AQARIOS

Quantencomputing in der Chemie

Was heute schon geht und wie Sie einsteigen

Webinar VCI und QuCUN, 20. Oktober 2026

Nico Kraus
Aqarios GmbH

Simon Schlichting
QAR-Lab, LMU München

Ionel Rusu
BASF, Quantum Computing Innovation

QuCUN

LMU LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT MÜNCHEN

BASF We create chemistry

SAP

Gefördert durch:
Bundesministerium für Forschung, Technologie und Raumfahrt

EINSTIEG

Wer heute spricht



Nico Kraus

Aqarios GmbH

Chief Product Officer (CPO)

Im Webinar

Grundlagen, Use Case 2 und Zugangsbüro



Simon Schlichting

QAR-Lab, LMU München

Wissenschaftlicher Mitarbeiter

Im Webinar

Use Case 1, Ozonolyse



Ionel Rusu

BASF

Quantum Computing Innovation, Next Generation Computing

Im Webinar

Stimme aus der Praxis

AGENDA

Fünf Blöcke in 60 Minuten, danach ist Zeit für Ihre Fragen

1	Begrüßung und Vorstellung QuCUN	15 Min
2	Quantencomputing verständlich erklärt	15 Min
3	Chemische Reaktionen simulieren (BASF)	10 Min
4	Produktionsplanung (BASF)	10 Min
5	Das Zugangsbüro für Ihren eigenen Use Case	10 Min
	Fragen und Diskussion	ca. 30 Min

EINSTIEG

Drei Dinge, die Sie heute mitnehmen

1

Einordnen, was heute schon möglich ist

Wo Quantencomputing schon heute nützt, wo es noch Jahre dauert, und warum sich der Einstieg trotzdem jetzt lohnt.

2

Erkennen, ob Ihr eigenes Problem passt

Simulation und Optimierung haben das größte Potenzial. Die Beispiele zeigen, woran Sie solche Probleme erkennen.

3

Den ersten Schritt kennen

Mit wem Sie sprechen, was Sie mitbringen müssen und wie ein erstes Projekt mit QuCUN abläuft.

QuCUN verbindet Forschung, Technologie und Anwendung

FORSCHUNG **QAR-Lab der LMU München**, Algorithmen und über 30 Publikationen seit Projektstart

QuCUN

Zentrale Anlaufstelle für Anwender in Deutschland

Vernetzen

Projekte, Anwender und Communities zusammenbringen

Wissen teilen

Use Cases, Lernmaterial und Projekterfahrung

Zugang schaffen

Plattform mit Zugang zu Quanten-Hardware

UNTERNEHMEN **Jeder Größe**, von der ersten Frage bis zum eigenen Projekt

Das QuCUN-Projekt

FORSCHUNG

QAR-Lab, LMU München

Forschung und Konsortialführung

TECHNOLOGIE

Aqarios GmbH

Spin-off des QAR-Labs, entwickelt Plattform und Algorithmen

ANWENDUNG

SAP

Anwender aus der Industrie

ANWENDUNG

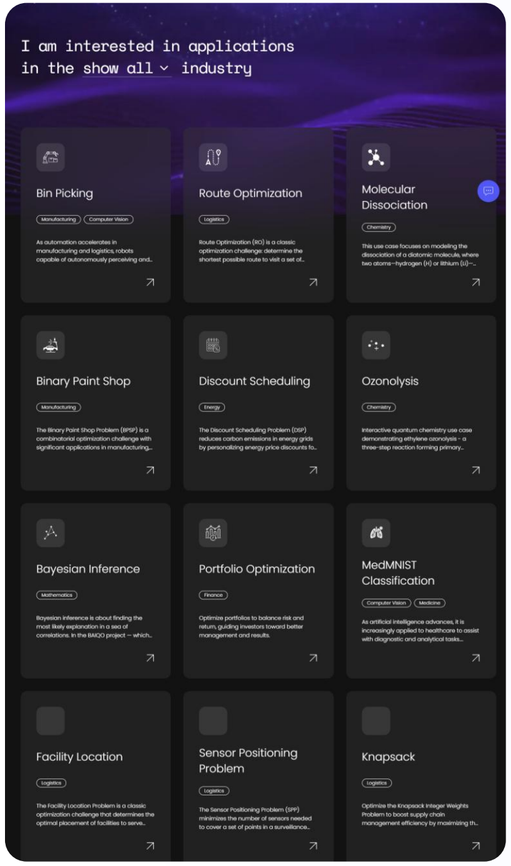
BASF

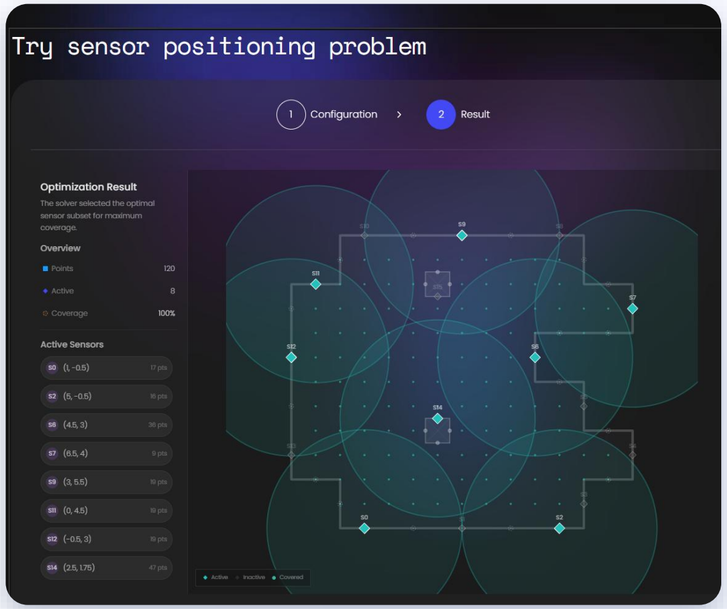
Anwender aus der Chemie

Gefördert vom **BMFTR**

Laufzeit bis **November 2027**

Die QuCUN-Plattform bündelt Use Cases, Wissen und Benchmarks





15+
Use Cases

25+
Experten

4
Quantum-Partner

- **USE CASES**

  Beispiele aus der Industrie

  Interaktiv ausprobieren oder als Code lesen

- **WISSEN**

  Tutorial Notebooks

  Lernmaterial und Schulungen für jeden Kenntnisstand

- **VERGLEICHEN**

  Das Evaluation Framework

  Vergleichen Sie Ergebnisse mehrerer Algorithmen in einer grafischen Oberfläche

BLOCK 2

Quantencomputing verständlich erklärt

Bei zwei Arten von Problemen stoßen klassische Rechner an Grenzen

SIMULATION

Moleküle und Reaktionen genau berechnen

Elektronen folgen den Regeln der Quantenphysik. Das genau nachzurechnen, wird klassisch schnell zu aufwendig.

In der Chemie

- Katalysatoren
- Materialien
- Reaktionsverständnis

OPTIMIERUNG

Riesige Kombinationsprobleme lösen

Schon 20 Aufträge ergeben 2,4 Trillionen mögliche Reihenfolgen.

In der Chemie

- Produktionsplanung
- Logistik

Chemie ist der natürliche Kandidat für Quantencomputer

01

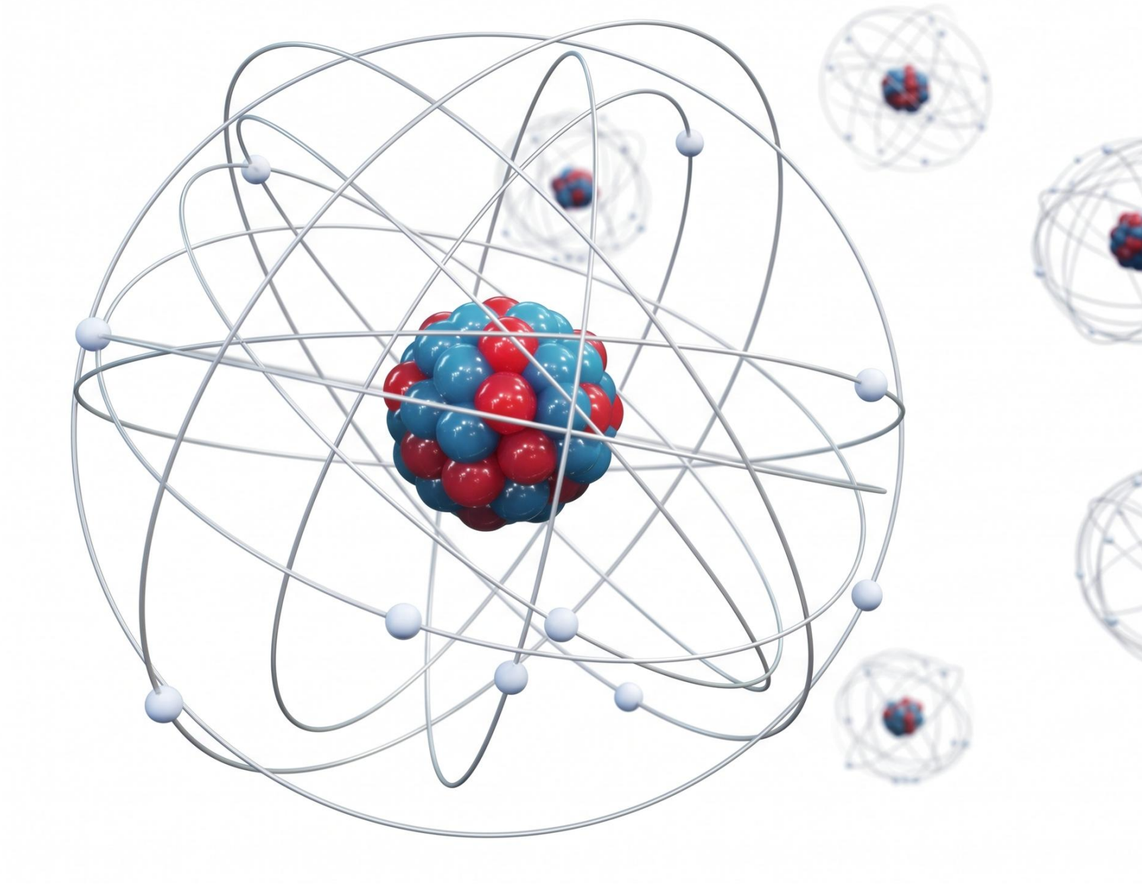
Elektronen in Molekülen sind selbst **Quantenobjekte.**

02

Klassisch **wächst der Aufwand exponentiell** mit der Molekülgröße.

03

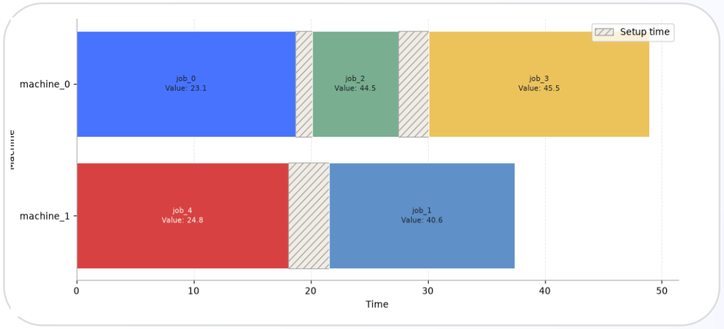
Ein Quantencomputer **bildet das direkt ab.**



„Die Natur ist nicht klassisch. Wer sie simulieren will, muss quantenmechanisch rechnen.“

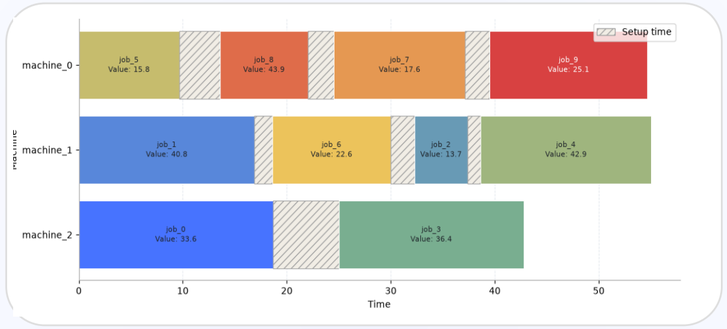
Richard Feynman, 1981 (sinngemäß)

Bei großen Planungsproblemen eröffnen Quantenverfahren neue Lösungswege



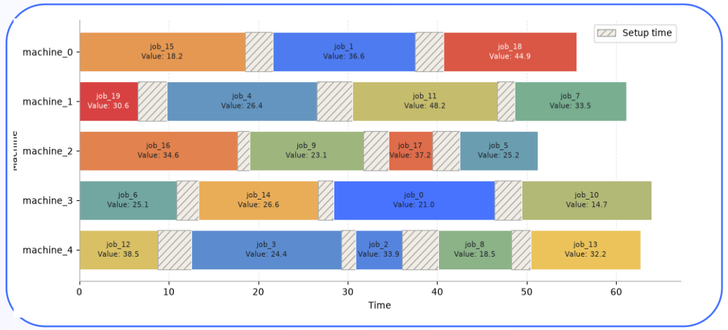
5 Aufträge auf 2 Maschinen

720



10 Aufträge auf 3 Maschinen

240 Millionen



20 Aufträge auf 5 Maschinen

26 Trilliarden

mögliche Pläne, wenn Reihenfolge und Maschine frei wählbar sind

Alles durchprobieren geht nicht. Klassische Solver wie Gurobi suchen gezielt, stoßen bei großen Problemen aber an Zeitgrenzen.

Quantenverfahren sind ein neuer Ansatz für diese Suche. Hybrid mit klassischen Solvern werden sie heute schon getestet.

Beispielpläne PAS (Aqarios). Anzahl Pläne: (n + m − 1)! / (m − 1)! für n Aufträge auf m Maschinen.

Ein Bit ist 0 oder 1, ein Qubit kann beides überlagern

Bit



0 aus **1** an

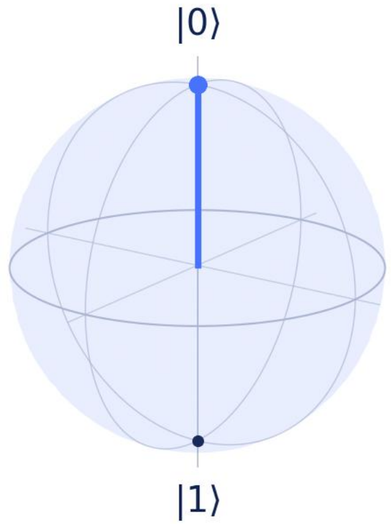
Wie ein Schalter. Er ist entweder aus oder an.

Qubit

Superposition von 0 und 1

Wie eine Münze, die sich dreht.

Erst beim Messen zeigt sie 0 oder 1.



Messung: 0 mit 100 % · 1 mit 0 %

Superposition heißt Überlagerung. Bis zur Messung trägt das Qubit 0 und 1 zugleich in sich.

Quantencomputer durchsuchen riesige Lösungsräume

10 Qubits
≈ 1.000 Zahlen

›

50 Qubits
≈ 10^{15} Zahlen
1.000.000.000.000.000

›

300 Qubits
mehr als Atome im Universum

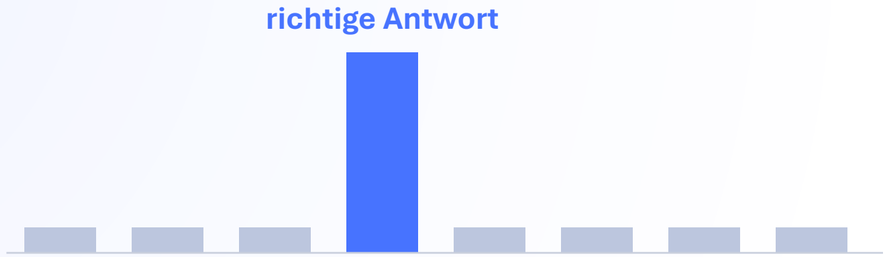
Vor dem Algorithmus



Interferenz

verstärkt die richtige Lösung

Nach dem Algorithmus



Jede Messung liefert **nur ein Ergebnis**. Deshalb wird viele Male gemessen (Shots). Das **häufigste Ergebnis** ist mit hoher Wahrscheinlichkeit die richtige Antwort.

Schematische Darstellung

Quantenrechner arbeiten in Gates, und jedes Gate bringt etwas Rauschen

GATES



Rechenschritte nacheinander →

Ein Gate ist ein einzelner Rechenschritt. Es dreht den Zustand eines Qubits oder verknüpft zwei Qubits. Ein Algorithmus besteht aus vielen Gates hintereinander, am Ende wird gemessen.

RAUSCHEN (NOISE)

Kein Gate ist perfekt. Wärme, Strahlung oder kleine Ungenauigkeiten verfälschen den Zustand bei jedem Schritt ein wenig.

Wahrscheinlichkeit für ein fehlerfreies Ergebnis



Annahme: 1 Fehler pro 1.000 Gates, typisch für heutige Hardware. Fehlerfrei-Wahrscheinlichkeit = 0,999 hoch Anzahl Gates.

Unter der Fehlerschwelle wirkt Fehlerkorrektur

FEHLER PRO RECHENSCHRITT

Heute

1 von 1.000

≈ 1.000 Schritte
bis zum ersten Fehler

Mit Fehlerkorrektur (Schätzung)

1 von 10.000

≈ 10.000 Schritte
bis zum ersten Fehler

(IBM-Ziel 2029)

1 von 100 Mio.

100 Mio. Schritte
ohne Fehler

WAS DIE FEHLERSCHWELLE BEDEUTET

Über der Schwelle
Mehr Qubits für die Korrektur bringen mehr neue Fehler, als sie beheben.

Unter der Schwelle
Mehr Qubits senken die Fehlerrate. Google hat das 2024 erstmals gezeigt.

2026
Erstmals mit vielen Qubits: Quantinuum rechnet mit **12 fehlerkorrigierten Qubits.**

Schätzung: angenommen, die Fehlerrate der Qubits sinkt weiter unter die Fehlerschwelle, sodass Fehlerkorrektur eine echte Verbesserung bringt.

Hardware und Investitionen machen große Sprünge

INVESTITIONEN

12,6 Mrd. $

in Quanten-Startups weltweit 2025, **6,3-mal so viel wie 2024**

1,68 Mrd. $	Börsengang von Quantinuum, Juni 2026
1 Mrd. $	Finanzierungsrunde von PsiQuantum, September 2025
2 Mrd. $	US-Regierung beteiligt sich an neun Quantenfirmen, 2026

MEILENSTEINE UND ZIELE

2025

IBM Nighthawk
Besser vernetzt, bis zu 1.000 Zwei-Qubit-Operationen

2029 geplant

IBM Starling
200 logische Qubits und 100 Mio. Operationen

2030 Ziel

Deutschland
Zwei fehlerkorrigierte Quantencomputer, Ziel der Hightech Agenda

Quellen: McKinsey, Quantum Technology Monitor 2026 (Wert 2024 aus Faktor 6,3 berechnet); Herstellerangaben IBM; Hightech Agenda Deutschland; Unternehmensangaben und Presseberichte 2025/2026

Wer jetzt einsteigt, ist vorbereitet, wenn die Hardware reif ist

LEHRE AUS INDUSTRIEPROJEKTEN

Kurzfristig bringen reine Quantenrechner keinen klaren Nutzen.

HEUTE

Eigene Probleme finden und passend zur Hardware modellieren

TESTEN

Quanten- und hybride Verfahren fair gegen klassische Lösungen vergleichen

GEMEINSAM

Mit Forschung und Anbietern an echten Problemen arbeiten

SPÄTER

Bereit sein, wenn die Hardware reif ist

Den KI-Moment hat Deutschland verpasst. Beim Quanten-Moment darf das nicht passieren.

Quelle: Projekt QCHALLenge (gefördert vom BMFTR), Bericht „Quantum Computing – Strategic Recommendations for the Industry“, 2025

BLOCK 3

Use Case 1: Chemische Reaktionen simulieren

Die Modellreaktion: Ozonolyse von Ethylen

WOZU OZONOLYSE?

Gezielte Spaltung von C=C-Doppelbindungen, um organische Moleküle in chemische Bausteine umzuwandeln.

Das Reaktionsverständnis hilft auch, Gummi vor Ozonschäden zu schützen – mit Antiozonantien als Schutzstoffen.

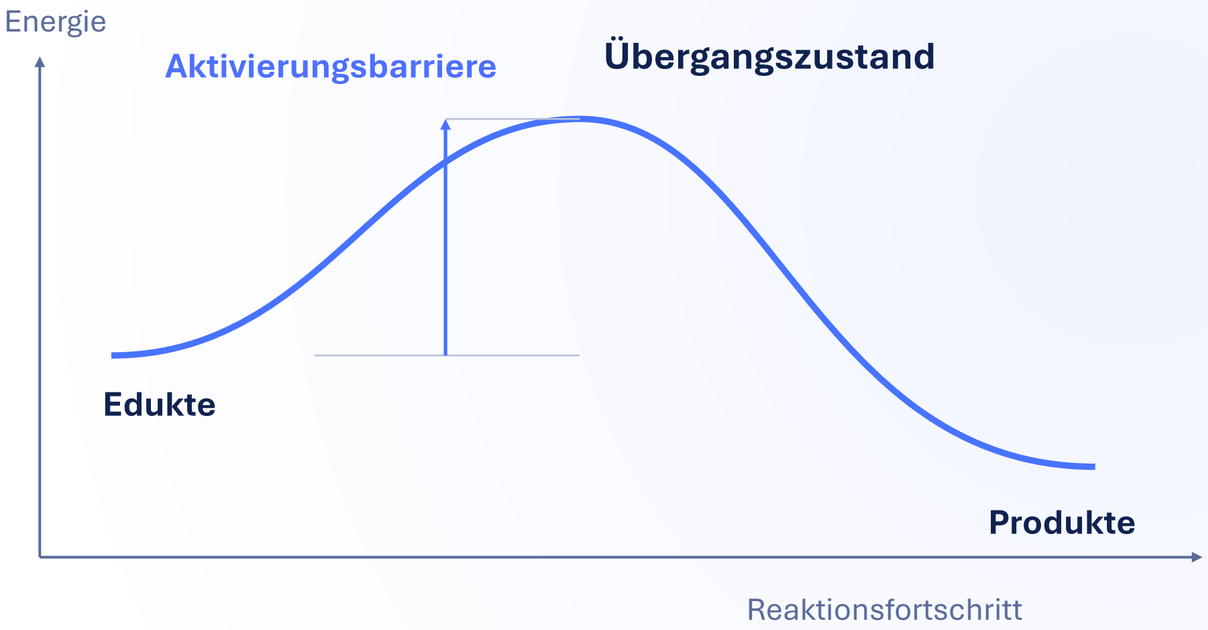


Ethylen + Ozon → **Primäres Ozonid** → **Formaldehyd + Carbonyloxid** → **Sekundäres Ozonid**

Quellenbasis: QuCUN-Screenshot; app.qucun.de/use-cases/ozonolysis

Die Herausforderung: Energiebarrieren bestimmen

Ziel: das Energieprofil berechnen



Warum ist das aufwendig?

Viele mögliche Elektronenverteilungen: Der Rechenaufwand wächst stark mit der Größe des betrachteten Raums.

Vereinfachung: der aktive Raum

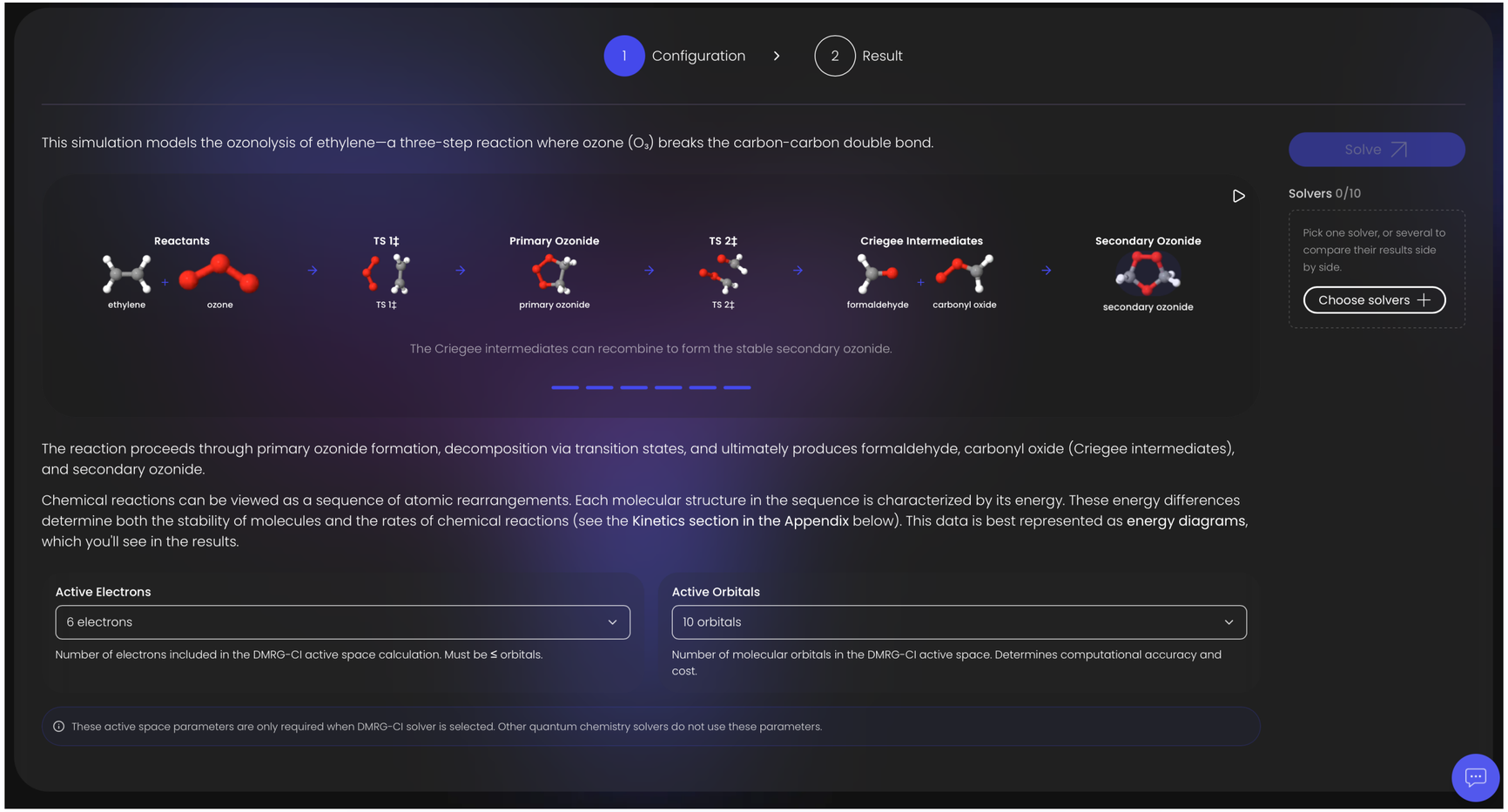
Ausgewählte Elektronen und Orbitale werden detailliert gemeinsam behandelt; die übrigen Elektronen vereinfacht.

Ein größerer, passend gewählter Raum kann die Energien besser beschreiben – benötigt aber mehr Rechenaufwand.

Entscheidend: alle Zustände entlang des Reaktionswegs ausgewogen beschreiben.

Quelle: QuCUN · Ozonolyse · bereitgestellter Fachtext zu CAS-CI/DMRG-CI. Energieprofil: schematischer Einzelschritt, ohne Maßstab.

Auf QuCUN: vom Modell zum Energieprofil



Quelle: QuCUN-Plattform · https://app.qucun.de/use-cases/ozonolysis

Der Lösungsansatz: Klassische & quantenbasierte Berechnungsmethoden

KLASSISCH

Modelle auf klassischen Rechnern

RHF · Restricted Hartree–Fock

Optimiert doppelt besetzte Orbitale im mittleren Elektronenfeld. Korrelation darüber hinaus fehlt.

DFT · Dichtefunktionaltheorie

Bestimmt die Elektronendichte selbstkonsistent. Ein Funktional nähert Austausch und Korrelation an.

DMRG-CI · Wellenfunktion im aktiven Raum

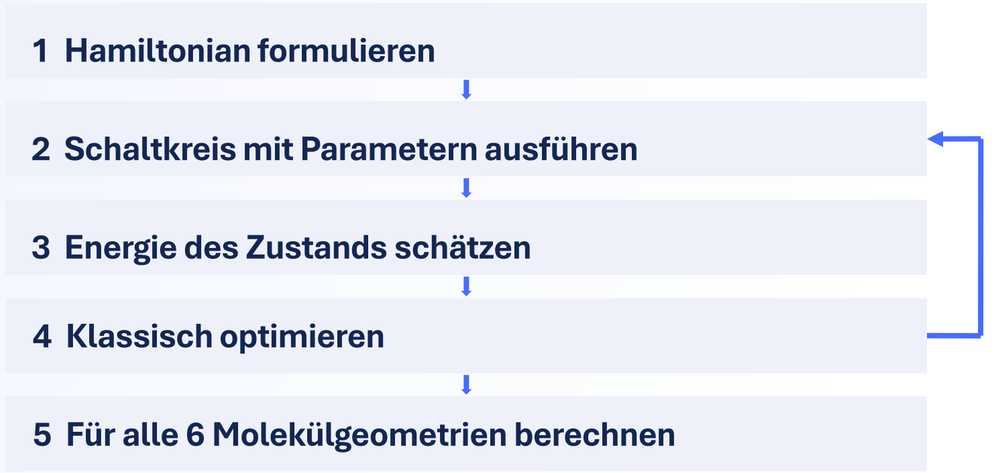
Optimiert eine komprimierte Wellenfunktion aus vielen Elektronenkonfigurationen im gewählten aktiven Raum.

HYBRID

Quanten + klassisch

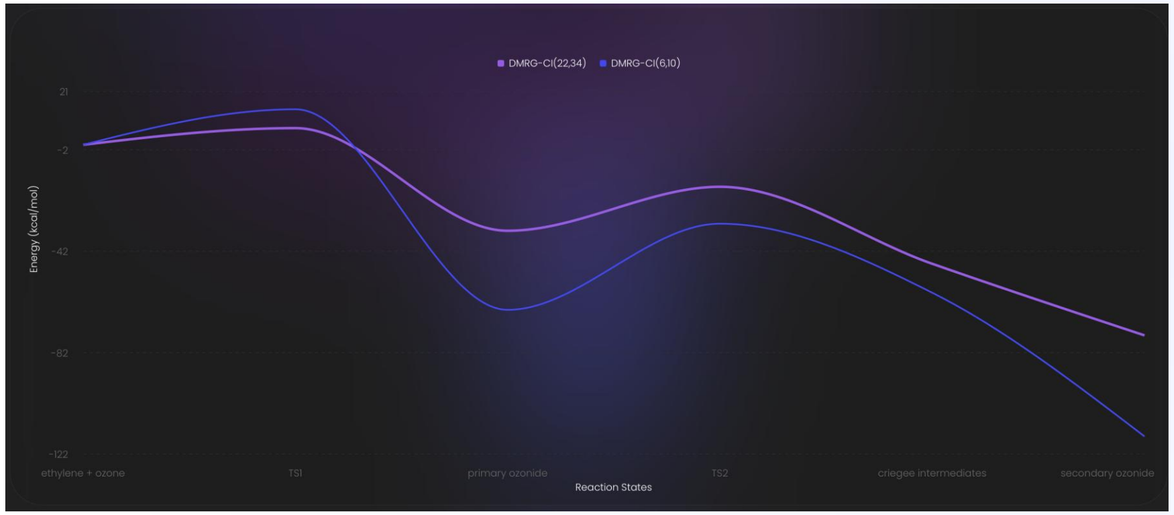
VQE

Variational Quantum Eigensolver

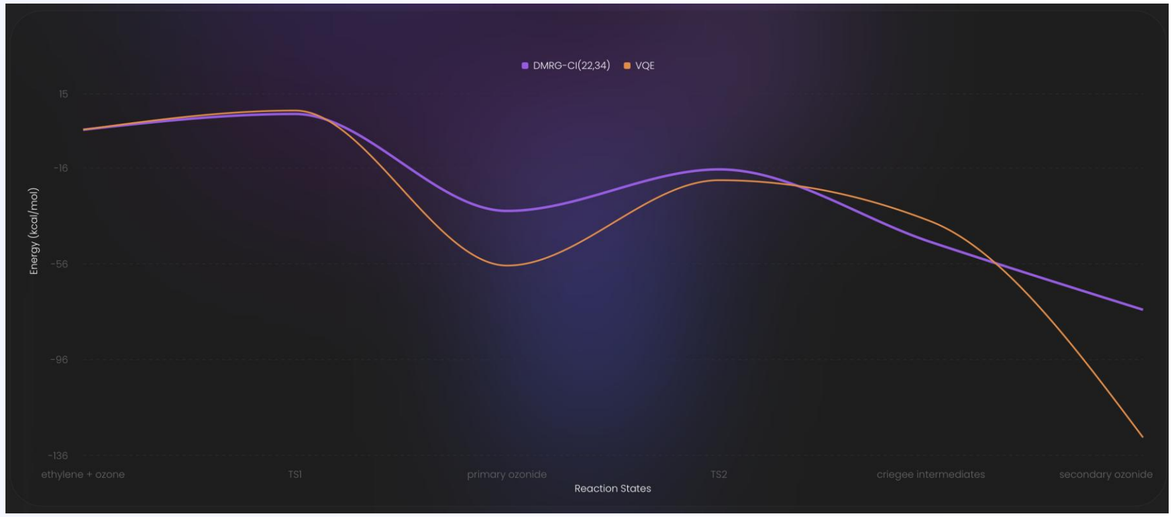


Energieprofile zeigen Abweichungen von der Referenz

DMRG-CI IM VERGLEICH



VQE IM VERGLEICH



Referenz: DMRG-CI(22,34) liefert Benchmark-Energien für den Vergleich (violette Kurve).

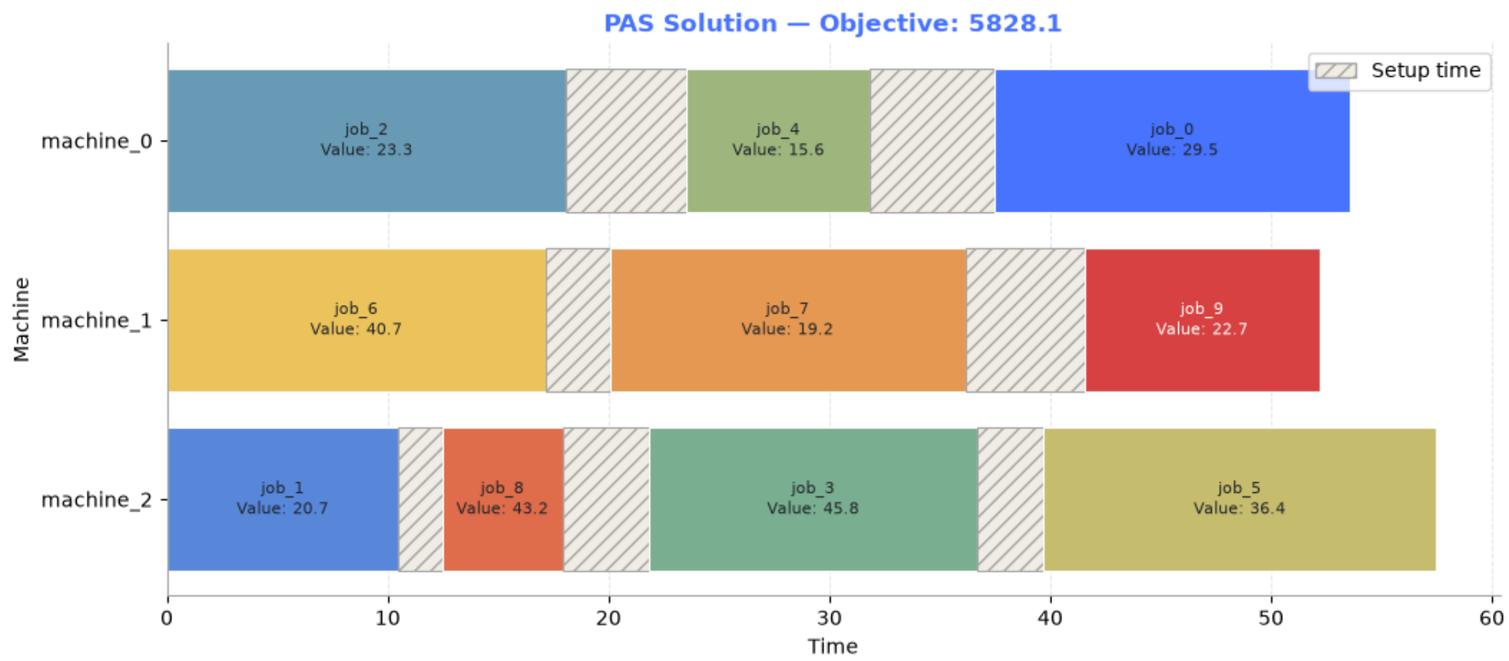
Quelle: QuCUN · app.qucun.de/use-cases/ozonolysis

BLOCK 4

Use Case 2: Produktionsplanung bei BASF

BASF will Produktionsaufträge schneller auf Reaktoren verteilen

- Im Agrargeschäft von BASF werden Produktionsaufträge auf chemische Reaktoren verteilt.
- **Heute dauert die Optimierung lange.**
- Schneller heißt mehr Planungsszenarien, längere Horizonte und schnelles Umplanen, wenn etwas ausfällt.

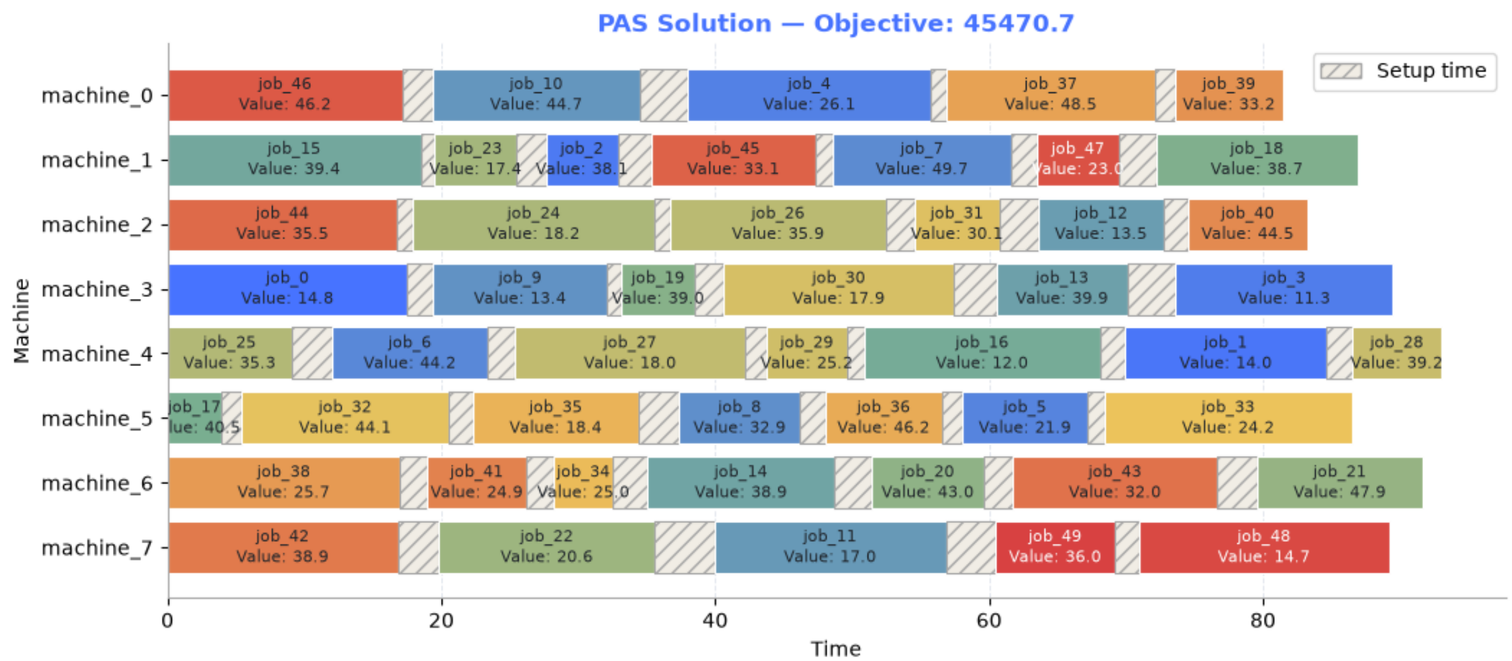


Beispiel mit 3 Reaktoren und 10 Aufträgen. Schraffiert: Setup-Zeiten.

Quelle: Projekt QCHALLenge (gefördert vom BMFTR). Awasthi (BASF), Kraus (Aqarios), Krellner (SAP), Zambrano (Aqarios), IEEE QCE 2024

Reaktoren, Setup-Zeiten und drei Ziele machen die Planung schwer

- Nicht jeder Auftrag passt auf jeden Reaktor.
- Zwischen zwei Aufträgen wird gereinigt oder umgerüstet. Wie lange, hängt von der Reihenfolge ab.
- **Ziele:** wenig Setup-Zeit, gleichmäßige Auslastung und hoher Produktionswert.
- Mit jedem Auftrag wächst die Zahl möglicher Pläne explosionsartig.



Beispiel mit 50 Aufträgen auf 8 Maschinen. Schraffiert: Setup-Zeiten.

Quelle: Projekt QCHALLenge (gefördert vom BMFTR). Awasthi (BASF), Kraus (Aqarios), Krellner (SAP), Zambrano (Aqarios), IEEE QCE 2024

Im fairen Vergleich bekommt jedes Verfahren sein passendes Modell

KLASSISCH

Gurobi

- Führender Industrie-Solver
- 3 Stunden Rechenzeit

HYBRID

D-Wave Leap Hybrid Solver

- Klassische Rechner plus Quantenannealer
- 5 Sekunden bis ca. 45 Minuten Rechenzeit, je nach Größe

20 Testfälle

Von 27 Aufträgen und 9 Reaktoren bis 160 Aufträgen und 20 Reaktoren, also **ca. 2.000 bis ca. 150.000 Variablen**

Quelle: Projekt QCHALLenge (gefördert vom BMFTR). Awasthi (BASF), Kraus (Aqarios), Krellner (SAP), Zambrano (Aqarios), IEEE QCE 2024

Der hybride Solver erreichte die gleiche Qualität bis zu 2-mal schneller

ca. 150.000

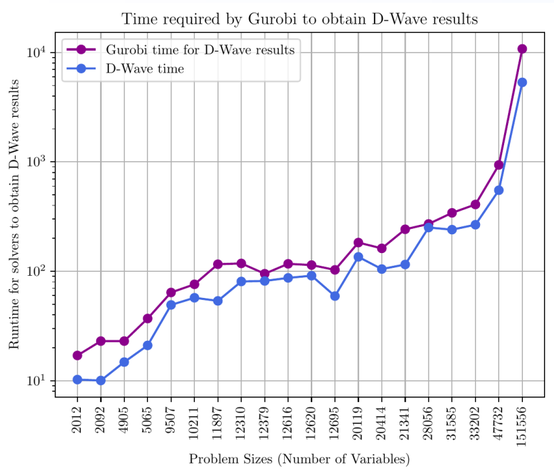
Variablen im größten Testfall

bis 2-mal

schneller zur gleichen Lösungsqualität

bis zu 17,5 %

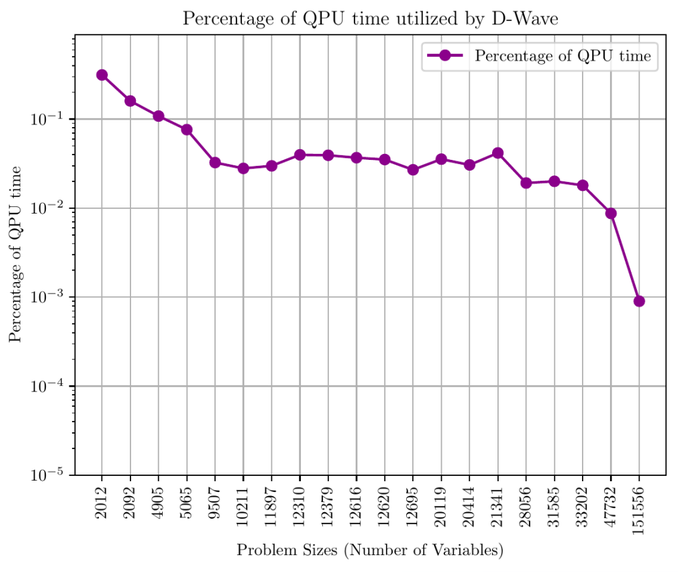
bessere Lösung bei gleicher Rechenzeit, im Testfall mit dem größten Unterschied



- Links die Laufzeit im Vergleich, bis zur **gleichen Lösungsqualität**
- Logarithmische Skala, da Laufzeit exponentiell wächst
- **Bei gleicher Rechenzeit** war die klassische Lösung teils deutlich schlechter
- Gurobi liefert zu jeder Zeit die bis dahin beste gefundene Lösung
- Leap Hybrid liefert exakt eine Lösung zu einem vorher festgelegten Zeitpunkt

Quelle: Projekt QCHALLenge (gefördert vom BMFTR). Awasthi (BASF), Kraus (Aqarios), Krellner (SAP), Zambrano (Aqarios), IEEE QCE 2024

Wie viel vom Vorteil auf den Quantenteil zurückgeht, ist offen



unter 1 % der Laufzeit war der Quantenprozessor aktiv

- Der hybride Solver ist eine Black Box. Wie klassische und Quantenanteile zusammenspielen, ist nicht offengelegt.
- Wie viel vom Vorteil auf den Quantenteil zurückgeht, ist deshalb **unklar.**

Was bleibt: Die richtige Modellierung entscheidet. Hybride Verfahren können schon heute mit klassischen Industrie-Solvern mithalten.

Quelle: Projekt QCHALLenge (gefördert vom BMFTR). Awasthi (BASF), Kraus (Aqarios), Krellner (SAP), Zambrano (Aqarios), IEEE QCE 2024

BLOCK 5

Ihr eigener Use Case im Zugangsbüro

BLOCK 5 | ZUGANGSBÜRO

In ca. 6 Wochen entsteht kostenlos ein Proof of Concept

SIE

Bringen eine Fragestellung mit

Zum Beispiel aus Produktion, Logistik oder Simulation

QUCUN-TEAM

Aqarios und LMU setzen sie um

Inklusive Zugang zu echter Quanten-Hardware

AQARIOS

LMU LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT MÜNCHEN

ERGEBNIS

Proof of Concept und Einschätzung

Lohnt sich Quantencomputing für Ihren Fall? Dazu das gewonnene Wissen.

kostenlos gefördert vom BMFTR

ca. 6 Wochen bis zum Proof of Concept

Vom Kick-off zum Proof of Concept in ca. 6 Wochen

Proof of Concept

Schritt 1
Kick-off-Termin

Use Case vorstellen, Daten besprechen



Schritt 2
Vorbereitung

Sie liefern Daten, wir bauen ein erstes Modell



Schritt 3
Strategie-Termin

Lösungsweg gemeinsam festlegen



Schritt 4
Umsetzung

Wir entwickeln den Proof of Concept



Schritt 5
Take-off-Termin

Ergebnis und Einschätzung zum Quantenvorteil



ca. 6 Wochen

Optional

Schritt 6
Integration

Demo auf der QuCUN-Plattform, ohne Aufwand für Sie



Schritt 7
Abschluss-Termin

Live-Demo, Feedback, nächste Schritte



ca. 2 Wochen

Bis 31. Januar 2027 kostenlos, danach begleitet Aqarios weiter

BIS 31.01.2027

Zugangsbüro kostenlos

Gefördert vom BMFTR.

Anfragen am besten frühzeitig stellen.

DANACH

AQARIOS

Begleitet Use Cases weiter, als reguläres Projekt.

Dasselbe Team, das die Proofs of Concept umsetzt.

Aus einem Proof of Concept kann ein eigenes Projekt werden.

ABSCHLUSS

Das Wichtigste aus dieser Stunde

01

VERSTEHEN

Quantencomputing ist heute ein **Lernfeld**. Ein klarer Vorteil bei Industrieproblemen ist noch nicht belegt.

02

VERGLEICHEN

Hybride Verfahren und **gute Modellierung** lohnen schon jetzt den fairen Vergleich.

03

TESTEN

Im Zugangsbüro testen Sie Ihren eigenen Use Case **kostenlos in ca. 6 Wochen**.

KONTAKT

Sprechen Sie uns an, wir prüfen Ihre Fragestellung gemeinsam



Nico Kraus
Aqarios GmbH
nico.kraus@aqarios.com



Simon Schlichting
QAR-Lab, LMU München
simon.schlichting@ifi.lmu.de

www.qucun.de

Die Folien schicken wir Ihnen gerne zu.

PARTNER

LMU LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT MÜNCHEN

AQARIOS

SAP

BASF We create chemistry

Gefördert durch:

Bundesministerium für Forschung, Technologie und Raumfahrt

DISKUSSION

Fragen und Diskussion