

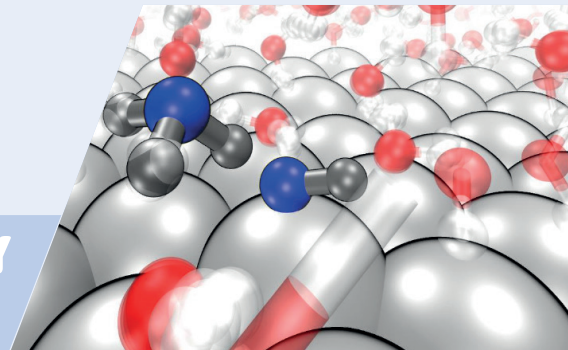
Welche Ergebnisse wurden erreicht?

Im Rahmen des Projekts wurde Borophen als vielversprechendes Material für die Wasserstoffproduktion identifiziert. Mithilfe konventioneller und neuartiger hybrider Methoden, basierend auf variationellen Quantenalgorithmen und Spinphysik, wurde das System präzise theoretisch beschrieben. Anschließend wurde auf dieser Basis der Prozess der Wasserstoffabsorption untersucht. Energieprofile des Wasserstoff-Borophen-Systems dienen als Grundlage für Quanten-Maschinelle-Lernmodelle, die auf eigens entwickelten Quanten-Kernel-Methoden basieren. Potenziellen Anwendern erleichtert die speziell entwickelte Cloud-Plattform HQScloud für Chemie mit Quantencomputing mit einer benutzerfreundlichen Schnittstelle den Zugang zu diesen Modellen.

Was ist der Nutzen für die Wirtschaft?

Das erworbene Wissen erleichtert die rechnergestützte Entwicklung von Elektrokatalysatoren für die Wasserstoffproduktion. Der spinphysikalische Ansatz für Quantencomputer und Quantum-Machine-Learning ist vielseitig und auf weitere Anwendungen in Chemie, Pharmazie und anderen Branchen übertragbar. Der Cloud-Prototyp ermöglicht eine benutzerfreundliche und effiziente Nutzung sowie Verteilung von Quantencomputing-Software.

Wie geht es nach Projektende weiter?



Die neu entwickelten Quanten-Maschinellen-Lernansätze, klassisch-hybriden Methoden und spinphysikalischen Modelle für Materialsimulationen werden verfeinert und auf magnetische Materialien sowie spektroskopische Anwendungen in den Biowissenschaften ausgeweitet. Der Cloud-Prototyp wird zu einem vollwertigen Service für HQS-Produkte und Cloud-Computing ausgebaut.



“
Zum Start des AQUAS-Projekts hatten wir die vage Idee, die Spinphysik für die Quantenberechnung von Molekülen und Materialien zu nutzen. Mit Projektabschluss haben wir eine klare Vision des Potenzials dieses Ansatzes in der Chemie und den Biowissenschaften – und erste funktionierende Prototypen.
”

Dr. Michael Marthaler
CEO of HQS Quantum Simulations

4 Partner

Fraunhofer-Institut für Produktionstechnik und Automatisierung IPA
Universität Ulm – Institut für Theoretische Chemie
HQS Quantum Simulations
Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) e. V. mit den Instituten SC und TT

Kontakt

Dr. Vladimir Rybkin

HQS Quantum Simulations

E-Mail:
vladimir.rybkin@quantumsimulations.de

Web:
<https://quantumsimulations.de/aquas>

Laufzeit

Januar 2022 – Dezember 2024

Gefördert durch:



aufgrund eines Beschlusses
des Deutschen Bundestages

