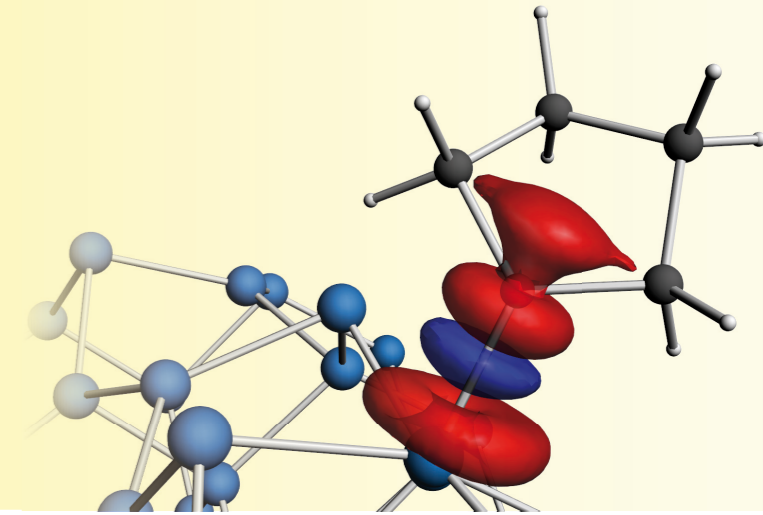


$$\Psi$$


# Computational Methods for Periodic Systems

## Workshop-Einladung 3. Juli 2015

Am 26. Juni 2015 wird der 2. *Computational Methods for Periodic Systems* Workshop am Fb. Chemie der Uni Marburg stattfinden. Er richtet sich primär an Studierende im Master- oder fortgeschrittenem Bachelorstudium der Chemie, die Interesse an theoretischer Chemie in Anwendung auf Systeme mit Festkörpern und Oberflächen haben. Interessierte Doktoranden sowie Studenten aus anderen naturwissenschaftlichen Fachbereichen sind selbstverständlich auch herzlich willkommen.

### Ziele

- Einführung in Konzepte der theoretischen Chemie von Festkörpern und Oberflächen
- Einführung in die Programmpakete VASP und ADF-BAND
- Überblick geben über mögliche Anwendungen der Methoden:  
Berechnung von Systemeigenschaften, Reaktionsdynamik und Bindungsanalyse
- Durch praktische Übungen in den Hands-on-Sessions direkte Anwendung ermöglichen

### Voraussetzungen

Die Teilnehmer sollten Grundbefehle der Linux-Kommandozeile beherrschen.

### Anmeldung

Die Anmeldung erfolgt per E-Mail an [pecher@staff.uni-marburg.de](mailto:pecher@staff.uni-marburg.de). Die Teilnahme ist kostenlos.

### Vorläufiges Programm

- 10:00 Ankunft
- 10:15 Präsentation: *Einführung in die periodische Quantenchemie und VASP* (Ralf Tonner)
- 11:15 Pause
- 11:30 Präsentation: *Eigenschaften von Festkörpern und Oberflächen* (Phil Rosenow)
- 12:00 Mittagspause
- 13:00 Hands-on-Session 1
- 14:30 Präsentation: *Adsorptionspfade und Reaktionsdynamik an Oberflächen* (Josua Pecher)
- 15:00 Kaffeepause
- 15:15 Präsentation: *Bindungsanalyse an Oberflächen und Einführung in ADF-BAND* (Ralf Tonner)
- 15:45 Hands-on-Session 2
- 17:45 Ende

Der Workshop findet im Seminarraum 02/5730 (2. OG Süd) des Chemie-Neubaus statt.

Organisation AG Tonner

Finanzierung und Unterstützung GRK 1782 *Funktionalisierung von Halbleitern*



GRK 1782