



Universität Hamburg  
DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG

Bachelorthesis

# Optimization of the Quantum Espresso Density Functional Theory Code for parallel execution on the PHYSnet-Cluster

Optimierung des Quantum Espresso Dichte-Funktional Theorie  
Codes für die parallele Ausführung auf dem PHYSnet-Cluster

vorgelegt von

TJARK SIEVERS

Fakultät: Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften

Fachbereich: Physik

Studiengang: Physik

Matrikelnummer: 7147558

Erstgutachter: Prof. Dr. Tim Wehling

Zweitgutachterin: Prof. Dr. Daria Gorelova