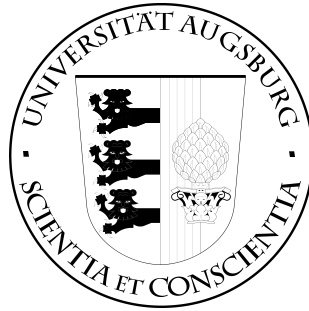


INSTITUTE OF COMPUTER SCIENCE UNIVERSITY OF AUGSBURG



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 23, 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. Due to the variety of shapes and sizes of quantum dots, the potential is often complex and highly dependent on their properties. With this variety, it is difficult to find a universal set of basis functions that can be used for all quantum dots. For this reason, an adaptive real-space approach based on multiwavelets is used. This allows the dynamic generation of basis functions based on the given potential of the quantum dot. A method for the automatic generation of system-adapted initial guesses is developed and integrated into the automatized eigensolver for general one-body potentials. This automatized eigensolver is written using MADNESS which ensures a high level of performance and accuracy.

Contents

1	Introduction	1
2	Quantum dots and the Usage of Basis Sets	3
2.1	Quantum Dots	3
2.2	Second Quantization	3
3	Eigensolver for General One-body Potentials	5
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
4	Hartree Fock Approximation	7
5	Results	9
6	Conclusion	11
	Bibliography	13

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 \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

