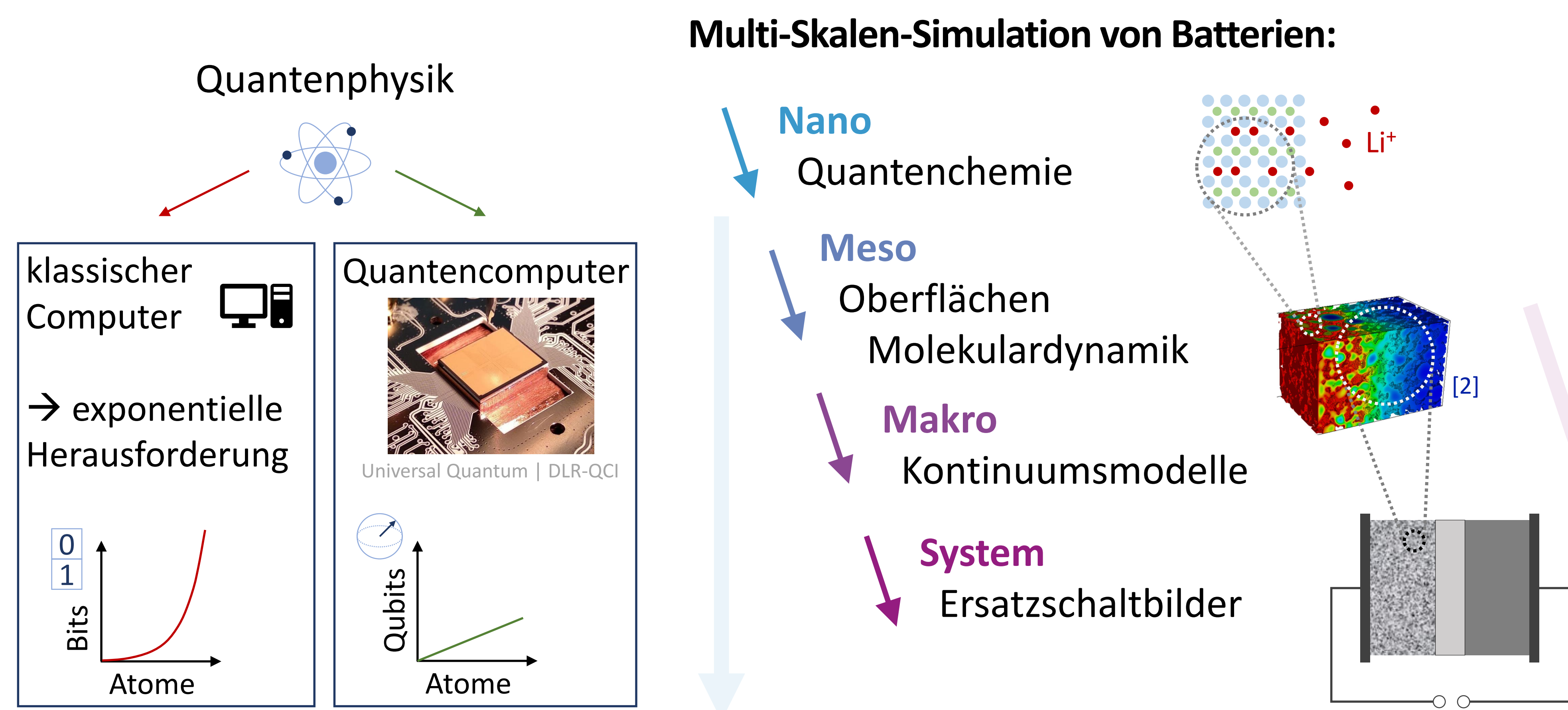


BASIQ – Batterie-Simulation mit Quantencomputern

DLR – Institut für Technische Thermodynamik

Theorie elektrochemischer Materialien

Prof. Birger Horstmann



Batterieforschung in Ulm

Helmholtz-Institut Ulm (HIU):
Angewandte Batterieforschung

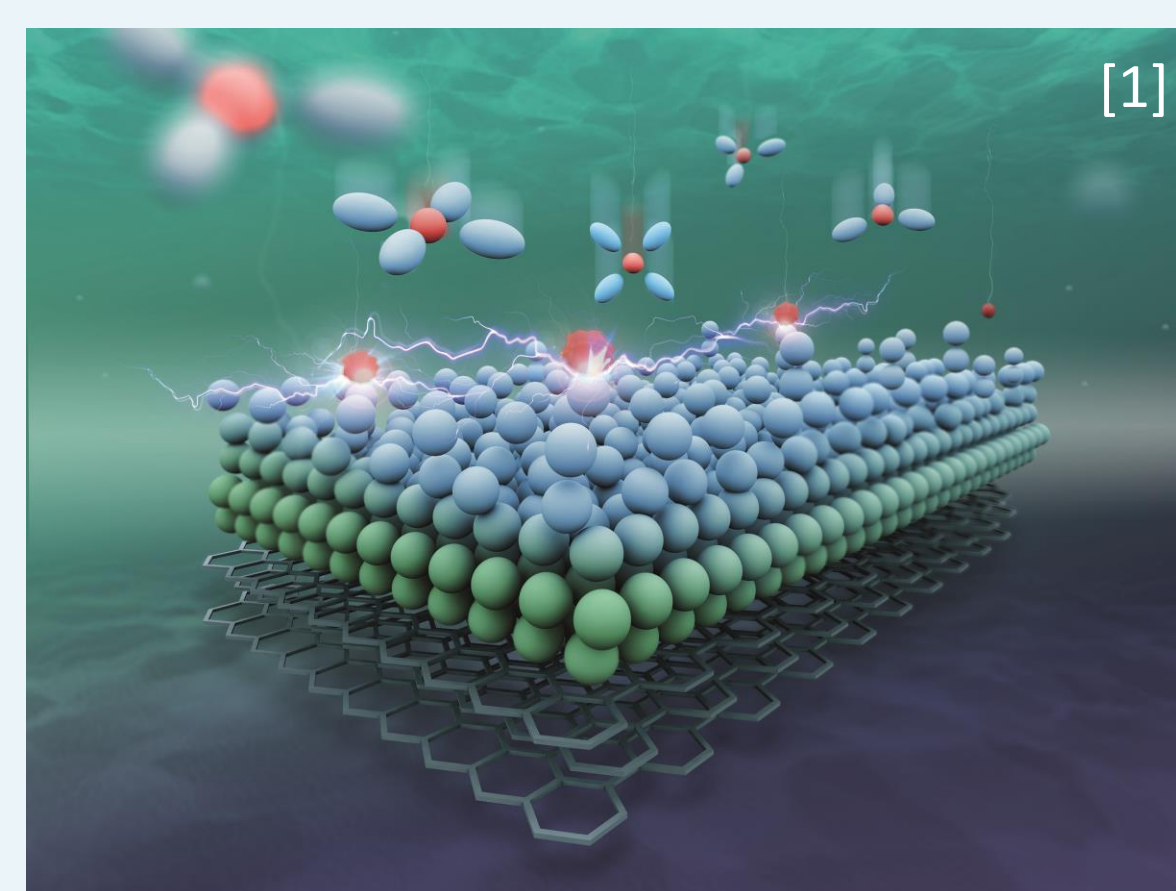


POLiS: DFG-Exzellenzcluster
für Post-Lithium-Batterien



Quantenchemie

- Materialsimulationen essentiell für Anwendungen
- Herausforderung für klassische Computer: Genauigkeit + Skalierbarkeit



Quantenchemie auf Quantencomputern:

- Simulationen von Elektroden, Elektrolyten, Grenzflächen
- Use-cases aus der Industrie (**Ausschreibung folgt**)
- Algorithmenentwicklung (**Ausschreibung läuft**)
- Implementierung auf QCI-Hardware

Drittmittelprojekte und Transfer

QuEST

- IBM-Quantencomputer in Ehningen
- Materialsimulation für Batterien



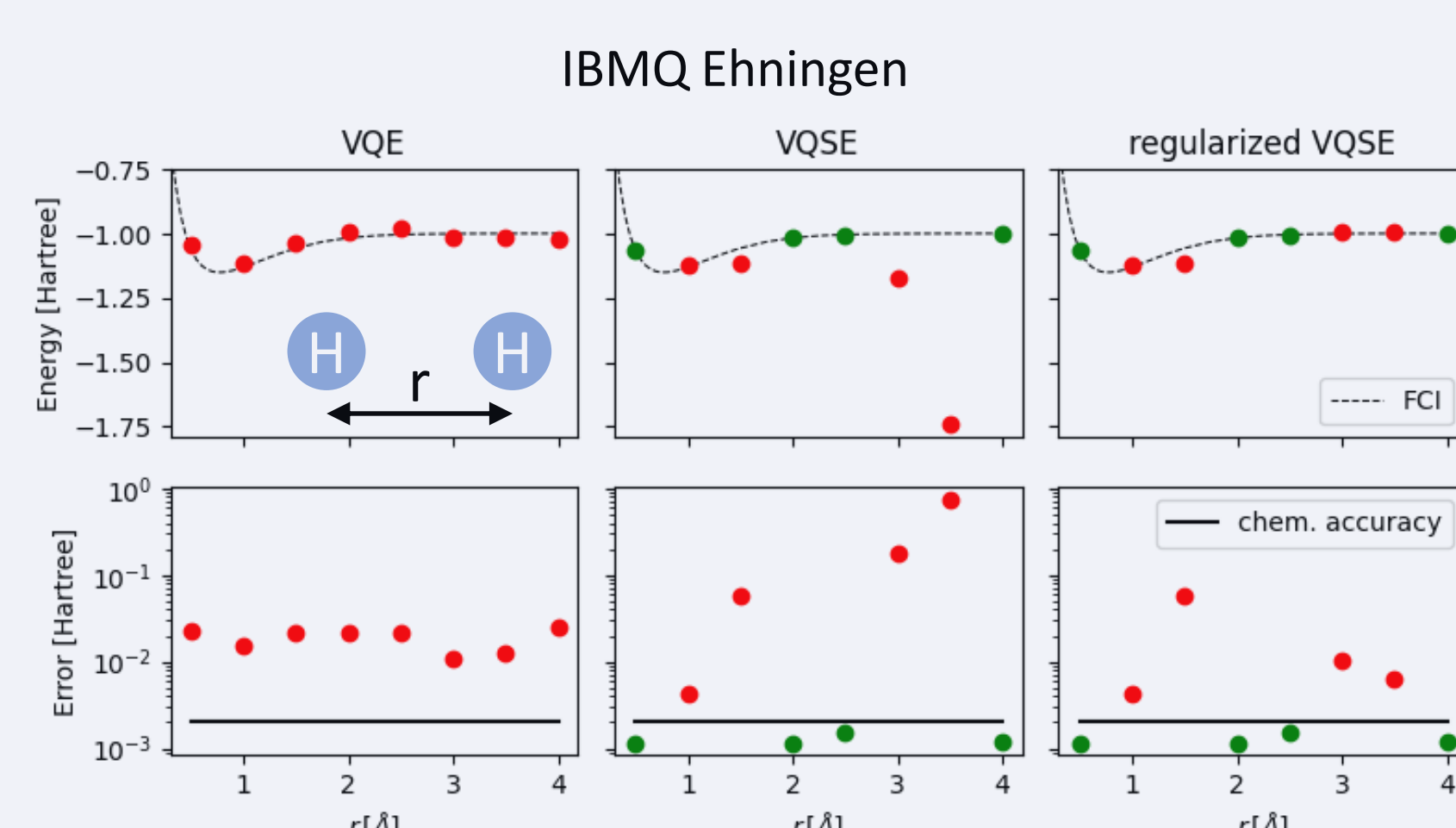
AQUAS

- Oberflächenprozesse für Wasserstoffindustrie
- Verknüpfung klassischer und Quanten-Methoden



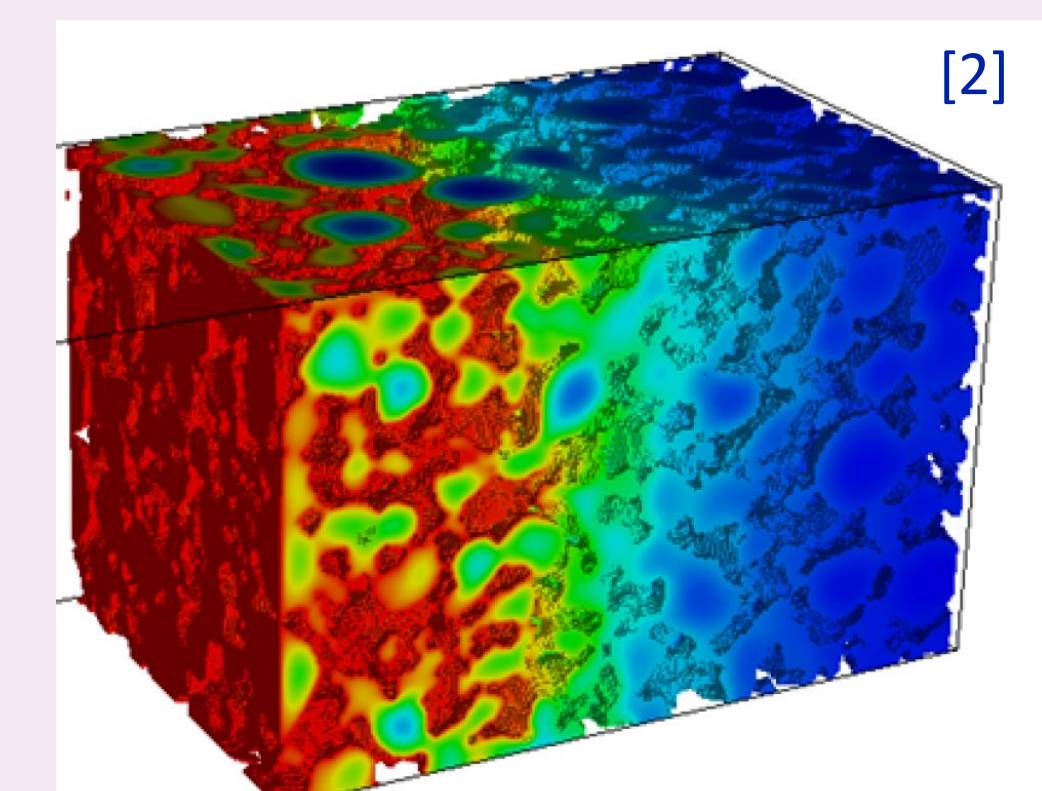
Beispiel 1: Virtual Quantum Subspace Expansion

Korrektur des Grundzustands durch angeregte Zustände
→ schrittweise Verbesserung der Genauigkeit



Partielle Differentialgleichungen

Komplexes Zusammenspiel der Komponenten:
→ Optimierung auf Quantencomputern



- Entwicklung von numerischen Lösern von PDE
- Algorithmenentwicklung (**Ausschreibung folgt**)
- Implementierung auf QCI-Hardware

Drittmittelprojekte und Transfer

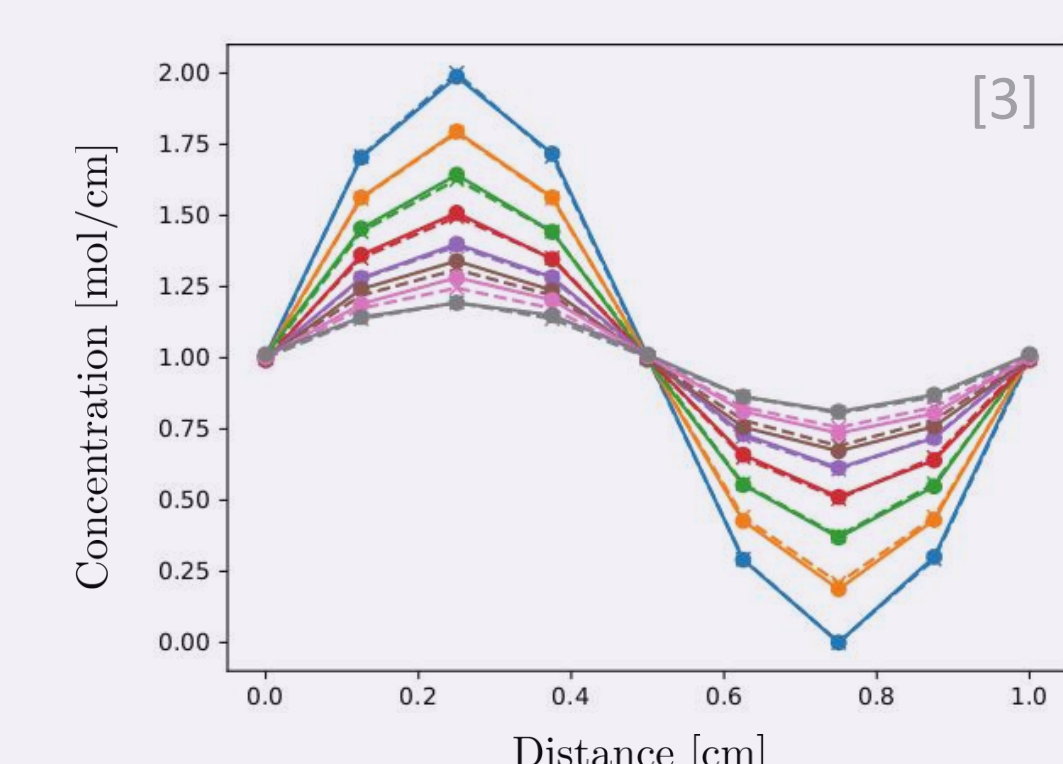
EQUALITY

- Use-Cases für Quantensimulation aus der Anwendung
- Lösen von PDE
- Simulation der Brennstoffzelle



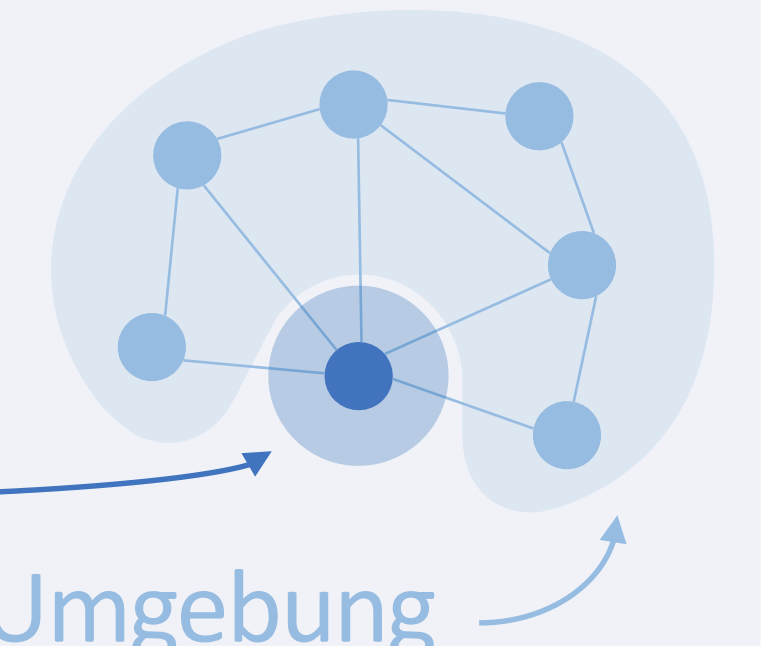
Beispiel 3: Diffusionsgleichung

Feynman-Kitaev-Hamiltonian:
Abbildung von Zeit- und Ortsabhängigkeit (t, x) auf Qubits



Beispiel 2: Quantum Embedding

Selbstkonsistente Verknüpfung:
Quanten-Methode für **aktiven Raum**
klassische Methode (Hartree-Fock, DFT) für **Umgebung**



Gefördert durch:



[1] L. von Kolzenberg, M. Werres, J. Tetzloff, B. Horstmann, Phys. Chem. Chem. Phys., 24, 18469-18476 (2022)
[2] T. Knorr, S. Hein, B. Prifling, M. Neumann, T. Danner, V. Schmidt, A. Latz, Energies 15, 7821 (2022)
[3] A. Pool, A. Somoza, M. Lubasch, B. Horstmann (2022),
Proceedings - 2022 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering, QCE 2022



aufgrund eines Beschlusses
des Deutschen Bundestages