

KI revolutioniert die Quantenchemie: Energievorhersage ohne Wellenfunktion!

Die Universität Heidelberg fördert ein KI-Projekt zur Vorhersage der kinetischen Energie molekularer Quantensysteme.

Heidelberg, Deutschland - Forschende an der Universität Heidelberg haben ein innovatives Projekt gestartet, das Künstliche Intelligenz (KI) nutzt, um die kinetische Energie von Elektronen in molekularen Quantensystemen vorherzusagen. Dies ist ein entscheidender Fortschritt, da die Berechnung von Bewegungsenergie auf molekularer Ebene weit komplexer ist verglichen mit der klassischen Physik, wo die Formel für kinetische Energie einfach die Masse multipliziert mit der Geschwindigkeit im Quadrat ist. Auf der mikrobiologischen Ebene wird die Situation kompliziert, da Moleküle aus positiv geladenen Atomkernen und negativ geladenen Elektronen bestehen, deren Bewegungsenergie von der verfügbaren Raumgröße abhängt. Ein kleinerer Raum bedeutet eine größere kinetische Energie der Elektronen.

Das neue Forschungsprojekt mit dem Titel „Quantenchemie ohne Wellenfunktion“ wird von der Carl-Zeiss-Stiftung gefördert und leitet sich von der Überlegung ab, dass die Gesamtdichte der Elektronen als Basis für die Energievorhersage dienen kann. Bisher war es nicht möglich, eine ausreichend genaue Formel für die kinetische Energie ohne die Verwendung einer komplizierten Wellenfunktion aufzustellen. Die Projektleitung übernehmen die Professoren Fred Hamprecht, Andreas Dreuw und Maurits W. Haverkort, die alle Experten auf dem Gebiet der Quantenchemie und der KI-Methoden sind.

Anwendung von Künstlicher Intelligenz

Die Forschung zu KI-Verfahren für die Naturwissenschaften, besonders in der Quantenchemie, steht im Mittelpunkt der Arbeit von Prof. Fred Hamprecht. Seine Kollegen, Prof. Andreas Dreuw und Prof. Maurits W. Haverkort, widmen sich der Nutzung moderner computergestützter Methoden zur Untersuchung chemischer und physikalischer Fragestellungen sowie der Vorhersage der Eigenschaften komplexer Quantensysteme. Diese Herangehensweise könnte künftig die Untersuchung komplexer molekularer Systeme erheblich verbessern.

Gleichzeitig arbeitet das Fraunhofer-Institut für Integrierte Schaltungen (IIS) an einem weiteren spannenden Projekt namens „KID-QC²“ (KI-gestütztes Design für skalierbare, effiziente und hoch strukturierte Quantenschaltkreise für Quantenchemie). Dieses Projekt zielt darauf ab, Künstliche Intelligenz in die Gestaltung von Quantenschaltkreisen zu integrieren, um die Fähigkeit der Quantencomputer zur Simulation von Molekülreaktionen zu verbessern und damit genauere und schnellere Ergebnisse zu erzielen. Dr. Daniel Scherer vom Fraunhofer IIS betont die Bedeutung der Zusammenarbeit mit der Universität Augsburg, wo Prof. Dr. Jakob Kottmann an der Entwicklung innovativer quantenalgorithmischer Verfahren arbeitet.

Neuer Ansatz in der Quantenchemie

Die Kombination von KI-Technologien und Quantencomputing könnte die Automatisierung und Optimierung von quantenchemischen Berechnungen revolutionieren. Momentan stoßen klassische Rechenverfahren bei der Analyse komplexer molekularer Systeme an ihre Grenzen. Quantencomputer könnten hier entscheidende Vorteile bieten, indem sie große Optimierungsprobleme lösen, die durch die limitierte Anzahl an Qubits und die fehleranfällige Qubit-Operationen aktueller Systeme entstehen.

Mit einer Förderung von 1,03 Millionen Euro durch das Bayerische Staatsministerium für Wirtschaft, Landesentwicklung und Energie hat das KID-QC²-Projekt eine Laufzeit bis Ende 2026. Das Fraunhofer IIS führt das Konsortium an und bringt seine Expertise im Bereich der KI-Methoden und Software-Entwicklung ein, während die Universität Augsburg die notwendigen quantenalgorithmischen Verfahren beisteuert. Dies könnte der Schlüssel dazu sein, die Grenzen der Quantenchemie weiter zu verschieben und neue, präzisere Ansätze zu entwickeln, die sowohl für die Forschung als auch für die Industrie von großer Bedeutung sind.

Mehr Informationen über die Entwicklungen an der Universität Heidelberg sind erhältlich unter uni-heidelberg.de und über das Fraunhofer IIS unter iis.fraunhofer.de.

Details	
Vorfall	Sonstiges
Ort	Heidelberg, Deutschland
Quellen	• www.uni-heidelberg.de • www.iis.fraunhofer.de

Besuchen Sie uns auf: n-ag.de