



## Projekt HoliQC2

# Berechnung chemischer Systeme auf Quantencomputern

### Motivation

Aus wissenschaftlicher und industrieller Sicht ist hierbei das Elektronenstrukturproblem aus der Quantenchemie eines der interessantesten Anwendungsgebiete. Die Suche nach einem elektronischen Grundzustand gilt als schwierige Aufgabe, und es wird nicht erwartet, dass effiziente (klassische und Quanten-) Algorithmen für allgemeine Fälle des Problems existieren. Heuristiken sind daher für die Entwicklung anwendbarer Berechnungsmethoden unerlässlich. Obwohl die Quantenchemie eines der bekanntesten und am intensivsten erforschten Bereiche der angewandten Quanteninformatik ist, gibt es bis heute keine zuverlässig anwendbaren Verfahren.

### Ziele und Vorgehen

Um zu skalierbaren und anwendbaren Ansätzen zu gelangen, müssen drei wichtige algorithmische Probleme angegangen werden: Reduktion der nötigen Messungen, Reduktion der benötigten Qubits und die zielgerichtete Konstruktion geeigneter Quantenschaltkreise. Genaue Lösungen für das Problem der elektronischen Struktur erfordern ganzheitliche Ansätze, die alle diese Einzelaspekte berücksichtigen. Das Hauptziel dieses Einzelvorhabens ist die Entwicklung eines umfassenden, ganzheitlichen hybrid-quantum-klassischen algorithmischen Grundgerüsts, das speziell auf quantenchemische Anwendungen zugeschnitten ist.

### Innovation und Perspektiven

Das Projekt HoliQC2 ist im Grenzbereich zwischen Physik, Chemie und Informatik verankert. Konkret werden Verfahren aus den wissenschaftlichen Bereichen der Quantenalgorithmik, Quantenchemie, der numerischen Simulation sowie die Entwicklung wissenschaftlicher Software zusammengeführt. Das Ziel ist die Entwicklung anwendbarer Verfahren zur Berechnung chemischer Systeme auf Quantencomputern. Hierbei wird auch Grundlage für weitere Arbeiten in der Grundlagenforschung als auch in zukünftigen Industriekooperationen geschaffen.

#### Projekttitel:

Quantencomputern (HoliQC2)

#### Programm:

Forschungsprogramm Quantensysteme

#### Fördermaßnahme:

Quantum Futur 3

#### Projektvolumen:

1,3 Mio. Euro (zu 100 % durch das BMBF gefördert)

#### Projektlaufzeit:

01.01.2025 – 31.12.2029

#### Projektpartner:

• Universität Augsburg, Institut für Informatik, Augsburg

#### Projektkoordination:

Universität Augsburg, Institut für Informatik

Prof. Dr. Jakob Kottmann

E-Mail: jakob.kottmann@uni-a.de