

Revolution in der Quantenchemie: KI sagt Elektronenenergie präzise voraus!

Die Universität Heidelberg forscht mithilfe von KI an der Vorhersage der kinetischen Energie molekularer Quantensysteme.



Heidelberg, Deutschland - Die Nutzung von Künstlicher Intelligenz (KI) in der Quantenchemie gewinnt zunehmend an Bedeutung, insbesondere im Hinblick auf die Vorhersage der kinetischen Energie von Elektronen in molekularen Quantensystemen. Das Projekt „Quantenchemie ohne Wellenfunktion“, geleitet von den Wissenschaftlern Prof. Fred Hamprecht, Prof. Andreas Dreuw und Prof. Maurits W. Haverkort, zielt darauf ab, mithilfe modernster KI-Methoden die komplexen Berechnungen auf molekularer Ebene zu vereinfachen. Laut **uni-heidelberg.de** ist die Berechnung der Bewegung von Elektronen im Kontext der klassischen Physik eine Herausforderung, da sie von der Verteilung und Dichte der Elektronen abhängt.

Moleküle setzen sich aus positiv geladenen Atomkernen und negativ geladenen Elektronen zusammen. Während die kinetische Energie in der klassischen Physik einfach berechnet werden kann, ist die Situation auf molekularer Ebene deutlich komplexer. Die nötige Beschreibung erfolgt durch eine „Wellenfunktion“, die von den Koordinaten aller Elektronen abhängt. Aktuell gibt es keine ausreichend genaue Formel zur Berechnung der kinetischen Energie ohne diese Wellenfunktion. Der Einsatz von KI könnte hier jedoch neue Möglichkeiten eröffnen, indem die Gesamtenergie aus der Elektronendichte abgeleitet wird.

Projekte und Fortschritte in der Quantenchemie

Zusätzlich zu den Bemühungen in Heidelberg forscht das Projekt KID-QC² (KI-gestütztes Design für skalierbare, effiziente und hoch strukturierte Quantenschaltkreise für Quantenchemie) an der Optimierung von Quantenschaltkreisen. Diese Initiative, die in Zusammenarbeit zwischen dem Fraunhofer IIS und dem Lehrstuhl für Quantenalgorithmik der Universität Augsburg durchgeführt wird, zielt darauf ab, klassische Rechenverfahren die Grenzen im Umgang mit komplexen molekularen Systemen zu überwinden. Dabei können Quantencomputer potenziell schnellere und genauere Ergebnisse bei der Simulation von Molekülreaktionen liefern, wie [iis.fraunhofer.de](https://www.iis.fraunhofer.de) hervorhebt.

Das KID-QC²-Projekt wird mit 1,03 Millionen Euro vom Bayerischen Staatsministerium für Wirtschaft, Landesentwicklung und Energie gefördert und hat eine Projektlaufzeit bis Ende 2026. In diesem Zusammenhang betont Dr. Daniel Scherer vom Fraunhofer IIS die Bedeutung der Kooperation mit Prof. Dr. Jakob Kottmann von der Universität Augsburg zur Entwicklung leistungsfähiger KI-gestützter Werkzeuge für die Quantenchemie.

Die Zukunft der Quantenchemie

Der Einsatz von KI-Technologien könnte einen Paradigmenwechsel in der Quantenchemie darstellen. Die Kombination von KI und Quantencomputing eröffnet neue Wege für die wissenschaftliche Forschung, insbesondere bei der Automatisierung und Optimierung von Designprozessen für Quantenschaltkreise. Daher könnte die Vorhersage und Untersuchung komplexer molekularer Systeme revolutioniert werden, was nicht zuletzt aufgrund der Limitierungen aktueller Quantencomputer, wie der begrenzten Qubit-Anzahl und fehleranfälligen Quantenoperationen, von enormer Relevanz ist.

Insgesamt verdeutlichen die aktuellen Projekte in diesem Bereich, wie das Zusammenspiel von KI und Quantenchemie dabei helfen kann, die Herausforderungen der Molekulardynamik zu meistern und die Forschungslandschaft nachhaltig zu bereichern.

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

Besuchen Sie uns auf: n-ag.de