

# Einführung in Quanten-Computing

M. Brinkmann, K. Ortel, **P. Tesarik**

22. Januar 2019

# Klassische Quantenchemie

## Definition

Beschreibung der elektronischen Struktur von Atomen und Molekülen und die Auswirkung auf ihre Reaktionsfähigkeit und Eigenschaften.

## Definition

Beschreibung der elektronischen Struktur von Atomen und Molekülen und die Auswirkung auf ihre Reaktionsfähigkeit und Eigenschaften.

- Lösung der zeit(un)abhängigen Schrödinger Gleichung:  $\hat{H}\Psi = \mathcal{E}\Psi$
- Genauigkeit abhängig von den Ansätzen von  $\Psi$  und weiteren Näherungen
- Komplexität der Rechnung abhängig von Zahl der Elektronen und Basissatz
- Lösungsverfahren: Iterativ und mit hohen Rechenzeitkosten

# Quantenchemie mit Quantensimulation

## Definition (der Idee)

Der Quantenprozessor übernimmt die für klassische Systeme schwierigen Rechnungen

- Quantenphasen Näherungsalgorithmus
- Variabler Quanten-Eigenlöser

# Variabler Quanten-Eigenlöser

- 1 Parameter nach Energie erstellen und Modell generieren (klassisch)
- 2 Testzustände des Systems berechnen (quantum)
- 3 Energien auslesen (quantum)
- 4 Energien auswerten (klassisch)
- 5 Gehe zu 1

# Variabler Quanten-Eigenlöser

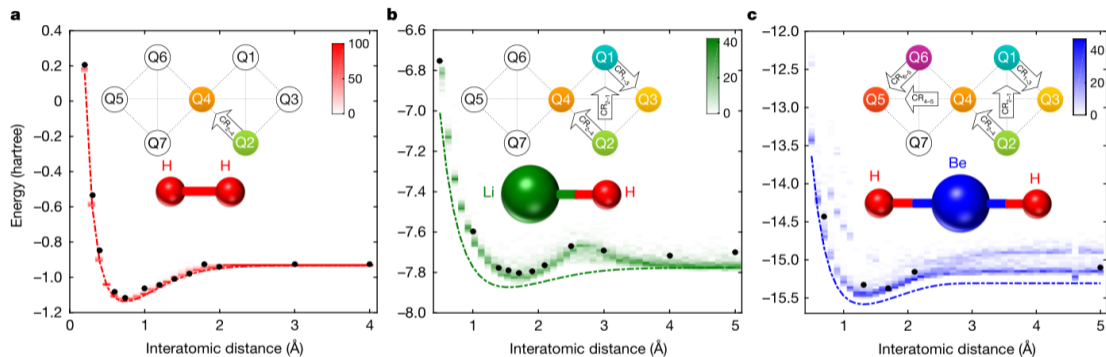


Abbildung: Kandala et. al., <https://arxiv.org/abs/1704.05018>