

# Dynamik magnetischer Eigenschaften potentieller QBits



Universität Stuttgart  
Institut für Theoretische Chemie

**Projektart**  
B.Sc. / M.Sc.

**Betreuer:**  
Robert Adam\*

**Prüfer:**  
Prof. Dr. Andreas Köhn

\*adam@theochem.uni-stuttgart.de

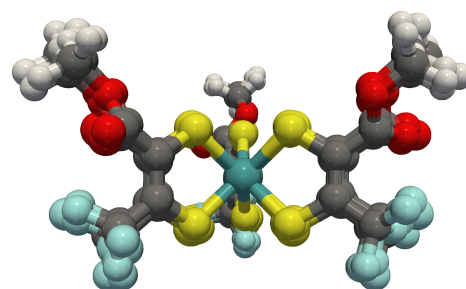
**Stichworte:** Magnetismus  $\diamond$  Molekulardynamik (MD)  $\diamond$  Quantencomputer  $\diamond$  Machine Learning

## Motivation

Paramagnetische Moleküle, welche in einem definierten Spin-Zustand präpariert werden können und diesen anschließend über eine gewisse Zeit (Kohärenzzeit) beibehalten, bieten vielversprechende Anwendungsmöglichkeiten in verschiedenen Quantentechnologien. Unter anderem für den Einsatz als sogenannte *quantum bits* (QBits) in Quantencomputern. Daher werden diese Moleküle auch als „molekulare QBits“ bezeichnet.

Auch wenn molekulare QBits im Vergleich zu anderen QBit-Arten bereits eine relativ lange Kohärenzzeit aufweisen, sind mögliche Verbesserungen stets Gegenstand aktueller Forschung. Hierfür müssen die Mechanismen der Dekohärenz verstanden werden, was tiefe Einblicke in die elektronische Struktur der Moleküle unabdingbar macht. Genau diese Einblicke liefern *ab initio* Simulationen, welche für die jeweiligen Systeme durchgeführt werden können.

Einer der möglichen Dekohärenz-Mechanismen besteht aus dem Einfluss geometrischer Verformungen des Moleküls (z.B. während molekularer Schwingungen) auf das Spin-System und somit auf seine magnetischen Eigenschaften. Um diese Kopplung über das harmonische Limit hinaus zu untersuchen, können molekulardynamische (MD) Simulationen durchgeführt werden. Allerdings wäre es aufgrund des enormen Rechenaufwands nicht möglich in jedem MD-Schritt eine *ab initio* Simulation der relevanten Eigenschaften durchzuführen, weswegen stattdessen ein neuronales Netz trainiert werden soll, welches die gewünschten Informationen anschließend in einem Bruchteil der Zeit vorhersagen kann.



## Thema

Ihre Aufgabe wird es sein ein neuronales Netz auf das zu untersuchende System zu trainieren, indem Sie eine entsprechende Anzahl an Datenpunkte generieren und diese dann für das Training über ein existierendes Framework verwenden. Anschließend werden Sie das so trainierte Netz verwenden, um eine molekulardynamische Simulation des Systems durchzuführen, um die dynamische Entwicklung relevanter magnetischer Kenngrößen zu extrahieren und zu analysieren. Das Gesamtprojekt wird dabei analog zu Referenz [1] durchgeführt werden.

[1] Zaverkin, V. *et al.* Thermally Averaged Magnetic Anisotropy Tensors via Machine Learning Based on Gaussian Moments. *J. Chem. Theory Comput.* **18**, 1–12. doi:10.1021/acs.jctc.1c00853 (2022)