



## Verbundprojekt NOGS

# Neue Methoden für quantenchemische Simulationen

### Motivation

Die Simulation von Quantensystemen ist entscheidend für die chemische Industrie, da präzisere quantenmechanische Simulationen von Molekülen kommerzielle Vorteile bieten können. Trotz der Hoffnungen, dass variationelle Algorithmen und Fehlermitigierung einen Quantenvorteil mit „Noisy Intermediate Scale“ (NISQ) Quantencomputern ermöglichen, zeigen neuere Forschungen, dass dies oft nicht ausreicht. Das NOGS-Projekt zielt darauf ab, neuartige Methoden zu entwickeln, um präzise chemische Grundzustandsenergien ohne herkömmliche Zustandspräparation zu berechnen.

### Ziele und Vorgehen

Das Hauptziel des NOGS-Projekts ist die Entwicklung von Methoden, die in der Zukunft einen praktischen Quantenvorteil in der chemischen Simulation ermöglichen. Ein neuer Workflow wird klassische und quantenmechanische Ansätze kombinieren. Zunächst werden Methoden zur effizienten Präparation von Matrix Produkt Zuständen (MPS) auf den fermionischen Fall verallgemeinert. Anschließend werden fehlertolerante Methoden weiterentwickelt und in quantenchemische Simulationen getestet. Mittels Benchmarking-Verfahren soll ermittelt werden, wie nah diese Methoden an einem Quantenvorteil herankommen und welche Quantenhardware dafür benötigt wird.

### Innovation und Perspektiven

Die entwickelten Methoden sollen die Effizienz und Präzision chemischer Simulationen steigern, was wichtige Fortschritte in der Entwicklung nachhaltiger Katalysatoren und chemischer Prozesse ermöglicht. Neue Methoden zur Simulation von Übergangsmetall-Komplekkatalysen, Radikalchemie und Elektrochemie könnten entstehen. Präzisere Vorhersagen können zu effizienteren und umweltfreundlicheren Katalysatoren, geringeren Nebenprodukten und einem niedrigeren Energiebedarf führen. Langfristig könnten diese Fortschritte zur nachhaltigen Kreislaufwirtschaft beitragen, indem sie innovative Recyclingmethoden und chemische Prozesse fördern.

#### Projekttitel:

Quantenalgorithmen für chemischen Grundzustandseigenschaften ohne den Grundzustand zu präparieren (NOGS)

#### Programm:

Forschungsprogramm Quantensysteme

#### Fördermaßnahme:

Anwendungsorientierte Quanteninformatik

#### Projektvolumen:

2,0 Mio. Euro (zu 76,8 % durch das BMBF gefördert)

#### Projektlaufzeit:

01.01.2025 – 31.12.2027

#### Projektpartner:

- Covestro Deutschland AG, Leverkusen
- Technische Universität Hamburg, Institute for Quantum Inspired and Quantum Optimization, Hamburg

#### Projektkoordination:

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