

KOMPETENZZENTRUM QUANTENCOMPUTING BADEN-WÜRTTEMBERG
VERBUNDFORSCHUNGSPROJEKT

SIQUIRE

Abschlussbericht
März 2023

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 Eigenschaften von Qubit-Arrays aus Diamant-NV-Zentren	5
2.1.1	Atomistische Modellierung von Qubit-Arrays (AP1, FhIWM)	5
2.1.2	Modellierung der Dynamik dissipativer Qubit-Arrays (AP2, UniUL)	7
2.1.3	Quanteninformation/Skalierbarkeit von Qubit-Arrays (AP3, UniFR)	12
2.2	Projektfortschritte im praktischen Programmieren mit Qiskit und Rechnen mit dem IBMQ-System	17
2.2.1	Elektronenstruktur einfacher Modelle (FhIWM)	17
2.2.2	Gekoppelte Fermionen (UniFr)	19
2.2.3	Simulation offener Quantensysteme (UniUL)	22
3	Ausblick auf weiteren Projektverlauf	24
4	Anhang	25
4.1	Publikationen	25
4.2	Vorträge	25
4.3	Mitwirkung in Gremien	26
4.4	Im Themenfeld Quantencomputing geschulte Personen	27

Das Projekt SiQuRe beschäftigte sich mit der Frage, inwieweit sich als Qubits adressierbare atomare Defektkomplexe im Diamant entlang linearer Strukturdefekte periodisch anordnen und als Qubit-Register nutzen lassen. Das Ziel dieses Projektes war der Aufbau eines theoretischen Verständnisses NV-basierter Qubit-Arrays und der Quantifizierung der Wechselwirkungen zwischen NV-Qubits und Liniendefekten im Diamantkristall, insbesondere hinsichtlich der relevanten Dekohärenzmechanismen. Darüber hinaus war ein zentraler Bestandteil des Projektplans der Kompetenzaufbau im Umgang mit dem IBMQ-System. Hier sahen die drei Theoriegruppen des Konsortiums ihre prädestinierte Aufgabe darin, Modelle der theoretischen Festkörperphysik und Quantenphysik zu testen, zu verstehen und weiterzuentwickeln und diese letztendlich in Fragestellungen zu übersetzen, die sich auf dem IBMQ in seiner aktuellen technologischen Realisierung umsetzen lassen.

Um die Wechselwirkungen zwischen NV-Zentren und Liniendefekten zu untersuchen, wurden am IWM Strukturmodelle für drei charakteristische Versetzungen im Diamantkristall erstellt und für ihrer Anwendbarkeit in den folgenden atomistischen Simulationen hinsichtlich ihrer Dimension (Ausdehnung, Anzahl Atome) optimiert. Der Einfluss dieser Kristalldefekte auf die Eigenschaften eines NV-Zentrums wurden für einen umfangreichen Satz relativer Abstände und Orientierungen berechnet. Dabei wurden insbesondere die Bildungsenergie, elektronische Zustandsdichte, Nullfeldaufspaltung und Hyperfeinstrukturparameter untersucht. Damit wurden die Meilensteine **MS1.1** und **MS1.2** wie geplant erreicht.

Die Entwicklung numerischer Simulationsverfahren zur Beschreibung der dissipativen Dynamik von Multi-Spin Systemen hat an der Uni Ulm entscheidende Fortschritte erfahren. Basierend auf den Hierarchical equations of motion (HEOM) und der generalized Cluster Correlation Expansion (gCCE) gelingt es mittlerweile, auch den schwierigen Bereich starker Quantenkorrelationen zwischen System und Umgebungsfreiheitsgraden zu erfassen. In engem Austausch mit der Gruppe von Prof. F. Jelezko (Projekt QC4BW) wurde ein dissipatives Quantenregister basierend auf NV-Zentren und ^{13}C Atomen simuliert und der Meilenstein **MS.2.4** entsprechend abgeschlossen. Durch unsere Arbeiten konnten wichtige Rückschlüsse auf experimentell relevante Kenngrößen gezogen werden. Hierbei sind insbesondere die Dauer der Quantenprozesse und die Dichte an Stickstoffstörstellen im Diamantgitter zu nennen.

An der Uni Freiburg wurde die Dynamik einer via Dipol-Dipol-Wechselwirkung gekoppelten Spin-Kette simuliert (**MS 1.3**). Durch Variation der Kopplungsparameter wurde der Einfluss eines ausgedehnten Kristallstrukturdefekts charakterisiert und untersucht. Dabei wurden die Größenordnungen der Systemparameter entsprechend den Vorarbeiten des IWM angesetzt. Ebenso wurde die Dynamik des Systems unter dem Einfluss elektromagnetischer Felder, die die Anzahl der Systemfreiheitsgrade reduzieren, studiert. Der Verschränkungsgehalt der Eigenzustände einer solchen Spin-Kette wurde quantifiziert und charakterisiert, insbesondere als Funktion des Abstands zwischen den NV-Zentren (**MS 3.1**). Die zu diesem Zweck entwickelten Werkzeuge wurden in der Folge dazu genutzt, die Verschränkung in den Eigenzuständen längerer Ketten von NV-Zentren zu quantifizieren und zu klassifizieren. Ebenso wurde die Widerstandsfähigkeit dieser Quantenkorrelationen gegenüber Unordnung in der Position der Zentren untersucht (**MS 3.2**).

Im Bereich des Quantencomputing wurden die wesentlichen Fertigkeiten und Kompetenzen zum Programmieren von Quanten-Algorithmen sowie zur Nutzung von Quanten-Simulatoren und realen Quantencomputern angeeignet. Dazu diente vor allem der im Frühjahr 2021 von IBM angebotene zwölfwöchige Qiskit-Kurs „Quantum Fridays“ sowie einzelne IBM Workshops zu spezialisierten Teilaspekten (z.B. surface codes,

Hardware-nahe Programmierung). Auf dem System in Ehningen wurden zunächst quantenchemische Rechnungen zu einfachen Molekülen durchgeführt und entsprechende Literaturergebnisse reproduziert. Im zweiten Schritt wurden aus der Festkörperphysik inspirierte Modelle einiger weniger gekoppelter Fermionen implementiert und untersucht (Ersatz für **MS 1.4**). Dafür wurden Algorithmen zur Berechnung ganzer Energiespektren als Qiskit-Runtime-Programme umgesetzt und deutliche Fortschritte bei der Fehlerreduktion gemacht.

In Bezug auf die Verwendung des IBMQ für die Modellierung dissipativer Effekte in NV-Zentren sind ebenfalls entscheidende Fortschritte gemacht worden. Hierzu wurden Kollisionsmodelle zur Simulation von offenen Quantensystemen auf Quantencomputern in Form von Quantenschaltkreisen umgesetzt und ausgeführt. Entgegengesetzt zu den Variationsverfahren für die Energieminimierung (VQE, VQD), wie sie bei hybriden Berechnungsmethoden der elektronischen Struktur einfacher Modellsysteme genutzt werden, wird hier der IBMQ als Quantensimulator der Zeitentwicklung des offenen Quantensystems verwendet. Im Rahmen dieser Arbeiten sind neue Simulationsansätze für die Dynamik offener Quantensysteme auf Quantencomputern entwickelt worden.

Im Laufe des Projektes und mit zunehmender Kenntnis der IBMQ-Hardware und ihrer Einschränkungen, insbesondere was Fehlerraten anbelangt, wurde deutlich, dass die ursprünglich im Projektantrag geplanten Meilensteine **MS 3.3** und **MS 2.3b** nicht so wie ursprünglich geplant umsetzbar waren. Die alternativ dazu ausgeführten Arbeiten sind in den jeweiligen Abschnitten zu den Projektergebnissen aufgeführt und erläutert.

MS	Aufgabe	Plan	Final
1.1	Simulation eines Superzellenmodells einer Versetzung in Diamant	M4	OK
2.1	Offene Quantendynamik kleiner wechselwirkend. NV-Ensembles implementiert	M5	M15
3.1	Verschrankungsspektren parametrisiert durch Kopplungsparameter	M6	OK
1.2	Simulation eines Superzellenmodells von NV-Zentren auf einer Versetzung	M8	OK
2.2a	Integration adaptierter Modelle mit TN-Verfahren in die SLN	M10	M16
2.2b	Identifikation von geeigneten experimentellen Observablen	M10	OK
3.2a	Skalierungsverhalten der Verschrankungsspektren	M10	M15
1.3	Simulation eines Spinmodells auf klassischem Computer	M12	OK
3.2b	Definition von geeigneten Verschrankungsobservablen	M14	OK
2.3a	Simulation wechselwirkender Spinketten auf <i>IBM Q System</i> ohne TN-Verfahren	M15	OK
1.4	Simulation eines Spinmodells auf <i>IBM Q System</i>	M16	mod.
3.3	Zertifizierung des auf <i>IBM Q System</i> erzielten Verschrankungsgrades.	M18	mod.
2.3b	Simulation wechselwirkender Spinketten auf <i>IBM Q System</i> inkl. TN-Verf.	M20	mod.
2.4	Simulation und Optimierung Puls-kontrollierter Dynamik von NV-Ketten	M20	OK

Tabelle 1: Übersicht über die Meilensteine (MS) und Vergleich zwischen dem im Antrag geplanten Abschlussmonat (Plan) und dem finalen Abschluss (Final). Die Verzögerung gegenüber der ursprünglichen Planung ist auf die Verzögerungen bei der Personalgewinnung und -einarbeitung zu Projektbeginn zurückzuführen. Drei Meilensteine wurden im Projektverlauf gegenüber dem Projektplan modifiziert und umdefiniert (mod.).

4	projektbezogene wissenschaftliche Publikationen
3	abgeschlossene, projektbezogene Bachelor und Masterarbeiten
0	projektbezogene Patentanmeldungen
18	im Themenfeld Quantencomputing geschulte Personen
1	am Projekt beteiligte KMU

Tabelle 2: Zusammenfassung der Kennzahlen, die im Anhang detailliert aufgelistet sind.

2.1 Projektfortschritte im theoretischen Erforschen von Eigenschaften von Qubit-Arrays aus Diamant-NV-Zentren

2.1.1 Atomistische Modellierung von Qubit-Arrays (AP1, FhIWM)

Um die Frage zu beantworten, inwieweit sich NV-Zentren als Qubits adressierbare atomare Defektkomplexe in Kristallen entlang linearer Strukturdefekte periodisch anordnen lassen, wurden am IWM zwei charakteristische, sehr häufig im Diamantkristall auftretende Versetzungen und deren Wechselwirkung mit NV-Zentren untersucht.

Zunächst wurden die Strukturmodelle der 30° Partialversetzung sowie zweier Varianten der 90° Partialversetzung (SP: single period; DP: double period) erstellt. Atomistische Superzellenmodelle unterschiedlicher Größen und Orientierungen wurden verglichen, um den besten Kompromiss zwischen der Minimierung von Artefakten aufgrund der endlichen Ausdehnung des Modells und dem mit der Systemgröße schnell ansteigenden numerischen Aufwand zu finden. Exemplarisch ist in Abb. 1 (a) das verwendete Superzellenmodell der 30° Versetzung, bestehend aus 1176 Atomen, abgebildet. Es enthält zwei 30° Versetzungskerne (blau und rot markiert) in entgegengesetzter Orientierung, die bei periodischer Fortsetzung der Superzelle in alle 3 Raumrichtungen zu einer Quadrupol-Anordnung führen. Mit diesem Ansatz gelingt es, den Einfluss weitreichender Verzerrungsfelder zu minimieren und somit das durch die numerischen Randbedingungen in seiner Größe beschränkte atomistische Modell aussagekräftiger zu machen.

In einem zweiten Schritt wurde dann der NV-Defekt an verschiedenen Stellen in den Versetzungskernen, in dessen unmittelbarer Nähe sowie weiter weg in einem dem perfekten Kristall ähnlichen Bereich („quasi bulk“, da es leichte Abweichungen vom perfekten Einkristall („bulk“) gibt) platziert und jeweils die Bildungsenergie des Defektkomplexes mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie bestimmt. Die Abbildungen 1 (c) – (g) zeigen die unterschiedlichen Positionen und Orientierungen der untersuchten NV-Zentren in Bezug auf den jeweiligen Versetzungskern. Um eine Kette linearer NV-Zentren zu formen, bedarf es energetisch eindeutig bevorzugter Positionen. In Abb. 2 sieht man, dass die Positionen 1 und 1_i (i steht für „invertiert, also mit vertauschten Positionen von N und V) energetisch eindeutig am tiefsten liegen. Es gibt also vielversprechende NV-Positionen direkt in den Versetzungskernen. Ob diese NV-Defektkomplexe allerdings als Qubits genutzt werden können, hängt davon ab, inwiefern die Anordnung der elektronischen Energieniveaus durch die Umgebung der Versetzungskerne verändert wird.

In einem dritten Schritt haben wir dazu die elektronischen Eigenschaften der meistversprechenden NV-Defektkomplexe im Detail untersucht. Neben der elektronischen Zustandsdichte (engl.: DOS = density of states) ist insbesondere die elektronische Feinstruktur von Interesse. Sowohl die Nullfeldaufspaltung als auch die Hyperfeinwechselwirkungsparameter wurden im Projektverlauf für die unterschiedlichen Positionen und relativen Ausrichtungen des NV-Zentrums bezüglich der Versetzungslinie systematisch berechnet. Ebenso haben wir durch das explizite Einstellen des Gesamtspins untersucht, ob das für eine Qubit-Anwendung relevante Spin-Triplett der Defektzustände weiterhin erhalten und gegenüber dem Spin-Singulett bevorzugt bleibt oder aufgrund der in der Nähe der Versetzung veränderten atomaren Nachbarschaftsverhältnisse zerstört wird. Es zeigt sich, dass nur die Position 1 (1_i ist äquivalent) im 30° -Versetzungskern (siehe Abb. 1 (b)) eine intakte Triplettstruktur aufweist, die dem NV- im perfekten Diamantkristall

ähnlich ist. Die Nullfeldaufspaltungs- und die Hyperfeinwechselwirkungsparameter weichen ebenfalls nur in geringem Ausmaß von den Werten im Einkristall ab. Die elektronische (Fein-)Struktur der energetisch bevorzugten Positionen in den 90° SP- und DP-Versetzungskernen bilden hingegen keine stabilen Triplettzustände und sind damit für Qubitanwendungen ungeeignet.

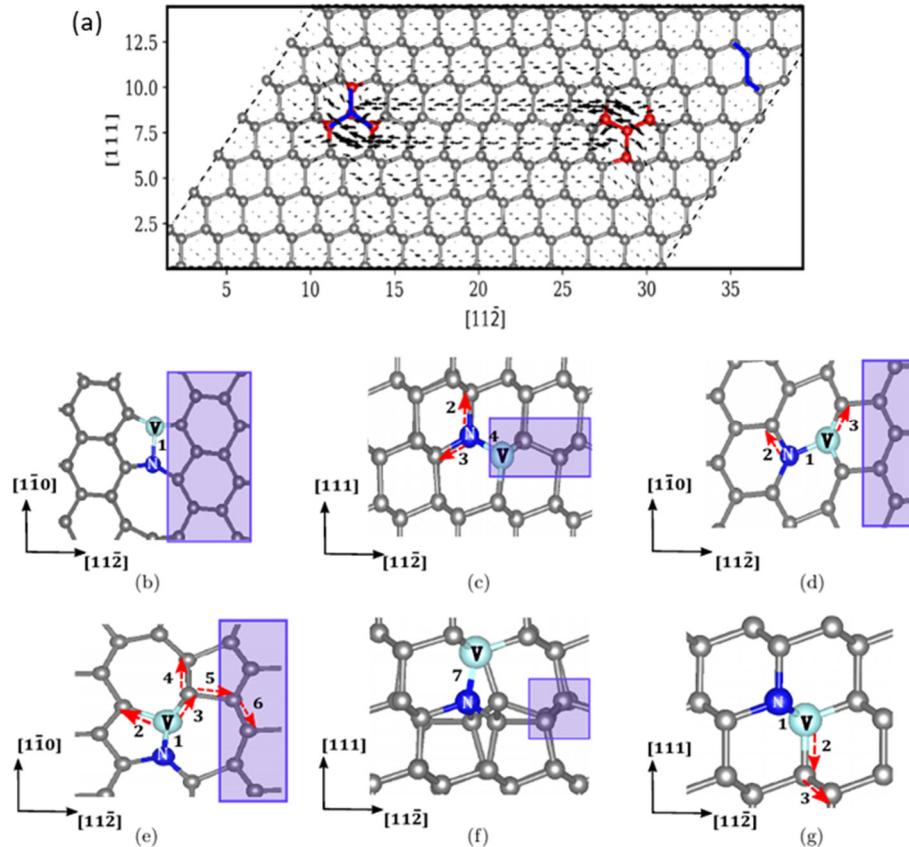


Abbildung 1: (a) Differential Displacement Map der Superzelle einer 30° Partialversetzung. Versetzungskern- und Quasibulk-Positionen sind farbig markiert. Die Abbildungen (b) und (c) zeigen untersuchte NV-Positionen am 30° Versetzungskern, (d) beim 90° SP und (e) und (f) bei 90° DP-Versetzungskern. (g) zeigt eine typische Position im Quasibulk. Rote Pfeile zeigen die Orientierung der NV-Zentren (Pfeil von N nach V). Die inverse Position (N und V vertauscht) hat den Namensindex „i“. (Bild aus [Gha22])

Fazit: Das zentrale Ergebnis der atomistischen Materialsimulation ist, dass es im 30° -Versetzungskern eine parallel zur Versetzungslinie ausgerichtete Position für einen möglichen NV-Defektkomplex gibt, der eine intakte Triplettstruktur ähnlich dem NV⁻ im perfekten Diamantkristall aufweist. Diese Position ist die energetisch vorteilhafteste und deren Nullfeldaufspaltungs- und die Hyperfeinwechselwirkungsparameter sind in vergleichbarer Größenordnung zu den Werten im perfekten Einkristall. Mit diesen Ergebnissen konnte die grundlegende Hypothese des Antrags, nämlich dass Versetzungslinien auf NV-Defektkomplexe attraktiv wirken und somit prinzipiell für deren Strukturierung verwendet werden können, belegt werden. Die oben beschriebenen Ergebnisse wurden in Physical Review B veröffentlicht [Gha22].

Meilensteine: Die Meilensteine MS1.1: „Simulation eines Superzellenmodells einer Versetzung in Diamant (M4)“ und MS1.2: „Simulation eines Superzellenmodells von NV-Zentren auf einer Versetzung (M8)“ wurden vollständig erreicht.

Überblick der wissenschaftlichen Arbeiten

Der MS1.3 „Simulation eines Spinmodells auf klassischem Computer (M12)“ wurde abweichend zum ursprünglichen Projektplan nicht vom IWM sondern im Rahmen der Masterarbeit von Mehdi Belhaj vom Projektpartner UniFR erfüllt.

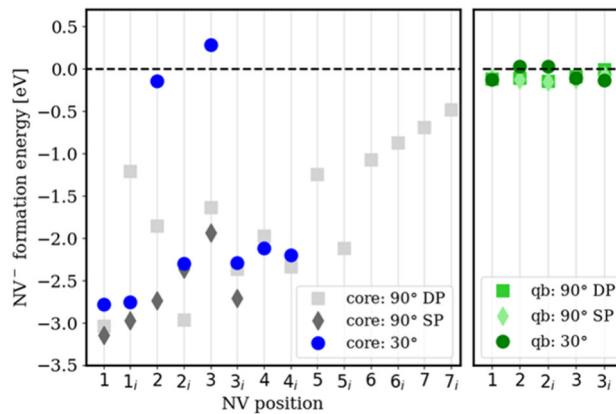


Abbildung 2: Bildungsenergie des NV-Zentrums relativ zum Einkristall an verschiedenen Positionen in den betrachteten Versetzungskernen. „qb“ steht als Abkürzung für Quasibulk. Im Zentrum der Versetzungskerne (Positionen 1 und 1_i) ist der Energiegewinn mit ca. 3eV am größten. (Bild aus [Gha22])

[Gha22] Stability and electronic structure of NV⁻ centers at dislocation cores in diamond, R. Ghassemizadeh, W. Körner, D. F. Urban, C. Elsässer, Phys. Rev. B 106, 174111 (2022)

2.1.2 Modellierung der Dynamik dissipativer Qubit-Arrays (AP2, UniUL)

Die theoretische Analyse gekoppelter Spin Systeme in Diamant zur möglichen Verwendung als Plattform zur Quanteninformationsverarbeitung und deren Beeinflussung durch ungewollte Wechselwirkungen mit einer dissipativen Umgebung benötigt ein tiefgreifendes Verständnis mannigfaltiger physikalischer Vorgänge. Es muss zunächst das isolierte System bezüglich seiner dynamischen Eigenschaften hinreichend gut verstanden sein, um geeignete Quanteninformationsprotokolle zu finden und zu simulieren. Um den Einfluss der im Diamant vorherrschenden dissipativen Umgebung miteinzubeziehen, ist diese zunächst zu charakterisieren wobei die Dekohärenz-Phänomene eines einzelnen NV-Zentrums verstanden sein müssen.

Neben dem Erwerben der Kenntnisse über die diamantspezifischen physikalischen Eigenschaften stand die Weiterentwicklung theoretischer Methoden zur Durchführung der Simulationen im Fokus unserer Arbeiten. Insbesondere sind hier die Verknüpfung von Kontrollmechanismen und dissipativen Simulationen sowie die Skalierbarkeit der Simulationsmethoden auf ein Ensemble von Spinqubits zu nennen. Die Verknüpfung der genannten Punkte zusammen mit den Projektpartnern und die Implementierung der Problemstellungen auf dem IBMQ waren die zentralen Ziele des AP2.

Für die Bearbeitung des AP2.1 (Dissipative Dynamik kleiner Spinensembles) wurde der Fokus zunächst auf bereits bestehende Methoden der theoretischen Beschreibung von

Dekohärenz-Phänomenen in einzelnen NV-Zentren gelegt, um deren Gültigkeitsbereiche abzugrenzen und damit einhergehende Probleme zu adressieren. Speziell wurde hierbei das Central Spin Model studiert und mittels Python und der Bibliothek PyCCE die Dekohärenzzeiten von NV-Zentren in der Umgebung von wechselwirkenden ^{13}C -Nuklearspins simuliert [Oni21,Yan08]. Die hierbei benutzten Techniken eignen sich gut für die Beschreibung der Dekohärenz- und Relaxationsphänomene, sind jedoch auf die Anwendung auf einzelne NV-Spins reduziert. Außerdem eignen sie sich nicht zur Beschreibung von Wechselwirkungen mit Gitterschwingungen.

Bezüglich der Beschreibung der Qualität von Gatteroperationen zwischen mehreren NV-Spins und/oder umliegenden Nuklearspins (siehe unten) haben wir, in Abweichung zum Projektantrag, an der Verwendung der sogenannten Hierarchical equations of motion (HEOM) [Xu22,Tan20] und der generalized Cluster Correlation Expansion (gCCE) [Mai23,Oni21] gearbeitet und nicht an der im Projektantrag skizzierten SLN.

In Bezug auf die HEOM wurden durch unsere Arbeiten Fortschritte für die Verwendung dieser Technik für tiefe Temperaturen erzielt, welche bereits im Fachjournal *Physical Review Letters* publiziert wurden [Xu22]. Simulationen auf Basis der HEOM bieten prinzipiell die Möglichkeit der Implementierung von optimalen Kontrollpulsen in der Präsenz von dissipativen Störeffekten und sind skalierbar auf größere Spinregister. Komplementär zur HEOM haben wir die gCCE von einzelnen Spins auf Spin-Register verallgemeinert. Mit dieser Methode können nun im Speziellen die dissipativen Effekte eines Spin-Bades auf Quantenprotokolle auf einem NV-basierten Quantenregister simuliert werden. Diese Ergebnisse stehen als Preprint zur Verfügung und werden derzeit im Fachjournal npjQuantum Information zur möglichen Publikation geprüft.

Basierend auf diesen Methoden beschäftigten wir uns mit der Implementierung von Kontrollpulsen, welche den genannten Störeffekten entgegenwirken sollen. Hierbei stehen und standen wir in engem Austausch mit der experimentellen Forschungsgruppe von Fedor Jelezko (Projektpartner im QC4BW Projekt) und dem Startup Tensor Solutions, um auf der einen Seite ein realistisches Bild der akuten Problemstellungen im Bereich der Kontrollmechanismen zu erhalten, und um auf der anderen Seite an numerischen Verfahren zur Lösung der Probleme zu arbeiten.

Parallel zur Forschung an der Methodik haben wir uns in der Frage des zu simulierenden Quantensystems am derzeitigen Stand der Forschung orientiert. Neben der Verwendung mehrerer NV-Zentren als Quantenregister besteht alternativ auch die Möglichkeit, die Wechselwirkung von NV-Zentren mit umliegenden ^{13}C -Nuklearspins auszunutzen und lokale Cluster dieser Spin-Anordnungen als Untereinheit des gesamten Quantenregisters zu benutzen. Dieser Ansatz wird auch in dem experimentell ausgerichteten Projekt QC4BW verfolgt. Während AP3 sich zunächst auf die Simulation von N-NV-NV-N-Registern (N steht für Stickstoff) konzentriert, haben wir uns entschieden, das komplementäre System von ^{13}C -NV- ^{13}C in den Fokus zu rücken. Dies bedeutet eine Abweichung vom im Antrag skizzierten Projekt-Plan. Die Gründe dafür liegen im derzeitigen Fokus der Forschung, auch die Nuklearspins als Qubits einzusetzen [Heg20]. Unsere erlangten Fortschritte in der Methodik sind leicht auf Kopplungen zwischen NV-Zentren erweiterbar. Ebenfalls konnten die von AP1 gefundenen Änderungen der physikalischen Eigenschaften der NV-Zentren, aufgrund von deren Positionierung an Versetzungen, einfach implementiert werden.

Im Speziellen beschäftigten wir uns mit dem in Abb. 3 (a) dargestellten System. In diesem wird lediglich das NV-Zentrum mit Mikrowellenstrahlung kontrolliert und Gatteroperationen auf dem ^{13}C -Nuklearspin können indirekt über die dipolare Wechselwirkung erfolgen. Für einen Verschränkungsprozess zwischen dem NV-Spin und dem Nuklearspin kann das in Abb. 3 (b) gezeigte Protokoll verwendet werden. Nach Initialisierung wird der NV-Spin mittels Mikrowellenstrahlung mit Kontrollpulsen

getrieben. Dabei wird die Wechselwirkung zwischen dem NV-Zentrum und dem ^{13}C -Nuklearspin für eine Zeit t_i ausgenutzt, um Operationen auf dem gesamten Register auszuführen. Das Design dieser Kontrollschemata orientiert sich am Stand der derzeitigen experimentellen Vorgehensweise. Dieser Prozess wird im Experiment üblicherweise von einer dissipativen Spin-Umgebung gestört. Wir zeigen das dynamische Verhalten der Verschränkung E_N (gemessen an der logarithmischen Negativität) zwischen dem Elektronspin und einem ^{13}C -Nuklearspin unter dem Einfluss von Kontrollpuls in Abb. 3 (d). Die hier gezeigten Ergebnisse fungieren gleichzeitig als Benchmark für die gCCE. Das simulierte Zwei-Spin-Register wird beeinflusst von einem kleinen Spinbad bestehend aus neun P1-Störstellen (Stickstoff). Dieses Problem kann gleichermaßen mittels exakter Diagonalisierung gelöst werden. Die gepunktete Linie in Abb. 3 (d) zeigt die Evolution des Quantenregisters ohne Einbezug des Spinbades. Der Kontrollprozess dauert ca. zehn Mikrosekunden und endet mit einem vollständig verschränkten Zustand ($\langle E_N \rangle = 1$). Danach wird das Register seiner unitären Zeitentwicklung überlassen, welche zu den wiederkehrenden Verschränkungsamplituden führt. In der Präsenz des Spin-Bades ist die beschriebene Evolution stark verändert. Das exakte Resultat wird von der roten-gestrichelten Linie beschrieben. Dabei sehen wir, dass die Verschränkungsamplituden gedämpft werden. Außerdem ist zu sehen, dass bestimmte Frequenzen des Spinbades dominieren, was zum Wiederaufleben der Verschränkung im Bereich zwischen 45 - 60 Mikrosekunden führt. Die dissipative Evolution des Registers ist für kurze Zeiträume durch die gCCE0-Näherung (entspricht der Meanfield-Näherung) hinreichend gut beschrieben. Für längere Zeiträume müssen Zwei-Spin-Korrelation im Spinbad mit einbezogen werden (gCCE2). Nachdem wir diese Zeiträume analysiert haben können wir größere Spinregister in einem größeren Spinbad ebenfalls simulieren. Das in Abb. 3 (c) simulierte Quantenregister besteht aus den in Abb. 3 (a) gezeigten vier Qubits; dem Elektronspin des NV-Zentrums, zwei ^{13}C Nuklearspins und dem Nuklearspin des Stickstoff Atoms. Die Dauer eines Prozesses auf diesem Register wird von den Dipolarkopplungen der beiden ^{13}C Nuklearspins mit dem Elektronspin bestimmt und beträgt ca. zwanzig Mikrosekunden. Als Qualität dieser Prozesse kann die Fidelität (F)

$$F = \frac{\text{tr}(\rho^\dagger \rho_t)}{\text{tr}(\rho_t^\dagger \rho_t)}$$

des in einer dissipativen Umgebung präparierten Zustands ρ mit einem Zielzustand ρ_t berechnet werden. Das zentrale Resultat unserer Arbeit [Mai23] ist die Bestimmung der Abhängigkeit von F von der Volumendichte der P1-Störstellen in der Umgebung des Registers. Hierbei spielt auch die partikuläre Konfiguration des Spin-Bades eine entscheidende Rolle. Um diesen Einfluss genauer zu betrachten haben wir Histogramme für verschiedene Volumendichten an P1-Störstellen erstellt. In Abb. 3 (d) ist die Fidelität für einen Verschränkungsprozess (Erzeugung eines Bell-Zustandes) für die beiden ^{13}C Nuklearspins, in Abhängigkeit der P1-Dichte (η_{P1}) gezeigt. Die Histogramme sind jeweils für 300 verschiedene Spin-Bad-Konfigurationen pro betrachteter Dichte berechnet. Unsere Ergebnisse bieten einen Einblick in die experimentell zu erreichende Qualität der Diamantplattformen in Bezug auf ihre Fülle von Stickstoffstörstellen. Außerdem können mit unserer realistischen Beschreibung Entkopplungspulssequenzen getestet und verbessert werden. Dies ist auch das Hauptaugenmerk unseres Beitrags zum bewilligten Projektantrags des SiQuRe II.

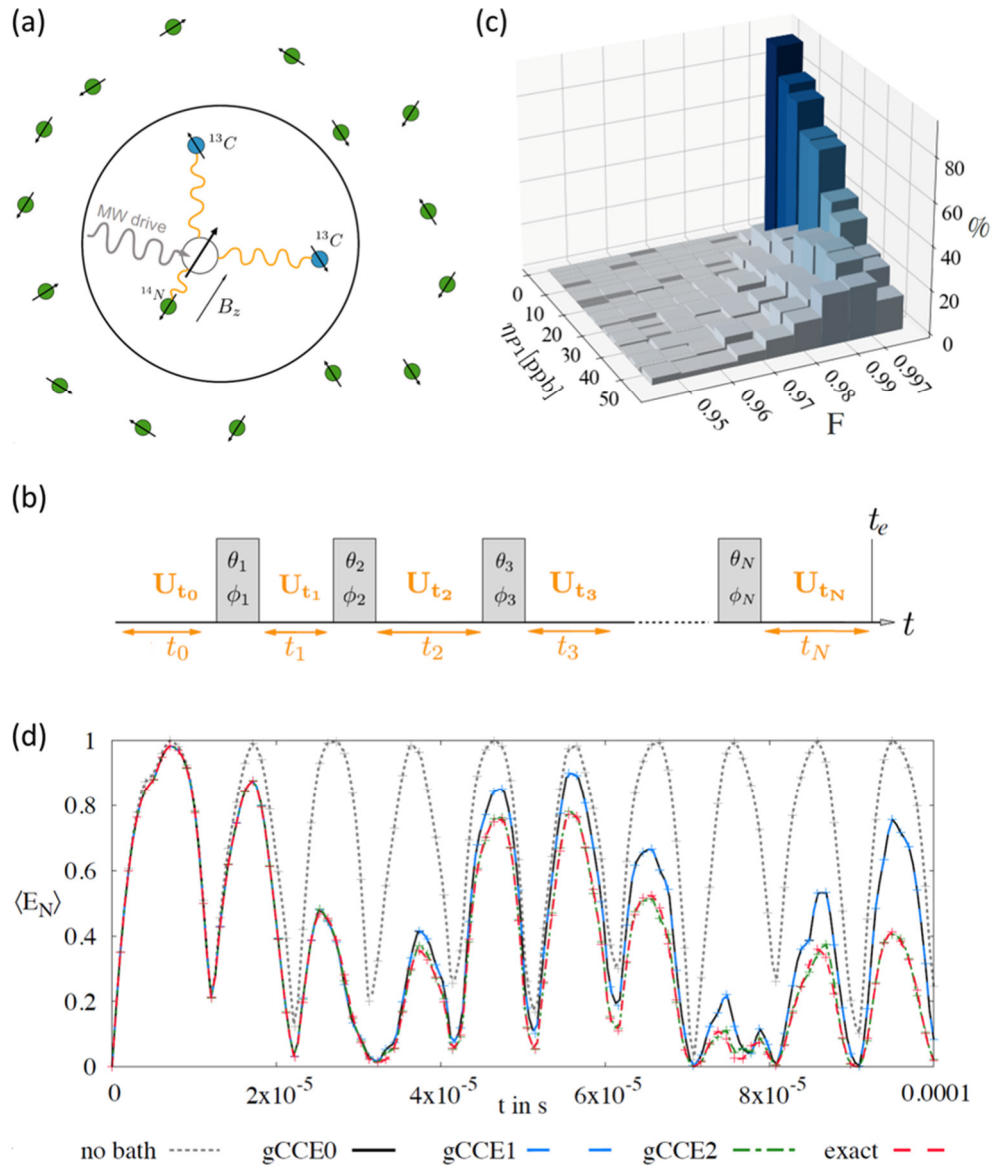


Abbildung 3: a) NV-Zentrum gekoppelt an zwei ^{13}C -Nukleare spins und den N -Nukleare spin, in Gegenwart von $P1$ -Störstellen. b) Schematische Darstellung des Protokolls für die Ausführung eines Quantenprozesses auf dem gesamten Register mittels Mikrowellenpulsen auf dem NV-Spin. Die optimalen Parameter für die Präparierung eines Zielzustands sind über ein Optimierungsprogramm berechnet worden. c) Histogramm für die Fidelität eines Quantenprozesses zur Erzeugung eines Bellzustandes als Funktion der Volumendichte (η_{P1}) von $P1$ -Störstellen. Das Histogramm ist aus 300 verschiedenen Spin-Bad-Konfigurationen pro Volumendichte η_{P1} erstellt worden. d) Dynamik der logarithmischen Negativität als Maß für die Verschränkung in einem Zweiqubitsystem (NV + ^{13}C). Die gepunktete Linie beschreibt das Verhalten ohne Dissipation. Die rot gestrichelte Linie zeigt das exakte Resultat in einem Spinbad bestehend aus neun $P1$ -Störstellen. Die übrigen Linien beschreiben verschiedene Ordnungen der gCCE. Die gCCE2 beschreibt das exakte Resultat für die angegebenen Zeiträume hinreichend gut.

Fazit: Zusammenfassend kann gesagt werden, dass mit dem Abschluss des Projekts SiQuRe I die antizipierten Ziele erfüllt wurden. Insbesondere wurde der Meilenstein MS.2.4 „Simulation und Optimierung pulskontrollierter Dynamik von NV-Ketten“ erreicht. Dabei konnten wichtige Rückschlüsse auf experimentelle Kenngrößen wie die P1-Störstellendichte gezogen werden. Auf dem Weg zum MS.2.4 sind einige Veränderungen im Projektablauf vorgenommen worden. Unsere Arbeiten beschäftigten sich aus den oben beschriebenen Gründen zu einem großen Teil mit Registern aus NV+¹³C Spins und nicht nur mit Ketten von NV-Zentren. Außerdem haben wir die Methoden zur Beschreibung der dissipativen Einflüsse angepasst. Wir verwendeten hierbei die HEOM und die gCCE und nicht SLN, wie ursprünglich im Projektantrag geplant.

- [Oni21] M. Onizhuk and G. Galli, PyCCE: A Python Package for Cluster Correlation Expansion Simulations of Spin Qubit Dynamics, *Advanced Theory and Simulations* 4, 2100254 (2021).
- [Yan08] W. Yang and R.-B. Liu, Quantum many-body theory of qubit decoherence in a finite-size spin bath, *Physical Review B* 78, 085315 (2008).
- [Xu22] M. Xu, Y. Yan, Q. Shi, J. Ankerhold, and J. T. Stockburger, Taming quantum noise for efficient low temperature simulations of open quantum systems, *arXiv e-prints*, 2202.04059 (2022).
- [Tan20] Y. Tanimura, Numerically “exact” approach to open quantum dynamics: The hierarchical equations of motion (HEOM), *J. Chem. Phys.* 153, 020901 (2020).
- [Heg20] S. S. Hegde, J. Zhang, and D. Suter, Efficient Quantum Gates for Individual Nuclear Spin Qubits by Indirect Control, *Physical Review Letters* 124, 220501 (2020).
- [Gar20] G. García-Pérez, M. A. C. Rossi, and S. Maniscalco, IBM Q Experience as a versatile experimental testbed for simulating open quantum systems, *npj Quantum Information* 6, 1 (2020).
- [Mai23] D. Maile and J. Ankerhold, Performance of quantum registers in diamond in presence of spin impurities , *arXiv e-prints*, 2211.06234v2

2.1.3 Quanteninformation/Skalierbarkeit von Qubit-Arrays (AP3, UniFR)

Überblick der wissenschaftlichen Arbeiten

Eine der Eigenschaften, die NV-Zentren zu einem attraktiven Grundbaustein für das Quantencomputing machen, sind die langen Kohärenzzeiten ihrer Elektronen- und Kernspins. Idealerweise wird die Quanteninformation in den Kern-Qubits ("memory") gespeichert, die die längere Kohärenzzeit aufweisen, und dann von den elektronischen Qubits ("bus") übertragen. In quantenmechanischer Sprache ausgedrückt, wollen wir die Population zwischen angeregten Zuständen der Kern-Qubits übertragen, bevor diese zerfallen.

Im ersten Teil des Projekts haben wir diesen Anregungstransfer in Bezug auf die Parameter untersucht, die zwei gekoppelte NV-Zentren beschreiben. Jedes NV-Zentrum in einem Array wurde als eine Einheit von zwei Qubits modelliert, basierend auf jeweils einem Übergang zwischen elektronischen und nuklearen Zuständen des isolierten NV-Zentrums, welche durch externe elektrische Felder in Resonanz gebracht werden. Die elektronischen und nuklearen Qubits sind über die Hyperfeinkopplung gekoppelt, während die Zwei-Qubit-Einheiten, aus denen ein Array besteht, durch die magnetische dipolare Kopplung zwischen den (effektiv Spin-1/2) Elektronen gekoppelt sind. Die wesentlich schwächere Kopplung, z. B. zwischen den (effektiven) Kernen, kann vernachlässigt werden.

Die beiden gekoppelten NV-Zentren wurden in dem Zustand präpariert, in dem der zweite Kern angeregt ist und alle anderen Subsysteme nicht angeregt sind (symbolisch: $|\psi_0\rangle = |-\rangle_e \otimes |-\rangle_n$). In Abb. 4 (a) wird gezeigt, dass es eine Wechselwirkungszeit t_f (gestrichelte graue Linie) gibt, bei der die Anregung vollständig vom zweiten auf den ersten Kernspin mittels Hyperfein- und dipolaren Kopplungen übertragen worden ist. Die Abhängigkeit der Wechselwirkungszeit von den Kopplungsparametern wurde mit einem störungstheoretischen Ansatz in [Ber11] hergeleitet.

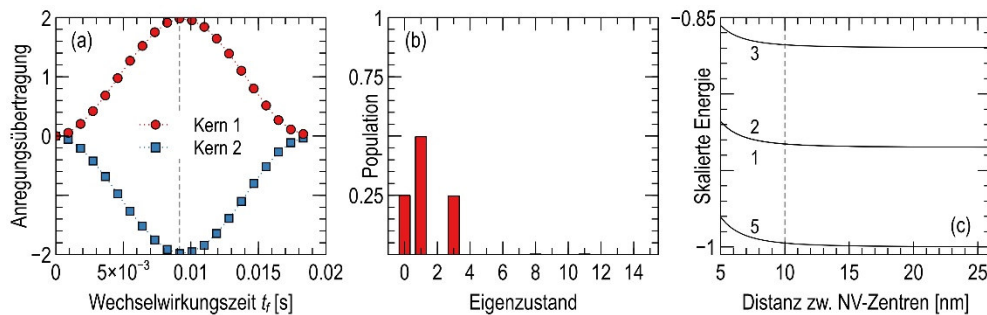


Abbildung 4: (a) Anregungsübertragung vom Kernspin 2 nach Kernspin 1. Hierbei ist der Anfangszustand $|\psi_0\rangle = |-\rangle_e \otimes |-\rangle_n$ und $|+\rangle$ und $|-\rangle$ bezeichnen einen angeregten bzw. nicht angeregten Zustand. Der Indices "e" und "n" bezeichnen elektronische bzw. nukleare Freiheitsgrade. Rote Kreise (blaue Quadrate) markieren die Anregung, die auf den Kernspin 1 (2) übertragen wird. Übernommen aus [Ber11], wo die Werte der Strukturparameter zu finden sind. (b) Histogramm der Populationen von $|\psi_0\rangle$ in der Eigenbasis des in (a) verwendeten Hamiltonian der Spin-Kette. Die Populationen der meisten Zustände sind auf der angelegten Skala verschwindend klein. (c) Abhängigkeit der Eigenenergie der Zustände 0-3 in (b) von der Distanz zwischen zwei gekoppelten NV-Zentren. Der Energieunterschied zwischen den Zuständen 1 und 2 kann auf der gezeigten Skala nicht aufgelöst werden.

Darüber hinaus haben wir untersucht, wie die Eigenenergien und -zustände von der Geometrie der Kette abhängen und haben daraus die Auswirkungen der Geometrie auf die Qubitdynamik bestimmen können [Bel21]. In Abb. 4 (b) wird gezeigt, wie sich der obige Anfangszustand $|\psi_0\rangle$ in die Eigenzustände des Ketten-Hamiltonians [mit den gleichen Parametern wie in (a)] zerlegen lässt. Die Dynamik spielt sich fast ausschließlich auf der Mannigfaltigkeit mit niedrigster Energie ab (die mit 0 bis 3 bezeichneten Zustände) und t_f wird durch die Differenz der Eigenenergien bestimmt. Wie sich die Struktur dieser Mannigfaltigkeit mit dem Abstand zwischen den NV-Zentren ändert, ist in Abb. 4 (c) zu sehen. Der bisher betrachtete Abstand (10 nm) ist durch eine graue gestrichelte Linie gekennzeichnet.

Um ein tieferes Verständnis der Dynamik zu erlangen, analysierten wir im zweiten Teil des Projektes den Verschränkungsgehalt der einzelnen Eigenzustände. Da wir es mit einem reinen Zustand von vier Qubits zu tun haben, berechneten wir die multipartite Concurrence [Min05] des gesamten Systems [Abb. 5 (a)] sowie die zweiseitige Concurrence [Ben06] der elektronischen [Abb. 5 (b)] und nuklearen [Abb. 5 (c)] Teilsysteme als Funktion des Abstands zwischen den NV-Zentren. Die letztgenannte Abbildung zeigt die Verschränkung zwischen den Kernspins, die durch die Wechselwirkung der Elektronenspins entsteht. Da die Wechselwirkung mit dem Abstand schwächer wird, nimmt der Verschränkungsgehalt der zentralen Eigenzustände (6-9) entsprechend ab. Die Verschränkung in der untersten Mannigfaltigkeit hat ihren Ursprung hingegen in der Energielücke ("avoided crossing") zwischen entarteten Zuständen, die durch eine Wechselwirkung beliebiger Stärke geöffnet wird, und ist daher konstant.

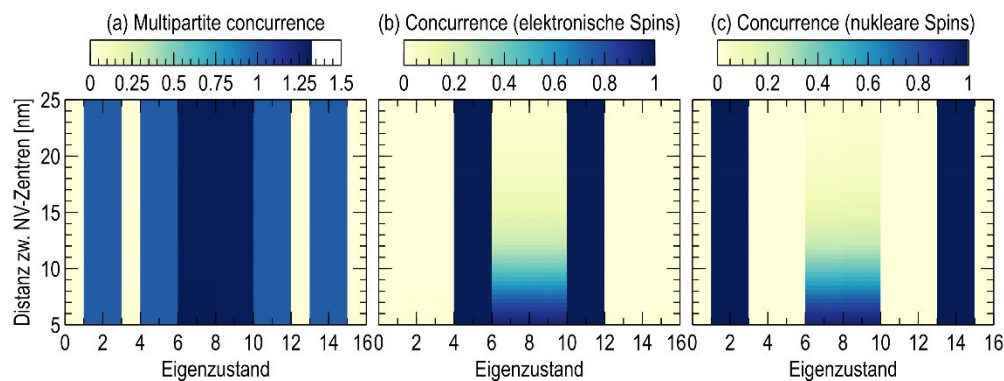


Abbildung 5: Verschränkung der Eigenzustände der Spinkette in Abhängigkeit vom Abstand zwischen den NV-Zentren. (a) Multipartite Concurrence [Min05] des gesamten Zustands der Elektronen- und Kernspins. (b) Concurrence im Zustand der elektronischen Spins, berechnet durch die partielle Spur der nuklearen Freiheitsgrade. (c) Concurrence im Zustand der Kernspins, berechnet durch die partielle Spur der elektronischen Freiheitsgrade.

Im dritten Teil des Projekts haben wir die Verschränkung, die in größeren Ketten von NV-Zentren eingeschrieben ist, untersucht. Zu diesem Zweck konnten wir auf die Ergebnisse des Konsortialpartners FhWM zurückgreifen und somit NV-Zentren modellieren, die entlang einer Versetzung, d.h. in einer Kettenkonfiguration, ausgerichtet sind. Wie im oben beschriebenen ersten Teil sind die NV-Zentren auf ein äußeres Magnetfeld ausgerichtet, was die Definition eines Qubits ermöglicht [Ber11]. Zunächst haben wir eine Kette regelmäßig angeordneter NV-Zentren (mit einem Abstand von 10 nm), die die Grundlage für die Klassifizierung der Verschränkungsstrukturen bildet, betrachtet und dann untersucht, ob diese Strukturen gegenüber einer Variation der Positionen (d.h. ihrer

relativen räumlichen Anordnung) widerstandsfähig sind. Um letztere zu modellieren, haben wir die Abweichungen der NV-Positionen von der idealen regelmäßigen Anordnung zufällig, entsprechend einer Normalverteilung, die auf der ursprünglichen Position zentriert ist, mit zunehmender Breite (von 0,1 nm bis 0,8 nm) variiert.

Da die Verschränkung innerhalb der NV-Kette auf die Dipol-Dipol-Wechselwirkung zwischen den Elektronen zurückzuführen ist, haben wir unsere Analyse nur auf die elektronischen Freiheitsgrade konzentriert. Diese Entscheidung wird durch unsere numerischen Simulationen gestützt, welche bestätigen, dass die elektronischen und nuklearen Freiheitsgrade tatsächlich nur sehr schwach verschränkt sind. (Die Reinheit jedes durch partielle Spur reduzierten Teilsystems in jedem Eigenzustand einer 3-NV-Kette beträgt mindestens 0,99). Daher konnten wir den Verschränkungsgehalt für Ketten mit bis zu 6 NV-Zentren analysieren.

Struktur	Ketten- größe	Eigenschaft	Reaktion auf Störungen
W-ähnlich [Abb. 6 (a)]	Alle	Mehrteilig verschränkt, endliche bipartite Concurrence zwischen jeweils zwei Knoten.	Resilient: Schwankungen in den einzelnen bipartite Concurrences verändern die Verschränkungsstruktur nicht.
GHZ-ähnlich [Abb. 6 (b)]	$N = 4, 6$	Mehrteilig verschränkt, verschwindend geringe bipartite Concurrence zwischen jeweils zwei Knoten.	Strukturänderungen zu W-ähnlich, da bipartite Concurrences endliche Werte annehmen. Robuster für $N = 6$.
Pfad [Abb. 6 (c)]	$N = 5, 6$	Jeder Knoten ist mit einem anderen verschränkt, so dass ein Pfad existiert, der alle Knoten verbindet.	Belastbar bis zu $\approx 4\%$ Unordnung, abhängig von der Position im Spektrum. Ansonsten verwandelt es sich in W-ähnlich.
Separabel [Abb. 6 (d)]	$N = 5$	Trennung in zwei oder mehr kleinere verschränkte Untersysteme	Eine leichte Zunahme der bipartiten Concurrences macht diese Zustände schwach verschränkt.

Tabelle 3: Typische Verschränkungsstrukturen, die in den Eigenzuständen von Ketten aus $N = 4$ bis 6 NV-Zentren auftreten.

Um die Verteilung der Verschränkung in den Eigenzuständen einer Kette von NV-Zentren zu klassifizieren, stützen wir uns auf drei Größen:

- Die *multipartite Concurrence* [Min05] ermöglicht den Vergleich der Menge an Verschränkung, die global in verschiedenen Zuständen enthalten ist. Diese Größe kann leicht für reine Zustände berechnet werden, was der Fall ist, wenn wir uns auf die elektronischen Freiheitsgrade konzentrieren.
- Die *bipartite* (oder *Wootters'sche*) *Concurrence* [Ben06] zwischen zwei Teilsystemen gibt an, wie jeder Knoten in der Kette direkt mit den anderen korreliert ist.
- Die *von-Neumann-Entropie* [Ben06] gibt Aufschluss darüber, ob die Kette in zwei unkorrelierte Teilsysteme aufgeteilt werden kann oder ob sie als ein verschränktes System als Ganzes betrachtet werden muss.

Im Allgemeinen weisen alle Zustände (mit Ausnahme des Grundzustands und des höchsten angeregten Zustands) einer regelmäßigen Kette eine gewisse Verschränkung auf. Bei Ketten mit einer geraden Anzahl von Zentren lässt sich sogar eine Verschränkung zwischen allen Knotenpunkten beobachten. In Tabelle 3 sind die von uns beobachteten

typischen Verschränkungsstrukturen zusammengefasst, mit Anmerkungen zu ihrer Widerstandsfähigkeit gegenüber Positionsstörungen.

Überblick der wissenschaftlichen Arbeiten

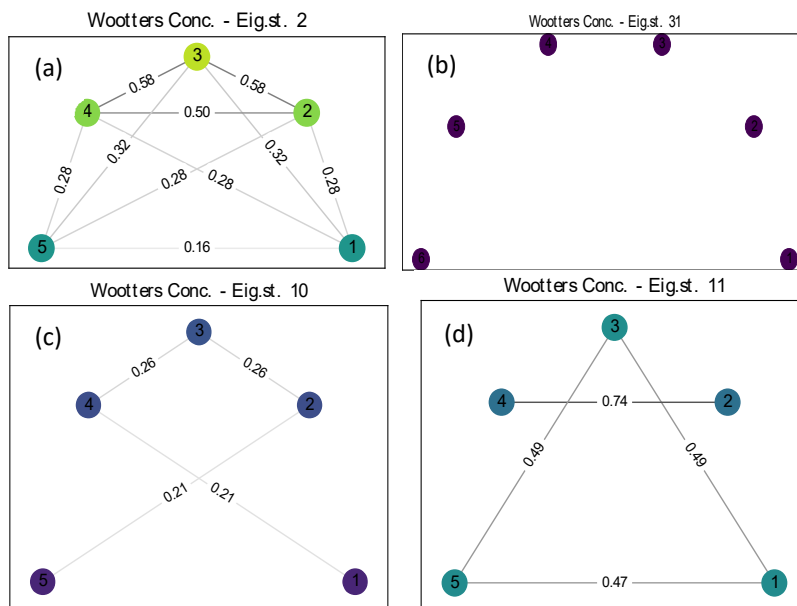


Abbildung 6: Beispielhafte Zustände für die in Tabelle 3 beschriebenen Kategorien. Kreise bezeichnen die NV-Zentren, Linien zeigen die bipartite Concurrence zwischen den angeschlossenen Teilsystemen an (explizit als Zahl und auch über die Grauskala – dunkel zeigt größere Concurrence an). Die Farbe der Kreise ist proportional zur gesamten Concurrence, die vom Knoten ausgeht (die Skala ist für die Diskussion im Text nicht relevant). Reproduziert aus [Min23].

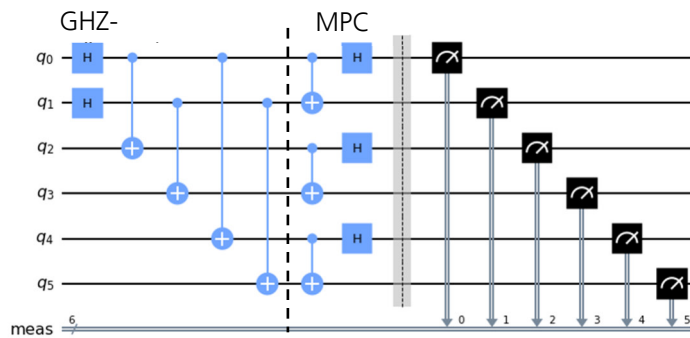


Abbildung 7: Schaltkreis zur Berechnung der multipartiten Concurrence eines dreiteiligen GHZ-Zustands. Die Gatter in "GHZ-Präparation" erzeugen zwei Kopien des GHZ-Zustands auf zwei separaten Drei-Qubit-Registern. Die Gatter in "MPC" bereiten die Register für die Messung der multipartiten Concurrence vor, die aus dem Messergebnis berechnet wird.

Eine Zertifizierung der oben genannten Ergebnisse auf IBMQ Ehningen ist derzeit nicht möglich, da die Hardware nicht in der Lage ist, die Eigenzustände der Ketten von NV-Zentren mit ausreichender Genauigkeit zu berechnen. Dennoch haben wir die Messung der multipartiten Concurrence für einen dreiteiligen GHZ-Zustand implementiert, wie in Abb. 7 gezeigt. Während dieser Schaltkreis und die anschließende Nachbearbeitung auf IBMs Simulator das richtige Ergebnis liefern, sind die Fehlerraten und der damit

verbundene Rauschpegel auf IBMQ Ehningen zu hoch, um das Ergebnis dort auch nur annähernd zu erreichen. Alternative Simulationen, die wir auf IBMQ Ehningen durchgeführt haben, um den Rauschpegel der Hardware zu bestimmen, sind in Abschnitt 2.2.2 erläutert.

Fazit:

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass wir die Dynamik einer Spin-Kette mit Kopplungsparametern simuliert haben, die mit experimentellen Ergebnissen für NV-Zentren gut übereinstimmen (MS 1.3). Wir haben den Verschränkungsgehalt der Eigenzustände einer solchen Spin-Kette quantifiziert und charakterisiert, insbesondere als Funktion des Abstands zwischen den NV-Zentren (MS 3.1). Wir haben unsere Werkzeuge angewendet, um die Verschränkung in den Eigenzuständen längerer Ketten von NV-Zentren zu quantifizieren und zu klassifizieren, und haben die Widerstandsfähigkeit dieser Quantenkorrelationen gegenüber Unordnung in der Position der Zentren untersucht (MS3.2).

Meilensteine:

Der Meilenstein 3.1 „Verschränkungsspektren parametrisiert durch Kopplungsparameter (M6)“ wurde vollständig erreicht. Im Rahmen der Masterarbeit von Mehdi Belhaj [Bel21] wurde der Meilenstein MS1.3 „Simulation eines Spinmodells auf klassischem Computer (M12)“ erreicht.

Die Meilensteine 3.2a „Skalierungsverhalten der Verschränkungsspektren (M10)“ und 3.2b „Skalierungsverhalten der Verschränkungsspektren (M10)“ wurden im Rahmen der Masterarbeit von Michael Minke [Min23] erreicht.

Während unser Modell zwar grundsätzlich auf dem IBMQ-System implementiert werden konnte, sind seine Eigenzustände für die Maschine aufgrund ihrer begrenzten Präzision und hohen Fehlerraten nicht direkt berechenbar.

Für die Berechnung der Verschränkung in einem gegebenen Eigenzustand, dem Kern von MS3.3, haben wir einen Schaltkreis geschrieben, der die multipartite Concurrence von einem dreiteiligen GHZ-Zustand bestimmt. Wie erwartet, liefert dieser Schaltkreis das korrekte Ergebnis auf dem Simulator, scheitert aber auf IBMQ Ehningen aufgrund des Rauschens der Maschine.

Der Ersatz für MS3.3 "Zertifizierung des auf IBMQ-System erzielten Verschränkungsgrades (M18)", bestehend aus exemplarischen, aber nicht trivialen Algorithmen für das Benchmarking von IBMQ Ehningen, ist in Abschnitt 2.2.2 dokumentiert.

- [Ber11] A. Bermudez et al., 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 centres: Characterization and simulation for real-world quantum computing prototypes, M.Sc. Thesis, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, 2023
- [Min05] F. Mintert *et al.*, Physics Reports **415**, 207 (2005).
- [Ben06] I. Bengtsson and K. Życzkowski, *Geometry of Quantum States* (Cambridge University Press, Cambridge, 2006).

2.2.1 Elektronenstruktur einfacher Modelle (FHIWM)

Unsere Projektarbeiten zum Quantencomputing zielten darauf ab, einfache Modellsysteme auf einen Quantenschaltkreis abzubilden und dessen Grundzustand mittels des *Variational Quantum Eigensolvers* (VQE) zu bestimmen. Bei dieser hybriden Berechnungsmethode wird ein parametrisierter Quantenschaltkreis als Ansatz für die gesuchte Lösung gewählt. Die optimalen Parameterwerte dieses Ansatzes werden durch Minimierung eines (Energie-)Erwartungswertes bestimmt. Hierbei wird der Erwartungswert auf dem Quantencomputer berechnet, der Optimierungsalgorithmus wird hingegen auf dem klassischen Computer ausgeführt.

Als erstes Testsystem haben wir das Wasserstoffmolekül ausgewählt, dessen Elektronenstruktur wir mit einem vier Qubits umfassenden Schaltkreis abgebildet haben. Abb. 8 zeigt eine Übersicht der Ergebnisse einer Parameterstudie, in der wir die Performance von 14 verschiedenen hardwareeffizienten Ansätzen für den parametrisierten VQE-Schaltkreis sowie 5 verschiedene Optimierungsalgorithmen miteinander verglichen haben. Während bei der Verwendung des deterministischen state-vector-Simulators (Abb. 8 (a)) die meisten Optimierer den Grundzustand mit hoher Genauigkeit finden, sofern der Ansatz eine ausreichende Flexibilität aufweist, sind beim probabilistischen QASM-Simulator nur noch der COBYLA- und der SPSA-Algorithmus erfolgreich, da diese in der Lage sind, mit statistisch variierenden Daten umzugehen. Der QASM-Simulator bildet hierbei den statistischen Prozess der Messung des Quantenregisters ab, nicht jedoch weitere Rauschquellen wie Gate- oder Messfehler. Kommen letztere hinzu, steht bei höheren Fehlerraten bisher nur der SPSA als geeignetes Werkzeug übrig.

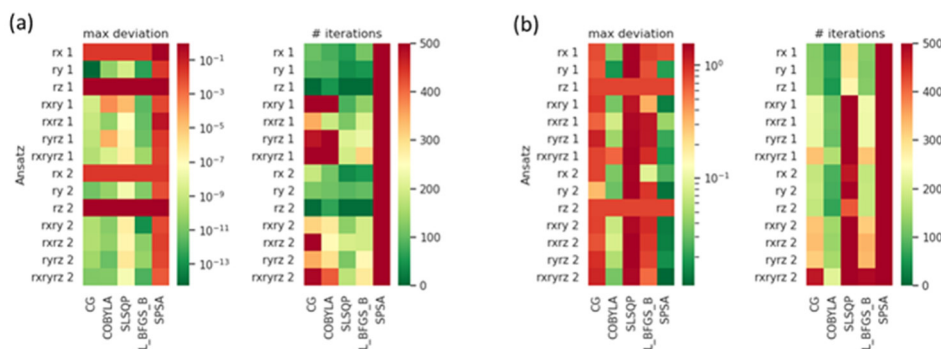


Abbildung 8: Ergebnisse einer Parameterstudie zum Vergleich unterschiedlicher Ansätze (y-Achsen) und Minimierungsalgorithmen (x-Achsen) auf dem (a) Statevector-Simulator und (b) dem probabilistischen QASM-Simulator. Gezeigt sind die Abweichungen in Bezug auf das exakte Ergebnis sowie die Anzahl der benötigten Iterationsschritte.

Um hybride Berechnungsverfahren effizienter umsetzen zu können, hat IBM Ende September 2021 die *Qiskit Runtime* Funktionalität auf den IBMQ-Systemen eingeführt. Wir haben daraufhin die VQE-Berechnung in ein Runtime-Programm überführt und auf dem IBMQ getestet. Abbildung 9 zeigt beispielhaft den Konvergenzverlauf einer Grundzustandsenergieminimierung, abermals für das H_2 -Molekül. Hier wird die Schwierigkeit deutlich, die sich bei der Verwendung eines fehlerbehafteten probabilistischen Systems

ergibt. Es gibt bei der Verwendung des SPSA-Optimierers kein klassisches Abbruchkriterium in Form eines Grenzwertes der Änderung des Funktionswertes, der zum Abbruch der Iterationsschleife und zum Endergebnis führt. Je nachdem, an welcher Stelle man den SPSA-Algorithmus abbricht, kann man sehr unterschiedliche Ergebnisse erhalten. Die Berechnung von geeigneten Mittelwerten oder das Aufzeichnen des entlang der Iterationshistorie minimalen Funktionswertes können brauchbare Lösungswege sein (siehe Werteliste in Abb. 9). Bemerkenswert ist, dass letztgenannter Wert aufgrund der Fehlerbehaftung des Systems häufig unterhalb des exakten Minimumwertes liegt. Wir haben uns für die folgenden Untersuchungen auf die Bildung eines Mittelwertes der letzten Iterationsschritte festgelegt.

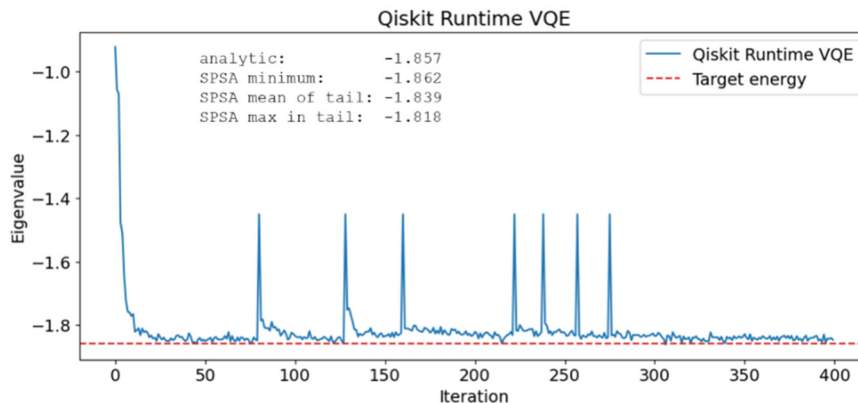


Abbildung 9: Konvergenzverlauf einer Energieminimierung mittels VQE-Algorithmus auf IBMQ Montreal unter Verwendung des SPSA-Optimierers.

Als nächsten Schritt haben wir uns die Berechnung des gesamten Energiespektrums, also einschließlich Anregungsenergien, vorgenommen. Dazu haben wir das iterative *Variational Quantum Deflation (VQD)* Verfahren implementiert und getestet. Bei diesem Verfahren werden die angeregten Zustände sukzessive durch einzelne VQE-Rechnungen bestimmt, wobei jeweils die Orthogonalität des neu zu suchenden Zustandes mit allen bisher bestimmten Eigenzuständen durch einen zusätzlichen Strafterm im Energiefunktional zu erzwingen versucht wird. Dieses Verfahren funktioniert mit dem state-vector-Simulator zuverlässig. Auch der QASM-Simulator liefert für kleine Systeme mit ausreichend hoher Anzahl an shots gute Ergebnisse. Sobald jedoch die Unschärfe der einzelnen Eigenwerte und Eigenfunktionen zu groß wird, sorgt das iterative Vorgehen dafür, dass sich die Fehler aufsummieren und somit vervielfachen. Insbesondere hat sich herausgestellt, dass das Verfahren große Schwierigkeiten damit hat, entartetete Eigenwerte aufzulösen.

Wir haben als zwei Modellsysteme jeweils drei bzw. vier paarweise gekoppelte fermionische Partikel (bzw. Sites) untersucht. Diese sind in Abb. 10 mit ihrem analytisch berechenbaren Spektrum dargestellt. Für die Berechnung des Spektrums auf dem Quantencomputer betrachtet man die Unterräume zu fester Teilchenzahl N und nutzt einen teilchenzahlerhaltenden Ansatz für die Wellenfunktion. Histogramme der mit dem VQD-Verfahren bestimmten Spektren des fermionischen Dreiecks sind in Abb. 11 zusammengefasst. Hierfür wurden SPSA mit 100 und 200 Iterationsschritten sowie Cobyla als Optimierer bei unterschiedlicher Shotanzahl n_s sowohl mit dem QASM-Simulator als auch für ein Fake-Backend getestet. Letzteres bildet ein Fehlermodell zur Beschreibung der Gate- und Messfehler der Quantumhardware ab. So bewirkt die Anwendung der m3-Messfehlermitigation auf dem Fake-backend eine deutliche Verbesserung.

Obwohl die VQD-Methode mit ausreichend hoher Shotanzahl im Mittel das Energiespektrum recht gut reproduziert, zeigen einzelne Rechnungen doch immer

wieder deutliche Ausreißer. Dies ist für den fermionischen Tetraeder noch wesentlich ausgeprägter.

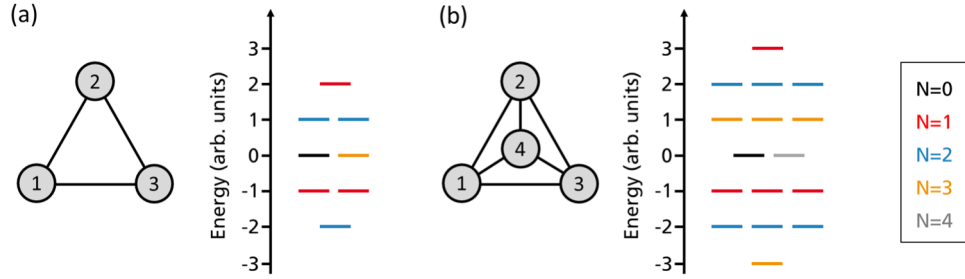


Abbildung 10: Schematische Darstellung der zwei betrachteten Modellsysteme und ihrer Energiespektren: (a) Fermionisches Dreieck, (b) Fermionischer Tetraeder. Die Energieniveaus sind zumeist zweifach oder dreifach entartet.

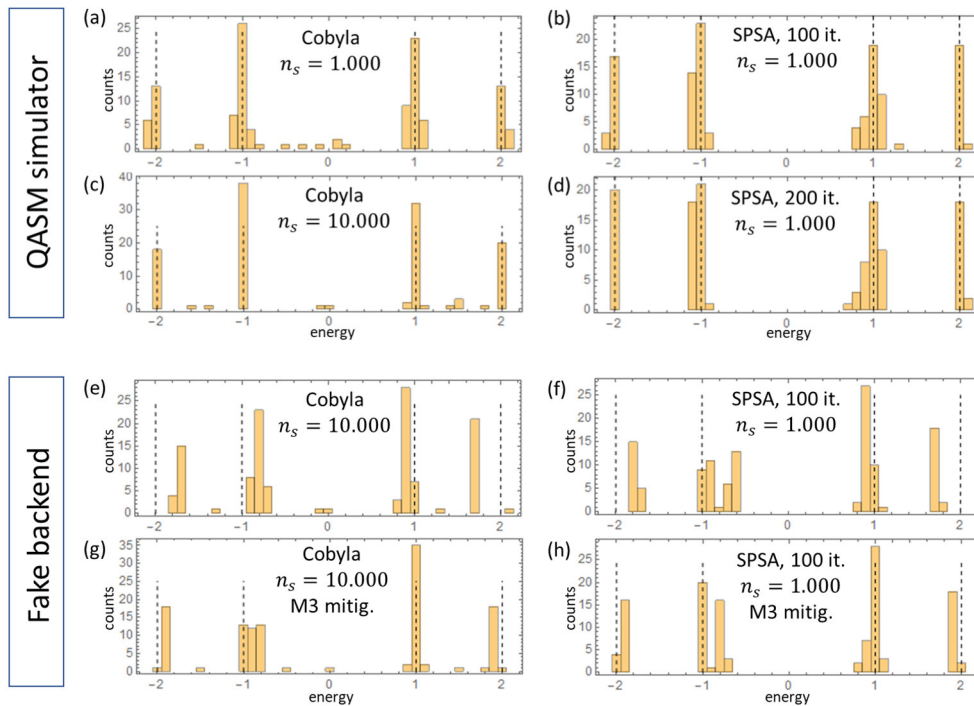


Abbildung 11: Histogramme der mittels VQD berechneten Energieeigenwerte des fermionischen Dreiecks ermittelt aus jeweils 20 Rechnungen. Die Balkenbreite beträgt 0.1. Die gestrichelten Linien zeigen die Lage der exakten Werte (-2, -1, 1 und 2). Es wurden SPSA mit 100 und 200 Iterationsschritten sowie Cobyla als Optimierer bei unterschiedlicher Shotanzahl n_s getestet. Auf dem Fake-backend bewirkt die Anwendung der m3-Messfehlermitigation eine deutliche Verbesserung.

2.2.2 Gekoppelte Fermionen (UniFr)

Unsere Analyse basiert auf dem Hamiltonian dreier paarweise gekoppelter Fermionen, dem sogenannten Fermionischen Dreieck H_{FT} , der durch Jordan-Wigner-Transformation aus dem dreieckigen Tight-Binding-Hamiltonian gewonnen wird.

Im ersten Teil der Analyse verwendeten wir bekannte Schaltungen, die den Grundzustand $|W\rangle$ von H_{FT} genau präparieren, und messen die erwartete Grundzustandsenergie $\langle W|H_{FT}|W\rangle = -2$ (in Einheiten der Sprungkonstanten t). Die Wiederholung dieses Präparations- und Messschemas auf dem stochastischen "QASM"-Simulator von QISKIT

ergab eine schmale um -2 zentrierte Verteilung der Messwerte, wobei die nicht verschwindende Breite der Verteilung von der iterativen Messung separater Pauli-Strings herrührt, aus denen H_{FT} aufgebaut ist, sowie von der folgenden Addition der Ergebnisse. Die gleiche Simulation auf IBMQ Ehningen ergab hingegen etwas breitere Histogramme, die um Spitzen herum verteilt sind, die ungefähr im Bereich $[-1,9; -1,3]$ driften [Abb. 12 (a)]. Um den Einfluss des Gatterrauschens (welches Fehler in der Zustandspräparation verursacht) und des Auslesefehlers zu bestimmen, haben wir die gemessene Grundzustandsenergie gegen den gesamten Auslesefehler [Abb. 12 (c)] sowie gegen den gesamten Gatterfehler [Abb. 12 (d)] aufgetragen. Diese Analyse zeigt jedoch keine signifikante Korrelation zwischen den Mengen.

Um die Zuverlässigkeit von IBMQ Ehningen zu testen, haben wir das obige Präparations- und Messschema über Zeitspannen von 6-8 Stunden für verschiedene Triplets wiederholt. Aus dieser Analyse erhielten wir Größenschwankungen, die mit dem oben beschriebenen Histogramm kompatibel sind. Merkmale, die wir für einen signifikanten Teil der Simulationen beobachtet haben, sind plötzliche Ausreißer [Abb. 13 (b)] sowie Oszillationen über einen Zeitraum von etwa 2 Stunden [Abb. 13 (a)]. Ob diese Phänomene durch die umgebende Steuerungselektronik verursacht werden oder Manifestationen einer zufälligen, aber quantenmechanischen Dynamik der Qubits sind, bleibt für uns als Benutzer leider eine offene und nicht beantwortbare Frage.

Unser zweites Experiment auf dem IBMQ Ehningen bestand darin, den Variational Quantum Eigensolver (VQE) auszuführen, um den Grundzustand von H_{FT} zu finden. Die QISKIT-Implementierung dieses Algorithmus stützt sich auf die klassische "simultaneous perturbation stochastic approximation" (SPSA), um die Suche nach optimalen Winkeln zu steuern, die den Quantenschaltkreis parametrisieren, der letztendlich den Zustand $|W\rangle$ erzeugen soll. Wir haben eine eigene Version des SPSA-Optimierungsalgorithmus entwickelt, der die Metrik des Raums der optimalen Winkel berücksichtigt. Wir haben den VQE mit beiden SPSA-Varianten für mehrere zufällige Ausgangszustände ausgeführt und die Konvergenzgeschwindigkeit über die Anzahl der benötigten Iterationen analysiert. Abb. 14 (b) zeigt das Histogramm der konvergierten Grundzustandsenergien, welches mit den Histogrammen vom ersten Teil zu vergleichen ist, und Abb. 14 (a) zeigt die Korrelation der gemessenen Energie mit dem gesamten Gatterfehler.

Obwohl hauptsächlich die Charakterisierung des IBMQ Ehningen in unserem Fokus lag, haben wir auch Simulationen auf anderen Maschinen (IBMQ Mumbai, IBMQ Auckland) durchgeführt, sowohl zu Test- als auch zu Vergleichszwecken.

Das dritte Experiment, welches wir von September bis November 2022 auf IBMQ Ehningen durchgeführt haben, zielte darauf ab, die für das erste Experiment gesammelten Statistiken zu erweitern und die Auswirkungen der Fehlermitigation auf die beobachteten Phänomene (Driften der Energieerwartungswerte, Oszillationen, Ausreißer) zu untersuchen. Zu diesem Zweck haben wir das in QISKIT implementierte Messfehlermitigationsprotokoll verwendet, das darauf beruht, a posteriori die korrekte Messung mithilfe einer Kalibrationsmatrix zu bestimmen, die die Auslesefehler der beteiligten Qubits berücksichtigt. Die Anwendung dieses Schemas verschiebt das Histogramm tatsächlich statisch in Richtung des korrekten theoretischen Wertes, ohne jedoch seine Breite zu verändern [Abb. 12 (b)]. Analog dazu werden weder Ausreißer noch Oszillationen durch das Schema korrigiert, was darauf hindeutet, dass diese Phänomene entweder mit externen einmaligen Ereignissen mit wenigen Qubits oder mit dem falschen Zustand des Registers zusammenhängen könnten. Darüber hinaus ermöglichte uns eine genauere Analyse der Kalibrationsmatrix, den Einzel-Qubit-Auslesefehler unabhängig abzuschätzen. Dieser zeigt Zeitschwankungen, die jedoch konstruktionsbedingt von dem QISKIT-Interface als konstant für die gesamte Simulation gemeldet werden.

Die Analyse des ersten und dritten Experiments wurde online in [Woi23] veröffentlicht.

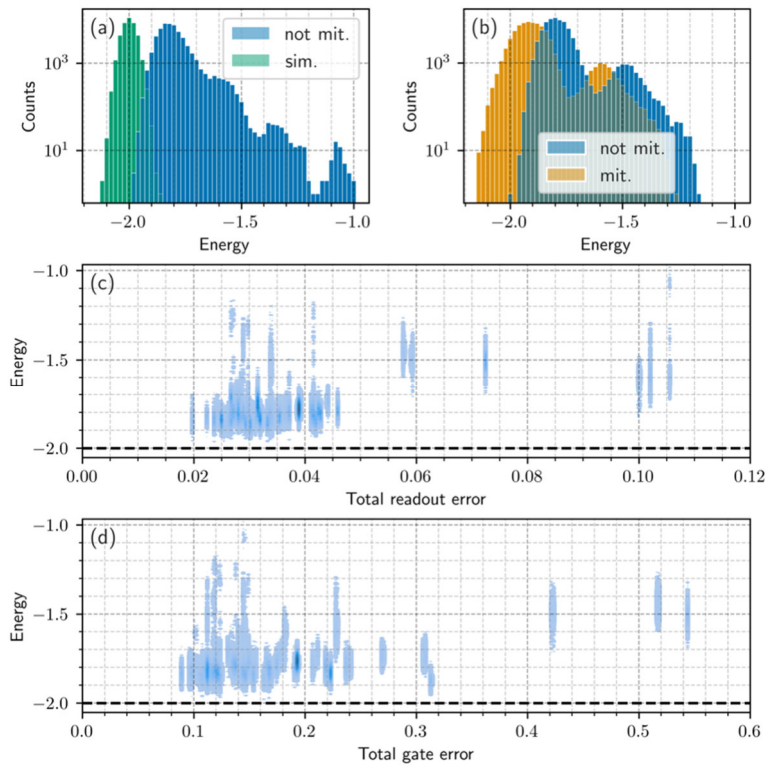


Abbildung 12: (a) Vergleich zwischen dem Histogramm der nicht-fehlermitigierten Grundzustandsenergien, die im Februar und März 2022 auf IBMQ Ehningen erhalten wurden (blau, "not mit.") und der 39750 Energien, die auf IBMs Simulator berechnet wurden (grün, "sim. "). (b) Vergleich zwischen den Histogrammen der auf IBMQ Ehningen zwischen September und Dezember 2022 erhaltenen Energien (blau, "not mit.") und die entsprechend Fehler-verminderten Werte (orange, "mit. "). (c,d) Dichtedia-gramme der auf IBMQ Ehningen gemessenen Energien, in Abhängigkeit des (c) gesamten Auslesefehlers und (d) des gesamten Gatter-Fehlers. Diese Fehler wurden für jeden Job berechnet, indem die entsprechenden Fehler, die vom IBM-Interface zum Zeitpunkt der Berechnung gemeldet wurden, aufsummiert wurden. Die gestrichelte Linie bei -2 gibt den erwarteten Wert von $\langle W | H_{FT} | W \rangle$ an. Dunklere (hellere) Farben zeigen eine höhere (niedrigere) Konzentration von Proben an, bei denen eine gegebene Energie mit dem zugehörigen gesamten Gatter- oder Auslesefehler aufgezeichnet wurde. Reproduziert aus [Woi23].

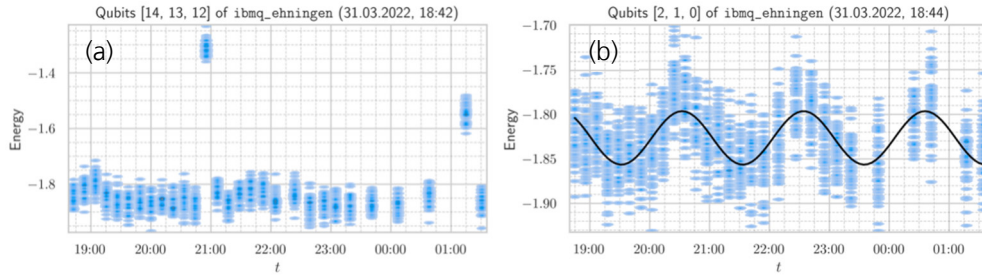


Abbildung 13: Zeitabhängigkeit der gemessenen Grundzustandsenergien $\langle W|H_{FT}|W\rangle$, die (a) Schwingungen mit einer Periode von etwa zwei Stunden [121,8(9) Minuten im gezeigten Beispiel] und (b) Ausreißer aufweisen. Reproduziert aus [Woi23].

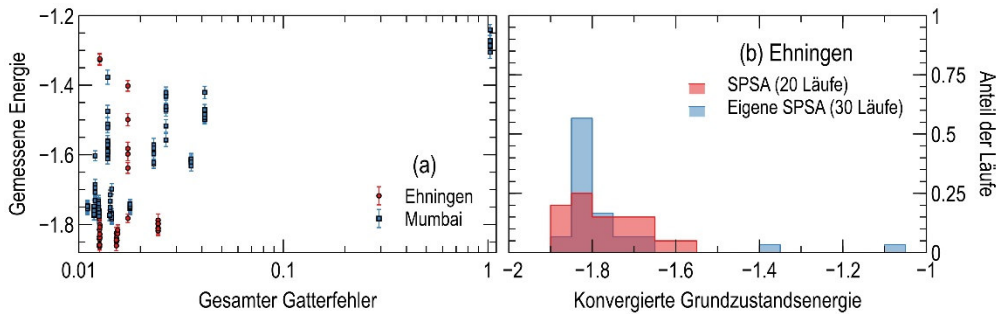


Abbildung 14: (a) Korrelation zwischen der gemessenen Energie $\langle W|H_{FT}|W\rangle$ und dem gesamten Gatterfehler des verwendeten Schaltkreises, der den Zustand $|W\rangle$ präpariert. Die roten Kreise (blaue Quadrate) zeigen Daten von IBM Q Ehningen (Mumbai). (b) In Rot (Blau) das Histogramm der konvergierten Grundzustandsenergien, die durch 20 (30) Durchläufe von VQE mit SPSA (eigene metrik-erhaltende SPSA) erhalten wurden, ausgehend von einem Zufallszustand für jeden Durchlauf. Da wir Samples unterschiedlicher Größe haben, geben wir den Anteil aller Läufe in jedem Balken an.

[Hof22] L Hoffmann, VQE on NISQ: Benchmarking Noisy Quantum Hardware with a Hybrid Quantum Algorithm, B.Sc. Thesis, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, 2022

[Woi23] Andreas JC Woitzik, Lukas Hoffmann, Andreas Buchleitner, Edoardo G Carnio, An Energy Estimation Benchmark for Quantum Computers, arXiv:2302.04144

2.2.3 Simulation offener Quantensysteme (UniUL)

Wir haben uns zunächst auf die Simulation von offenen Quantensystemen auf Quantencomputern mittels Kollisionsmodellen konzentriert [Gar20]. Dabei wird der unitäre Zeitentwicklungsoperator durch die Trotter-Suzuki-Zerlegung in Unteroperationen zerlegt, welche effektiv auf dem Quantencomputer programmiert werden können. In diesem Zusammenhang haben wir die dipolare Wechselwirkung $H_I = A_{zz}S_zI_z$ zwischen der z-Komponente des NV-Zentrums (S_z) und der des ^{13}C -Nuklearspins (I_z) simuliert. Die unitäre Matrix des Zeitentwicklungsoperators für dieses

System ist diagonal und kann sehr einfach in grundlegende Quantengatter auf dem IBMQ zerlegt werden. Nach Präparation eines Superpositionszustands im Systemqubit, welcher das NV-Zentrum beschreibt, wird die Wechselwirkung mit einem umliegenden Spinbad durch sukzessive Kollisionen mit verschiedenen Hilfsqubits im Quanteregister simuliert. In der Abb. 15 (a) zeigen wir den Zerfall der Nebendiagonalelemente der Dichtematrix (Kohärenzen) als Funktion der Zeit. Jeder Datenpunkt steht hierbei für eine Kollision mit einem Nuklearspin (simuliert durch einen Hilfsqubit). Neben der sukzessiven Kollision nicht-wechselwirkender Qubits können auch die Effekte von Korrelationen innerhalb des Spinbades simuliert werden. Dies führt zu einem nicht-Markovschem offenen Quantensystem, da Informationen vorheriger Kollisionen spätere Kollisionen beeinflussen können. Wir zeigen die Resultate für solch ein System in Abb. 15 (b). Für kompliziertere dissipative Wechselwirkungen führt die für Kollisionsmodelle nötige Trotter-Suzuki-Zerlegung zu sehr tiefen Quantenschaltkreisen. Diese sind nur unzureichend auf den heutigen NISQ-Plattformen berechenbar. Deshalb haben wir gegen Ende des SiQuRe Projekts vermehrt an effizienteren Quantensimulationsmethoden für offene Quantensysteme gearbeitet. Dabei ist es gelungen, einen Formalismus zu erarbeiten der derzeit - im Zuge des SiQuRe II Projekts - zu vielversprechenden Ergebnissen auf der Plattform in Ehningen führt. Die finalen Ergebnisse dieser Arbeit sind deshalb Bestandteil von SiQuRe II. Die Konzeption des Projekts ist jedoch eine direkte Folge der oben angesprochenen Probleme bei der Anwendung von Kollisionsmodellen auf NISQ-Plattformen. Im Speziellen nutzen wir aus, dass ein offenes Quantensystem, welches zu Beginn seiner Zeitentwicklung von der dissipativen Umgebung entkoppelt ist, als eine „Completely-Positive-Trace-Preserving Map“ (CPTP) beschreibbar ist. Falls solch eine Map außerdem markovsches Verhalten widerspiegelt, kann sie wiederum durch eine einfache Gatesequenz auf einen Quantencomputer implementiert werden [Wan13]. Die Inverse einer solchen Map ist jedoch nicht CPTP. Wir haben ein Verfahren entwickelt, mit welchem sich solch eine Inverse effizient auf einer NISQ-Plattform implementieren lässt. Unsere Methode, kann demnach auch zur Mitigation von markvoschen Fehlerquellen, welche inhärent auf dem Quantencomputer vorhanden sind, benutzt werden.

[Wan13] D. Wang, et al. Phys. Rev. Lett. **111**, 130504 (2013)

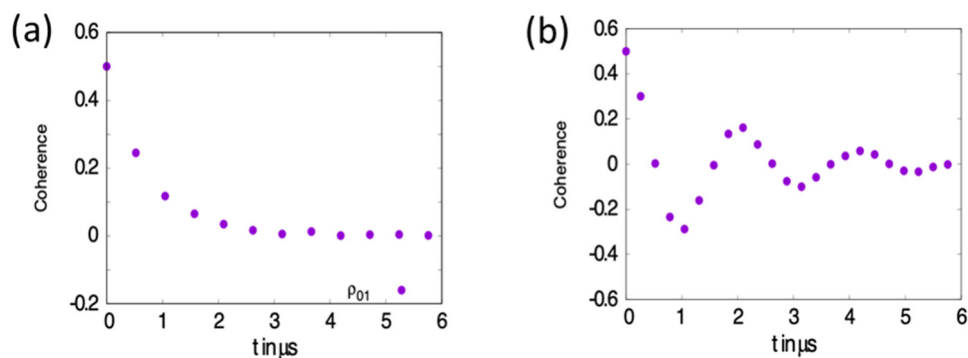


Abbildung 15: Zerfall der Nebendiagonalelemente der Dichtematrix eines NV-Zentrums, simuliert mittels eines Kollisionsmodells. Benutzt wurde der Simulator für den IBMQ. (a) Markovsches Kollisionsmodell. (b) Nicht-Markovsches Kollisionsmodell.

3 Ausblick auf die zweite Förderphase: SiQuRe II

Ausblick auf die zweite
Förderphase: SiQuRe II

Im Zentrum der theoretischen Untersuchungen des Fortsetzungsprojektes SiQuRe II, im Rahmen der zweiten Förderperiode des KQCBW, stehen Quantenregister, die sich aus dem Elektronenspin eines NV-Zentrums und einigen wenigen Kernspins von umliegenden ^{13}C Atomen in unmittelbarer Nähe zusammensetzen (NVCR). Darüber hinaus werden wir die Kopplung mehrerer dieser NVCR zu größeren Qubit-Registern betrachtet, wie in Abb. 16 skizziert. Drei Arbeitspakete befassen sich mit (1) der Modellierung eines und mehrerer NVCR unter dephasierenden Umgebungseinflüssen, insbesondere dem Spinbad bestehend aus weiteren umliegenden ^{13}C und ^{14}N Atomen, (2) dem Entstehen resilienten und zur Manipulation als Rechenzustand geeigneter Quantenzustände in einem hochgradig wechselwirkenden Multispinsystem, sowie (3) der Ausgestaltung und Optimierung von Quantengattern, die auf NVCR ausgeführt werden können.

Diese Arbeiten bauen auf den Erkenntnissen der ersten Förderperiode auf, insbesondere was sowohl die Methodik in der Simulation der dissipativen Umgebungseinflüsse als auch die Modellierung von Quantengattern anbelangt. Für die Berücksichtigung von Materialkenngrößen und deren Modulation aufgrund von Kristallstrukturdefekten kann ebenfalls auf die umfangreichen Ergebnisse der atomistischen Simulation von SiQuRe(I) zurückgegriffen werden.

Auch bezüglich der unterschiedlichen Anwendungen der IBM Q-Hardware werden wir auf den Ergebnissen von SiQuRe(I) Erkenntnissen aufbauen. Insbesondere untersuchen wir (1) die Implementierung weiterer einfacher Modelle der theoretischen Festkörperphysik, (2) die Quantifizierung des effektiv erreichbaren Verschränkungsgehalts bei der Präparation von Multi-Qubit-Zuständen und (3) die Frage, wie sich offene Quantensysteme auf den IBM Q abbilden lassen und dieser als Simulator speziell gestalteter dissipativer Dynamik genutzt werden kann.

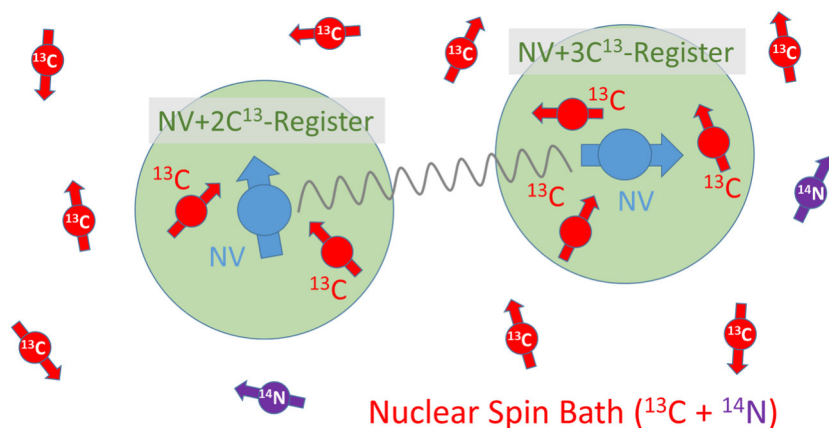


Abbildung 16: Schematische Darstellung von zwei benachbarten, wechselwirkenden NV- ^{13}C -Registern. Die ^{13}C -Spins in den grünen Kreisen liegen „nah“, d.h. nur wenige Ångström entfernt von dem jeweiligen NV-Zentren (starke HF-Kopplung). Alle anderen Kernspins sind „weit“ (mehrere Nanometer) entfernt (schwache HF-Kopplung).

4.1 Publikationen

- M. Xu, Y. Yan, Q. Shi, J. Ankerhold, and J. T. Stockburger, Taming quantum noise for efficient low temperature simulations of open quantum systems, *Phys. Rev. Lett.* **129**, 230601 (2022).
- R. Ghassemizadeh, W. Körner, D. F. Urban, C. Elsässer, Stability and electronic structure of NV- centers at dislocation cores in diamond, *Phys. Rev. B* 106,174111 (2022).
- A. J. C. Woitzik, L. Hoffmann, A. Buchleitner, E. G. Carnio, *An Energy Estimation Benchmark for Quantum Computers*, arXiv:2302.04144
- D. Maile and J. Ankerhold, Performance of quantum registers in diamond in presence of spin impurities , arXiv e-prints, 2211.06234v2
- M. A. Belhaj, Quantum Control of Nitrogen-Vacancy Centre Arrays, M.Sc. Thesis, Albert Ludwigs-Universität Freiburg, 2021
- A. M. Minke, Entanglement inscribed in a chain of NV centres: Characterization and simulation for real-world quantum computing prototypes, M.Sc. Thesis, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, 2023
- L. Hoffmann, VQE on NISQ: Benchmarking Noisy Quantum Hardware with a Hybrid Quantum Algorithm, B.Sc. Thesis, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, 2022
- Beitrag von C. Elsässer im Jahresbericht 2020/2021 des Fraunhofer IAF, Seite 91.
- Beitrag von C. Elsässer zu einem Artikel im Magazin LEICHT.WERT der Leichtbau BW, Januar 2021, Seiten 12-14.
- Beitrag von D. Urban im Jahresbericht 2021 des Fraunhofer IWM

4.2 Vorträge

- Aalto University, Helsinki, Colloquium, August 2021, J. Ankerhold, "Quantum noise, non-Markovianity, and the dynamics of open quantum systems"
- Jahrestagung PhotonicNet Deutschland, November 2021, J. Ankerhold, eingeladener Plenarvortrag „Quantentechnologien – Quo vadis?“
- MTU/IWM Online workshop, Dezember 2021, Vortrag D. Urban, "Quantum Computing 2021"
- Jahrestreffen des Netzwerks Quantentechnologie Baden-Württemberg (QTBW), Januar 2022, Reisingburg/Günzburg, J. Ankerhold (Sprecher des Netzwerks), D. Urban (Vortrag)
- Ulmer Universitätsgesellschaft, März 2022, J. Ankerhold, eingeladener Abendvortrag, „Als die Quanten das Rechnen lernten“

- Tagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft der Sektion der kondensierten Materie in Regensburg (September 2022), D. Maile, Vortrag: „Fidelities of quantum algorithms for a spin register in diamond in the presence of magnetic impurities“.
- Tagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft der Sektion der kondensierten Materie in Regensburg (September 2022), R. Ghassemizadeh, Vortrag: „NV center in the vicinity of linear defects in diamond“.
- KAIST Seminar (18.10.2022), A. Woitzik, Vortrag: “An energy estimation benchmark for quantum computers”.
- KQCBW Developer Conference (20.10.2022), D. Maile, Vortrag: „Simulating Open Quantum Systems with NISQ Devices“.
- KQCBW Developer Conference (20.-21.10.2022), E. Carnio, Poster: “Benchmarking noise in IBM Quantum System One, Ehningen”
- CZS Center QPhoton Networking Symposium (15.12.2022), D. Maile, Vortrag: „Performance of quantum registers in diamond in the presence of spin impurities“.
- DPG-Frühjahrstagung der Sektion Atome, Moleküle, Quantenoptik und Photonik (5.-10.3.2023), A. Woitzik, Vortrag: “An energy estimation benchmark for quantum computers”.
- DPG-Frühjahrstagung der Sektion Atome, Moleküle, Quantenoptik und Photonik (5.-10.3.2023), R. Ghassemizadeh, Vortrag: „Perspectives for a solid-state-based quantum register based on NV centers aligned along linear crystal defects in diamond“

Aktivitäten der Gruppe Buchleitner (Andreas Woitzik, Doktorand) in Bezug auf Lehrer- und Schülerfortbildung im Jahr 2021:

- Workshop auf der DPG-Schülertagung zur Quanteninformationsverarbeitung
- Unterrichtseinheit zur Quanteninfo im Physikleistungskurs bei Herrn Dr. Kornhaß am GSG-Waldkirch
- Besuch und Laborführung Leistungskurs von Herrn Dr. Kornhaß im Institut
- Unterrichtsstunde zur Quanteninfo im Physikleistungskurs Roßwog am THG Freiburg St. Georgen (Hochschulpartnerschule)
- Austausch mit Schülerforschungszentrum phaenovum in Lörrach
- Entwicklung Web-Applet Quantum Penny Flip gehostet mit Geld des Lehrpreises (<https://www.quantumpennyflip.com/>). Es erscheint nun auch ein Artikel dazu in der Hello World, einem der reichweitestärksten Informatikdidaktikjournalen für Praktiker (<https://helloworld.raspberrypi.org/>)

4.3 Mitwirkung in Gremien

- Prof. Ankerhold ist Co-Sprecher des Stuttgart-Ulmer Quantenzentrums IQST und Sprecher des Netzwerks QTBW zu Quantentechnologien in 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 des Quantum Business Network (<https://qbn.world/>). Diese Vereinigung zur Verbreitung und Sichtbarmachung von Quantencomputing und weiteren Quantentechnologien bei Wirtschaftsunternehmen bietet regelmäßig Workshops und Vernetzungstreffen zu verschiedenen Bereichen des Quantencomputing an. Die Teilnehmenden kommen aus Industriefirmen und Forschungsinstituten.

4.4 Im Themenfeld Quantencomputing geschulte Personen

- IBM Qiskit-Kurs Quantum Fridays (12-wöchig, 2021)
Daniel Urban, Aljoscha Baumann (IWM)
Mehdi Belhaj, Eric Brunner, Edoardo Carnio, Sophia Ohnemus, Lukas Pausch, Vyacheslav Shatokhin, Andreas Woitzik (Uni Freiburg)
Jürgen Stockburger (Uni Ulm)
- QC-Basiserschulung (IAF/IAO 2022)
Reyhaneh Ghassemizadeh, Daniel Pfalzgraf, Aljoscha Baumann, Patrick Sell (IWM)
Dominik Maile, Jürgen Stockburger, Dhruv Deshmukh, Mirko Rossini, Dennis Herb, Brecht Donvil (Uni Ulm)
- IBM Quantum Webinar (Surface codes, Quantum Kernels, hardware control, Qiskit Runtime)
- IBM/FhG technical enablement workshop VQE/VQD