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 19, 2024

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

Abstract

Beschreiben Sie hier den Inhalt der vorliegenden Arbeit. Stellen Sie kurz dar, was der Ausgangspunkt der Arbeit ist, und welche Ziele die Arbeit verfolgt. Gehen sie dann auf die verwendeten Methoden und die erzielten Ergebnisse ein.

Contents

1	Introduction					
2	Quantum dots and the Usage of Basis Sets2.1 Quantum dots					
3	Eigensolver for General One-body Potentials3.1 Methods for Eigensolver3.2 Approaches to generate Basis Sets3.3 Basis Set Functions for Harmonic Oscillator3.4 Basis Set Functions for general Potentials3.4.1 General Basis Set Functions3.4.2 Examples	5 5 5				
4	Hartree Fock Approximation	7				
5	Results	9				
6	Conclusion	11				
Bi	bliography	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 ein kurze Einführung in Laten 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 Qualit" atsanspr" uchen gen" ugen muss.

- Verwenden Sie keine umgangssprachlichen Formulierungen.
- Achten Sie darauf, alle Aussagen, die Sie machen, durch entsprechende Argumente oder Literaturverweise zu untermauern.
- F"uhren Sie vor der Abgabe eine Rechtschreibpr"ufung durch. Ein g"angiges Werkzeug hierf'ur ist beispielsweise aspell, dessen Verwendung auch in Editoren wie Emacs vorgesehen ist.

Kleiner Test ob das Komplieren funktioniert

- 3.1 Methods for Eigensolver
- 3.2 Approaches to generate Basis Sets
- 3.3 Basis Set Functions for Harmonic Oscillator
- 3.4 Basis Set Functions for general Potentials
- 3.4.1 General Basis Set Functions
- 3.4.2 Examples

4 Hartree Fock Approximation

5 Results

6 Conclusion

Bibliography