



## Neues Update des FPLO Programmpakets

**Neues Update des FPLO Programmpakets**  
Ein wichtiges Verfahren für die Berechnung quantenmechanischer Eigenschaften von Atomen, Molekülen und Festkörpern ist die Dichtefunktionaltheorie, für deren Entwicklung und Nutzbarmachung Walter Kohn und John Pople 1998 den Chemie-Nobelpreis erhielten. Mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie können zum Beispiel chemische Bindungsenergien, optische Spektren sowie mechanische, elektrische und magnetische Eigenschaften von Materialien berechnet werden. Dabei ist es möglich, allein aus der chemischen Zusammensetzung und der atomaren Struktur eines Stoffes materialspezifische Eigenschaften vorherzusagen oder entsprechende experimentelle Ergebnisse zu erklären. Notwendig dafür sind numerische Verfahren, welche die von Walter Kohn und anderen Autoren entwickelten impliziten, nichtlinearen Integro-Differentialgleichungssysteme näherungsweise lösen können. Solche Verfahren werden weltweit mit verschiedenen konkurrierenden Lösungsansätzen entwickelt, wobei jeder Ansatz spezielle Vor- und Nachteile besitzt. Eines dieser numerischen Verfahren wird seit 1999 von Dr. Klaus Koepernik im Leibniz-Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung (IFW) Dresden entwickelt. Sein Name FPLO steht für Full-Potential, Local-Orbital; seine Vorteile bestehen in seiner ausgewogenen Kombination von hoher numerischer Genauigkeit und Effizienz sowie in seiner leichten Bedienbarkeit. Für das IFW bedeutet die Eigenentwicklung, dass die Beantwortung neuer Fragestellungen oder die Berechnung weiterer Materialeigenschaften rasch und mit hauseigener Expertise durchgeführt werden können. Das FPLO-Programmpaket enthält ca. 300.000 Programmzeilen und hat weltweit etwa 200 lizenzierte Nutzer. Ende März 2014 wurde eine neue Version dieses Programmpaketes veröffentlicht. Einzelheiten finden Sie unter <http://www.fplo.de/>.  
Die Entwicklung elektronentheoretischer Verfahren in Dresden begann in den 1950er Jahren und steht in der Tradition einer Schule, die mit den Namen W. Macke, P. Ziesche und H. Eschrig, dem Gründungsdirektor des IFW, verbunden ist.  
Leibniz-Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung Dresden  
Helmholtzstraße 20  
01069 Dresden  
Telefon: (03 51) 46 59-0  
Telefax: (03 51) 46 59 540  
URL: [www.ifw-dresden.de](http://www.ifw-dresden.de)

## Pressekontakt

Leibniz-Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung Dresden

01069 Dresden

[ifw-dresden.de](http://ifw-dresden.de)

## Firmenkontakt

Leibniz-Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung Dresden

01069 Dresden

[ifw-dresden.de](http://ifw-dresden.de)

Das Leibniz-Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung Dresden ? kurz IFW Dresden ? ist ein außeruniversitäres Forschungsinstitut und Mitglied der Leibniz-Gemeinschaft. Es betreibt moderne Werkstoffwissenschaft auf naturwissenschaftlicher Grundlage und spannt dabei einen Bogen vom Erkenntnisfortschritt auf den Gebieten Physik und Chemie bis zur technologischen Vorbereitung neuer Materialien und Produkte. Im Mittelpunkt des Forschungsprogramms stehen Funktionswerkstoffe, die eine Schlüsselposition in vielen Einsatzfeldern einnehmen: Supraleiter, Magnetwerkstoffe, Schichtsysteme und Nanostrukturen, kristalline und amorphe Materialien. Daneben gehört es zu den Aufgaben des Instituts, die Fortbildung des wissenschaftlichen und technischen Nachwuchses zu fördern und die gewonnenen Erkenntnisse für die Wirtschaft nutzbar zu machen. Das IFW Dresden wurde am 1.1.1992 aus dem früheren Akademie-Institut heraus als Einrichtung der Blauen Liste gegründet. Es ist aus dem größten Materialforschungszentrum der DDR hervorgegangen, das schon zu dieser Zeit internationales Ansehen genoss. Inzwischen hat sich das IFW Dresden zu einem international führenden Institut auf ausgewählten Gebieten der naturwissenschaftlich fundierten Materialforschung entwickelt.