

26.05.2022 – 10:14 Uhr

Untersuchung industriell relevanter chemischer Probleme auf heutigen Quantencomputern: Quantinum stellt InQuanto vor

Cambridge, England, und Broomfield, Colorado (ots/PRNewswire) -

InQuanto, eine hochmoderne Softwareplattform für Quantencomputerchemie, wurde für Computerchemiker entwickelt, die mit modernen Quantencomputern hoch hinaus wollen.

[Quantinum](#), der weltweite Anbieter von Quantencomputern, hat heute die Markteinführung von InQuanto bekannt gegeben, einer hochmodernen Softwareplattform für Quantencomputerchemie, die es Computerchemikern erleichtert, mit einer breiten Palette von Quantenalgorithmen auf heutigen Quantencomputern zu experimentieren.

InQuanto ist zum ersten Mal als eigenständige Plattform für kommerzielle Organisationen verfügbar und vereint die neuesten Quantencomputing-Tools in einer einzigen Anwendung. Es wurde vom Quantenchemie-Team bei Quantinum entwickelt und eingesetzt, um die Zusammenarbeit mit Partnern wie [BMW](#), [Honeywell](#), [JSR](#), [Nippon Steel Corporation](#) und [TotalEnergies](#) zu unterstützen und branchenspezifische Anwendungsfälle für Quantencomputer anzubieten. Sie nutzen die Lösung, um das Potenzial von Quantencomputern zur Verbesserung der Genauigkeit komplexer Molekular- und Materialsimulationen in ihren jeweiligen Bereichen zu erörtern.

InQuanto ermöglicht es Benutzern, die neuesten Quantenalgorithmen, fortschrittliche Subroutinen und chemiespezifische Rauschminderungstechniken miteinander zu kombinieren und anzupassen, um moderne Quantencomputer optimal zu nutzen. Die Plattform hilft den Computerchemikern außerdem, größere industriell relevante Systeme in kleinere Fragmente zu zerlegen, die auf den kleinen Quantenmaschinen von heute laufen können. Sie verwendet das Open-Source-Toolkit TKET von Quantinum, um die Rechenanforderungen für elektronische Struktursimulationen zu reduzieren und die Leistung über die breiteste Palette von Quantengeräten und -simulatoren zu maximieren.

„Quantum Computing bietet einen Weg zur schnellen und kostengünstigen Entwicklung neuer Moleküle und Materialien, die neue Antworten auf einige der größten Herausforderungen ermöglichen könnten, denen wir uns stellen müssen“, betonte **Patrick Moorhead, CEO und Chief Analyst von Moor Insights and Strategy** „Der beste Weg, um Fortschritt sicherzustellen, ist, jetzt mit dem Prototyping mit realen Anwendungsfällen zu beginnen, damit die Methoden auf die tatsächlichen Bedürfnisse der Branche zugeschnitten sind. InQuanto ist genau dafür konzipiert.“

BMW und Quantinum haben unter Verwendung der InQuanto-Plattform zusammengearbeitet, um Elektrodenreaktionen in Wasserstoff-Brennstoffzellen zu simulieren. Ziel war es, die höchste Wiedergabetreue auf heutigen Maschinen zu erreichen. Bei der Zusammenarbeit ging es vor allem um die Modellierung der Sauerstoffreduktionsreaktion. Sie hat Einblicke gegeben, wie Quantencomputer beim zukünftigen Design effizienter Katalysatoren und Elektroden helfen könnten.

Elvira Shishenina, Leiterin für Quantencomputing bei BMW Group New Technologies and Innovation, erläuterte: „Der Weg zu zukünftigen Fortschritten in der Materialmodellierung mit Quantencomputern beruht auf einem tiefen Verständnis sowohl der Technologie als auch unserer Anwendungen. Die Zusammenführung von Brennstoffzellen-Know-how und hochgradig prädiktiven Quantencomputing-Simulationen könnte die Entwicklung neuer Materialien in Richtung Zero-Physical-Prototyping vorantreiben.“

Durch die Forschungs- und Entwicklungskooperationen (F&E) von Quantinum mit Partnern aus aller Welt hat die jetzt über InQuanto verfügbare Technologie zu einer Reihe von Premieren geführt: Sie erforschte zum ersten Mal die Quantifizierung von Arzneimittel-Protein-Wechselwirkungen unter Verwendung moderner Quantengeräte ([Link](#)). In Zusammenarbeit mit der Nippon Steel Corporation hat es seine Fähigkeiten bei der Simulation von Materialien wie Eisenkristallen für die Stahlentwicklung unter Beweis gestellt ([Link](#)), und in einem bei TotalEnergies veröffentlichten Artikel wurde es zur Modellierung metallorganischer Gerüste für die Kohlenstoffabscheidung verwendet ([Link](#)).

Ilyas Khan, CEO von Quantinum, erklärte: „Wir freuen uns sehr über die heutigen Nachrichten. InQuanto ist ein

perfektes Beispiel für ein Produkt, das mit aktiver Unterstützung der führenden Unternehmen in allen Bereichen der Quantenchemie entwickelt wurde. Wir haben ein spezielles Quantencomputing-Produkt für Computerchemiker entwickelt, die nach einer Brücke zwischen dem wohlbekannten klassischen Computing und den so versprechenden Quantentechniken suchen."

Rei Sakuma, wissenschaftlicher Leiter der Materialinformatik-Initiative der JSR Corporation, sagte: „JSR ist sehr früh eine enge Partnerschaft mit Quantinuum eingegangen. Wir waren an den Beta-Tests von InQuanto (ehemals EUMEN) beteiligt und haben es hauptsächlich für Forschung und Entwicklung zu neuen Materialien und Eigenschaftsvorhersage verwendet. InQuanto ist sehr einfach zu bedienen, auch für Forscher und Ingenieure ohne tiefergehendes Wissen über Quantencomputing. In Zukunft möchten wir InQuanto nicht nur in der Forschung und Entwicklung, sondern auch in realen Produktionsstätten einsetzen, basierend auf der Prämisse der weiteren Leistungssteigerung von Quantencomputern."

In einem anderen Projekt hat Quantinuum zusammen mit Honeywell InQuanto eingesetzt, um die Anwendbarkeit von Quantencomputing auf das Design neuartiger Kältemittel zu untersuchen. Diese komplexen Verbindungen, die in vielen Branchen weit verbreitet sind, werden aufgrund der geringen Toxizität, der geringen Entflammbarkeit und Stabilität, dem geringen Treibhauspotenzial (GWP) und dem nicht vorhandenen Ozonabbaupotenzial ausgewählt. Die Suche nach neuen, umweltfreundlichen Kältemitteln ist eine entscheidende Herausforderung für nachhaltige Lösungen der Zukunft. Im Rahmen der Zusammenarbeit wurde eine Reaktion zwischen Methangas, einem einfachen Kältemittel und einem einfachen atmosphärischen Radikal unter Verwendung von in InQuanto integrierten Funktionen modelliert.

Gavin Towler, Chief Technology Officer für Honeywell PMT, erklärte: „Honeywell ist bestrebt zu untersuchen, wie wir die Quantencomputing-Fähigkeiten für unser Geschäft nutzen. Werkzeuge wie InQuanto werden eine wertvolle Rolle bei der Erfindung und Entdeckung neuer umweltfreundlicherer Chemikalien spielen."

Quantinuum arbeitet auch mit Mitsui & Co. zusammen und baut auf seiner weltweiten industriellen Reichweite auf, um das Angebot von InQuanto für Industriekunden und Forscher in Japan und im weiteren asiatisch-pazifischen Raum zu beschleunigen.

Simon Toda, Geschäftsführer der Abteilung Digital Technology Strategy im Geschäftsbereich Integrated Digital Strategy, machte deutlich: „Wir freuen uns sehr über die Zusammenarbeit mit Quantinuum, einem weltweiten Pionier im Bereich Quantencomputing. Wir glauben, dass die InQuanto-Plattform große Innovation zu den Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten in der Chemiebranche mit sich bringen wird. Mit unserem breiten Geschäftspotenzial und dank unserer einzigartigen Position in der Branche und Region unterstützen wir unsere Kunden dabei, gemeinsam mit Quantinuum neue, innovative Werte zu schaffen."

Einführung in InQuanto auf Medium: <https://medium.com/cambridge-quantum-computing/introduction-to-the-inquanto-computational-chemistry-platform-for-quantum-computers-4fced08d66cc>

Um mehr darüber zu erfahren, wie Sie mit Quantinuum Ihre Anwendungsfall-Prüfung mit der InQuanto-Plattform beschleunigen können, kontaktieren Sie Quantinuum unter inquanto@quantinuum.com. Weitere Informationen zu InQuanto finden Sie auf: <https://www.quantinuum.com/products/inquanto>. Die InQuanto-Lizenz kann den Zugriff auf das Quantinuum-Systemmodell H1 umfassen, das von Honeywell, einer Quantencomputer-Hardware auf Ionenfallenbasis, betrieben wird.

Informationen zu Quantinuum

Quantinuum ist eines der weltweit größten integrierten Unternehmen für Quantencomputer, das aus der Kombination der weltweit führenden Hardware von Honeywell Quantum Solutions und der führenden Middleware und Anwendungen von Cambridge Quantum entstanden ist.

Quantinuum beschäftigt über 400 Mitarbeiter, darunter 300 Wissenschaftler, an acht Standorten in den USA, Europa und Japan.

Auf der Grundlage von Wissenschaft beschleunigt Quantinuum unternehmensorientiert Quantencomputing und die Entwicklung von Anwendungen in den Bereichen Chemie, Cybersicherheit, Finanzen und Optimierung. Quantinuum legt seinen Schwerpunkt auf der Entwicklung skalierbarer und kommerzieller Quantenlösungen zur Lösung der besonders dringenden Probleme der Welt in Bereichen wie Energie, Logistik, Klimawandel und Gesundheit.

Das Open-Source-Entwickler-Toolkit TKET von Quantinuum bietet plattformübergreifenden Zugriff auf die weltweit führende Quantenhardware und -simulatoren und verbessert die Leistung aller Quantinuum-Produkte, einschließlich der Plattform zur Generierung von Cybersicherheitsschlüsseln Quantum Origin, des InQuanto-Pakets für Quantencomputerchemie und Materialwissenschaften, sowie des Quantenverarbeitungs- und Computerlinguistik-Toolkits für natürliche Sprache, λ mbecq, von Quantinuum.

Quantinuums Quantencomputer „H1“ von Honeywell ist einer der fortschrittlichsten der Welt und hat als erster die branchenübliche Quantenvolumen 4096-Benchmark erreicht. Im März 2020 verpflichtete sich Quantinuum (als Honeywell Quantum Solutions), das Quantenvolumen seiner kommerziellen Quantencomputer der H-Serie in den folgenden fünf Jahren jährlich um eine Größenordnung zu erhöhen.

Die Marke Honeywell wird unter Lizenz von Honeywell International Inc. verwendet. Honeywell International Inc. gibt keine Zusicherungen oder Garantien in Bezug auf diesen Dienst. Dieses Produkt wird von Quantinuum produziert.

Pressekontakt:

Kortny Rolston-Duce | +1 (208) 522-4809 | Kortny.Rolston-Duce@quantinuum.com; Peter Sigrist | +44 (0)7720 056 981 | peter.sigrist@cambridgequantum.com

Diese Meldung kann unter <https://www.presseportal.ch/de/pm/100088451/100889824> abgerufen werden.