

# Innovation Coffee

## Abstract

Titel:

**Die Vorteile und Limitationen eines Quantencomputers in der Materialwissenschaft**

Redner/-in:

Dr. Sabine Matysik, Dr. Daniel Herr

Position:

Senior Consultant, Manager

Firma:

d-fine GmbH

Ort:

Frankfurt

Webseite:

[www.d-fine.com](http://www.d-fine.com)

Abstract:

Quantum Computing hat viele interessante Anwendungen, von Kryptographie über Optimierungen in der Logistik bis hin zu effizienteren Machine Learning Algorithmen. Die aussichtsreichsten Vorteile gegenüber klassischen Computern finden sich jedoch in der Materialsimulation. Zum Beispiel hilft ein besseres Verständnis über Reaktionen, die Düngemittelherstellung zu verbessern. Weitere mögliche Simulationen können helfen, Materialeigenschaften vorherzusagen oder auch die Effektivität von neuen Medikamenten abzuschätzen.

Momentan schon eingesetzte Methoden auf klassischer Hardware umfassen verschiedene Ansätze zur Simulation von Werkstoffen und ihren Eigenschaften. Einerseits ist mithilfe diverser Annahmen über die Wechselwirkungen der Atome die Simulation tausender Moleküle oder Atome zugänglich, auch als Molekulardynamik über Zeiträume von mehreren Nanosekunden. Andererseits können moderne Computer auch quantenmechanische Berechnungen zur sehr exakten Beschreibung einzelner Moleküle anstellen. Diese können Hinweise zu Reaktionsmechanismen, etwa in der Batterie- und Brennstoffzellenforschung geben, oder experimentelle Ergebnisse aus Mikroskopie oder Spektroskopie komplementieren.

In diesem Vortrag geben wir eine Übersicht über state-of-the-art In-Silico-Berechnungen und Anwendungsfelder, in denen ein Quantencomputer konkrete Vorteile bieten kann. Wir zeigen, was realistische Berechnungen in der "noisy, intermediate-scale quantum" (NISQ)-Welt benötigen und diskutieren die Bedeutung von fehlerkorrigierten Berechnungen. Damit zeigen wir auf, wo die Grenzen der Technologie liegen und welcher weitere Entwicklungsbedarf besteht.