



## Verbundprojekt QUBE

# Quantencomputersimulation zur Vorhersage von Materialeigenschaften

### Motivation

Die Entwicklung neuer Produkte mit verbesserten Eigenschaften erfordert in vielen Fällen die Suche nach neuen Materialien. Dies können Katalysatoren für Brennstoffzellen sein oder Hochtemperatursupraleiter und Hartmagnete für die Elektroantriebe der Zukunft. Seit vielen Jahren werden Versuche unternommen, Materialeigenschaften durch Computersimulationen vorhersagen zu können. Allerdings waren diese Versuche bisher nicht besonders erfolgreich, da die Rechenkapazität konventioneller Rechenanlagen hier schnell an ihre Grenzen stößt. Quantencomputer könnten hier den Durchbruch bringen.

### Ziele und Vorgehen

Um die Eigenschaften neuer Materialien vorhersagen zu können, müssen ihre quantenphysikalischen Eigenschaften modelliert werden. Die Algorithmen, mit denen die Materialeigenschaften berechnet werden, müssen optimal an die derzeit verfügbaren Quantencomputersysteme angepasst werden. Diese befinden sich noch in der Entwicklung, sind aber voraussichtlich bereits jetzt schon in der Lage bestimmte Problemstellungen im Bereich der computergestützten Materialentwicklung besser lösen zu können als herkömmliche Computer.

### Innovation und Perspektiven

Wenn es gelingt, Materialeigenschaften bzw. die zugrundeliegenden quantenphysikalischen Problemstellungen mit Hilfe von bereits existierenden Quantencomputern lösen zu können, steht der Materialentwicklung ein völlig neues Werkzeug zur Verfügung, mit dem sich Materialien mit maßgeschneiderten Eigenschaften am Computer entwerfen lassen. Das kann der Entwicklung von modernen Antriebssystemen und Energiespeichern völlig neue Dimensionen eröffnen und damit einen entscheidenden Beitrag leisten, um die ambitionierten Klimaziele zu erreichen, die die Abschwächung des Klimawandels erfordert.



Untersuchung chemischer Reaktionen am Computer

#### Projekttitel:

Quantenalgorithmenentwicklung, Benchmarking und Ressourcenabschätzung für Materialsimulation mit Anwendungsvorteilen auf NISQ Quantencomputern (QUBE)

#### Programm:

Forschungsprogramm Quantensysteme

#### Fördermaßnahme:

Anwendungsorientierte Quanteninformatik

#### Projektvolumen:

3,6 Mio. Euro (zu 80,6 % durch das BMBF gefördert)

#### Projektlaufzeit:

01.12.2024 – 30.11.2027

#### Projektpartner:

- Robert Bosch GmbH, Renningen
- Technische Universität Hamburg, Institute for Quantum Inspired and Quantum Optimization, Hamburg
- Universität des Saarlandes, AG Theoretische Physik der Quanteninformation, Saarbrücken
- Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik (IWM), Freiburg im Breisgau
- IQM Germany GmbH, München

#### Projektkoordination:

Robert Bosch GmbH  
Thomas Eckl  
E-Mail: [thomas.eckl@de.bosch.com](mailto:thomas.eckl@de.bosch.com)