



## Verbundprojekt VeriVaQ

# Variationelles Quantencomputing für spezifische Molekülsysteme

### Motivation

Eine der wichtigsten Anwendungen des Quantencomputings ist nach wie vor die Simulation quantenmechanischer Systeme, wobei das Elektronenstrukturproblem der Quantenchemie einen wissenschaftlichen und wirtschaftlichen Schwerpunkt darstellt. In diesem Kontext haben sich die variationellen Methoden als dominierende Klasse für kurz- und mittelfristig verfügbare quantenalgorithmische Verfahren herauskristallisiert. Die Energie des elektronischen Quantensystems wird durch ein Minimierungsverfahren nach oben hin beschränkt. Nach erfolgreicher Optimierung lässt sich der zugehörige Zustand beliebig oft erzeugen. Auf diese Weise können wichtige Initialzustände zuverlässig generiert werden. Trotz bemerkenswerter Erfolge in Theorie und Praxis steht die Variationsmethode vor erheblichen Herausforderungen: Die Wahl eines Ansatzes und die Entscheidung, ob er aussagekräftig ist, ist dabei ein zentrales Problem.

### Ziele und Vorgehen

Anwendbare und automatisierte quantenalgorithmische Methoden zur systematischen Approximation energetischer Eigenzustände molekularer Systeme sollen entwickelt und mit Werkzeugen zur quantitativen Verifikation ausgestattet werden.

### Innovation und Perspektiven

Das Elektronenstrukturproblem ist inhärent komplex und macht den Einsatz von Heuristiken erforderlich. Das Verständnis, welche Moleküle durch spezifische Heuristiken präzise beschrieben werden und welche Methoden bzw. Moleküle mit großen Unsicherheiten verbunden sind, ist von entscheidender Bedeutung für die Verfeinerung von Berechnungsmodellen und experimentellen Ansätzen in der Chemie und Materialwissenschaft. In VeriVaQ wird das variationelle Quantencomputing auf spezifische, industriell motivierte Molekülsysteme zugeschnitten und nicht als Universalösung betrachtet.

#### Projekttitel:

Verifizierbare Variationelle Quantenalgorithmen (VeriVaQ)

#### Programm:

Forschungsprogramm Quantensysteme

#### Fördermaßnahme:

Anwendungsorientierte Quanteninformatik

#### Projektvolumen:

1,3 Mio. Euro (zu 80,2 % durch das BMBF gefördert)

#### Projektlaufzeit:

01.01.2025 – 31.12.2027

#### Projektpartner:

- Universität Augsburg, Institut für Informatik, Augsburg
- Technische Universität Darmstadt, Quantum Computing Group, Darmstadt
- MERCK KGaA, Darmstadt

#### Projektkoordination:

Universität Augsburg, Institut für Informatik  
Prof. Dr. Jakob Kottmann  
E-Mail: jakob.kottmann@uni-a.de