

Fakultät für Mathematik, Physik und Geodäsie

www.mpug.tugraz.at/dekanat/dekanat

Telefon: +43 316 873 8112/4457

E-Mail: physik.mpug@tugraz.at

Bekanntgabe Master's Thesis *notification of a Master's Thesis*

Masterstudium (bitte ankreuzen) *master's programme (please mark):*

☒ **Technical Physics (UF 066 486)**

☐ **Physics (UF066 682)**

Vorname <i>given name</i> Elias	Nachname <i>surname</i> Wachmann	Matrikelnr. <i>matriculation no</i> 12004232
Titel/Thema Master's Thesis <i>topic of Master's Thesis</i> : Machine Learning-Driven Initial Guess Prediction for SCF Procedures		
Inhalt (in wenigen Sätzen, allenfalls Rückseite verwenden) <i>content (please describe in a few sentences, use back of page if necessary):</i> This thesis explores how machine-learning techniques can accelerate the convergence of electronic-structure calculations. Various ML methods have been implemented in Python and evaluated on a set of representative systems. The performance is benchmarked against traditional approaches.		
Zuordnung Master's Thesis zu einer Lehrveranstaltung aus einem physikalischen Pflicht- oder Wahlmodul gem. § 11 (2) der Curricula 2017 in der Version 2023 <i>Assignment of Master's Thesis to a course from a physical compulsory or elective module according to § 11 (2) of the Curricula 2017 in the version 2023</i> PHT.102UF Advanced Atomic and Molecular Physics Technical Physics: Bitte wählen <i>please select</i> : experimentell / experimental		
Beginn der Masterarbeit <i>start of Master's Thesis</i> : 01.06.2025		

Zustimmungserklärung:

Mir ist bekannt, dass die Arbeit, um deren Zulassung ich hiermit anseuche, nach der Fertigstellung gemäß § 29 (5) Satzungsstudienrecht in elektronischer Form an der Bibliothek der TU Graz zu veröffentlichen ist und unbefristet an der TU Graz digital gespeichert wird sowie ggf. auch eine technikgestützte Plagiatprüfung erfolgt. Ich erkläre mich damit ausdrücklich einverstanden und werde alle notwendigen Schritte unternehmen um dies zu ermöglichen. Darüber hinaus erkläre ich meinen unwiderruflichen Verzicht diese Zustimmung innerhalb von zehn Jahren nach erfolgter digitaler Speicherung meiner Arbeit zurückzuziehen.

Declaration of consent:

I am aware that the thesis, for which I hereby apply for admission, is to be published in electronic form at the library of Graz University of Technology after completion according to § 29 (5) part of the statutes concerning study law and will be stored digitally at Graz University of Technology for an unlimited period of time and, if necessary, a technology-based plagiarism check will be carried out. I expressly agree to this and will take all necessary steps to make this possible. Furthermore, I declare my irrevocable waiver to withdraw this consent within ten years after the digital storage of my work.

28.05.2025

Datum *date*

*Unterschrift Studierende*r* *signature of student*

30.5.2025 ANDREAS HAUSER

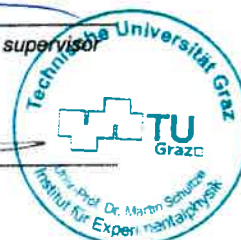
Datum *date*, **Name Betreuer*in** *name of supervisor*

*Unterschrift Betreuer*in* *signature of supervisor*

Betreuendes Institut *supervising institute*

30.5.25
Datum, **Name Institutsleiter*in**
date, name of Head of the Institute

*Unterschrift Institutsleiter*in*
signature of Head of the Institute



Die Genehmigung wird über das Dekanat eingeholt *approval will be obtained via the Dean's Office.*
Schicken Sie das Formular per E-Mail an *send the form by e-mail to* physik.mpug@tugraz.at.

03.06.2025

Datum *date*

*Unterschrift Studiendekan*in*
signature of Dean of Studies