMAP à Alençon. Au cours de cette réunion nous avons fait le point sur la situation de notre collaboration scientifique ainsi que les perspectives permettant de la renforcer. Nous avons également parlé du planning de mon séjour au CIMAP-Alençon.
- 2- Le 09/05/2019, j'ai participé au group meeting de l'équipe de simulation atomistique du CIMAP-Alençon. J'ai pu échanger avec les membres du groupe dont R. Mohamed, V. Hounkpati ainsi que R. Ramdani. Suite à ce meeting j'ai enchainé avec deux séances de travail avec R. Mohamed et R. Ramdani qui ont porté sur les nos travaux de collaboration en cours.
- 3- Le 10/05/2019, j'ai participé à deux séances de travail. La première séance avec V. Hounkpati a porté sur l'étude de quelques joints de grains dans les matériaux nitrures-III. La deuxième séance avec R. Ramdani a porté sur l'étude du phénomène de dégradation dans les matériaux nitrures-III.
- 4- Le 14/05/2019, j'ai participé à deux séances de travail, l'une avec V. Hounkpati et l'autre avec R. Ramdani. Ces séances de travail ont porté sur l'implémentation de calculs DFT avec ABINIT et SIESTA.
- 5- Le 17/05/2019, une visite à l'université de Caen été organisée. Au CIMAP-Caen une séance de travail a été tenue avec R. Mohamed sur l'étude des dislocations dans l'alliage InAlN.

Au cours de mon séjour au CIMAP-Alençon, j'ai pu aussi exécuter des calculs DFT avec les codes SIESTA et VASP sur les configurations du cœur de la dislocation vis dans l'alliage InAlN. Pour différentes concentration d'indium, le cœur avec un cycle unique à 6 atomes (S6) a

donné lieu à 12 configurations. Ces dernières ont été relaxées et les configurations du cœur les plus stables ont été identifiées pour chaque concentration d'indium. Les calculs en questions ont été exécutés au CRIANN (Centre Régional Informatique et d'Applications Numériques de Normandie-France).

L'intéressé

