



Verbundprojekt HFAK

Quantenrechner für die chemische Industrie

Motivation

Bisher erfolgt die Produktentwicklung in der chemischen Industrie überwiegend durch experimentelle Forschung und Entwicklung. Eine Verkürzung der Entwicklungszeiten kann mit dem Ersatz von Experimenten durch Simulationen erreicht werden.

Ziele und Vorgehen

Die exakte Berechnung von Grundzustandsenergien und Anregungsspektren komplexer Moleküle ist eine herausragende Herausforderung beim Design neuer chemischer Prozesse und Substanzen sowie der Bestimmung von Aktivierungsenergien. Ziel des Projektes ist es, eine Anbindung von industriellen Herausforderungen an Quantenhardware im deutschen akademischen Umfeld zu schaffen. Existierende Quantencomputer an der Universität Mainz, welche auf gefangenen Ionen basieren, werden den Berechnungen erhöhte Flexibilität und Präzision in den Gattern bieten. Fermionische Quantensimulatoren, wie sie mit kalten Atomen an der Universität Heidelberg entwickelt werden, werden die Algorithmen erheblich vereinfachen, da eine Übersetzung der fermionischen Elektronen auf Qubits nicht mehr benötigt wird. Im Ergebnis sollen vertiefte Erkenntnisse zu den Vorteilen von Quantenrechnern im Bereich der chemischen Industrie erarbeitet werden.

Innovation und Perspektiven

Insbesondere in der Katalyseforschung zur Steigerung der Energieeffizienz und zur chemischen Spaltung von Polymeren für neue Recyclingverfahren mit dem Ziel einer zirkulären chemischen Wirtschaft haben neuartige simulative Methoden ein hohes wirtschaftliches Potential, denn hier müssen komplett neue Lösungen für chemische Probleme gefunden werden und klassische Methoden stoßen an ihre Grenzen.



Vorteile von Quantenrechnern in der chemischen Industrie erforschen

Projekttitle:

Hybrides Fermionisches Quantenrechnen für die Katalysatorentwicklung (HFAK)

Programm:

Quantentechnologien – von den Grundlagen zum Markt

Fördermaßnahme:

Quanteninformatik – Algorithmen, Software, Anwendungen

Projektvolumen:

1,5 Mio. Euro (zu 64,2% durch das BMBF gefördert)

Projektlaufzeit:

01.02.2021 – 31.07.2024

Projektpartner:

- Covestro Deutschland AG, Leverkusen
- Johannes Gutenberg-Universität Mainz – FB 08 Physik, Mathematik und Informatik – Institut für Physik, Mainz
- Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Garching
- Universität Heidelberg – Fakultät für Physik und Astronomie – Kirchhoff-Institut für Physik, Heidelberg

Projektkoordinator:

Dr. Christian Gogolin
Covestro Deutschland AG
E-Mail: christian.gogolin@covestro.com