
Kurzzusammenfassung

Diese Arbeit untersucht QUANTUM ESPRESSO, eine Sammlung von Programmen für Berechnungen von elektronischen Strukturen und Modellierung von Materialien in Bezug auf seine Skalierbarkeit über mehrere Prozessoren auf dem PHYSnet compute cluster. Die Methode ist eine Reihe an Benchmarks zum Testen von verschiedenen Compiler Kombinationen und den Parallelisierungsoptionen von QUANTUM ESPRESSO. Diese Benchmarks zeigen, dass die Nutzung von Compilern in [Intel oneAPI](#) die Skalierbarkeit signifikant verbessert, mit bis zu dreimal schnelleren Rechnungen auf einem Rechnerknoten. Außerdem ermöglicht die Nutzung der Parallelisierungsoptionen von QUANTUM ESPRESSO die Rechnungen weit über einen Rechnerknoten hinweg ermöglichen, wenn sie richtig genutzt werden. Ergebnisse aus den Benchmarks wurden außerdem genutzt, um effiziente Phononen Rechnungen von TaS₂ in einer Ladungsdichtewellephase durchzuführen, deren Ergebnisse möglicherweise eine Lücke um das Fermi-Niveau zu erklären, die 2019 in einem [Scanning Tunneling Spectroscopy \(STS\)](#) Experiment an diesem Material [\[1\]](#) gefunden wurde.

Abstract

This thesis examines QUANTUM ESPRESSO, a suite of computer code for electronic-structure calculations and materials modeling in terms of its scalability on multiple processors on the PHYSnet compute cluster. A series of benchmarks is carried out to test different combination of compilers as well as parallelization parameters offered by QUANTUM ESPRESSO itself. These benchmarks show that using a set of compilers and auxiliary code in [Intel oneAPI](#) significantly improves scaling, with up to three times faster calculations on a single compute node. Furthermore, the parallelization parameters offered by QUANTUM ESPRESSO let calculations scale beyond a single node when used right. Results from these benchmarks were then used to carry out efficient phonon calculations on TaS₂ in a charge density wave phase, the results of which could explain a gap feature near the Fermi level observed in a 2019 [STS](#) experiment on this material [\[1\]](#).