



Projekt qHPC-GREEN

Hybride High-Performance und Quantencomputing-Methode für eine grüne Energiewende

Motivation

Eines der Hauptprobleme der Entwicklung umweltfreundlicher Technologien wie der Biokatalyse zur effizienten Ammoniakproduktion ist die Komplexität der zugrunde liegenden quantenmechanischen Mechanismen. Diese Prozesse werden von kleinen Quantensystemen mit starken elektronischen Korrelationen katalysiert und sind noch nicht vollständig verstanden. Sie stellen eine große Herausforderung für die experimentelle und theoretische Untersuchung dar. qHPC-GREEN hat das Ziel diese Verständnislücke zu schließen, indem das synergetische Potenzial von High-Performance (HPC) und Quantencomputing (QC) genutzt wird.

Ziele und Vorgehen

qHPC-GREEN zielt darauf ab die Notwendigkeit einer grünen Energiewende durch einen innovativen Ansatz zu adressieren, der die Stärken klassischer und neuartiger Quantencomputer-Hardware kombiniert. In dem Projekt wird eine hybride HPC+QC-Methode entwickelt, die für die genaue Berechnung von Quantenmaterialien und bio-inspirierten Katalysatoren maßgeschneidert ist. Dieser Ansatz beinhaltet eine korrelierte Methode zur Minimierung des Quantenressourcenbedarfs, sowie eine Divide-and-Conquer-Strategie, die HPC für schwach korrelierte und QC für stark korrelierte Bereiche nutzt.

Innovation und Perspektiven

Die in qHPC-GREEN entwickelte nahtlose HPC+QC-Implementierung wird dazu beitragen, die biologische Stickstofffixierung durch das Enzym Nitrogenase und seinen Eisen-Molybdän-Cofaktor besser zu verstehen. Obwohl sich das Projekt auf biochemische katalytische Systeme konzentriert, gehen die resultierenden effizienten und vielseitigen algorithmischen Lösungen für stark korrelierte Probleme weit darüber hinaus. Ergebnisse von qHPC-GREEN könnten langfristig wissenschaftliche und wirtschaftliche Auswirkungen auf das Design von Medikamenten, Materialien, Chemikalien, Finanzen und Optimierung haben.

Projekttitel:

Quantenunterstütztes Hochleistungsrechnen für die grüne Energiewende (qHPC-GREEN)

Programm:

Forschungsprogramm Quantensysteme

Fördermaßnahme:

Quantum Futur 3

Projektvolumen:

1,8 Mio. Euro (zu 100 % durch das BMBF gefördert)

Projektlaufzeit:

01.01.2025 – 31.12.2029

Projektpartner:

• Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., CASUS – Center for Advanced Systems Understanding, Görlitz

Projektkoordination:

Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf e.V., CASUS – Center for Advanced Systems Understanding

Dr. Werner Dobrautz

E-Mail: werner.dobrautz@gmail.com