

# Quantencomputer – Hype oder Realität?

Großes Potenzial breites Anwendungsspektrum in der Chemie- und Pharmaindustrie

Innerhalb der innovativen Technologien besitzen Quantencomputer ein sehr hohes disruptives Potenzial, besonders für die Bereiche Chemie und Materialforschung, Medikamentenentwicklung, Logistik und Verkehrsplanung. Eine Vorreiterrolle nehmen zurzeit die USA und China ein, die regelmäßig neue Erfolge bei der Entwicklung von Quantencomputern vermelden zur Lösung von Problemen, an denen moderne Hochleistungsrechner scheitern. Allein im vergangenen Jahr flossen weltweit bereits 700 Mio. USD in Quantencomputer-Start-ups, 65% davon in die Hardware-Entwicklung.

In der Chemieindustrie eröffnet sich für Quantencomputer ein breites Anwendungsspektrum, z.B. im Bereich von Forschung & Entwicklung, in der Produktion oder auch innerhalb der Logistik und bei der Optimierung ganzer Wertschöpfungsketten. So können zielgerichtet spezielle Moleküle, molekulare Prozesse oder Formulierungen entwickelt werden für umweltfreundliche Anwendungen im Pflanzenschutz, in der Körperpflege, für Farben und Pigmente oder auch für Reinigungs- und Pflegemittel. Mit Hilfe von Simulationen können Reaktionsmechanismen tiefergreifend analysiert und auf dieser Grundlage verbesserte oder gänzlich neue Katalysatoren entwickelt werden. Diese wiederum können Produktionsabläufe und Prozessbedingungen optimieren, einhergehend mit Einsparungen von Energie und Rohstoffen und Vermeidung von unerwünschten Nebenprodukten.

Auch im Bereich innovativer Batteriematerialien gibt es laut BASF Ansatzpunkte für Quantencomputer, wo die Berechnung von elektrochemischen Potenzialen für die Simulation von Lade- und Entladekurven zur Entwicklung neuer Kathodenmaterialien beitragen kann.

Laut McKinsey können durch verbesserte Katalysatoren in der chemischen Produktion allein 5–10% Effizienzsteigerungen erzielt werden, entsprechend einer jährlichen Wertschöpfung von 20–40 Mrd. USD. Darüber hinaus lassen sich komplexe Wertschöpfungsketten bzw. Netzwerke im Falle von Störungen „ad hoc“ re-optimieren zur Sicherung der Lieferfähigkeit bei gleichzeiti-



ger Minimierung der Kosten und Risiken.

Auch die pharmazeutische Industrie sieht enorme Potenziale für die Anwendung von Quantencomputern. Heutzutage beträgt die Zeit zur Entwicklung neuer Wirkstoffe typischerweise zehn Jahre und länger, wobei die Kosten im Durchschnitt 1.5–2 Mrd. USD bis zur Marktreife

durchschnittlicher EBIT-Marge von 16% bei einer 1–5%igen Umsatzsteigerung ein zusätzliches EBIT von 2–12 Mrd. USD.

#### Technologische Herausforderungen

Im Moment sind die technologischen Limitierungen für kommerzielle Anwendungen von Quantencomputern

topologische Quantencomputer auf Basis sog. Majorana Nullmoden liefern. Dies sind Quasiteilchen, die im einfachsten Fall aus einer eindimensionalen Kette aus Elektronen bestehen und gemäß theoretischem Vorhersagen in Halbleitern auftreten sollen. Dies ist jedoch ein rein theoretischer Ansatz, denn bislang konnten diese Quasiteilchen noch nicht einmal nachgewiesen werden.

Auch auf Seiten der Software und der Programmierung von Quantensystemen sind völlig neue Ansätze erforderlich. Größere Anbieter wie z.B. Google oder IBM bilden Development Communities rund um ihre Angebote, die häufig kostenlos verfügbar sind. Vielfach sind diese Angebote auf Cloud Plattformen abrufbar, verbunden mit direktem Zugang zu Quantencomputern, auf denen dann spezielle Anwendungen getestet werden können.

#### Netzwerke und Plattformen als Innovationstreiber

Mittlerweile haben auch Europa und führende Länder wie Deutschland das Potenzial von Quantencomputern erkannt. Dies spiegelt sich in Form von zahlreichen Initiativen und Start-ups wider. So hat z.B.

die EU-Kommission 2018 mit ihrer auf zehn Jahre ausgelegten „Quantum Flagship“-Initiative Investitionen in Höhe von 1 Mrd. EUR für Quantentechnologien angekündigt. Die Bundesregierung hat 2021 ein knapp 2 Mrd. EUR umfassendes Förderprogramm vorgestellt. Das deutsch-finnische Start-up IQM hat bei Wagniskapitalinvestoren bereits 128 Mio. EUR eingesammelt – und das mitten in der Technologiekrise an den Börsen.

Das „Quantum Technology & Application Consortium Konsortium“ (QUTAC) mit Dax-Konzernen wie Infineon, BASF, MunichRe und Volkswagen beschäftigt sich vorwiegend mit der Entwicklung von Algorithmen und Simulationen zur Lösung spezifischer Probleme auf Quantencomputern. Und auch die Fraunhofer- und Max-Planck-Gesellschaft sind an dem neuen bayerischen Forschungsnetzwerk „Munich Quantum Valley“ beteiligt in das allein 300 Mio. EUR Landesmittel investiert werden sollen. Seit Mai gibt es das „Quantum Computing User Network“ (QuCUN). Hier entwickelt die Ludwig-Maximilians-Universität München in Zusammenarbeit mit ihrer Ausgründung Aqarios sowie mit BASF und SAP eine Plattform,

die zu einer zentralen Anlaufstelle für Firmen werden soll, die sich mit Quantencomputern beschäftigen. All dies macht den Anspruch Europas und Deutschlands deutlich, systematisch Ausgründungen im Bereich dieser Schlüsseltechnologie zu fördern und wettbewerbsfähige Strukturen aufzubauen.

#### Fazit

Parallel zu Quantencomputern wird auch weiterhin die Entwicklung von Hochleistungscomputern (HPCs) betrieben. So wurde unlängst der erste Exaflop Computer, genannt „Frontier“ vom Oak Ridge National Laboratory in Tennessee, USA, in Betrieb genommen, der mehr als  $10^{18}$  Rechenschritte pro Sekunde ermöglicht. Auch hier ist eine der Hauptstoßrichtungen die Simulation größerer Molekularsysteme und Erstellung von Modellen, die auf die Entwicklung neuer Kraftstoffe oder klimaresilienter Werkstoffe abzielen und den Kenntnisstand bezüglich molekularer Prozesse erweitern sollen.

Die mittelfristige Prognose bis ca. 2030 geht in Richtung hybrider Systeme, in denen spezifische Probleme und Anwendungen von Quantencomputern in Synergie mit klassischen HPCs bearbeitet werden. Um Quantencomputern langfristig zum kommerziellen Durchbruch zu verhelfen, bedarf es öffentlicher und privater Investitionen über alle Unternehmensgrößen und Branchen hinweg. Hierbei spielen Industrie-Konsortien unter Einbindung von Forschungseinrichtungen in Form von übergreifenden Netzwerken eine zentrale Rolle. Solche Netzwerke sind als wesentliche Treiber von Standardisierung im Bereich Datenstrukturen, Programmiersprache, Interfaces und Semantik zu sehen. Darüber hinaus muss ein effizienter und skalierbarer Zugang zu Hardware, z.B. als Cloud Service, gewährleistet sein, sowie die Verfügbarkeit von qualifiziertem Personal. Gerade für Letzteres sollten interdisziplinäre Programme bereits an Universitäten schnellstmöglich implementiert werden. Die Umsetzung vorab genannter Erfolgsfaktoren wird für die zukünftige internationale Wettbewerbsfähigkeit von Europa im Bereich Quantencomputer eine entscheidende Rolle spielen.

Stefan Guertzen, CHEManager

Quellenangaben sind beim Autor erhältlich.

**Die Simulation größerer Molekularsysteme zielt u.a. auf die Entwicklung neuer Kraftstoffe oder klimaresilienter Werkstoffe ab.**

betragen. Quantencomputer könnten den Forschungs- und Entwicklungsprozess für neue Wirkstoffe nicht nur erheblich beschleunigen, sondern auch wesentlich selektiver gestalten mit weniger Nebenwirkungen für Patienten. Hierdurch eröffnen sich völlig neue Möglichkeiten im Bereich personalisierte Medizin. Nimmt man noch zusätzliche Potenziale im Bereich Produktion, Logistik und Wertschöpfungsketten hinzu, eröffnet sich gemäß McKinsey für eine auf ca. 1.5 Bio. USD Gesamtumsatz geschätzte Pharmaindustrie mit

tern mehr auf der Hardware-Seite zu sehen. Der derzeitige Fokus liegt entweder auf bei extrem tiefen Temperaturen perlenförmig aufgereichte Ionen („Paul Fallen“) oder auf supraleitenden Schleifen, sog. Squids als Träger der kleinsten Recheneinheiten, der „Qubits“. Beide Systeme sind technisch sehr anspruchsvoll und extrem anfällig gegenüber externen Störeinflüssen, sodass Verfügbarkeit und Skalierbarkeit immer noch große Hindernisse darstellen. Mehr Stabilität bei gleichzeitig erhöhter Anzahl von Qubits könnten

COAC

EFFIZIENZ UM >80% STEIGERN

EH&S- und regulatorische Informationen können mit Hilfe der SAIFTY Plattform entlang der gesamten Lieferkette automatisiert erfasst, verarbeitet und bereitgestellt werden. Durch passgenaue Informationsbereitstellung an Menschen und Maschinen automatisieren Sie aufwändige und fehleranfällige Prozesse. Steigern Sie mit uns Verfügbarkeit, Effizienz und Qualität.

Enabling data-driven innovations  
[WWW.COAC.DE/SAIFTY](http://WWW.COAC.DE/SAIFTY)

Sie suchen Lagerkapazitäten für Gefahrstoffe in zentraler Lage?



Wir bieten:

- Block- und Regallagerung
- Gefahrgutabwicklung für Straße, Luft & See-Transport
- Bestandsführung mit Chargenverwaltung
- Kommissionieren, Packen und Versenden
- Musterabfüllung für Nicht-Gefahrstoffe

[www.livchem-logistics.com](http://www.livchem-logistics.com)

TEAMPROJEKT  
OUTSOURCING

Jetzt Prozesse analysieren lassen

- ✓ 100 % Flexibilität
- ✓ mehr Effektivität
- ✓ keine Kopfschmerzen

Ihre Prozesse in guten Händen

Ihre Service-Experten für die chemische Industrie  
Produktion • Lagerung • Verpackung  
Automatisierung • Digitalisierung

+49 6142 83786 0

Jetzt unverbindliche Analyse Ihrer Unternehmensprozesse anfordern.

[www.teamprojekt-chemie.de](http://www.teamprojekt-chemie.de)