

KOMPETENZZENTRUM QUANTENCOMPUTING BADEN-WÜRTTEMBERG
VERBUNDFORSCHUNGSPROJEKT

SIQURE II

Abschlussbericht
Juni 2024

Koordinator: Dr. Daniel Urban, Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM, Freiburg

Projektpartner: Prof. Dr. Joachim Ankerhold, Institut für Komplexe Quantensysteme, Universität Ulm
Prof. Dr. Andreas Buchleitner, Physikalisches Institut, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg

Inhalt

1	Zusammenfassung.....	3
2	Überblick der wissenschaftlichen Arbeiten.....	5
2.1	Projektfortschritte im theoretischen Erforschen von NV-basierten Spin-Qubit- Registern in Diamant	5
2.1.1	Modellierung dissipativer NVCR (AP1, FhIWM).....	5
2.1.2	Resilienz verschränkter Zustände eines Vielteilchensystems (AP2, UniFR)	8
2.1.3	Optimierung von Quantengattern auf NVCR in Diamanten (AP3, UniUlm)	12
2.2	Projektfortschritte im praktischen Programmieren mit Qiskit und Rechnen mit dem IBMQ-System.....	16
2.2.1	Von der Festkörperphysik inspirierte Modellsysteme auf IBMQ (FhIWM).....	16
2.2.2	Zertifizierung der Verschränkungsgüten auf IBMQ (UniFR)	19
2.2.3	Simulation offener Quantensysteme auf dem IBMQ (UniUL)	23
3	Ausblick	26
3.1	Quantenregister auf Basis von NVCR	26
3.2	Quantumcomputing auf IBMQ Hardware	26
4	Anhang	27
4.1	Publikationen.....	27
4.2	Vorträge	27
4.3	Mitwirkung in Gremien.....	28
4.4	Kennzahlen gemäß Zuwendungsbescheid	28

Im Rahmen des SiQuRe II Projektes wurde mit Modellen und Computersimulationen der theoretischen Quantenphysik die Frage behandelt, unter welchen Bedingungen ein gekoppeltes Spinsystem, bestehend aus NV-Zentren und einigen ^{13}C Atomen, robuste Quantenzustände aufweist, die sich als Qubitsystem für den Aufbau von festkörperbasierten Quantencomputern nutzen lassen. Die Charakterisierung und Zertifizierung essenzieller Quanteneigenschaften wie z.B. der Verschränkungsgehalt wurden im Hinblick auf ihre Skalierbarkeit erforscht und der Einfluss der Umgebungsatome auf die Kohärenz des Zentralspins quantifiziert.

Des Weiteren wurde in diesem Projekt intensiv an der Frage gearbeitet, welche Möglichkeiten die aktuelle und perspektivisch auch die zukünftig zur Verfügung stehende QC-Hardware bietet, um zur Lösung material- und quantenphysikalischer Probleme beizutragen. Dafür wurden einfache Modelle der theoretischen Festkörperphysik auf dem IBM Q System umgesetzt und mittels hybrider variationeller Algorithmen unter Einbeziehung geeigneter Fehlerreduktions- und Fehlermitigationstechniken gelöst. Ebenso wurden verschiedene Methoden zur Simulation von offenen Quantensystemen und deren Umsetzbarkeit auf dem IBMQ System untersucht.

Am Fraunhofer IWM wurden Untersuchungen zum Kohärenzverhalten eines NV-Zentrums in einer Umgebung von P1-Zentren für unterschiedliche Defektkonzentrationen durchgeführt. Die Berechnungen mittels der Methode der *Cluster Correlation Expansion* (CCE) erlauben die Kohärenzzeit des NV-Zentrums zu extrahieren und es wurde eine umfassende statistische Analyse der Ergebnisse unterschiedlicher räumlicher Konfigurationen durchgeführt. Damit konnte der Meilenstein **MS 1** („Berechnung der umgebungsabhängigen Kohärenzzeit eines NVCR ist implementiert und für relevante Parameterbereiche ausgeführt“) erfolgreich abgeschlossen werden.

An der Universität Freiburg wurde an der Modellierung eines Qubitregisters bestehend aus einem oder mehreren NV-Zentren sowie mehreren ^{13}C -Nuklearspins (NVCR) gearbeitet. Es wurden geeignete Verschränkungsmaße implementiert, um die Verschränkungsstruktur in den Eigenzuständen des NVCR zu bestimmen und anschließend für NVCR unterschiedlicher Größen für mehrere Störungsrealisierungen untersucht. Damit konnte der Meilenstein **MS 2** („Das Modell eines NVCR mit zwei NV-Zentren ist implementiert“) sowie das AP 2 abgeschlossen werden.

An der Universität Ulm wurden ebenfalls Simulationen auf Basis der generalisierte Cluster Correlation durchgeführt, um die Güte von Quantenprozessen auf einem Register bestehend aus vier Spins in Diamant quantitativ vorherzusagen. Um den Prozess vor Umgebungseinflüssen (Spin-Störstellen) zu schützen, wurde die Wirkung von Hahn-Echo-Pulsen, die zwischen die Kontrollpulse gesetzt werden, evaluiert. Damit konnte in der Simulation erreicht werden, dass das Register bei üblichen Häufigkeiten an P1-Störstellen hinreichend gut gegen die Störeinflüsse dieses Spinbades geschützt ist. Mit diesen Untersuchungen konnte der Meilenstein **MS3.1** („Optimierung von Quantenprozessen durch Entkopplungspulse“) erfolgreich abgeschlossen werden. Des Weiteren wurde die Implementierung von unitären Gattern auf einem solchen Spin Register untersucht. Diese stellt eine größere Herausforderung dar, da bei der Adressierung von einzelnen Qubits im Register die gewählte Pulssequenz die restlichen Qubits unverändert lassen sollte. In diesem Zusammenhang haben wir auch Verfahren des maschinellen Lernens eingesetzt womit der **MS3.2** bearbeitet wurde.

Im Bereich des praktischen QC konnten ebenfalls gute Fortschritte erzielt werden. Am IWM wurde die Berechnung des gesamten Spektrums einfacher Modellsysteme weiter verbessert und automatisiert. Es wurde ein Simulator implementiert, dessen Fehlermodell mit den Daten der realen IBMQ Hardware in Ehningen parametrisiert wurde, und der es erlaubt, gezielt einzelne Fehlerquellen an- und abzuschalten, oder die entsprechenden Fehlerraten zu reduzieren. Damit ist eine gründlichere Ursachenforschung für die immer

noch stark verrauschten numerischen QC-Ergebnisse und damit eine gezielte Verbesserung der verwendeten Algorithmen möglich. In der zweiten Projekthälfte konnten umfangreiche Ergebnisse für ein Modellsystem von bis zu 8 gekoppelten Fermionen auf der IBMQ-Ehningen Hardware gewonnen und analysiert werden. Daraus ergab sich die Schlussfolgerung, dass die aktuelle Güte der IBM Quantenprozessoren noch nicht ausreichend hoch ist, um die im Meilenstein **MS4** ursprünglich angestrebte Berechnung der Diamantbandstruktur, welche 8 Qubits benötigt, erfolgreich durchführen zu können.

Um zu verstehen, wie gut sich verschränkte Zustände von Qubits auf Quantenhardware vom IBM erzeugen lassen, wurden an der Universität Freiburg umfangreiche Experimente auf 5 verschiedenen IBMQ-Rechnern durchgeführt. Dafür wurden geeignete Verschränkungsmaße definiert und umgesetzt um damit auf Quantenhardware von IBM erzeugte verschränkten Zustände mit bis zu 7 Qubits zu messen und zu charakterisieren. Um den Verschränkungsgehalt in den erzeugten Zuständen alternativ zu prüfen, wurde auf eine Methode aus dem Bereich des maschinellen Lernens zugegriffen, mit der die erzeugten Daten analysiert wurden. Mit der finalen Anwendung von Fehlerminderungstechniken wurde der **MS5** („Verschränkungsmaß für wenige Qubits ist mit Fehlerminderung umgesetzt und mit kleinen Prototypen getestet“) innerhalb der Nutzbarkeit der IBMQ-Tickets noch vervollständigt.

Bezüglich der Simulation von offenen Quantensystemen hat sich die Universität Ulm verstärkt auf die Simulation von nicht-Markovschen Mastergleichungen auf dem IBMQ konzentriert. Im Rahmen der Arbeiten zu **MS6** wurde ein mathematisches Konzept entwickelt, welches einfach und mit wenigen Gatteroperationen auf NISQ-Geräten implementiert werden kann. Darüber hinaus kann diese Methode durch Miteinbeziehen von Informationen über die Rauscheigenschaften einzelner Qubits als Fehlermitigationsverfahren benutzt werden. Wir haben dieses Verfahren auf dem IBMQ-System in Ehningen getestet und vielversprechende Resultate erhalten. Dabei konnte die Relaxation eines Qubits über einen Zeitraum der Größenordnung seiner T1 Zeit erfolgreich mitigiert werden.

MS	Aufgabe	Plan	
1	Berechnung der umgebungsabhängigen Kohärenzzeit eines NVCR ist implementiert und für relevante Parameterbereiche ausgeführt	M9	OK
2	Das Modell eines NVCR mit zwei NV-Zentren ist implementiert.	M6	OK
3.1	Optimierung von Quantenprozessen durch Entkopplungspulse	M6	OK
3.2	Trainieren von Algorithmen mittels maschinellen Lernens	M14	OK
4	Bandstrukturberechnung ist implementiert und für Diamant auf IBMQ getestet	M15	teilweise
5	Verschränkungsmaß für wenige Qubits ist mit Fehlerminderung umgesetzt und mit kleinen Prototypen getestet	M9	OK
6	Vergleichende Analyse verschiedener Techniken zur Quantensimulation von offenen Quantensystemen auf dem IBM Q System	M15	OK

Tabelle 1: Meilensteine (MS) des Projektes. Lediglich MS4 konnte aufgrund der unzureichenden Güte der IBM Quantenprozessoren nicht vollständig erreicht werden.

2 Überblick der wissenschaftlichen Arbeiten

2.1 Projektfortschritte im theoretischen Erforschen von NV-basierten Spin-Qubit-Registern in Diamant

2.1.1 Modellierung dissipativer NVCR (AP1, FhIWM)

Ein entscheidender Parameter für die Nutzbarkeit eines Qubits als Baustein eines Quantencomputers ist seine Kohärenzzeit. Qubits basierend auf NV-Zentren in Diamant weisen vergleichsweise lange Kohärenzzeiten auf. Zwei der wesentlichen Umgebungseinflüsse, die diese Kohärenzzeit negativ beeinflussen, sind parasitäre Elektronenspins substitutioneller Stickstoffatome (sogenannte P1-Zentren) und die Nuklearspins von ^{13}C -Isotopen in der Kristallumgebung. Der Elektronenspin der ^{14}N -Atome hat hierbei aufgrund der vergleichsweise stärkeren Dipol-Dipol-Wechselwirkung einen größeren Einfluss auf den zentralen Spin als die schwächer gekoppelten Nuklearspins der ^{13}C -Atome.

In diesem AP haben wir den Einfluss von umliegenden P1-Zentren auf die NV-Kohärenzzeit für unterschiedliche Dichten und Verteilungen von ^{14}N -Atomen systematisch untersucht. Wir haben hierfür die Methode der *Cluster Correlation Expansion* (CCE) [Hal14] in der Implementierung der open-source Python-software PyCCE [Oni21] verwendet. Die Software berechnet die zeitliche Entwicklung des zentralen NV-Spins unter dem Einfluss der Kopplung an die Elektronenspins der Umgebung in Form einer Reihenentwicklung von Clustern zunehmender Größe. Die Kohärenzzeit (T_2) wird dann durch einen Fit einer Exponentialfunktion

$$\exp[-(t/T_2)^p] \quad (1)$$

an die Einhüllende der oszillierenden Dekohärenzkurve bestimmt, wobei ein zweiter Anpassungsparameter p die Form der Kurve beeinflusst.

Aufbauend auf den im Zwischenbericht präsentierten Arbeiten haben wir die Kohärenzzeit von NV-Zentren in stark wechselwirkenden Bädern von Elektronenspins mit Spinkonzentrationen ρ_e von 0,1–100 ppm berechnet. Bei der Validierung unserer T_2 -Werte durch Vergleich mit den in der Literatur verfügbaren theoretisch ermittelten Daten haben wir eine sehr große Variation von Werten für die gleiche Art und Konzentration von Badspins in der Umgebung von NV-Zentren festgestellt. Tabelle 2 fasst diese Literaturergebnisse zusammen. Die Variation der T_2 -Werte zwischen den halbklassischen Methoden und den neueren quantenmechanischen Ansätzen, wie z.B. CCE, beträgt einen Faktor 3 – 4 (siehe z.B. die Werte von [Bau20] und [Par22]). Doch selbst bei gleichem theoretischen Ansatz kann die Variation der T_2 -Zeiten bis zu 50 % betragen.

Im Projektverlauf haben wir die möglichen Ursachen für diese großen Schwankungen der theoretisch vorhergesagten T_2 - und p -Werten gründlich untersucht. Bereits im Zwischenbericht haben wir die Bedeutung der Ensemblemittelung diskutiert, und Kriterien aufgestellt, um eine robuste und zuverlässige Schätzung der Kohärenzzeit T_2 zu erhalten. Als Folge davon haben wir fortan unsere Ensemblemittelwerte unter Berücksichtigung von jeweils 500 räumlichen Spinkonfigurationen pro untersuchter Spinbadkonzentration berechnet.

Neben der Wahl der Konvergenzparameter der CCE-Methode stellten sich insbesondere die unterschiedlichen Vorgehensweisen beim Fitprozess der Zerfallsfunktion von Gleichung (1) an die Daten als wesentliche Ursachen für die Inkonsistenz der T_2 - und p -Literaturwerte heraus.

	1 [ppm]		10 [ppm]		100 [ppm]	
	T_2	p	T_2	p	T_2	p
[Sch24]- JT (r)	225	1.03	-	-	-	-
[Mar24]- JT (r)	230	1.2 - 1.3	25	1.2 - 1.3	3.5	1.2 - 1.3
[Par22]- JT (r)	407	0.8	39	0.9	3.3	0.8
[Bau20]- JT (r)	70 – 140	1.5	8 – 10	1.5	0.6 – 0.8	1.5
[Par22]- JT (a)	250	0.9	25	1	2.5	0.8
[Sch24]- no HF	49.2	1.43	-	-	-	-
[Par22]- no HF	91.2	1.1	8.9	1.1	0.87	1.1
[Wan13] *	20	2 – 3	2	2 – 3	0.2	2 - 3

Tabelle 2: Aus der Literatur zusammengestellte berechnete Werte von T_2 und p für den Kohärenzabfall eines NV-Ensembles in 1, 10 und 100 ppm Konzentrationen von P1-Badspins. Die Methoden berücksichtigen sowohl zufällige als auch ausgerichtete Jahn-Teller-Achsen, bezeichnet als JT(r) bzw. JT(a). * [Wan13] diskutiert keine Änderungen der Werte mit oder ohne HF.

Im Rahmen der CCE-Näherung ist die maximale Ordnung der berücksichtigten Cluster ein entscheidender Parameter, um verlässliche Ergebnisse in stark wechselwirkenden Bädern von Elektronenspins zu erhalten. Sie bestimmt die maximale Anzahl der Spins in einem Cluster, deren Beitrag zur Dekohärenz des Zentralspins dann quantenmechanisch berechnet wird. Als zentrales Ergebnis dieses APs haben wir den Kohärenzabfall $\mathcal{L}(t)$ für einen Ensemblemittelwert von NV-Spins sowohl mittels CCE2- als auch CCE3-Näherung für Elektronenspinbäder mit einer Konzentration von 0,1 bis 100 ppm systematisch berechnet und verglichen. CCE4-Berechnungen haben wir aufgrund des damit verbundenen hohen numerischen Aufwands auf die ausgedünnten Spinbäder mit 0,1 und 0,2 ppm beschränkt.

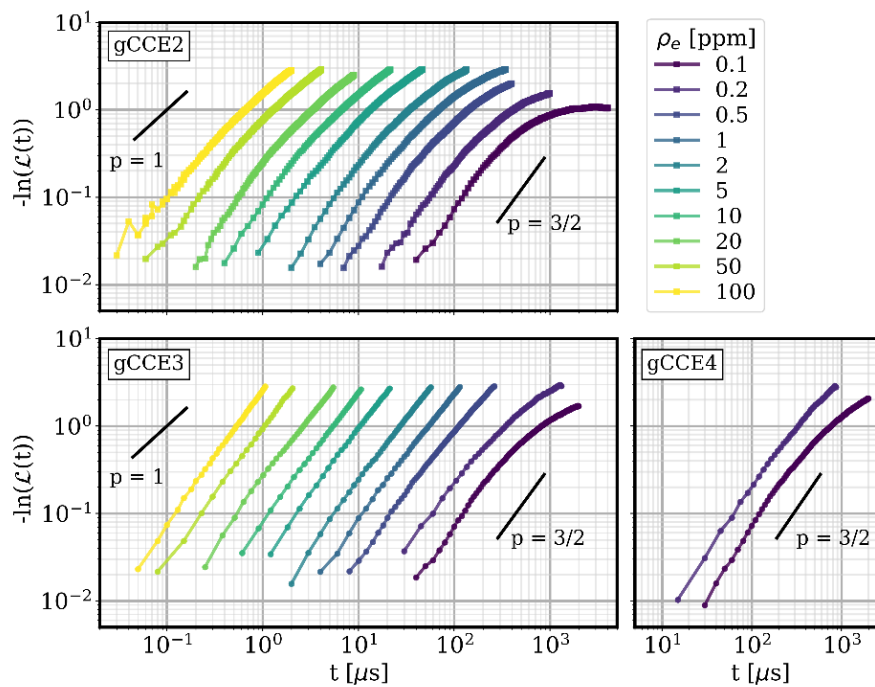


Abbildung 1: Kohärenzabfall eines NV-Zentrums in Elektronenspinbädern der Konzentrationen $\rho_e = 0,1 - 100$ ppm, dargestellt in doppellogarithmischen Diagrammen für drei verschiedene Clusterordnungen, CCE2, CCE3 und CCE4. Die Ensemblemittelwerte wurden jeweils aus 500 individuellen räumlichen Spinkonfigurationen generiert. Kurze schwarze Linien markieren zum Vergleich die Steigungen für ausgewählte p -Werte.

Um die Kurven in geeigneter Weise darzustellen und zu vergleichen, wird in Abb. 1 der Verlauf von $-\ln(\mathcal{L}(t))$ gegen t in einem doppellogarithmischen Diagramm gezeigt. In dieser Auftragung bestimmt die Steigung der Kurve den (lokalen) Wert von p . Man sieht, dass es keinen universelle (konstanten) p -Wert gibt, der die Kurve im gesamten Zeitverlauf beschreibt. Wie aus Abb. 1 hervorgeht, führt die Verwendung von Clustern höherer Ordnung in den CCE-Berechnungen jedoch zu einem immer perfekteren linearen Verhalten der Kurve in dieser Darstellung im untersuchten Zeitbereich. Die numerische Anpassung der Funktion aus Gleichung (1) wird umso genauer, je linearer die Beziehung der numerischen Daten $-\ln(\mathcal{L}(t))$ ist.

Auch die Wahl des Zeitintervalls (Datenbereichs), für den die Anpassung der Zerfallsfunktion durchgeführt wird, kann das Fitergebnis stark beeinflussen. Um diesen Einfluss zu untersuchen, definieren wir einen Endwert L_f und schneiden die für die Anpassung verwendeten Daten entsprechend ab. Beispielsweise bedeutet der Wert $L_f = 0,6$, dass der Funktionsfit für den Bereich $1 > \mathcal{L}(t) > 0,6$ durchgeführt wird.

Für das Anpassen der Fitfunktion haben wir zwei unterschiedliche Verfahren in Betracht gezogen: eine exponentielle Anpassung, bei der die Gleichung (1) an die $\mathcal{L}(t)$ Werte angepasst wird, sowie eine lineare Anpassung, bei der eine Gerade an die $-\ln(\mathcal{L}(t))$ vs. t Werte in einem doppelt logarithmischen Diagramm angepasst wird. Die Ergebnisse dieser Analyse sind in Abb. 2 zusammengefasst. Die T_2 - und p -Werte, die entweder aus einer exponentiellen Anpassung (Kreissymbole) oder einer linearen Anpassung (quadratische Symbole) erhalten wurden, variieren um bis zu $\approx 16\%$ bzw. 24% für die ausgedünnnten Spinbäder ($0,1$ ppm und $0,2$ ppm), wenn der maximal betrachtete Kohärenzabfall L_f zwischen $0,6$ und $0,2$ variiert. Bei Badkonzentrationen von $\rho_e \geq 0,5$ ppm ist die Abweichung geringer und liegt im Bereich von nur 6% bzw. 10% für T_2 und p .

Darüber hinaus haben wir festgestellt, dass die Abweichungen der extrahierten T_2 - und p -Werte, die mittels CCE2 berechnet wurden, sogar bis zu 52% bzw. 96% betragen können. Daher muss man bei der Interpretation von Ergebnissen im Rahmen der Cluster-näherung zweiter Ordnung in CCE-Berechnungen von stark wechselwirkenden Spinnbädern sehr vorsichtig sein.

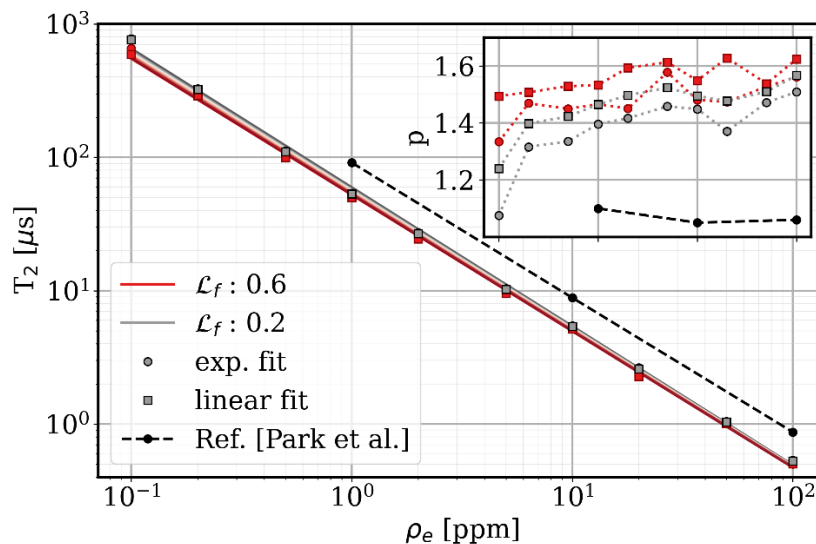


Abbildung 2: Kohärenzzeit T_2 , erhalten aus einer exponentiellen (Kreissymbole) oder einer linearen (quadratische Symbole) Anpassung für zwei verschiedene Anpassungsbereiche $1 > \mathcal{L}(t) > L_f$, als Funktion der Elektronenspinbadkonzentration ρ_e . Das Inset zeigt die entsprechenden Ergebnisse für den Parameter p . Die schwarz gestrichelten Linien markieren zum Vergleich die aus [Par22] entnommenen Werte für ein reines Elektronenspinbad.

Fazit

Überblick der wissenschaftlichen
Arbeiten

Wir haben die Wechselwirkungen zwischen einem NV-Zentrum und seiner Umgebung aus stark gekoppelten Elektronenspins simuliert und das zeitliche Abklingverhalten der Spinkohärenz des NV-Zentrums berechnet. Durch gründliches Evaluieren der verschiedenen angewandten Näherungen, der statistischen Mittelungsmethoden sowie der unterschiedlichen in der Literatur verwendeten Datenfitverfahren, konnten wir die Ursachen der starken Variation an erhältlichen Literaturwerten aufklären. Unsere Ergebnisse bestätigen, dass man, wenn man Elektronenspins in die Umgebung des NV-Spins einbezieht, eine höhere Clusterordnung in den CCE-Berechnungen berücksichtigen muss, d.h. mindestens CCE4 für ausgedünnte Bäder und CCE3 für Bäder mit hoher Konzentration. Andernfalls kann sich aus CCE-Berechnungen eine Abweichung der Kohärenzzeit T_2 von bis zu 50 % ergeben. Unsere Ergebnisse haben wir in einem Manuskript [Ghas24] zusammengestellt und bei Physical Review B eingereicht.

Meilensteine

Der Meilenstein MS 1 („Berechnung der umgebungsabhängigen Kohärenzzeit eines NVCR ist implementiert und für relevante Parameterbereiche ausgeführt“) wurde erfolgreich abgeschlossen.

Referenzen

- [Bau20] E. Bauch et al., Decoherence of ensembles of nitrogen-vacancy centers in diamond, Phys. Rev. B 102, 134210 (2020).
- [Hal14] L. T. Hall, et al., Analytic solutions to the central-spin problem for nitrogen-vacancy centers in diamond, Phys. Rev. B. 90, 075201 (2014).
- [Ghas24] R. Ghassemizadeh, W. Körner, D. F. Urban, C. Elsässer: Coherence properties of NV-center ensembles in diamond coupled to an electron-spin bath, arXiv:2404.08388
- [Oni21] M. Onizhuk and G. Galli., PyCCE: A Python Package for Cluster Correlation Expansion Simulations of Spin Qubit Dynamic, Adv. Theory Simul. 2100254 (2021).
- [Par22] H. Park et al., Decoherence of nitrogen-vacancy spin ensembles in a nitrogen electron-nuclear spin bath in diamond, npj Quantum Information 8, 95 (2022).
- [Sch24] P. Schätzle et al., Spin Coherence in Strongly-Coupled Spin Baths in Quasi Two-Dimensional Layers, arXiv:2401.16169
- [Mar24] J. C. Marcks et al., Guiding diamond spin qubit growth with computational methods, Phys. Rev. Materials, (2024).
- [Wan13] H. Wang et. al., Spin decoherence and electron spin bath noise of a nitrogen-vacancy center in diamond, Phys. Rev. B 87, 115122 (2013).

2.1.2 Resilienz verschränkter Zustände eines Vielteilchensystems (AP2, UniFR)

Wir betrachten Quantenregister, die aus den Elektronenspins von Stickstoff-Leerstellen (NV) gebildet werden, und die jeweils mit einigen Kernspins von nahe gelegenen ^{13}C -Atomen gekoppelt sind. Für die Beschreibung der elektronischen Freiheitsgrade betrachten wir den Hamiltonian [Ber11]

$$H^{ee} = \sum_i \frac{\Omega_i}{\sqrt{2}} S_i^x + \sum_{j>i} 2J_{ij} S_i^z S_j^z. \quad (2)$$

Hier beschreibt der erste Term den elektromagnetischen Antrieb des Systems, der die Zwei-Niveau-Systeme (Qubits) des Registers definiert (Ω_i ist die Rabi-Frequenz für das i -te NV-Zentrum, S_i^x der Spin-Flip-Operator, der den Antrieb vermittelt). Der zweite Term beschreibt die dipolare Kopplung zwischen den elektronischen Spins der Zentren i und j (J_{ij} ist die Stärke der Kopplung, S_i^z der Spin-Operator entlang der Quantisierungsachse des i -ten NV-Zentrums). Dieses Modell wurde bereits im Vorgängerprojekt SiQuRe verwendet, um die Dynamik von Ketten dipolgekoppelter NV-Zentren [Bel21] und die Verschränkungseigenschaften zu untersuchen, die den Eigenzuständen dieses Systems zu eigen sind [Min23].

In SiQuRe-II haben wir den Elektronenspin jedes NV-Zentrums mit bis zu drei Kernspins von nahegelegenen ^{13}C -Atomen gekoppelt (Abb. 3). Der Hamiltonian, der den Kernspin k und die Kopplung an seinen Stamm-Elektronenspin i beschreibt lautet [Mai22]

$$H_C^{(i,k)} = -g_C B_z I_k^z + \mathbf{S}_i \bar{\mathbf{M}}^{(i,k)} \mathbf{I}_k. \quad (3)$$

Hier ist g_C das gyromagnetische Verhältnis, B_z ein äußeres Magnetfeld, $\mathbf{I}_k$ der Vektor der Spinkomponenten (I_k^x, I_k^y, I_k^z) des k -ten Kernspins, analog dazu $\mathbf{S}_i$ der Vektor der Komponenten des i -ten Elektronenspins und $\bar{\mathbf{M}}^{(i,k)}$ die Matrix, die die Kopplung zwischen Elektronen- und Kernspins vermittelt.

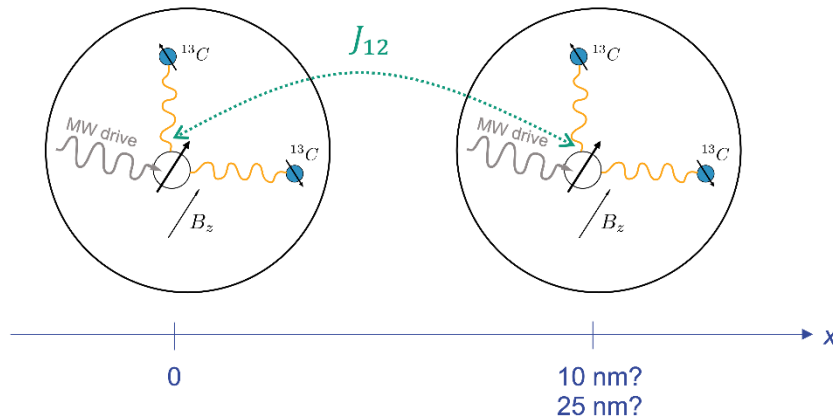


Abbildung 3: Schematische Darstellung eines NVCR mit zwei NV-Zentren. Der Elektronenspin (weißer Kreis) wird durch ein Mikrowellenfeld angetrieben und ist einem Magnetfeld B_z ausgesetzt. Jeder Elektronenspin ist mit den anderen über Dipolwechselwirkungen der Stärke J_{ij} gekoppelt, sowie an nahe gelegene ^{13}C -Atome (innerhalb des Kreises), die durch blaue Kreise dargestellt sind. (Abb. angepasst von [Mai22].)

In diesem Projekt haben wir die folgenden Konfigurationen untersucht:

# NV-Zentren	# ^{13}C pro NV-Zentrum	Gesamtzahl der Qubits	# Realisierungen
2	2	6	10 000
2	3	8	1000
3	2	9	250

Wie weiter unten erläutert, reichen diese Konfigurationen aus, um recht weitreichende Schlussfolgerungen über die Verteilung der Verschränkung in NVCRs ziehen zu können. In unseren Simulationen legen wir den Abstand zwischen den NV-Zentren auf 10 nm fest, während die Position jedes Kernspins zufällig innerhalb einer Kugel mit zunehmend größerem Radius $r_M \in [0.05 \text{ nm}; 2 \text{ nm}]$ gewählt wird, deren Zentrum der zugehörige

Elektronenspin bildet [Mai22]. Da der Hamilton-Operator in Gleichung (2) zwei Terme mit sehr unterschiedlichen Energieskalen enthält ($\Omega_i \gg J_{ij}$), lassen sich seine Eigenzustände in energetisch gut getrennten Mannigfaltigkeiten gruppieren.

Analog zu [Min23] untersuchen wir den Grad der Verschränkung, der den Eigenzuständen des NVCR zu eigen ist, mit Hilfe der *bipartiten Concurrence*, die die Verschränkung zwischen zwei spezifischen Subsystemen (z.B. einem elektronischen Spin mit einem Kernspin) identifiziert. Wir konstruieren dann Graphen, deren Eckpunkte die Kernspins darstellen und deren Kanten (Verbindungen zwischen den Eckpunkten i und j) anzeigen, wenn es eine nicht verschwindende Concurrence zwischen den zugehörigen Kernspins gibt. Schließlich bezeichnen wir ein NVCR als *zusammenhängend*, wenn es einen Pfad mit nicht verschwindender Concurrence gibt, der zwei beliebige Kernspins verbindet. Ob ein NVCR zusammenhängend ist oder nicht, hängt von der spezifischen Position der verschiedenen Kernspins ab.

Die Abbildung 4 (a) und (c) zeigen den Prozentsatz der zusammenhängenden Register, die wir statistisch für zwei Kernspins gefunden haben, die an zwei bzw. drei NV-Zentren gekoppelt sind. Diese Größe tragen wir als Funktion jedes Eigenzustands im Spektrum von Gleichung (2) (x-Achse) und der maximal zulässigen Entfernung zwischen den Kernspins und dem zugehörigen NV-Zentrum (y-Achse) auf. Wie die dunkleren Farben zeigen (siehe Legende), finden wir den größten Anteil an zusammenhängenden Registern in den beiden inneren Mannigfaltigkeiten (die durch graue gestrichelte Linien getrennt sind), was darauf hindeutet, dass die Concurrence der Kernspins weitgehend durch die dipolare Kopplung zwischen den Elektronen ermöglicht wird. Eine logische Folge dieser Beobachtung ist die Tatsache, dass für $r_M \lesssim 0.7 \text{ nm}$ kaum ein zusammenhängendes Register gefunden werden kann. Dies ist eine Folge der Monogamie der Verschränkung: Wenn die Elektronenspins aufgrund der Hyperfeinkopplung stark mit ihren zugehörigen Kernspins verschränkt sind, dann können sie nicht auch noch über die dipolare Kopplung stark untereinander verschränkt sein. Nur bei einem Abstand von etwa 1 nm hat die Hyperfeinkopplung die gleiche Größenordnung wie die dipolare Kopplung zwischen den NV-Zentren.

Selbst wenn wir für einen signifikanten Teil der Realisierungen durchaus verbundene NVCRs finden, ist die durchschnittliche typische Concurrence, wie in Abb. 4 (b) und (d) gezeigt, gering (vergleiche die Farben und den Bereich der Legende mit der Obergrenze von 1 für die Concurrence). Diese dargestellte Größe wird als arithmetisches Mittel über die zusammenhängenden Realisierungen der entsprechenden typischen Concurrence berechnet, die wiederum als geometrisches Mittel aller nicht verschwindenden Concurrence im Register berechnet wird. In Anbetracht dieser Definition beobachten wir einzelne Realisierungen, die auftreten, wenn die Kernspins sehr eng an die Elektronenspins verteilt sind, wo die typische Concurrence für bestimmte Eigenzustände Werte von bis zu 0,2 erreicht. Dies sind jedoch seltene Ereignisse, die keine robuste Eigenschaft des Systems darstellen.

Fazit

Wir haben NVCRs simuliert, bei denen die NV-Zentren in einem festen Abstand zueinander gehalten und die ^{13}C Atome zufällig innerhalb einer umgebenden Kugel verteilt wurden. Wir haben mittels von Verschränkungsmaßen statistisch ausgewertet, ob und wie stark die NVCRs über Hunderte oder Tausende von Realisierungen hinweg miteinander verbunden sind (AP2.1).

Mit diesen Werkzeugen haben wir eine systematische statistische Analyse durchgeführt (AP2.2), die gezeigt hat, dass zusammenhängende NVCRs häufig in jenen Mannigfaltigkeiten auftreten, in denen die elektronischen Spins der NV-Zentren verschränkt sind. Da wir aus dem SiQuRe-Projekt wissen, wie verschränkte elektronische Zustände im Spektrum einer Kette von NV-Zentren verteilt sind, können wir darauf vertrauen, dass verschränkte Kernspinzustände auch in längeren NVCRs auftreten, was als robustes Merkmal des gekoppelten elektronischen und nuklearen Systems interpretiert werden kann.

Meilensteine

Meilenstein MS 2 („Die Erstellung eines Skripts zur Simulation eines NVCR mit beliebig vielen NV-Zentren, umgebenden ^{13}C -Atomen und positioneller Unordnung aller Komponenten“) wurde fristgerecht abgeschlossen.

Überblick der wissenschaftlichen Arbeiten

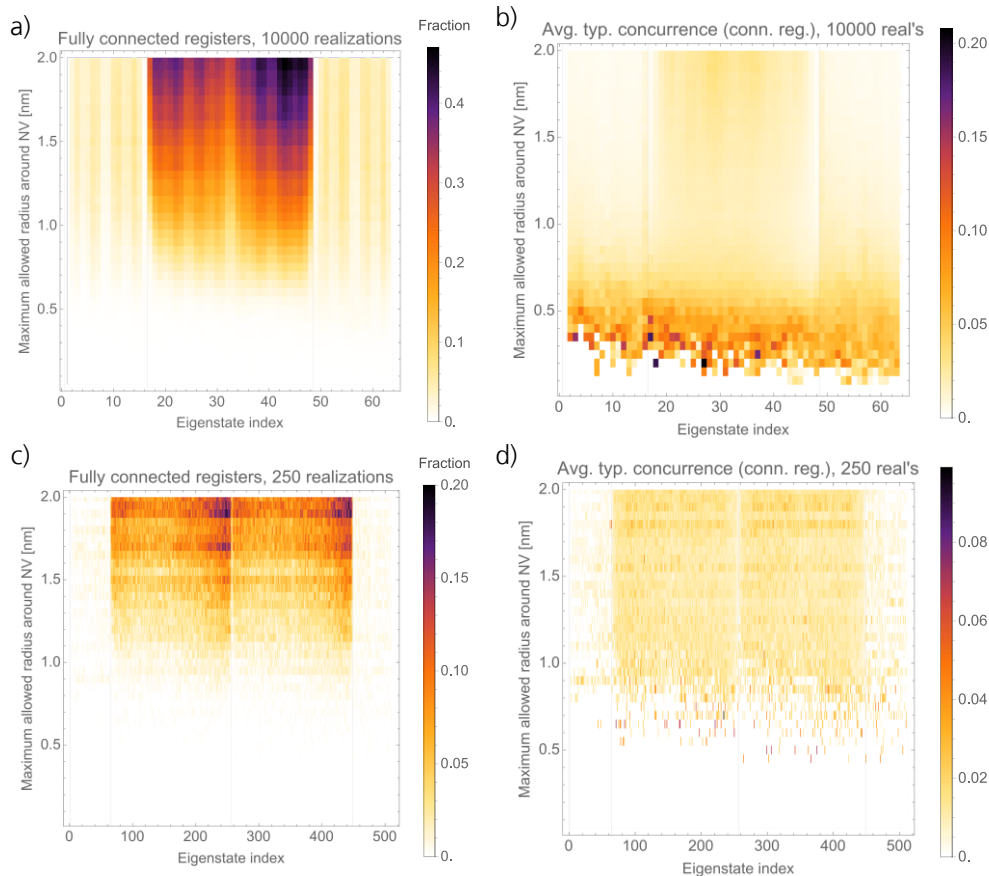


Abbildung 4: Häufigkeit des Auftretens verbundener Register und entsprechende durchschnittliche typische Werte der Concurrence für Systeme mit zwei (erste Zeile) und drei (zweite Zeile) NV-Zentren, die in beiden Fällen jeweils an zwei ^{13}C Kernspins gekoppelt sind. Die Diagramme in der ersten Spalte zeigen die relative Anzahl der Realisierungen, in denen wir verbundene NVCRs finden konnten (Farbskala), als Funktion des maximal zulässigen Radius für die sphärische Verteilung der Kernspins (y-Achse), für jeden Eigenzustand (x-Achse). Die Diagramme in der zweiten Spalte zeigen die durchschnittlichen typischen Werte der Concurrence (siehe Text) der im Unordnungsensemble gefundenen verbundenen Register. Die Achsen sind dieselben wie in den nebenstehenden Diagrammen. Gepunktete graue Linien trennen die verschiedenen Mannigfaltigkeiten, aus denen das Spektrum besteht

Referenzen

- [Ber11] A. Bermudez et al., Electron-Mediated Nuclear-Spin Interactions between Distant Nitrogen-Vacancy Centers, Phys. Rev. Lett. 107, 150503 (2011).
- [Bel21] M. A. Belhaj, Quantum Control of Nitrogen-Vacancy Centre Arrays, M.Sc. Thesis, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, 2021.

- [Min23] A. M. Minke, Entanglement inscribed in a chain of NV centers: Characterization and simulation for real-world quantum computing prototypes, M.Sc. Thesis, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, 2023.
- [Mai22] D. Maile and J. Ankerhold, Performance of quantum registers in diamond in the presence of spin impurities, arXiv:2211.06234 (2022).

2.1.3 Optimierung von Quantengattern auf NVCR in Diamanten (AP3, UniUlm)

Dieses Arbeitspaket beschäftigte sich mit der Robustheit der Kontrollmechanismen dissipativer NVC-Register. Einzelne NVCR-Systeme existieren in unterschiedlichen Realisierungen. Einer der wichtigsten Parameter in diesem Zusammenhang ist die Häufigkeit von ^{13}C Nuklearspins im Diamantgitter. Natürlich vorkommender Diamant hat eine Häufigkeit an ^{13}C Isotopen von $\eta_{^{13}\text{C}} = 1,1\%$. Das bedeutet, dass jedes NV-Zentrum an ca. 20 ^{13}C stark (d.h. mit einer Kopplungsstärke von mehr als 1kHz) gekoppelt ist. Dieser Umstand führt dazu, dass die individuelle Kontrolle eines einzelnen ^{13}C -Kernspins ein nicht-triviales Problem darstellt. Nichtsdestotrotz sind für solche Systeme Kontrollmechanismen bereits sowohl theoretisch vorgeschlagen als auch experimentell implementiert worden [Brad19, Tak23]. Die derzeit vielversprechendsten Pulssequenzen in diesem Zusammenhang haben jedoch den Nachteil, dass sie hunderte von Pulsen benötigen und demnach eine Prozessdauer von mehreren Millisekunden haben. Da die Kohärenzzeit des NV-Zentrums einige Mikrosekunden beträgt, funktionieren sie nur mit Hilfe der zusätzlichen Verwendung von Entkopplungspulsen. Da jeder Puls eine Fidelität $F < 1$ hat, ist eine Minimierung des Kontrollaufwands für die Realisierung von zuverlässigen Kontrollpulssequenzen von großer Bedeutung.

Seit Beginn des SiQuRe I Projekts arbeiten wir deshalb an einer anderen Systemarchitektur. Im Speziellen interessieren wir uns für Systeme mit $\eta_{^{13}\text{C}} \leq 0,05\%$. Hierbei ist das NV-Zentrum mit nur 1-3 stark gekoppelten ^{13}C umgeben. Die Verkleinerung der Anzahl an zu kontrollierenden Qubits hat zur Folge, dass die Kontrollpulse nur einige zehn Mikrosekunden beanspruchen [Heg20, Mai23]. Da zur Skalierung zu größeren Registern die Kopplung zwischen mehreren NVCR unabdingbar ist, betrachten wir die Verkleinerung der einzelnen NVC-Register zu ca. vier Qubits als unproblematisch. Im SiQuRe I Projekt wurde ein solches NVCR auf seine Robustheit gegenüber umliegenden P1-Störstellen untersucht. Dabei wurden jedoch keine Entkopplungspulse verwendet, sodass die statische Varianz des B-Feldes, verursacht durch umliegende P1-Störstellen, bereits zu erheblichen Dekohärenz-Effekten für das Register führte.

Im SiQuRe II Projekt haben wir auf den bereits im SiQuRe I modellierten Systemen aufgebaut. Zunächst haben wir neben dem P1-Spin-Bad auch das ^{13}C -Spin-Bad, bestehend aus ^{13}C Isotopen, welche für eine effiziente Kontrolle zu weit entfernt vom NV-Zentrum sind, mit einbezogen. Dabei konzentrieren wir uns wie erwähnt auf eine Häufigkeit von $\eta_{^{13}\text{C}} \leq 0,05\%$ und nehmen an, dass jedes ^{13}C Isotop innerhalb von $r = 1,8\text{ nm}$ effizient adressiert werden kann und deshalb Teil unseres NVCR ist. Die Wahrscheinlichkeit für eine bestimmte Größe eines NVCRs bei einer bestimmten Häufigkeit $\eta_{^{13}\text{C}}$ ist in Abb. 5 (b) dargestellt.

Um das NVCR während der Kontrolle mittels des NV-Zentrums von der dissipativen Umgebung abzuschirmen, implementieren wir π -Pulse (auch „Hahn-Echo-Pulse“ genannt) zwischen den Kontrollpulsen. Damit werden die Effekte der statischen Varianz des B-Feldes korrigiert und nur dynamische Effekte innerhalb des Spinbades führen zu Dekohärenz und Dissipation. Im Speziellen finden wir je nach Art des Spinbades verschiedene Störeinflüsse. Jedes P1-Zentrum im Spinbad besteht aus einem Elektronenspin, welcher auf der eine Seite an den lokalen Nuklearspin des Stickstoffatoms koppelt und außerdem an den Elektronenspin von weiteren P1-Zentren. Da wir ein Magnetfeld ($B = 148\text{ mT}$) in Richtung der Quantisierungsachse des NV-Zentrum anlegen wird die Dynamik innerhalb des P1-Zentrums unterdrückt. Auch die Wechselwirkung zwischen NV und P1

induziert keine Dynamik in den P1-Zentren, da deren Larmor-Frequenzen zu unterschiedlich sind. Die Dynamik im P1-Spinbad kann deshalb ausschließlich auf P1-P1 Dipolar-Wechselwirkungen zurückgeführt werden. Falls nun die Zeitintervalle zwischen den Hahn-Echo-Pulsen und den Kontrollpulsen kurz genug sind, ist das System auch von den P1-P1-Wechselwirkungen entkoppelt. Die Histogramme in Abb. 6 c-d zeigen die Fidelitäten für Verschränkungsprozesse im 4-Spin-Register unter Einfluss von P1-Umgebungen für verschiedene Dichten an P1-Störstellen. Wir finden, dass für Häufigkeiten $\eta_{P1} < 200 \text{ ppb}$ die Hahn-Echo Kontrollsequenzen hinreichend gut von P1-Spinbädern geschützt sind ($F > 0,99$).

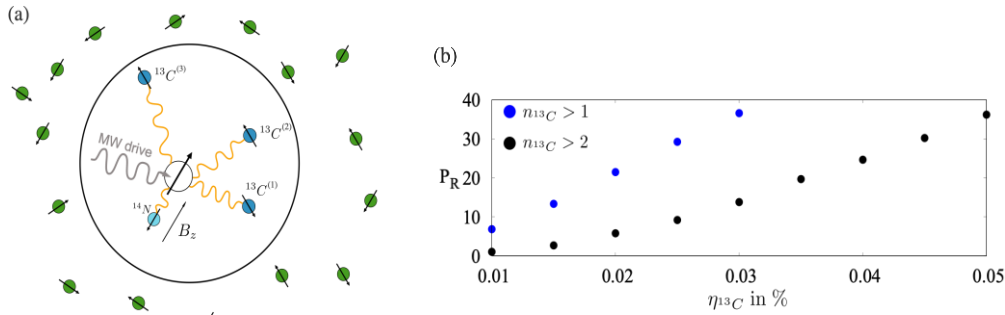


Abbildung 5: (a) NV-basiertes Quantum-Register mit einem NV-Zentrum und drei ^{13}C Kernspins. (b) Wahrscheinlichkeit mindestens $\eta_{^{13}\text{C}}$ Kernspins innerhalb eines Radius von $r = 1.8 \text{ nm}$ um das NV-Zentrum zu finden. Die Daten sind statistisch aus 20000 Spinbad-Konfigurationen berechnet worden.

Für das Nuklearspinbad finden wir eine andere Situation vor. Hier kann die ^{13}C - ^{13}C -Wechselwirkung für die angesprochenen Häufigkeiten $\eta_{^{13}\text{C}} \leq 0,05\%$ vernachlässigt werden. Die Dynamik im Spinbad wird ausschließlich durch die Wechselwirkung mit dem NV-Zentrum verursacht. Das kann daran festgemacht werden, dass die ^{13}C Isotope im Register und diejenigen im Spinbad einen spektralen Überlapp aufweisen. Beim Adressieren des Registers werden deshalb auch ungewollt ^{13}C Isotope außerhalb des Registers angeregt und mit dem NV-Zentrum verschränkt. Um von diesem Einfluss zu entkoppeln, reichen die eingeführten Hahn-Echo-Pulse nicht aus und aufwendigere Kontrollmechanismen müssen implementiert werden. Wir finden jedoch, dass für $\eta_{^{13}\text{C}} = 0,02\%$ die Güte der implementierten Verschränkungsprozesse hoch ist (Abb. 6 a-b). Die Pulssequenzen sind hierbei kurz genug, um den Verschränkungstransfer zum Nuklearspinbad klein zu halten. Da für $\eta_{^{13}\text{C}} = 0,02\%$ zusätzlich die Wahrscheinlichkeit, ein NVCR mit drei ^{13}C Isotopen innerhalb von $r = 1,8 \text{ nm}$ zu finden, relativ groß ist (Abb. 5), kann dies ein vielversprechendes Regime für das Design von Diamantproben sein. Diese Analyse komplementiert den Meilenstein MS. 3.1. Eine Zusammenfassung dieser Arbeit wird derzeit im Journal Physical Review B zur Publikation geprüft [Maile23].

Die bis jetzt implementierten Pulssequenzen sind optimiert für die Erzeugung von verschränkten Zuständen. Für ein universelles Quantencomputing müssen jedoch unitäre Quantengatter implementiert werden. Wir haben hierfür im Verlauf des Projekts Pulssequenzen für CNOT and Hadamard Gatter auf dem simulierten Register erzeugt. Hierbei ist im Speziellen die Frage interessant, inwieweit überhaupt einzelne ^{13}C Isotope unabhängig von den anderen adressierbar sind.

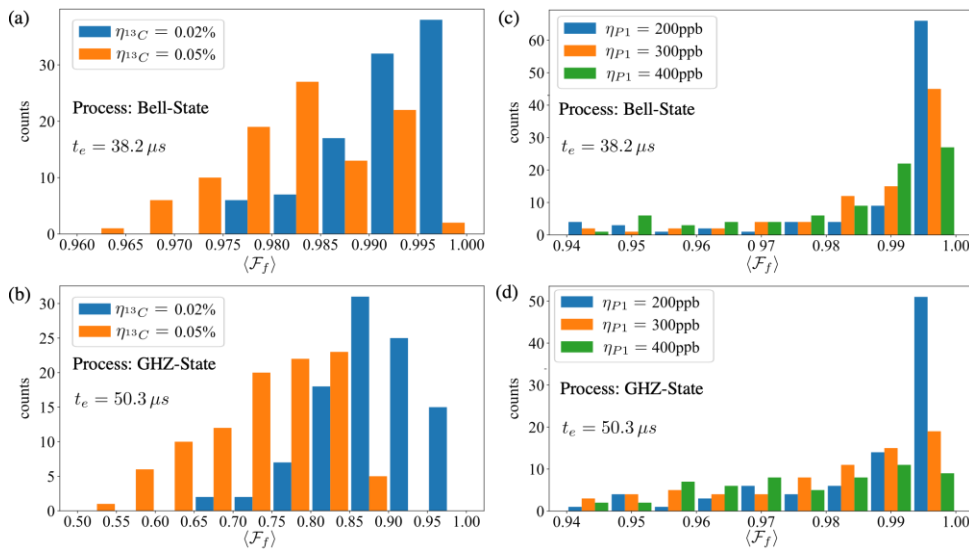


Abbildung 6: Histogramme für die Fidelität der Bell- (a,c) und GHZ- (b,d) Prozesse im Nuklearspin-Umfeld (a,b) und im Umfeld von P1-Störstellen (c,d). Die Histogramme sind erstellt für verschiedene Häufigkeiten der jeweiligen Badspins.

In diesem Zusammenhang haben wir zunächst die zuvor für die Optimierung auf eine Target-Dichtematrix verwendeten Programme für die Optimierung auf eine gewünschte unitäre Entwicklung des Gesamtsystems umgeschrieben. Damit betreiben wir im Folgenden nicht mehr nur die Präparation eines Quantenzustands, sondern versuchen unitäre Quantengatter zu implementieren. Hierbei starteten wir mit dem einfachsten System: Ein 2-Qubit-Register bestehend aus einem NV-Zentrum und einem ^{13}C Nuklearspin. Durch die oben beschriebene spezielle Wahl des Magnetfelds sind CNOT- und Hadamard-Gatter sehr einfach zu implementieren und die Qualität beträgt hierbei $F \approx 0,99$ innerhalb von einigen zehn Mikrosekunden. In diesem Sinne haben wir zunächst die Resultate aus [Hed20] bestätigt.

Im Zuge der unitären Kontrollen eines 4-Spin-Registers müssen - wie auch beim oben beschriebenen Präparieren von Zuständen - längere Gatterzeiten in Kauf genommen werden. Da wir weiterhin nur das NV-Zentrum mittels Mikrowellen-Strahlung kontrollieren wollen, muss berücksichtigt werden, dass die S_z Komponente des NV-Zentrums an alle Spins im Register koppelt. Das bedeutet, dass bei einem gezielten Gatter auf einem bestimmten ^{13}C Nuklearspin (z.B. Hadamard-Gatter) die unitäre Zeitentwicklung des Gesamtsystems auf eine Identität bezogen auf die restlichen ^{13}C Nuklearspins führen muss. Dementsprechend nimmt die Komplexität der Optimierung der Pulssequenzen erheblich zu. Unser oben dargestellter Ansatz hat für dieses Problem auf eine Qualität von $F \approx 0,97$ für ein gezieltes Hadamard-Gatter auf dem ersten ^{13}C Nuklearspin geführt. Um die Güte dieses Prozesses zu erhöhen können verschiedene Ansätze verfolgt werden. Hier kann zum Beispiel mit einem variablen Magnetfeld in z-Richtung gearbeitet werden um Resonanzbedingungen zwischen der Kopplung an den NV-Spin und der Zeeman-aufspaltung der ^{13}C Nuklearspins geschickt auszunutzen. Auf der anderen Seite können anspruchsvollere Optimierungsalgorithmen verwendet werden.

Diesbezüglich haben wir an Techniken des maschinellen Lernens gearbeitet. Dabei wurde die Arbeit [Kha23] als Referenz genutzt und auf unser spezifisches Problem angepasst. Diese Techniken sollen Wahrscheinlichkeitsverteilungen (sogenannte „Policies“) für die Pulssequenzen erzeugen, welche eine Tendenz zu hohen Fidelitäten haben. Diese Verteilungen können demnach benutzt werden, um Pulssequenzen hoher Güte zu erzeugen oder einen Startpunkt für weitere Optimierungsalgorithmen erzeugen. Hierbei kann die Anzahl der Pulse einfach vorgegeben werden. Solche Methoden versprechen außerdem den Vorteil, dass sie die räumlichen Verteilungen der Spinumgebung miteinbeziehen und

sie demnach fehlerresistentere Pulssequenzen erzeugen. Wir haben den Algorithmus der Arbeit [Kha23] benutzt um die „Policy“ für Pulssequenzen für ein Hadamard Gatter auf dem zwei-Spin Register bestehend aus NV-Zentrum und einem ^{13}C maschinell zu lernen. Dabei haben wir die Anzahl der Pulse auf 20 festgelegt. Die gelernte „Policy“ hat daraufhin Pulssequenzen mit Fidelitäten von ungefähr 0.7 produziert. Diese könnten bereits als Anfangswert für weitere Optimierungen benutzt werden. Um das volle Potential dieser Methodik auszuschöpfen, bedarf es jedoch einer feineren Justierung des Algorithmus.

Fazit

Die generalisierte Cluster Correlation Expansion hat es uns ermöglicht, die Güte von Quantenprozessen auf einem Register bestehend aus vier Spins in Diamant quantitativ vorherzusagen. Um den Prozess vor Umgebungseinflüssen (Spinstörstellen) zu schützen, haben wir Hahn-Echo-Pulse zwischen die Kontrollpulse gesetzt. Damit konnten wir erreichen, dass das Register hinreichend gut vor dem Einfluss von P1-Störstellen (mit Häufigkeiten bis zu 300ppb) geschützt ist. Die Entkopplung des Prozesses von den sich außerhalb des Registers befindenden Nuklearspins stellt wegen der einsetzenden Verschränkung mit dem NV-Zentrum ein größeres Problem dar. Wir finden jedoch Parameter bezüglich der Diamantproben, welche auf der einen Seite genügend Nuklearspins nahe am NV-Zentrum garantieren und gleichzeitig eine hinreichend geringe Kopplung an weiter entfernte Nuklearspins aufweisen. Außerdem haben wir an Pulssequenzen für CNOT- und Hadamard-Gatter gearbeitet und diese für ein 2-Spin-System erfolgreich implementiert. Für ein 4-Spin-Register ist die Güte der Kontrolle noch zu niedrig und bessere Optimierungsverfahren müssen gefunden werden. Wir haben diesbezüglich Algorithmen basierend auf maschinellem Lernen implementiert welche bereits Pulssequenzen erzeugen, die zur weiteren Optimierung verwendet werden können.

Meilensteine

Der Meilenstein MS. 3.1 ist mit der Implementierung der dynamisch entkoppelten Pulssequenzen abgeschlossen. Des Weiteren haben wir die oben erwähnte Methodologie angewendet, um unitäre Quantengatter auf dem Register zu implementieren. Daraufhin haben wir Techniken des Maschinellen Lernens verwendet, um eine „Policy“ für Pulssequenzen mit hoher Güte zu finden. Die Güten sind hierbei jedoch noch in einem relativ niedrigen Bereich. In diesem Sinne ist der MS. 3.2 bearbeitet und wird auch weiterhin im Interesse unserer Forschungsvorhaben stehen.

Referenzen

- [Brad19] Bradley et al., A Ten-Qubit Solid-State Spin Register with Quantum Memory up to One Minute, Phys. Rev. X 9, 031045 (2019).
- [Tak23] Takou et al., Precise Control of Entanglement in Multinuclear Spin Registers Coupled to Defects, Phys. Rev. X 13, 011004 (2023).
- [Mai23] D. Maile et al., Performance of quantum registers in diamond in the presence of spin impurities, arXiv:2211.06234 (2023).
- [Heg20] Hegde et al., Efficient Quantum Gates for Individual Nuclear Spin Qubits by Indirect Control, Phys. Rev. Lett. 124, 220501 (2020)
- [Kha23] Khalid et al., Sample-efficient model-based reinforcement learning for quantum control, Phys. Rev. Research 5, 043002 (2023).

2.2 Projektfortschritte im praktischen Programmieren mit Qiskit und Rechnen mit dem IBMQ-System

Überblick der wissenschaftlichen Arbeiten

2.2.1 Von der Festkörperphysik inspirierte Modellsysteme auf IBMQ (FhIWM)

In diesem AP4 haben wir intensiv an der Frage gearbeitet, wie sich die auf realer IBM-Hardware erzielbaren Ergebnisse der verwendeten variationellen Algorithmen (VQE, VQD) zur Berechnung des vollständigen Spektrums an Eigenzuständen eines einfachen Modellhamiltonians verbessern lassen. Insbesondere sind wir der Frage nachgegangen, durch welche Fehlerquellen die Ergebnisse maßgeblich, d.h. am stärksten verfälscht werden und welche Reduktion an Fehlerraten für die Zukunft notwendig wäre, um zufriedenstellende Ergebnisse erzielen zu können. Zu diesem Zweck haben wir ein sogenanntes *fake-backend* generiert, welches ein Fehlermodell enthält, dessen Parameter denen des IBMQ Ehningen entsprechen. Das Fehlermodell berücksichtigt und enthält hierbei Ein- und Zweiqubitgatterfehler, Auslesefehler, sowie Kohärenzzeiten. Mit diesem Simulator ist es nun möglich, einzelne Fehlerraten gezielt an- und auszuschalten oder zu reskalieren.

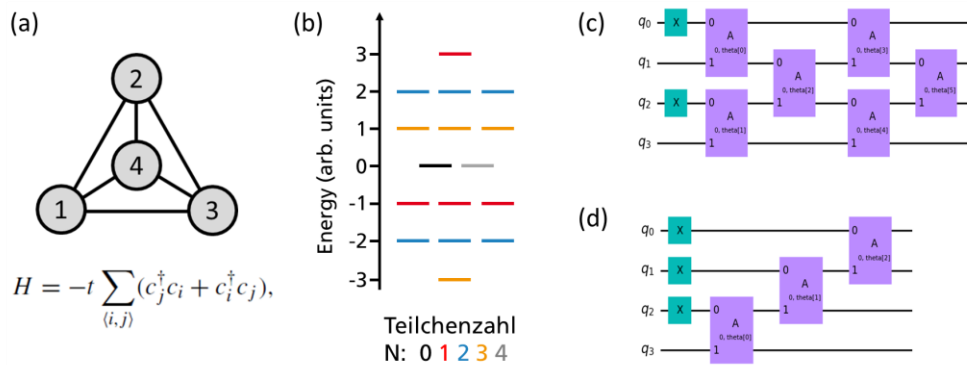


Abbildung 7: (a) Struktur und (b) Spektrum des Modellhamiltonians vier paarweise gekoppelter Fermionen (Fermionischer Tetraeder). Die Teilchenzahl in den einzelnen Zuständen des Spektrums ist durch die Farbe kodiert. Die teilchenzahlerhaltenden Ansatzschaltkreise für (c) $N=2$ und (d) $N=3$ sind ebenfalls gezeigt.

Als Modellhamiltonian haben wir den fermionischen Tetraeder gewählt, ein System, welches sich durch Jordan-Wigner-Mapping auf vier Qubits abbilden lässt. Als Ansatzschaltkreis haben wir, wie bereits zuvor, den teilchenerhaltenden Ansatz aus [Gar20] gewählt. Abbildung 7 illustriert unser Modell und die verwendeten Schaltkreise zur Bestimmung der Eigenzustände mit 2 oder 3 Teilchen. Der Ansatz für $N=1$ entspricht dem für $N=3$ mit nur einem initialen X Gatter. Die hier zur Anwendung kommenden A-gatter lassen sich durch elementare Einqubitrotationen und jeweils 3 CNOT-Gatter darstellen [Gar20]. In dem hier vorliegenden Fall eines zeitumkehrinvarianten Systems, enthält jedes A-Gatter einen zu variierenden und zu optimierenden Parameter θ_i . Zur Bestimmung des Grundzustandes (mit $N=3$) wird also ein Schaltkreis mit 9 CNOT-Gattern und 3 zu optimierenden Parametern verwendet. Abbildung 8 (a) zeigt beispielhaft die auf dem IBMQ Ehningen erzielten Ergebnisse im Vergleich mit den durch das Fake-backend berechneten Grundzustandsenergien des fermionischen Tetraeders, wobei unterschiedlich skalierte Fehlermodelle und Shot-Anzahlen verglichen werden. Ebenso wie die „echten“ Hardwareergebnisse weichen die mit VQE und dem SPSA-Optimierer berechneten Erwartungswerte deutlich vom Zielwert -3.0 (gestrichelte Linie) ab. Hier bringt eine Reduktion der Gatterfehler mit einen Faktor 0.1 bereits eine deutliche

Verbesserung. Bei weiterer Reduktion dieser Fehler (Faktor 0.01) zeigt sich jedoch nur noch eine geringe Verbesserung der Ergebnisse, deren Fehler in diesem Fall durch die endlichen Kohärenzzeiten dominiert werden. Im Idealfall unendlich langer Kohärenzzeiten, bleibt der statistische Fehler aufgrund der endlichen Anzahl an Shots. Die diesen VQE-optimierten Zuständen zugehörigen Teilchenzahlen sind in Abb. 8 (b) gezeigt. Diese Erwartungswerte weichen um wenige Prozent vom exakten Wert $N=3$ ab und zeigen analoge Verbesserungen bei einer Reduktion der Fehlerraten.

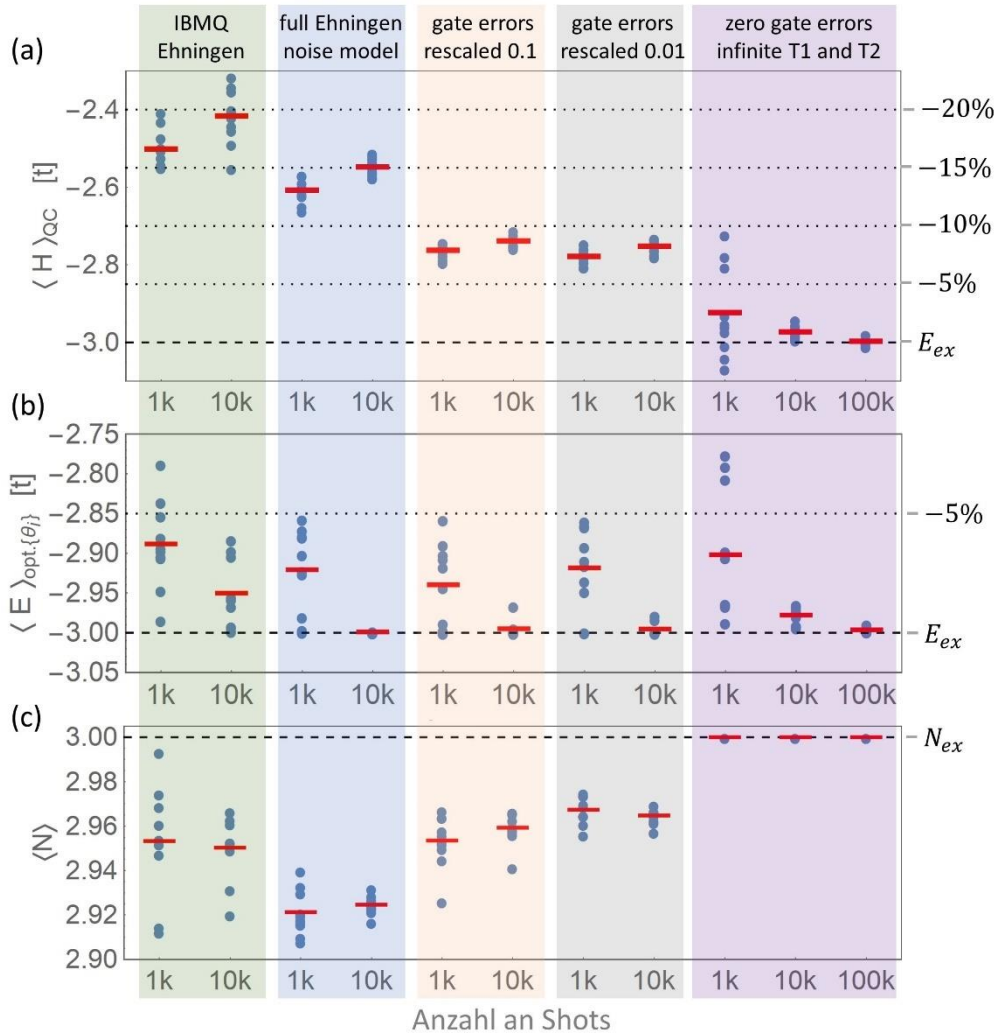


Abbildung 8: Energieerwartungswerte des Grundzustandes des fermionischen Tetraeders, berechnet auf IBMQ Ehningen und mit Hilfe eines Fake-backends, jeweils mit unserer Implementierung des VQE-Algorithmus. Es wurden drei verschiedene Fehlermodelle getestet (unterschiedliche farbliche Schattierungen im Hintergrund). Die kurzen roten Linien geben den Mittelwert der jeweils 10 Einzelrechnungen (blaue Punkte) an. Horizontale gestrichelte und gepunktete Linien markieren den exakten Energiewert sowie Fehlerintervalle in Schritten von 5%. (b) Erwartungswerte für den Teilchenzahloperator (c) Energiewerte, die sich analytisch aus den durch VQE optimierten Variationsparametern berechnen lassen.

In Abb. 8 (c) wird schließlich eindrücklich demonstriert, dass die in (a) und (b) dargestellten Abweichungen, maßgeblich auf die Berechnung der Erwartungswerte und nicht auf eine etwaige mangelnde Qualität der optimierten Parameter zurückzuführen ist. Um dies zu zeigen haben wir die mit VQE und dem SPSA-Optimierer erhaltenen Parameter

in die analytische Matrixrepräsentation des Schaltkreises eingesetzt und über diesen Weg den jeweiligen Energieerwartungswert algebraisch berechnet. Mit 1.000 Shots weichen die Mittelwerte für alle untersuchten Fehlermodelle nur noch ca. 2 – 3 % vom exakten Wert ab wohingegen für 10.000 shots die Abweichungen in allen Fällen deutlich unter 1% liegen.

Des Weiteren haben wir das Modell gekoppelter Fermionen auf bis zu 8 Orbitale erweitert und entsprechend auf bis zu 8 Qubits ausgewertet. Entsprechend der oben diskutierten Untersuchungen gehen wir davon aus, dass die größte und prinzipielle Schwierigkeit in der QC-Umsetzung die Berechnung des Erwartungswertes und nicht die variationelle Optimierung an sich darstellt. Aus diesem Grund haben wir für die im Folgenden dargestellte Studie auf die ressourcenaufwändigen VQE-Rechnungen verzichtet und stattdessen systematisch die Berechnung von Grundzustandsenergien, ausgehend von vorab bestimmten exakten Parametersätzen für die teilchenzahlerhaltenden Ansatzschaltkreise, durchgeführt. Die in Abb. 9 zusammengefassten Ergebnisse sind niederschmetternd. Für der Verwendung von mehr als vier Qubits summieren sich die Hardwarefehler dermaßen auf, dass die Ergebnisse weitestgehend unbrauchbar werden, selbst unter Verwendung der üblichen Fehlermitigationsmethoden. Grundsätzlich sieht man hier auch deutlich, dass die Fehlermodelle, die wir zur Konstruktion unserer Fake-backends verwendet haben, die wirklichen Rauscheigenschaften der Hardware deutlich unterschätzen.

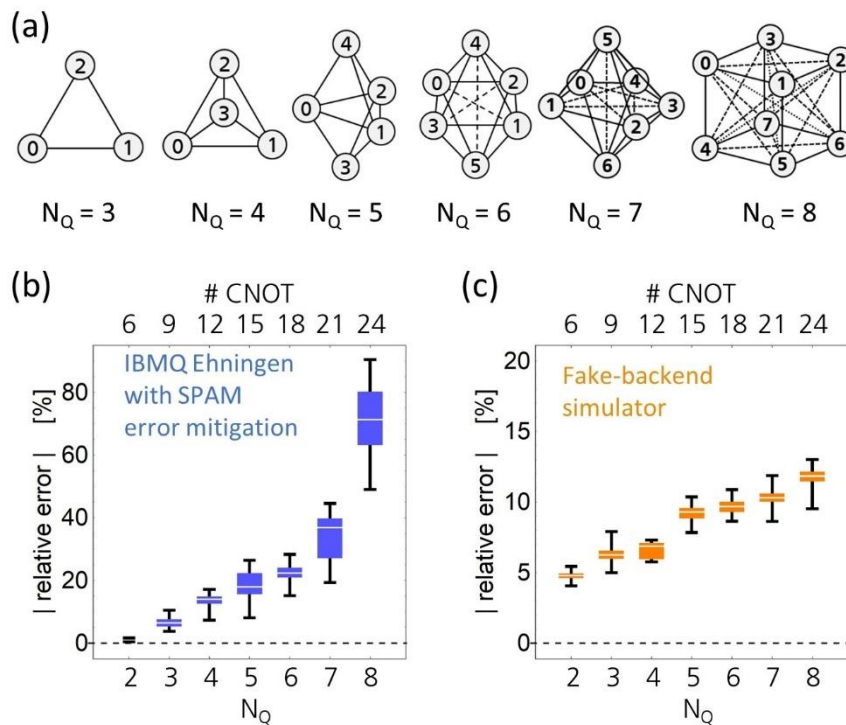


Abbildung 9: (a) Schematische Darstellung der untersuchten N -Fermionmodelle. Die entsprechenden teilchenzahlerhaltenden Ansatzschaltkreise benötigen N_Q Qubits und enthalten $3N_Q$ CNOT-Gatter. (b) Mittelwerte und Streuung für jeweils 50 auf IBMQ Ehningen berechnete Erwartungswerte unter Verwendung der SPAM-Fehlermitigation. (c) Vergleich der auf IBMQ Ehningen erzielten Ergebnisse mit denen eines auf den Hardwarecharakteristika aufbauenden Fehlermodells simulierten Daten (Fake-backend).

Fazit

Überblick der wissenschaftlichen
Arbeiten

Bezüglich der Umsetzung einfacher, aus der Festkörperphysik inspirierter Modellsysteme, auf den IBMQ Systemen haben wir große Fortschritte erzielen können. Wir haben einen robusten Workflow zur Berechnung des Energiespektrums Fermionischer Systeme unter Einbeziehung aktueller Fehlermitigationsmethoden umgesetzt. Damit konnten wir systematisch umfangreiche Rechnungen auf dem IBMQ Ehningen durchführen. Die zentrale Erkenntnis dieser Untersuchungen lautet, dass das variationelle Verfahren zur Bestimmung von Grundzustandsenergien für sich genommen erstaunlich robust und gut funktioniert, der Schwachpunkt der Methode derzeit allerdings die Art der Berechnung von Erwartungswerten darstellt, bei der sich kleine Gatterfehlerraten systematisch zu deutlichen Abweichungen im Endergebnis aufsummieren, die eine sinnvolle Verwendung von mehr als 4 Qubits für diese Art der Fragestellung auf den IBM Falcon und Eagle Prozessoren verhindert.

Meilensteine

Trotz intensiver Bemühungen und der Umsetzung aktueller Strategien zur Fehlerreduktion und -mitigation waren alle IBMQ-Rechnungen unter Verwendung von mehr als 4 Qubits zu sehr verrauscht, um damit die ursprünglich geplanten Bandstrukturrechnungen von Diamant in einem sp³-Tight-Binding Modell durchführen zu können. Der Meilenstein **MS4** konnte somit leider nicht vervollständigt werden.

Referenzen

- [Gar20] B.T.Gard et al., Efficient symmetry-preserving state preparation circuits for the variational quantum eigensolver algorithm, npj Quantum Information 6:10 (2020)

2.2.2 Zertifizierung der Verschränkungsgüten auf IBMQ (UniFR)

In diesem AP haben wir zunächst zwei bestimmte verschränkten Zustände (W-Zustände und GHZ-Zustände), auf der Quantenhardware von IBM erzeugt und mit geeigneten Verschränkungsmaßen (dem entsprechenden *Entanglement Witness* [Gue09]) gemessen, ob die erzeugten Zustände tatsächlich verschränkt sind oder nicht. Dies haben wir für Register zunehmender Größe untersucht, von 2 bis maximal 7 Qubits, auf 5 verschiedenen IBMQ-Rechnern und pro Rechner 10 Mal wiederholt, um eine statistische Auswertung zu ermöglichen. Die Ergebnisse in Abb. 10 zeigen, dass mit diesem Verschränkungsmaß keine Verschränkung mehr für Register aus 5 Qubits oder mehr nachgewiesen werden kann, wahrscheinlich weil sowohl die Erzeugung als auch die Messung noch von relativ hohen Gatter- und Messfehlern in der Hardware beeinträchtigt werden. Die Anwendung von Techniken zur Fehlerminderung führte hier zu keiner nennenswerten Veränderung der Ergebnisse dieser statistischen Studie.

Um den Verschränkungsgehalt in den erzeugten Zuständen alternativ zu prüfen, haben wir auf eine Methode aus dem Bereich des maschinellen Lernens zurückgegriffen. Dafür haben wir die Ergebnisse von sogenannten randomisierten lokalen Messungen [Ket18] als Datensatz einem Algorithmus zur nichtlinearen Dimensionsreduktion [Inn20] zugeführt, der schließlich diesen Datensatz als Punkt auf einer Ebene darstellt. Den Algorithmus haben wir mit Messergebnissen von verschränkten Zuständen trainiert, die wir nach bestimmten Verschränkungsstrukturen generiert haben. Diese Trainingsdatensätze sehen wir in Abb. 11 als bunte Wolken: Die violette Wolke zum Beispiel besteht aus Zuständen, in denen 6 Qubits verschränkt sind, die grünen Wolke repräsentiert Zustände, in denen nur die ersten fünf Qubits miteinander verschränkt sind, und in der hellblauen sind die Qubits überhaupt nicht verschränkt, usw.

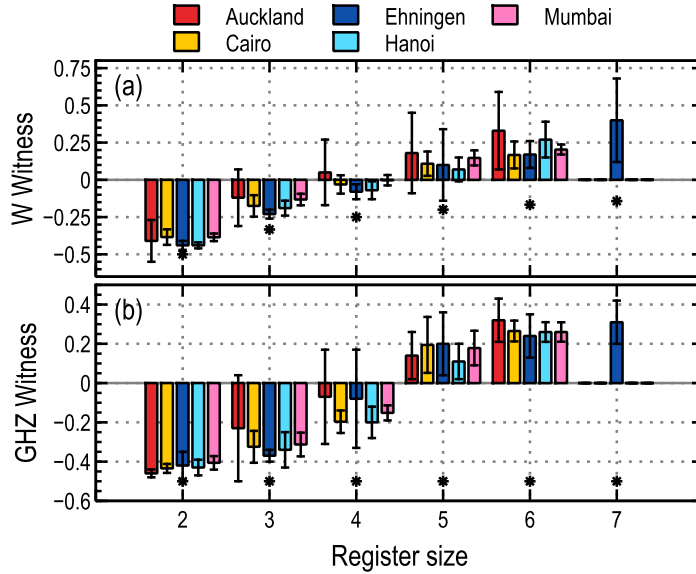


Abbildung 10: Werte der Entanglement Witnesses von (a) W-Zuständen und (b) GHZ-Zuständen für verschiedene Registergrößen und IBMQ-Hardware (durch Farben gekennzeichnet). Werte und Fehlerbalken entsprechen dem arithmetischen Mittel bzw. der Standardabweichung aus einer Stichprobe von jeweils 10 Werten. Die Erwartungswerte (durch Sternchen gekennzeichnet) für die W-Zustände sind $-1/N$ bei einer Registergröße N und die für GHZ-Zustände betragen $-1/2$, unabhängig von der Registergröße.

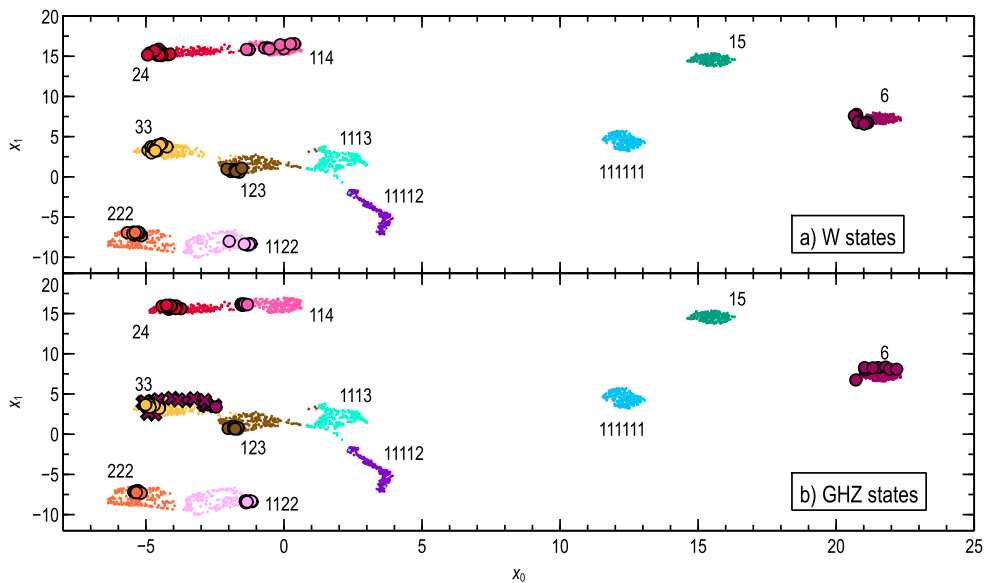


Abbildung 11: Zuordnung von (a) W- und (b) GHZ-Zuständen, die auf IBMQ Ehningen präpariert wurden, auf die entsprechenden Verschränkungspartitionen unter Verwendung des Dimensionalitätsreduktionsalgorithmus (siehe Text). Der Trainingsdatensatz wird durch farbige Wolken dargestellt, die jeweils aus 200 klassisch simulierten reinen Zufallszuständen gewonnen werden, die entsprechend der in der Beschriftung angegebenen Partition verschränkt sind (z. B. entspricht "114" der Partition $[[0], [1], [2,3,4,5]]$). Die auf IBMQ Ehningen präparierten und gemessenen Quantenzustände werden stattdessen als große Kreise oder Kreuze dargestellt, wobei die Farben die für die Herstellung verwendete Partition angeben. Die Klassifikation funktioniert zuverlässig für alle Partitionen, mit Ausnahme der vollständig verschränkten Partition '6' bei GHZ-Zuständen, die mit der "Star"-Schaltung (dunkelviolette Kreuze) präpariert wurden. In diesem Fall werden alle Zustände der Partition '33' zugeordnet.

Überblick der wissenschaftlichen Arbeiten

wenden wir eine Reihenfolge von bis zu fünf Quanten-Fourier-Transformationen und deren Inversen lokal auf jedes Qubitregister an. Im Idealfall wäre diese Operation unitär und würde die Verschränkungsstruktur unverändert lassen. Da die Gatter aktueller Quantenhardware einen endlichen Fehler aufweisen, führt diese Operation jedoch zur Dekohärenz im Registerzustand, der somit zunehmend gemischt wird. In Abbildung 12 zeigen wir, wie Zustände, die in verschiedenen Partitionen verschränkt sind, nach und nach ihre Verschränkung verlieren, bis sie über die logarithmische Negativität als separabel erkannt werden.

Schließlich haben wir einen Schaltkreis zur Berechnung eines weiteren Verschränkungsmaßes, der *mehrteiligen Concurrence* [Min05], konstruiert und entsprechend mit der aktuellen Version der von IBM entwickelten Qiskit-Schnittstelle implementiert. Die Ergebnisse dieser Berechnung erweisen sich jedoch leider als bedeutungslos, da die Berechnung der mehrteiligen Concurrence von der Reinheit des zugrundeliegenden Zustandes ausgeht. Die Berechnung dieser Reinheit, die auch in der gleichen Zwei-Kopien-Einstellung möglich ist, zeigt, dass der vorbereitete Zustand stattdessen stark gemischt ist. Was wir in Abbildung 13 beobachten, ist eine immer größere mehrteilige Concurrence für einen fast maximal gemischten und daher separablen Zustand, was ein paradoxes Ergebnis darstellt.

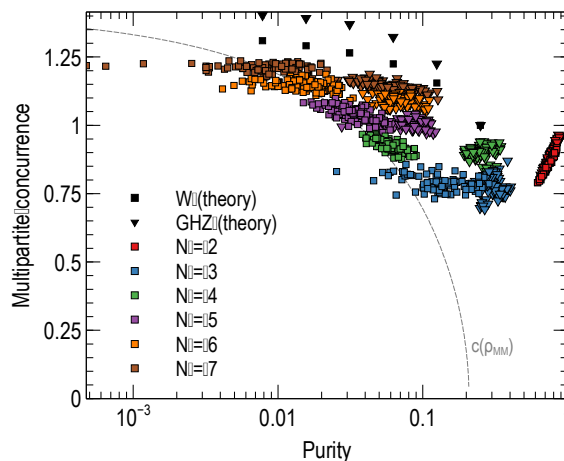


Abbildung 13: Werte der mehrteiligen Concurrence (Ordinaten) und der Reinheit (Abszissen), die auf IBMQ Ehningen berechnet wurden, wobei die Farben die Systemgröße und die Symbole den Zustand angeben (Dreiecke für GHZ-Zustände, Quadrate für W-Zustände). Hier sind 100 Realisierungen für jede Systemgröße und jeden Zustandstyp dargestellt. Zum Vergleich markieren die schwarzen Punkte die mehrteilige Concurrence von reinen W- bzw. GHZ-Zuständen zunehmender Größe N und die Reinheit des entsprechenden maximal gemischten Zustands ($1/2^N$). Die gestrichelte Linie zeichnet die (unphysikalische) Beziehung zwischen der mehrteiligen Concurrence und der Reinheit nach, die mit einer projektiven Messung an zwei Kopien des maximal gemischten Zustands berechnet wurde, was zu der paradoxen Schlussfolgerung führt, dass dieser Zustand zunehmend stärker mit der Systemgröße verschränkt ist. Dieses Paradoxon entsteht, weil diese Methode zur Berechnung der Concurrence von der Reinheit des zugrunde liegenden Zustands ausgeht.

Fazit

Zusammenfassend stellen wir fest, dass sich die Prüfung von Verschränkung durch Witnesses nicht (oder noch nicht) für aktuelle Quantenhardware eignet, da diese Methode zu empfindlich gegenüber Präparations- und Messfehler ist. In unseren Experimenten wurde keiner der 6-Qubit-Zustände auf keiner Maschine als verschränkt erkannt.

Analog dazu scheitert die Berechnung der mehrteiligen Concurrence über eine projektive Messung in einem Zwei-Kopien-Szenario gerade daran, dass das Quantenregister in einem gemischten Zustand präpariert wird. Eine alternative Methode, die auf randomisierten lokalen Messungen für einen nichtlinearen Dimensionsreduktion-Algorithmus basiert, bietet allerdings eine robustere Prüfung der Verschränkungsstruktur in den auf IBMQ-Hardware erzeugten Zuständen.

Meilensteine

Wir haben Witnesses von W- und GHZ-Zustände als Verschränkungsmaß mit Anwendung von Fehlerminderungstechniken umgesetzt, und damit die Skalierung der Abbildungstreue dieser Zustände auf unterschiedlichen IBM-Maschinen getestet. Damit wurde Meilenstein 5 erreicht.

Referenzen

- [Gue09] O. Gühne & G. Tóth, Entanglement detection, Physics Reports 474, 1 (2009).
- [Ket18] A. Ketterer et al., Characterizing Multipartite Entanglement with Moments of Random Correlations, Phys. Rev. Lett. 122, 120505 (2019).
- [Inn20] L. McInnes et al., Uniform Manifold Approximation and Projection for Dimension Reduction, arXiv:1802.03426 (2020).
- [Min05] F. Mintert et al., A. Measures and dynamics of entangled states, Physics Reports 415, 207 (2005).

2.2.3 Simulation offener Quantensysteme auf dem IBMQ (UniUL)

Bezüglich der Simulation von offenen Quantensystemen haben wir uns verstärkt auf die Simulation von nicht-Markovschen Mastergleichungen auf dem IBMQ konzentriert, da unser Simulationsansatz sehr effizient auf den derzeit verfügbaren IBMQ-Systemen ausführbar ist. Im Speziellen haben wir dazu ein neues mathematisches Konzept entwickelt, welches wir durch wenige Gatteroperationen auf NISQ-Geräten implementieren können. Auf der anderen Seite ist die Implementierung von den ebenfalls im Projektplan erwähnten Kollisionsmodellen ungleich schwieriger und, wie sich im Projektverlauf herausstellte, derzeit aufgrund der hohen Anzahl von Gatteroperationen nicht möglich.

Unter der Annahme, dass ein offenes Quantensystem zu Beginn seiner Evolution nicht mit seinem Umfeld verschränkt ist, kann seine Dynamik über sogenannte CPTP-Maps (Completely Positive Trace Preserving Maps) beschrieben werden. Quantensimulationsverfahren für solche Zeitevolutionen sind vor kurzem entwickelt worden [Wang13]. Wir verallgemeinerten diesen Algorithmus um darüber hinaus auch GD-Maps (General Dynamical Maps) simulieren zu können. Diese erhalten die Spur, aber nicht notwendigerweise die Positivität der Dichtematrix. Mittels dieser GD-Maps können wir auch eine dissipative nicht-Markovsche Dynamik simulieren, selbst wenn wir initial mit einer Dichtematrix starten, welche schon mit einem Umfeld wechselgewirkt hat. Dies wird in Abb. 14 demonstriert, indem wir eine vorangegangene CP-Evolution (Qubit Relaxation) mittels einer GD-Map zurück zu ihrem Ausgangspunkt bringen. Durch dieses Beispiel ist außerdem gezeigt, dass wir bei Kenntnis der CP-Map eines Qubits mit unserer Simulationsmethode die bereits vonstattengegangene Dekohärenz statistisch mittels GD-Map-Simulation ausgleichen können. Wir haben also die Möglichkeit, unsere Simulationsmethode als ein Fehlermitigationsverfahren einzusetzen, wenn wir zuvor eine Tomographie der CP-Map eines Qubits durchgeführt haben. Diese Erkenntnisse können einen großen Einfluss auf die Quanteninformations-Community haben und sind vor kurzem in dem Journal Physical Review Letters erschienen [Rossini23].

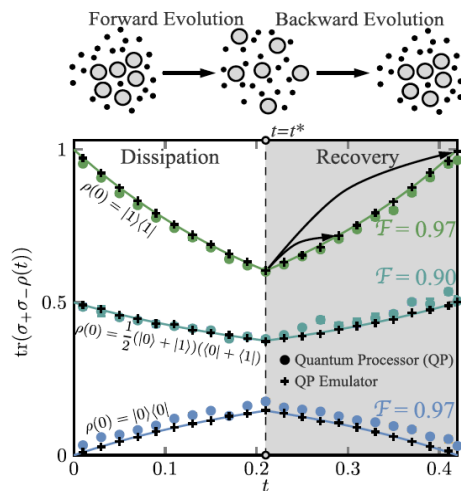


Abbildung 14: $t < t^*$: Evolution einer Lindblad-Zeitentwicklung auf dem IBMQ für verschiedene Anfangszustände. $t > t^*$: Ausgleich der zuvor stattgefunden dissipativen Evolution mittels einer GD-Map, welche die vorausgegangene Lindblad-Evolution mit negativen Raten widerspiegelt.

Des Weiteren haben wir uns damit beschäftigt die oben erwähnte Fehler-Mitigations-Methode auf dem IBMQ Ehningen zu testen. Hierbei haben wir zunächst ein Verfahren implementiert, um die intrinsische CPTP-Map des Systems mittels Rauschtomographie zu ermitteln. Diese kann nun im Anschluss mit unserer Methode statistisch ausgeglichen werden. Wir zeigen in Abb. 15 wie durch unsere Methode die intrinsische Relaxation eines Qubits statistisch mitigiert werden kann. Zunächst implementieren wir ein X-Gatter um den Qubit in den $|1\rangle$ Zustand zu bringen und warten daraufhin für einen Zeitraum t (siehe Abb. 15 (b)). Ohne Mitigation messen wir dann die orange Kurve in der Abb. 15 (c). Wenn wir nach der Wartezeit t unseren auf das intrinsische Rauschverhalten des Qubits abgestimmten Fehler-Mitigations-Algorithmus anwenden, messen wir die blaue Kurve in Abb. 15 (c). Wir finden, dass die Güte des mitigierten Zustands bis auf wenige Ausreißer höher ist als die Güte des eigentlichen Zustands auf dem IBMQ. Die Ursache der Ausreißer ist zum Zeitpunkt dieses Berichts noch nicht vollständig geklärt. Wir vermuten, dass hierbei im Qubit eine sehr schnelle Relaxation, zum Beispiel durch die Wechselwirkung mit einem intrinsischen zwei-Niveau System, vonstattengegangen ist. Eine solche ist sehr schwer über eine CPTP-Map abzubilden und demnach nur schwer zu mitigieren. Nichtsdestotrotz zeigt unser Verfahren sehr vielversprechende Resultate über einen genügend langen Zeitraum t .

Fazit

Bezüglich der Simulation von offenen Quantensystemen haben wir uns verstärkt auf die Simulation von nicht-Markovschen Mastergleichungen auf dem IBMQ konzentriert. Unser dabei entwickeltes mathematisches Konzept kann einfach und mit wenigen Gatteroperationen auf NISQ-Geräten implementiert werden. Darüber hinaus kann diese Methode durch Miteinbeziehen von Informationen über die Rauscheigenschaften einzelner Qubits als Fehlermitigationsverfahren benutzt werden. Wir haben dieses Verfahren explizit auf dem IBMQ Ehningen getestet und vielversprechende Resultate erhalten.

Meilsteine

Der Meilenstein MS. 6 ist insofern sehr erfolgreich bearbeitet worden, dass ein für das Quantencomputing effizienter Formalismus zur Simulation von nicht-Markovschen offenen Quantensystemen gefunden wurde. Es konnte gezeigt werden, dass diese Simulationstechnik als Fehlermitigationsverfahren auf dem IBMQ anwendbar ist.

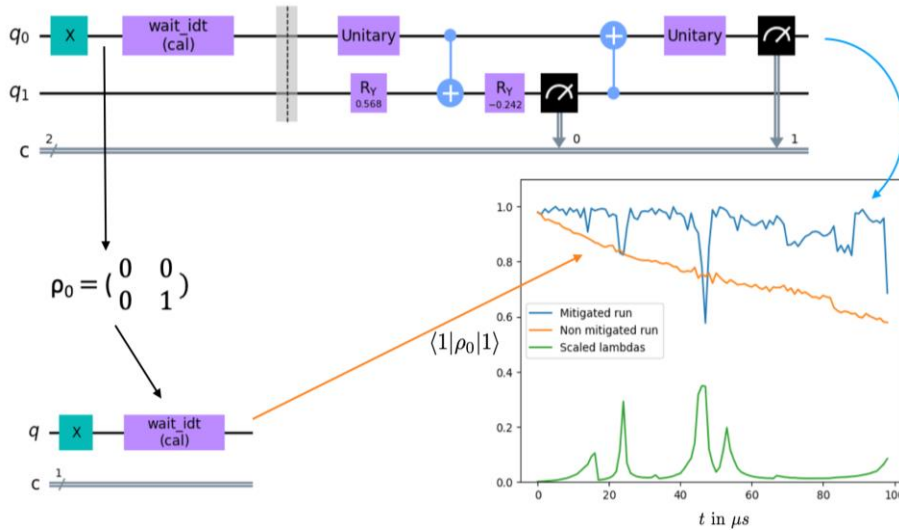


Abbildung 15: (a) Kompletter Quantenalgorithmus: Der Qubit wird zunächst in den Zustand $|1\rangle$ gebracht. Das „wait_idt“ Gatter implementiert die Wartezeit t , währenddessen der Qubit mit seinem dissipativen Umfeld wechselwirkt. Daran schließt sich unser Mitigations-Algorithmus an, welcher spezifisch auf die intrinsische CPTP-Map des Qubits angepasst wird. (b) Algorithmus ohne Mitigation. (c) Güte des Zustands mit (blau) und ohne (orange) Mitigation als Funktion der Zeit.

Referenzen

- [Wan13] Wang, et al., Solovay-Kitaev Decomposition Strategy for Single-Qubit Channels, Phys. Rev. Lett. 111, 130504 (2013), Phys. Rev. Lett. 111, 130504 (2013)
- [Ros23] Rossini, et al., Single-Qubit Error Mitigation by Simulating Non-Markovian Dynamics, Phys. Rev. Lett. 131, 110603 (2023)

3.1 Quantenregister auf Basis von NVCR

Unsere Ergebnisse legen die Schlussfolgerung nahe, dass die dipolare Kopplung zwischen NV-Elektronenspins perspektivisch nicht geeignet ist, um zuverlässig mehrere NVCR zu einem gemeinsamen Register zu koppeln und verschränkte Zustände über größere Entfernungen hin zu erzeugen und zu manipulieren. Was die Realisierung eines einzelnen NVCR angeht, so haben die Untersuchungen dieses Projektes abermals deutlich gezeigt, dass die statistische Variation der Verteilung der ^{13}C Kernspins zu enormen Schwankungen in allen das NVCR charakterisierenden Parametern führt. Sowohl das durch die Umgebung hervorgerufene Abklingverhalten der Kohärenz als auch die prinzipielle Möglichkeit, verschränkte Zustände und kompakte Pulssequenzen für Quantengatter zu erzeugen variieren grundsätzlich, je nach spezifischer räumlicher Realisierung der Atome im Kristall. Eine Methode zur gezielten Strukturierung der NV-Zentren und auch der ^{13}C Kernspins auf atomarer Ebene erscheint uns unabdingbar, um im Bereich des NV-basierten Quantencomputing Fortschritte hinsichtlich der Skalierung hin zu größeren Registern und deren Kontrolle zu ermöglichen.

3.2 Quantumcomputing auf IBMQ Hardware

Sowohl unsere Charakterisierung des maximal erzielbaren Verschränkungsgehalts auf IBMQ-Quantenprozessoren als auch unsere Modellrechnungen für festkörper- und quantenphysikalisch inspirierte Modellsysteme haben gezeigt, dass eine technologische Reduktion der hardwarebedingten Fehlerraten um mindestens eine, wenn nicht zwei Größenordnungen notwendig wären, um einigermaßen sinnvolle Berechnungen auf IBMQ Maschinen durchführen zu können.

Nichtsdestotrotz sind wir der festen Überzeugung, dass die intensive Beschäftigung mit den in diesem Projekt vorangebrachten Fragestellungen sehr gewinnbringend war (und ist) und sich in Zukunft auszahlen wird. Die Quantumhardware entwickelt sich stetig weiter und die ambitionierte IBM Roadmap konnte bisher Jahr für Jahr bedeutende technologische Weiterentwicklungen hervorbringen. Auch andere Hardwareplattformen entwickeln sich stetig. Dennoch ist derzeit aus unserer Sicht nicht absehbar, wann Mittels QC sinnvolle Problemstellungen erfolgreich bearbeitet und gelöst werden können. Eine weitere wichtige ungelöste Frage diesbezüglich ist, ob aus einem Use-Case auch ein Business-Case werden kann. Dies wird letztendlich davon abhängen, welche QC-Rechenzeit ein Algorithmus benötigt und zu welchem Preis diese zu bekommen ist. Auch hier liegen etliche Größenordnungen zwischen dem aktuellen Status und einer zukünftigen wirtschaftlichen Verwendung von QC-Ressourcen.

4.1 Publikationen

- R. Ghassemizadeh et al., Coherence properties of NV-center ensembles coupled to an electron-spin bath in diamond, arXiv:2404.08388 (2024).
- D. Maile and J. Ankerhold, Performance of quantum registers in diamond in the presence of spin impurities, arXiv:2211.06234v3 (2023).
- Rossini, et al., Single-Qubit Error Mitigation by Simulating Non Markovian Dynamics, Phys. Rev. Lett. **131**, 110603 (2023).
- Andreas JC Woitzik, Lukas Hoffmann, Andreas Buchleitner, Edoardo G Carnio, An Energy Estimation Benchmark for Quantum Computers, Open System Dynamics and Information **31**, 2450006 (2024).

4.2 Vorträge

- Tagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft der Sektion Atome, Moleküle, Quantenoptik und Photonik (SAMOP) in Hannover, 5. – 10. März 2023:
 - A Woitzik, Vortrag: "An energy estimation benchmark for quantum computers"
 - R. Ghassemizadeh, Vortrag: „Perspectives for a solid-state-based quantum-register based on NV centers aligned along linear crystal defects in diamond“.
- Tagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft der Sektion der kondensierten Materie (SKM) in Dresden, 26. – 31. März 2023:
 - D. Maile, Vortrag: „Performance of quantum registers in diamond in the presence of spin impurities“.
 - M. Rossini, Vortrag: „Single Qubit Error Mitigation by Simulating non-Markovian Dynamics“.
 - D. Urban, Vortrag: „Stability and electronic structure of NV centers at dislocation cores in diamond“.
- Tagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft der Sektion der kondensierten Materie (SKM) in Berlin, 17. – 22. März 2024:
 - R. Ghassemizadeh, Vortrag: „Analysis of the Sources of Discrepancy in Coherence Time Calculations of NV Center Ensembles in an Electron-Spin Bath“.
 - D. Urban, Vortrag: "Fermionic Tetrahedron: Test-Bed for Error Analysis on NISQ"
 - D. Maile, Vortrag: „Performance of quantum registers in diamond in the presence of spin impurities“
 - M. Rossini, Vortrag: „Single Qubit Error Mitigation by Simulating non-Markovian Dynamics"
- E Carnio, Vortrag "An energy estimation benchmark for quantum computers" for the Theory Seminar of the Department of Physics of the University of Warwick (May 19, 2023).
- D. Maile, Vortrag „Performance of quantum registers in diamond in the presence of spin impurities“, CZS Center QPhoton Networking Symposium Ulm (13.07.2023)
- A Woitzik, Poster "Entanglement in noisy quantum computing hardware" at the Annual Convention of the RTG DynCAM at the University of British Columbia, Vancouver (Aug 21-26, 2023).

- E Brunner, Poster "Data-driven characterisation of mixed-state multipartite entanglement" at QTML (Quantum techniques in machine learning) at CERN (Nov 23, 2023).
- E Brunner, Poster "Data-driven approach to mixed-state multipartite entanglement characterisation" at QIP (Quantum information processing) in Taipei, Taiwan (Jan 15, 2024).
- E Brunner, Vortrag "Data-driven characterisation of mixed-state multipartite entanglement" at QFORT (Center for Quantum Frontiers of Research and Technology), National Cheng Kung University Tainan, Taiwan (Jan 22, 2024).
- E Carnio, Vortrag "Entanglement certification for mixed quantum states prepared on noisy quantum hardware" at the KQCBW Developer Conference, Fraunhofer IAF, Freiburg (Mar 7-8, 2024)
- D. Urban, Vortrag "Material Simulation with Quantum Computing" at the KQCBW Developer Conference, Fraunhofer IAF, Freiburg (Mar 7-8, 2024)
- D. Urban, Vortrag „Material Simulation with Quantum Computing“ Swiss Quantum Industry Day, EPFL Lausanne (16. Okt. 2023)
- D. Urban, Vortrag „Quantencomputing für die Materialsimulation“, Quantum Effects Messe Stuttgart (10. – 11. Okt. 2023)
- D. Urban, Vortrag „Material Simulation with Quantum Computing“, FhG, Desy & UniBW Workshop, München (22. Jan. 2024)
- D. Urban, Vortrag „Perspectives of Quantum Computing for Material Simulations“, IBM Partner Forum, Mailand (13. – 16. Mai 2024)

4.3 Mitwirkung in Gremien

- Prof. Ankerhold ist akademischer Sprecher von Quantum BW und Sprecher des von den Baden-Württemberg-Stiftung geförderten Projekts QT.BW.
- Das Fraunhofer IWM engagiert sich im Fraunhofer Strategischen Forschungsfeld Quantentechnologien und im Fraunhofer Kompetenznetzwerk Quantencomputing.
- Die Projektmitarbeiter beteiligen sich an Veranstaltungen des IQST-Netzwerkes der Baden-Württemberg-Stiftung
- Das Fraunhofer IWM ist Mitglied im Quantum Business Network.

4.4 Kennzahlen gemäß Zuwendungsbescheid

Die Zusammenstellung der im Zuwendungsbescheid geforderten Kennzahlen des Projektes SiQuRe II lautet

- Projektbezogenen wissenschaftlichen Publikationen: 4 (siehe Kap. 4.1)
- Projektbezogene Patentanmeldungen: keine
- Anzahl an Personen in Forschungseinrichtungen, die am Projekt gearbeitet haben: 10
- Davon die Anzahl an Personen, die während der Projektlaufzeit Schulungen in Quantencomputing erhalten haben: keine (die beteiligten Personen wurden zu Beginn der ersten KQCBW-Projektphase (SiQuRe) geschult)
- Anzahl der am Projekt beteiligten Unternehmen: 5
- Davon Anzahl an KMU: 3