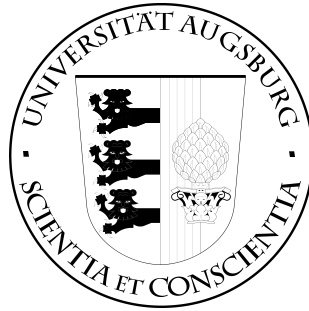


# INSTITUTE OF COMPUTER SCIENCE UNIVERSITY OF AUGSBURG



Bachelor's Thesis

## Automatized Eigensolver for General One-body Potentials

Ho Son Thuy Truong

Matriculation Number: 2020659  
First Reviewer: Prof. Dr. Jakob Kottmann  
Second Reviewer: Prof. Dr. Mónica Benito  
Scientific Supervisor: Prof. Dr. Jakob Kottmann  
Date: July 21, 2024

written at  
Chair of Quantum Algorithms  
Prof. Dr. Jakob Kottmann  
Institute of Computer Science  
University of Augsburg  
D-86135 Augsburg, Germany

# Abstract

With quantum dots being a popular research topic following the 2023 Nobel Prize in Chemistry, the need to solve the Schrödinger equation for quantum dots has become increasingly important. In this thesis, an automatized eigensolver for general one-body potentials is developed and an example of the harmonic oscillator is demonstrated. The basis functions for the eigensolver are generated using two different approaches. The first method uses the basis functions of the harmonic oscillator to generate the initial guesses, while the second method uses the given potential. In this approach the basis functions depend on the potential. The eigensolver with general basis functions is tested with different potentials such as Gaussian potentials and double-well potentials. After generating the basis functions, the convergence between these two methods is compared in terms of speed and accuracy. This automatized eigensolver is written using MADNESS which ensures a high level of performance and accuracy.



# Contents

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Quantum dots and the Usage of Basis Sets</b>	<b>3</b>
2.1	Quantum Dots . . . . .	3
2.2	Second Quantization . . . . .	3
<b>3</b>	<b>Eigensolver for General One-body Potentials</b>	<b>5</b>
3.1	Methods for Eigensolver . . . . .	5
3.2	Approaches to Generate Initial Guess Functions . . . . .	5
3.3	Basis Functions for Harmonic Oscillator . . . . .	5
3.4	Basis Functions for General Potentials . . . . .	5
3.4.1	General Basis Functions . . . . .	5
3.4.2	Examples . . . . .	5
<b>4</b>	<b>Hartree Fock Approximation</b>	<b>7</b>
<b>5</b>	<b>Results</b>	<b>9</b>
<b>6</b>	<b>Conclusion</b>	<b>11</b>
	<b>Bibliography</b>	<b>13</b>



# 1 Introduction

Dieses Dokument dient als Vorlage für Ihre Abschlussarbeit. Gleichzeitig enthält es wichtige Informationen, die Ihnen das Erstellen der Arbeit erleichtern sollen.

Geben Sie hier eine allgemeine Einführung in das Thema Ihrer Arbeit.

Beschreiben Sie hier, wie sie in den folgenden Kapiteln vorgehen, um die oben definierten Ziele zu erreichen. Kapitel 3 enthält Informationen, wie Sie den Inhalt Ihrer Abschlussarbeit aufbereiten sollten. In Kapitel ?? finden Sie eine kurze Einführung in  $\text{\LaTeX}$  und wichtige Pakete, die Sie im Rahmen Ihrer Arbeit benötigen könnten. Kapitel ?? schließt dieses Dokument ab.





## **2 Quantum dots and the Usage of Basis Sets**

### **2.1 Quantum Dots**

### **2.2 Second Quantization**



# 3 Eigensolver for General One-body Potentials

Bei ihrer Abschlussarbeit handelt es sich um eine wissenschaftliche Arbeit, die auch entsprechenden Qualitätsansprüchen genügen muss.

- Verwenden Sie keine umgangssprachlichen Formulierungen.
- Achten Sie darauf, alle Aussagen, die Sie machen, durch entsprechende Argumente oder Literaturverweise zu untermauern.
- Führen Sie vor der Abgabe eine Rechtschreibprüfung durch. Ein gängiges Werkzeug hierfür ist beispielsweise `aspell`, dessen Verwendung auch in Editoren wie Emacs vorgesehen ist.

Kleiner Test ob das Kompilieren funktioniert

## 3.1 Methods for Eigensolver

## 3.2 Approaches to Generate Initial Guess Functions

## 3.3 Basis Functions for Harmonic Oscillator

## 3.4 Basis Functions for General Potentials

### 3.4.1 General Basis Functions

### 3.4.2 Examples



## 4 Hartree Fock Approximation



## 5 Results





## 6 Conclusion



# Bibliography

