

RUPRECHT-KARLS-UNIVERSITY
HEIDELBERG

PHD THESIS

THESIS TITLE

Author:

Benjamin THOMITZNI

Supervisor:

Prof. Dr. Andreas DREUW

A thesis submitted in blabla

In Cooperation With

Research Group Prof. Dr. A. Dreuw

Interdisciplinary Center for Scientific Computing

October 2022

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, Benjamin Thomitzni, geboren am 11. Oktober 1991 in Öhringen, dass die vorliegende Arbeit mit dem Titel:

IMPLEMENTATION OF THE JOVE ALGORITHM FOR MP2 CORRELATION
ENERGIES

von mir selbstständig in Schrift und Bild verfasst wurde. Ich erkläre weiterhin dass jegliche Zitate, direkt oder im Sinn, kenntlich gemacht wurden und dass keine außer den angegebenen Hilfsmitteln verwendet wurden. Kein von mir verfasster Teil dieser Arbeit wurde bereits zum Erlangen eines akademischen Grades oder einer Prüfungsleistung an der Universität Heidelberg oder an einer anderen Universität eingereicht.

Ort, Datum

Unterschrift

Abstract

Abstract comes here

Zusammenfassung

Deutsche Zusammenfassung hier

Danksagung

Danksagungen hier

Contents

List of Figures	xiii
List of Tables	xv
Abbreviations	xvii
Symbols	xix
1 Chapter Title	1
A Chaptertitle	5
A.1 Section	5

List of Figures

List of Tables

Abbreviations

ADC	Algebraic-Diagrammatic Construction scheme
AO	Atomic Orbital
BO	Born-Oppenheimer approximation
CCSD	Coupled-Cluster Singles Doubles
CD-MP	Cholesky-Decomposition variant of MPPT
CGTO	Contracted Gaussian-type Orbital
CPU	Central Processing Unit
ERI	Electron Repulsion Integral
GB	Giga Byte
GPU	Graphics Processing Unit
GTO	Gaussian-type Orbital
HF	Hartree-Fock method
HOMO	Highest Occupied Molecular Orbital
JOVE	Jovian Møller-Plesset approach (for MP2)
LUMO	Lowest Unoccupied Molecular Orbital
MO	Molecular Orbital
MP2	Møller-Plesset perturbation theory of second order
MPPT	Møller-Plesset Perturbation Theory
r-grid	spatial (DFT) grid
RAM	Random Access Memory
RI-MP	Resolution-of-Identity variant of MPPT
RS	Rayleigh-Schrödinger perturbation theory
SE	time-independent (electronic) Schrödinger Equation
STO	Slater-type Orbital

t-grid	one-dimensional Gauss-Legendre grid
TB	Terra Byte

Symbols

α	Gaussian orbital exponent
χ	One electron wave function
Δ	In JOVE: Homo-LUMO gap
δ	Kronecker delta
ω	Weighting function
ϕ	AO/basis set wave function, solid angle
Ψ	Wave function
ψ	MO wave function
θ	Angle in Becke single-center integral
ε	MO energies
ζ	Slater orbital exponent
a.u.	Atomic units
a, b, ...	Virtual MO index
$\hat{f}(i)$	Fock operator
$\hat{h}(i)$	One-electron Hamiltonian
i, j, ...	Occupied MO index
p,q,r,s, ...	General MO index
r_p	Spacial coordinate of electron/nuclei
r_{pq}	Spacial distance between electrons/nuclei
u_{ia}	Coulomb potential-like integral
x_p	Spacial and spin coordinates
A, B, ...	Nuclei index

E	Energy
\hat{H}	Hamiltonian operator
\hat{J}	Coulomb operator of HF
\hat{K}	Exchange operator of HF
K, P, Q	Number of points on grid
L	Lebedev points on the r-grid
M_A	Ratio of mass between nuclei and electron
M	Number of nuclei
N	Number of electrons or basis functions
$O(\dots)$	Scaling Order
O	Number of occupied orbitals
R	Radial points on the r-grid
T	Points on the t-grid
\hat{T}_e, \hat{T}_N	Kinetic energy operator of electrons/nuclei
V	Number of virtual orbitals
$\hat{V}_{Ne}, \hat{V}_{ee}, \hat{V}_{NN}$	Potential energy operator
Z_A	Charge of nuclei

Dedication Text.

Chapter 1

Chapter Title

Bibliography

Appendix A

Chaptertitle

A.1 Section

