

## “HoW exciting!” – CECAM tutorial

*Hands-on Workshop on Excitations in Solids Employing the **exciting** code*

CECAM Lausanne, Switzerland, November 11-17, 2010

Vom 11. bis 17. November 2010 wird am “Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire” (CECAM) in Lausanne ein Hands-on Workshop für den **exciting** Code stattfinden. Organisiert wird dieser Workshop von Frau Prof. Claudia Ambrosch-Draxl vom Lehrstuhl für Atomistic Modelling and Design of Materials (AMDM) der Montanuniversität Leoben in Zusammenarbeit mit Dr. Jürgen Spitaler vom Materials Center Leoben (MCL) und Dr. Clas Persson von der königlich-technischen Hochschule (KTH) in Stockholm. Der Workshop kombiniert Vorträge über die theoretischen Grundlagen des Ab-initio Rechnens von internationalen SpitzenforscherInnen mit Einführungen in die verwendeten Methoden und praktischen Übungen am Computer. Zu den prominenten Vortragenden zählen unter anderem Roberto Car von der Princeton University (zusammen mit Michele Parrinello Begründer der Car-Parrinello Molekular-Dynamik), Kieron Burke von der University of California (Miterfinder des Perdew-Burke-Ernzerhof Dichtefunktional) und Matthias Scheffler, Direktor der Theorie-Abteilung des Fritz-Haber-Instituts der Max-Planck-Gesellschaft in Berlin. Der **exciting** Code – ein modernes Programmpaket zur parameterfreien Berechnung von Materialeigenschaften – wird zur Zeit in Leoben in einem gemeinsamen Projekt von MCL und AMDM weiterentwickelt. Er basiert auf der Berechnung der elektronischen Eigenschaften eines Festkörpers im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie und kombiniert besonders genaue theoretische Methoden mit einer übersichtlichen Programmstruktur und einem modernen Datenmanagement. Der Workshop in Lausanne bietet eine einmalige Gelegenheit, den Umgang mit dem Code zu erlernen und gleichzeitig eine exzellente Einführung in die physikalischen Grundlagen des Ab-initio-Rechnens und aktuelle Trends des atomistischen Modellierens zu bekommen.

Nähere Infos:

- “HoW exciting!” - CECAM tutorial: <http://www.cecama.org/workshop-455.html>
- **exciting** code: <http://exciting-code.org/>