

## **HQS stellt Setup zur Simulation chemischer Vorgänge im Quantum-Computing-Projekt QC-4-BW bereit**

HQS Quantum Simulations liefert im Auftrag von Fraunhofer IAF und ICT Setups zur Simulation chemischer Systeme wie metallorganischer Gerüstverbindungen (metal-organic frameworks, MOFs) auf Quantencomputern. Im Rahmen des QC-4-BW Projekts wird ein diamantbasierter Quantenprozessor entwickelt, dessen Leistungsfähigkeit unter anderem mit Hilfe der quantenchemischen Berechnungen bewertet wird.

Im Zentrum des Verbundprojekts QC-4-BW steht die Entwicklung eines diamantbasierten Quantenprozessors, der auf den einzigartigen Eigenschaften von Diamant-Farbzentren basiert. Das Projekt startete im Januar 2021, die zweite Phase des Projekts, die zu Beginn des Jahres eingeleitet wurde, wird im März 2024 erfolgreich abgeschlossen werden.

Die Diamant-Farbzentren nutzen die Spins von Elektronen und Atomkernen als Quantenbits (Qubits), um Quanteninformationen zu speichern und zu verarbeiten. Der diamantbasierte Quantenprozessor basiert auf einer neuen Generation von Spin-basierten Quantenregistern und verfügt über integrierte Speicherfunktionen für quantenmechanische Zustände. Die einzigartige Leistungsfähigkeit des diamantbasierten Quantenprozessors wird im Vergleich zu supraleitenden Qubit-Technologien analysiert, um seine Eignung für anwendungsrelevante Quantencomputer-Aufgaben zu bewerten. Für diese Berechnungen steht der IBM Quantencomputers „Quantum System One“ zur Verfügung.

Als chemische Anwendungsfälle werden die Speicherung von CO<sub>2</sub> in metallorganischen Gerüstverbindungen ebenso wie elektronische Anregungen in organischen Molekülen untersucht. HQS hat dazu im Auftrag von Fraunhofer IAF und ICT ein auf derartige chemische Systeme zugeschnittenes Setup bereitgestellt, mithilfe dessen Teile der Simulationen auf einen Quantenprozessor ausgelagert werden können. HQS verwirklichte dies unter anderem mithilfe seiner eigenen Open-Source-Anwendung, dem "Active Space Finder" (ASF), der die Auswahl aktiver Orbitale in Molekülen automatisiert: Der Auswahlprozess bestimmt die wichtigsten Orbitale, die auf dem Quantencomputer abgebildet werden müssen. Im Rahmen der Arbeit hat HQS für die verschiedenen molekularen Systeme spezifische aktive Räume unterschiedlicher Größe ermittelt. Gleichzeitig sind die Anzahlen der aktiven Orbitale jeweils optimal, um entweder auf einem im Entwicklungsstadium befindlichen diamantbasierten Quantenprozessor abgebildet werden zu können oder auch auf anderen Systemen wie dem IBM Quantum System One. Die gelieferte Software implementiert den vollständigen Arbeitsfluss von der Molekülstruktur hin zur Berechnung energetischer Größen unter Benutzung der Quantenchemiesoftware PySCF. Für die Einbindung des Quantencomputers wird eine Schnittstelle zur Software Qiskit genutzt.

Ziel ist es, die Anwendung von Quantentechnologie in Bereichen wie molekularer Modellierung und chemischer Forschung voranzutreiben. Durch die Simulationen auf dem diamantbasierten Quantenprozessor können neue Erkenntnisse in der molekularen Modellierung gewonnen werden.

**Über QC-4-BW** Das Verbundprojekt QC-4-BW mit dem Arbeitstitel "Entwicklung und Benchmarking eines diamantbasierten, spintronischen Quantenregisters für einen skalierbaren Quantenprozessor," ist ein gemeinschaftliches Vorhaben unter der Leitung des Fraunhofer-Instituts für Angewandte Festkörperphysik IAF. Zu den beteiligten Partnern gehören das Fraunhofer-Institut für Chemische Technologie ICT, das Karlsruher Institut für Technologie (KIT), die Universität Stuttgart, die Universität Ulm und die Universität Konstanz. Dieses wegweisende Projekt wird im Rahmen des Kompetenzzentrums Quantencomputing Baden-Württemberg (KQCBW) geführt und durch das Ministerium für Wirtschaft, Arbeit und Tourismus Baden-Württemberg gefördert.

## **HQS provides a setup for the simulation of chemical processes in the quantum computing project QC-4-BW**

HQS Quantum Simulations provides setups for simulating chemical systems such as metal-organic frameworks (MOFs) on quantum computers on behalf of Fraunhofer IAF and ICT. The QC-4-BW project is developing a diamond-based quantum processor. Its performance will be evaluated using quantum chemical calculations.

The joint project QC-4-BW focuses on the development of a diamond-based quantum processor based on the unique properties of diamond color centers. The project started in January 2021 and the second phase of the project, which was initiated at the beginning of the year, will be completed in March 2024.

To store and process quantum information, the diamond colour centers use the spins of electrons and atomic nuclei as quantum bits (qubits). The diamond-based quantum processor is based on a new generation of spin-based quantum registers and has integrated memory functions for quantum mechanical states. To assess its suitability for application-relevant quantum computing tasks, the unique performance of the diamond-based quantum processor will be analyzed in comparison with superconducting qubit technologies. IBM's Quantum System One quantum computer will be available for these calculations.

The storage of CO<sub>2</sub> in metal-organic framework compounds and electronic excitations in organic molecules are being investigated as chemical applications. On behalf of Fraunhofer IAF and ICT, HQS has provided a setup tailored to such chemical systems to perform parts of the simulations on a quantum processor. HQS realized this with the help of its open-source application, the "Active Space Finder" (ASF), which automates the selection of active orbitals in molecules: The selection process determines the most important orbitals to be mapped on the quantum computer. As part of the work, HQS has determined specific active spaces of different sizes for the various molecular systems. At the same time, the numbers of active orbitals are optimal to be mapped either on a diamond-based quantum processor currently under development, or on other systems such as the IBM Quantum System One. The software supplied implements the complete workflow from the molecular structure to the calculation of

energetic quantities using the quantum chemistry software PySCF. An interface to the Qiskit software is used to integrate the quantum computer.

The aim is to advance the application of quantum technology in areas such as molecular modeling and chemical research. New insights into molecular modeling can be gained through simulations on the diamond-based quantum processor.

#### **About QC-4-BW**

The joint project QC-4-BW with the working title "Development and benchmarking of a diamond-based, spintronic quantum register for a scalable quantum processor" is a joint project under the leadership of the Fraunhofer Institute for Applied Solid State Physics IAF. The partners involved include the Fraunhofer Institute for Chemical Technology ICT, the Karlsruhe Institute of Technology (KIT), the University of Stuttgart, the University of Ulm, and the University of Constance. This pioneering project is part of the Baden-Württemberg Competence Center for Quantum Computing (KQCBW) and is funded by the Baden-Württemberg Ministry of Economic Affairs, Labour, and Tourism.

#### **About HQS Quantum Simulations**

HQS Quantum Simulations was founded in 2017 as a Karlsruhe Institute of Technology (KIT) spin-off and develops software to simulate quantum systems. The start-up's software works on regular computers but can be easily transferred to quantum computers. HQS Quantum Simulations intends this approach to allow companies and researchers to transition their simulation workflow quickly and efficiently to quantum computing as soon as it becomes available.

#### **Press Contact:**

Dr. Michael Marthaler  
[press@quantumsimulations.de](mailto:press@quantumsimulations.de)

HQS Quantum Simulations GmbH  
Rintheimer Straße 23  
76131 Karlsruhe  
Germany

[info@quantumsimulations.de](mailto:info@quantumsimulations.de)  
[www.quantumsimulations.de](http://www.quantumsimulations.de)