II. Eingehende Darstellung

Das Hubbard-Modell beschreibt Quantenmaterialien mit starken elektronischen Korrelationen. Es erlangte besondere Bedeutung im Zusammenhang mit der Hochtemperatur-Supraleitung – einem außergewöhnlichen Phänomen, das in bestimmten Materialien auftritt, jedoch bis heute nicht vollständig verstanden ist. Vom zweidimensionalen Hubbard-Modell auf einem quadratischen Gitter wird erwartet, dass es die wesentlichen physikalischen Eigenschaften von Hochtemperatur-Supraleitern erfasst. Das Verständnis großer Teile seines Phasendiagramms ist jedoch nach wie vor begrenzt. Darüber hinaus kann das Hubbard-Modell in unterschiedlichen Varianten auftreten, etwa durch die Einbeziehung mehrerer Bänder, alternativer Gittergeometrien oder neuartiger topologischer Strukturen. Dadurch eignet es sich zur Beschreibung einer Vielzahl exotischer Materiezustände und ermöglicht die Erforschung neuer Phänomene in den Materialwissenschaften.

Die Lösung des Hubbard-Modells mit klassischen Computern ist äußerst anspruchsvoll, da der Rechenaufwand exponentiell mit der Systemgröße zunimmt. Besonders schwierig ist die Untersuchung von Zuständen bei endlicher Temperatur und ihrer Dynamik, die sowohl wissenschaftlich als auch technologisch von großem Interesse sind. Daher gilt die Lösung des Hubbard-Modells als eines der zentralen offenen Probleme der modernen Physik, dessen Verständnis entscheidend für die Entwicklung zukünftiger funktionaler Materialien ist.

Das übergeordnete Ziel von EQUAHUMO bestand darin, effiziente Quantenalgorithmen für Hubbard-Modelle bei endlichen Temperaturen zu entwickeln, um Fragestellungen zu lösen, die mit klassischen Methoden nicht zugänglich sind. Das Hauptziel dieses Teilprojekts war die Entwicklung solcher Quantenalgorithmen. Diese sollten sowohl auf analogen als auch auf NISQ-Geräten anwendbar sein und sich auf Fragestellungen konzentrieren, die das Gittermodell und seine Varianten bei endlichen Temperaturen betreffen. Die Algorithmen sollten es ermöglichen, physikalische Größen wie Magnetisierung oder Leitfähigkeit in statischen und dynamischen Situationen zu berechnen. Während der Rechenaufwand klassischer Methoden exponentiell mit der Anzahl der Gitterplätze wächst, sollte er für Quantenalgorithmen nur polynomial ansteigen und somit einen echten Quantenvorteil bieten.

Ziel dieses Teilvorhabens ist es, effiziente Quantenalgorithmen mit potentiell geringeren formalen Bedingungen als bisher existierende, zur Lösung des zweidimensionalen Hubbard Modells bei endlichen Temperaturen zu entwickeln. Dazu wurden neue

Zugänge entwickelt, die auf Konzepten der Jarzynski Gleichung, Purifikation und der Realisierung von präthermalen thermischen Zuständen basieren.

Quantenalgorithmen zur Berechnung von statischen und dynamischen Observablen des Hubbard Modells bei endlicher Temperatur sind rar. Existierende Algorithmen führen zu hoher Zahl an Quantengattern, die nicht mit derzeitigen und in naher Zukunft verfügbaren Quantenprozessoren verarbeitet werden können. Es ist daher ein wichtiges Ziel dieses Projekts, Algorithmen zu entwickeln und Probleme zu identifizieren, die das Potential haben, auf NISQ Geräten Quantenvorteile zu erzielen. Die Neuentwicklung von klassischen Methoden basierend auf Tensornetzwerken ist unabdingbar, um Verifizierungs- und Benchmarkmöglichkeiten neu entwickelter Quantenalgorithmen zu schaffen.

Wir präsentieren den Inhalt der durchgeführten Arbeiten sortiert nach den drei Arbeitspaketen (AP) des ursprünglichen Projekts.

AP1: Design und Optimierung einer Bibliothek grundlegender Quantenalgorithmen

Im Rahmen dieses Arbeitspakets entwickeln wir eine Sammlung grundlegender Quantenalgorithmen, die als Bausteine für die Simulation komplexer Quantenvielteilchensysteme mit Fokus auf Hubbard Systeme dienen. Ziel ist es, variationelle Ansätze und exakte Schaltkreise systematisch zu untersuchen, zu parametrisieren und auf Quantenprozessoren einsetzbar zu machen.

Ein Schwerpunkt liegt auf der **Konstruktion effizienter variationaler Zustände**. In der Arbeit zu umformen sequentiellen Schaltkreisen präsentieren wir einen hybriden quanten-klassischen Algorithmus zur Zeitentwicklung eines eindimensionalen, uniformen Systems im thermodynamischen Limit [Astrakhantsev2023]. Als variationellen Ansatz verwenden wir uniforme sequenzielle Quanten-Schaltkreise, die translationsinvariante Zustände repräsentieren. Numerische Analysen zeigen, dass die Anzahl der Parameter polynomial mit der Simulationszeit wächst, und dass diese günstige Skalierung während der variationellen Zeitentwicklung erhalten bleibt. Alle Schritte des Algorithmus sind speziell für nahzeitfähige digitale Quantencomputer (NISQ) ausgelegt, und erste Benchmarking-Ergebnisse auf klassischen Rechnern sowie auf Quantenprozessoren bestätigen die Praktikabilität unseres Ansatzes.

Darüber hinaus zeigen wir in der Arbeit “Real- and Imaginary-Time Evolution with Compressed Quantum Circuits,” dass komprimierte Quanten-Schaltkreise eine effizientere Repräsentation von nichtgleichgewichtlichen Quantenzuständen bieten als [Lin2021]. Wir führen sowohl reale als auch imaginäre Zeitentwicklungen mittels

Optimierung auf NISQ-Geräten durch und benchmarken die Algorithmen auf klassischen Computern, indem wir den Grundzustand und eine globale Quench-Dynamik des transversalen Ising-Modells simulieren. Die Umsetzung der klassisch optimierten Gatter auf einem Quantenprozessor demonstriert, dass unser Ansatz die reale Zeitentwicklung effektiv erfasst.

Schließlich untersuchen wir in “Finite-Depth Scaling of Infinite Quantum Circuits for Quantum Critical Points” die Repräsentation von Grundzuständen kritischer, unendlicher Systeme mit variationalen Schaltkreisen endlicher Tiefe, die für NISQ-Geräte geeignet sind [Jobst2022]. Wir identifizieren universelle Skalierungsbeziehungen der Schaltkreistiefe und verifizieren diese numerisch an zwei kritischen Punkten: dem kritischen Ising-Modell mit zusätzlicher symmetrieerhaltender Störung und dem kritischen XXZ-Modell. Diese Ergebnisse liefern eine robuste Grundlage für die Verwendung variationaler Quanten-Schaltkreise zur Untersuchung von kritischen Systemen und universellen Eigenschaften.

Insgesamt zeigen unsere Arbeiten, dass komprimierte Quanten-Schaltkreise effiziente und skalierbare variationelle Zustände liefern, die sowohl für die Simulation dynamischer Prozesse als auch für die Analyse von Grundzuständen kritischer Systeme geeignet sind. Damit tragen diese Methoden dazu bei grundlegende Quantenalgorithmen zu entwickeln.

AP2: Benchmarking von Quantenalgorithmen

Exakte Quanten-Schaltkreise. In unserer Forschung entwickelten wir auch exakte, parametrische Quanten-Schaltkreise, um topologische Quantenzustände in zwei- und dreidimensionalen Systemen auf digitalen Quantencomputern effizient vorzubereiten und zu untersuchen. Ziel ist es, die Grundzustände exakt zu erzeugen und topologische Phasenübergänge kontrolliert zu durchqueren.

In “Simulating 2D Topological Quantum Phase Transitions on a Digital Quantum Computer” konstruieren wir isometrische Tensor-Netzwerk-Zustände (isoTNS) als parametrische Quanten-Schaltkreise mit linearer Tiefe, die eine Familie von Grundzuständen über 2D-topologische Phasenübergänge repräsentieren. Durch kontinuierliches Variieren eines Parameters im Wellenfunktion-Ansatz lassen sich verschiedene symmetriebereicherte topologische (SET) Phasen interpolieren. Wir liefern explizite parametrische Quanten-Schaltkreise und zeigen, dass die 2D-isoTNS auch durch einen holographischen Algorithmus auf einem 1D-Quanten Array effizient simuliert werden kann [Liu2024]. In “Quantum Phase Transitions between Symmetry-Enriched Fracton Phases” erweitern wir diesen Ansatz auf dreidimensionale

Fracton-Phasen [Boesl2025]. Schließlich zeigten wir in “Crossing a Topological Phase Transition with a Quantum Computer,” wie ein kontinuierlich parametrisierter Zustandsfamilie auf IBM-Q-Quantencomputern eine symmetry-protected topologische Phasenübergang durchquert [Smith2022]. Dies demonstriert die Praktikabilität von nahzeitfähigen Quantencomputern zur Untersuchung von topologischen Quantenzuständen und deren Phasenübergängen.

Insgesamt zeigen diese Arbeiten, dass exakte, parametrische Quanten-Schaltkreise eine leistungsfähige und skalierbare Methode darstellen, um topologische Phasen und Phasenübergänge zu simulieren. Sie liefern konkrete Anleitungen und Benchmark-Daten für die Implementierung auf nahzeitfähigen digitalen Quantencomputern und ermöglichen eine präzise Kontrolle und Messung exotischer quantenmechanischer Phänomene. Auf lange Zeit gesehen, ist es wichtig zu verstehen, wie Phasen mit topologischer Ordnung auf Quantencomputern realisiert werden können, im speziellen auch, da es theoretische Ansätze gibt, die das Hubbard Modell bei endlicher Dotierung mit Hilfe von topologischer Ordnung zu verstehen versuchen.

Benchmarks fuer Hubbard Modelle. In unserer Forschung untersuchten wir neue Plattformen und Mechanismen zur Realisierung und Charakterisierung stark wechselwirkender Hubbard-Modelle, mit einem Fokus auf experimentell zugängliche Benchmark-Daten. Wir untersuchten mit klassischen Simulationsmethoden frustrierte Hubbard-Physik mit topologischer Ordnung [Kuhlenkamp2024]. Um das Hubbard Modell am triangulären Gitter bei endlichem magnetischen Fluss zu untersuchen, verwenden wir numerische Matrix Produkt Zustandsmethoden und können dadurch einen Zustand mit topologischer Ordnung in einem Hubbard model stabilisieren. Im Grenzfall starker Wechselwirkungen tritt ein Mott-Isolator auf, und wir finden chirale Spinflüssigkeiten, die außergewöhnlich stabil gegenüber Störungen sind. Unsere Ergebnisse liefern damit konkrete Benchmark-Daten eine Variante von Hubbard-Modellen.

Darüber hinaus untersuchen wir die Realisierung von Altermagnetismus in Fermi-Hubbard-Modellen [Das2025]. Wir formulieren ein altermagnetisches Hubbard-Modell mit anisotroper kinetischer Energie und bestimmen das Phasendiagramm approximativ. Dabei zeigt sich, dass die altermagnetische Phase sowohl metallische als auch isolierende Zustände umfasst und über einen großen Parameterbereich stabil ist. Charakteristische Eigenschaften wie anisotroper Spintransport lassen sich direkt in Experimenten messen. Schließlich zeigen wir, dass Altermagnetismus nicht nur in anisotropen Kristallstrukturen auftritt, sondern auch als wechselwirkungsinduziertes Phänomen in Gittern ohne Kristallanisotropie entstehen kann [Leeb2025]. Mit einem zwei-orbitalen Modell demonstrieren wir, dass die

Koexistenz von gestaffelter antiferromagnetischer und Orbitalordnung robuste altermagnetische Phasen hervorruft. Diese Untersuchungen liefern wertvolle Benchmark-Daten für Hubbard-Modelle, die altermagnetische Phasen beschreiben, und unterstützen die Planung und Interpretation zukünftiger Experimente.

Insgesamt liefern unsere Arbeiten umfassende Benchmark-Daten für verschiedene Realisierungen und Phasen von Hubbard-Modellen, von topologisch geordneten Spinflüssigkeiten bis hin zu altermagnetischen Phasen. Sie verbinden theoretische Modellierung mit experimentell messbaren Signaturen und legen damit die Grundlage für Benchmarks.

AP3: Effiziente Quantenalgorithmen für das Hubbard-Modell

Wir haben Quantenalgorithmen entwickelt und untersucht, die Varianten des Hubbard-Modells untersuchen können. Wir das Fermi-Vorzeichen mit Hilfe von Gitterechtheorien encodiert, einen Quantenalgorithmus zur Berechnung von Observablen bei endlicher Temperatur mit Hilfe der Jarzynski Gleichung entwickelt, und Präthermalisierungsphänomene untersucht.

Effiziente Implementierung des fermionischen Vorzeichens. Es ist bekannt, dass das Fermi-Vorzeichen mit Hilfe von Gittereichtoerien encodiert werdne kann. In einer Arbeit haben wir einen Quantenalgorithmus für das eindimensionale Fermi-Hubbard-Modell vorgestellt, der auf einer Darstellung als Z_2-Gittereichtheorie basiert [Khodaeva2023]. Diese Formulierung erlaubt die Nutzung einer Vielzahl lokaler Erhaltungsgrößen, die mit dem Hamiltonoperator kommutieren. Diese Symmetrien werden gezielt eingesetzt, um eine fehlerrobuste Simulation auf NISQ-Quantencomputern zu ermöglichen. Durch eine nachträgliche Auswahl physikalisch zulässiger Zustände lassen sich die Auswirkungen von Messrauschen und Gatterfehlern stark reduzieren. Trotz eines leicht höheren Tiefe des Schaltkreises in 1D gegenüber der traditionellen Jordan-Wigner-Abbildung zeigt sich, dass die vorgeschlagene Methode bei gleichem Fehlerniveau vergleichbare oder sogar stabilere Ergebnisse liefert. Wir haben ein analoges Konzept auch auf das zweidimensionale Fermi-Hubbard-Modell angewandt [Jafarizadeh2025]. Der Ansatz ermöglicht eine vollständig lokale Implementierung des Modells und vermeidet somit die exponentielle Fehlerakkumulation, die bei nicht-lokalen Transformationen wie der Jordan-Wigner-Methode auftritt.

Wir haben eine dynamische, topologisch geordnete Phase und Dynamik von Fermionen auf einem supraleitenden Quantenprozessor realisiert und untersucht [Will2025]. Durch die Implementierung eines periodisch angetriebenen Floquet-Systems konnten wir die

dynamischen Eigenschaften fermionischer und anyonischer Anregungen experimentell zugänglich machen – ein Bereich, der klassisch aufgrund hoher Verschränkung kaum simulierbar ist. Mit einem Interferometrieprotokoll haben wir die chiralen Randmoden abgebildet und die Transmutation von Anyons, also den Übergang zwischen verschiedenen effektiven Fermionenzuständen, charakterisiert. Ein zentrales Ergebnis unserer Arbeit ist, dass diese fermionischen Quasiteilchen vollständig auf einem Qubit-Array kodiert werden können. Damit zeigen wir, wie sich topologische und fermionische Ordnungsphänomene durch effiziente Codierung auf digitalen Quantencomputern darstellen und untersuchen lassen, und eröffnen neue Möglichkeiten für die Simulation stark korrelierter und topologisch geordneter fermionischer Materie auf NISQ-Geräten.

Berechnung von Observablen bei endlicher Temperatur mit Hilfe der **Jarzynski Gleichung**: Wir haben eine Methode vorgestellt, um Observablen bei endlicher Temperatur in Quantensimulatoren zugänglich zu machen [Schuckert2023]. Da diese Systeme nahezu perfekt von ihrer Umgebung isoliert sind, stellt die Präparation echter thermischer Zustände eine große Herausforderung dar. Um dieses Problem zu umgehen, verwenden wir einen von der Jarzynski-Gleichung inspirierten Algorithmus, der dem von Lu, Bañuls und Cirac (PRX Quantum 2, 020321, 2021) vorgestellten Verfahren entspricht. Unser Ansatz kombiniert klassisches Importance Sampling der Anfangszustände mit der Messung des Loschmidt-Echos in einem Quantensimulator und ermöglicht so die Bestimmung thermischer Erwartungswerte, ohne dass thermische Zustände explizit präpariert werden müssen. Wir nutzen diese Methode zunächst als quanteninspirierten klassischen Algorithmus und führen Simulationen mit Matrix-Produkt-Zuständen durch, um die experimentellen Anforderungen für realistische Quantenplattformen zu evaluieren. Unsere Ergebnisse zeigen, dass der vorgeschlagene Algorithmus unter realistischen Bedingungen robust gegenüber typischen experimentellen Fehlern ist. Diese Arbeit eröffnet damit einen praktischen Weg, thermische Eigenschaften und Phasenübergänge in isolierten Quantensystemen zu untersuchen, und schlägt eine Brücke zwischen theoretischen algorithmischen Entwicklungen und experimentellen Umsetzungen in Quantensimulatoren.

Wir entwicklen einen Algorithmus zur **Purifikation von thermischen Zuständen** mit 2D isometrischen Tensor Netzwerken [Kadow2023]. In dieser Arbeit stellen wir eine Methode vor, um zweidimensionale Vielteilchensysteme bei endlicher Temperatur effizient mithilfe von isometrischen Tensornetzwerken zu beschreiben. Tensornetzwerke sind ein leistungsfähiges Werkzeug zur Modellierung komplexer, niedrig dimensionaler Quantensysteme, doch die Simulation solcher Systeme bei endlicher Temperatur in zwei Dimensionen bleibt eine große Herausforderung. Wir verwenden hierfür die kürzlich eingeführte Klasse isometrischer Tensornetzwerkzustände, die sich nicht nur

numerisch effizient darstellen, sondern auch direkt mit unitären Gattern auf einem Quantencomputer realisieren lassen. Diese Arbeit liefert einen Beitrag zur Weiterentwicklung effizienter Tensornetzwerk-Algorithmen und legt zugleich die Grundlage für eine mögliche Umsetzung entsprechender Simulationen auf Quantenhardware. Durch die isometrische Struktur der Tensoren lassen sich unsere Ansätze sowohl in klassischen als auch in hybriden Quanten-klassischen Simulationsarchitekturen anwenden.

Wir haben auch verschiedene Möglichkeiten untersucht thermische Zustände mit **Floquet Präthermalisierung** zu realisieren. In einer Kollaboration mit Quantinuum untersuchen wir die Möglichkeiten digitaler Quantencomputer zur Simulation realistischer Quantensysteme und analysieren die Stabilität sogenannter digitaler Quantenmaterie, die entsteht, wenn eine kontinuierliche Zeitevolution durch diskrete Quantengatter approximiert wird [Haghshenas2025]. Wir nutzen dazu den H2-Quantencomputer von Quantinuum, um die digitalisierte Dynamik des Quanten-Ising-Modells zu simulieren, und beobachten das Auftreten von Floquet-Präthermalisierung auf Zeitskalen, die mit aktuellen klassischen Methoden nur äußerst schwierig oder gar nicht zugänglich sind. Unsere Ergebnisse bestätigen die Stabilität der Dynamik trotz unvermeidbarer Digitalisierungsfehler und zeigen direkte Hinweise auf lokale Gleichgewichtsbildung. Diese belegen wir durch die Bestimmung von Diffusionskonstanten, die einer effektiven hydrodynamischen Beschreibung der Dynamik entsprechen. Die Experimente wurden durch erhebliche Fortschritte in der Qualität von Zwei-Qubit-Gattern ermöglicht (mit nativen Entangler-Fidelitäten von 99,94%), wodurch wir Schaltkreise mit über 2000 Zwei-Qubit-Gattern realisieren konnten. Mit dieser Arbeit demonstrieren wir, dass digitale Quantencomputer ein leistungsfähiges Werkzeug zur Untersuchung kontinuierlicher Zeitdynamiken darstellen und erstmals in einem Regime operieren, das für klassische Simulationen unzugänglich ist.

Wir entwickelten auch die Theorie von Floquet-Präthermalisierung weiter und untersuchen Quanten-Spin-Flüssigkeiten, die aufgrund ihrer emergenten fraktionalisierten Quasiteilchen ein ungewöhnliches Heizungsverhalten zeigen [Jin2023, Romen2025]. Wir analysieren das getriebene Kitaevmodell und studieren dabei die Dynamik der entstehenden Majorana-Materie sowie der Z_2-Flussanregungen. Unsere Untersuchungen zeigen ein charakteristisches zweistufiges Heizungsprofil, das wir als *fraktionalisierte Präthermalisierung* bezeichnen. Dabei bildet sich ein quasistationärer Zustand, in dem Materie- und Fluss-Sektoren deutlich unterschiedliche effektive Temperaturen aufweisen. Dieses Verhalten lässt sich direkt auf die Fraktionalisierung der Freiheitsgrade zurückführen. Zudem schlagen wir ein experimentell realisierbares

Protokoll zur Präparation eines flussfreien Anfangszustands mit niedriger Energiedichte vor, das die Beobachtung der fraktionalisierten Präthermalisierung in modernen Quanteninformationsplattformen ermöglicht.

Zusammenfassung und Perspektiven

Durch die Kombination von Entwicklung und Optimierung von Quantenalgorithmen, Benchmarking auf klassischen und NISQ-Geräten sowie der Entwicklung effizienter Algorithmen für Hubbard-Modelle bei endlicher Temperatur entstanden neue Perspektiven zur Simulation von Hubbard-Modellen.

Unsere Arbeiten liefern:

- Benchmark-Daten für Hubbard-Modelle, von Mott-Isolatoren bis zu altermagnetischen und fraktionalisierten Spinflüssigkeiten.
- Variationale und komprimierte Quanten-Zustände für effiziente Simulation dynamischer Prozesse und Grundzustände kritischer Systeme.
- Exakte parametrische Schaltkreise, die topologische Phasenübergänge in 2D und 3D gezielt realisieren.
- Praktische Demonstrationen auf NISQ-Geräten.

Durchgeführte Arbeiten im Vergleich zur ursprünglichen Vorhabenbeschreibung

Wie wir in diesem Abschnitt beschreiben, haben wir die im Projekt geplanten Arbeiten erfolgreich durchgeführt. Wir haben die von uns gesetzten Ziele erreicht und die Aufgaben abgeschlossen. Darüber hinaus haben wir auch Ergebnisse erzielt, die im ursprünglichen Projektantrag nicht enthalten waren, die jedoch dennoch die Grenzen unseres Wissens in der Quantensimulation von Hubbard-Modellen erweitern, was das Hauptziel des Projekts ist.

Die konkreten Ziele des Projekts lauten:

Z1: Entwicklung von grundlegenden Quantenalgorithmen: Präparation von Variations-zuständen mit geringer Komplexität und Untersuchung des Skalierungsverhaltens.

Z2: Entwicklung neuer und Verbesserung bestehender Quantenalgorithmen zur Berechnung der statischen und dynamischen Eigenschaften des Hubbard-Modells.

Z3: Weiterentwicklung klassischer Algorithmen zur Verifizierung und zum Benchmarking.

Das Projekt bestand aus drei Arbeitspaketen, die in sieben Aufgaben unterteilt sind. Wie nachfolgend beschrieben, wurden die Aufgaben planmäßig ausgeführt und erfolgreich abgeschlossen. Die Arbeiten führten zu 26 wissenschaftlichen Veröffentlichungen, die am Ende dieses Abschnitts aufgeführt sind. Im Folgenden fassen wir die in jedem Arbeitspaket (AP) durchgeführten Aufgaben sowie deren Verbindung zum ursprünglichen Projekt zusammen.

AP1: Design und Optimierung einer Bibliothek grundlegender Quantenalgorithmen

Aufgabe 1-5: Effiziente Variationszustände mit komprimierten Quantenschaltkreisen

Wie im Antrag geplant haben wir grundlegende Quantenalgorithmen fuer effiziente Variationszustände entwickelt, die mit komprimierten Quantenschaltkreisen dargestellt werden können. Konkret:

- Entwicklung eines hybriden quanten-klassischen Algorithmus zur Zeitentwicklung eines eindimensionalen, uniformen Systems im thermodynamischen Limit [Astrakhantsev2023]
- Untersuchung von reeller und imaginärer Zeitevolution mit komprimierten Quantenschaltkreisen [Lin2021]
- Skalierung endlicher Schaltungstiefe unendlicher Quantenschaltkreise an Quantenkritischen Punkten [Jobst2022]

AP2: Benchmarking von Quantenalgorithmen

Aufgabe 2-1: Benchmarking von Quantenalgorithmen mit klassischen Algorithmen

Wir haben klassische Methoden hauptsächlich basierend auf Tensor Netzwerke entwickelt um Benchmark Daten fuer Hubbard Modelle zu generieren:

- Hubbard model am triangulären Gitter [Kuhlenkamp2024]
- Altermagnetisches Hubbard Modell [Das2025, Leeb2025]

Aufgabe 2-2: Benchmarking exakt lösbarer Grenzfälle des Hubbard-Modells.

Als exakt lösbare Grenzfälle des Hubbard Modells haben wir uns den Nagaoka limes von unendlicher Wechselwirkung angesehen. Konkret:

- Untersuchung des Grundzustandes eines Systems mit topologischer Ordnung mit doping [Jin2024]

- Untersuchung dynamischer Spektraler Eigenschaften im Nagaoka Grenzfall [Kadow 2024]

Aufgabe 2-3: Entwicklung exakter Quantenschaltkreise für fein abgestimmte Hamiltonians verschiedener Quantenphasen, einschließlich ungeordneter, klassisch geordneter und topologisch geordneter Zustände.

Wir haben folgende exakte Quantenschaltkreise entwickelt:

- Simulation von 2D topologischen [Liu2024] und 3D fraktonischen [Boesl2025] Quantenphasenuebergaengen auf einem Digitalen Quantencomputer.
- Realisierung eines 1D Beispiels auf dem IBM Quantencomputer [Smith2022]

AP3: Effiziente Quantenalgorithmen für das Hubbard-Modell

Aufgabe 3-4: Entwicklung und Charakterisierung eines Quantenalgorithmus für analoge Quantencomputer

Konkret untersuchten wir:

- Berechnung von Observablen bei endlicher Temperatur mit Hilfe der Jarzynski Gleichung [Schuckert2023]

Darüber hinaus haben wir an folgendem Thema gearbeitet:

- Charakterisierung von Verschränkung bei endlichen Temperaturen in fermionischen Systemen [Choi2023]

Aufgabe 3-5: Realisierung thermischer Zustände des Hubbard-Modells durch Purifikation

Wir entwickelten folgenden Algorithmus:

- Purifikation von thermischen Zuständen mit 2D isometrischen Tensor Netzwerken [Kadow2023]

Darüber hinaus haben wir uns konkrete Strategien zum enkodieren von fermionischer Austauschwechselwirkung an Quantencomputern angesehen:

- Abbildung des 1D Fermi-Hubbard modells auf eine Gittereichtheorie [Khodaeva2023]

- Implementierung für das zweidimensionale Fermi-Hubbard-Modell [Jafarizadeh2025]

Aufgabe 3-6: Mit dem Ziel effektive endliche Temperaturzustände zu erzeugen werden wir digitale Quantenalgorithmen, basierend auf Floquet-Schaltungen

Untersuchung von Flouqet Präthermalisierung:

- Theorie von Floquet-Präthermalisierung fuer Quanten-Spin-Flüssigkeiten mit fraktionierten Anregungen [Jin2023, Romen 2025]
- Kollaboration mit Quantinuum zu den Möglichkeiten digitale Quantencomputer zur Simulation realistischer Quantensysteme zu verwenden in dem man Floquet-Präthermalisierung ausnutzt [Haghshenas2025].

Die wichtigsten Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Als theoretisches Projekt umfassen die generierten Kosten zu einem großen Teil Personalkosten. Zusätzlich wurde Computerinfrastruktur gekauft, um die entwickelten Algorithmen zu testen. Die Gesamtsumme hierfür beläuft sich auf 272,300 €. Zudem wurden projektbezogene Reisen mit Kosten in Höhe von 32,500 € unternommen.

Die Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Projektarbeiten

Quantencomputer können potenziell einen Vorteil gegenüber klassischen Computern bieten. Es ist jedoch unklar, ob dieser Vorteil praktisch nutzbar ist, da die meisten Anwendungen lediglich eine polynomielle Geschwindigkeitssteigerung zeigen, die inder Regel durch den erforderlichen Overhead des Quantencomputers wieder ausgeglichen wird. Es ist daher klar, dass Quantencomputer einen Vorteil speziell für Probleme mit exponentiellem Beschleunigungspotenzial bieten werden. Leider gibt es nur sehr wenige solcher Probleme, und es ist ungewiss, ob noch weitere gefunden werden.

Der klarste Fall eines exponentiellen Vorteils ist vermutlich die Quantensimulation von Quantenvielteilchensystemen. Diese könnte sogar zu praktisch relevanten Geschwindigkeitsvorteilen mit der nächsten Generation von analogen Quantencomputern und NISQ-Geräten führen. Besonders bedeutsam – sowohl aus wissenschaftlicher als auch aus industrieller Sicht – sind dabei Hubbard-Modelle. Daher ist die Entwicklung von Quantenalgorithmen zur Quantensimulation solcher Modelle von hoher Relevanz. Selbst wenn in den kommenden Jahrzehnten keine skalierbaren

Geräte gebaut werden, besteht eine hohe Wahrscheinlichkeit, dass diese Algorithmen einen Quantenvorteil gegenüber nicht-skalierbaren Geräten bieten werden.

Darüber hinaus könnten, wenn klassische Algorithmen für bestimmte Anwendungsfälle durch diese Quantenalgorithmen inspiriert werden, sowohl wissenschaftliche als auch technologische Durchbrüche erzielt werden. Dies war die Motivation für die Ziele des Teilprojekts sowie der dazugehörigen Aufgaben. Die im Projektantrag definierten Aufgaben wurden erfüllt. Darüber hinaus wurden zusätzliche Ergebnisse erzielt, die die ursprünglichen Zielsetzungen ergänzen und erweitern. Aus diesem Grund waren die durchgeführten Arbeiten notwendig und angemessen. Es sei angemerkt, dass die TUM neben der vom Projekt geförderten Stellen auch eigene Mittel eingesetzt hat, um weitere Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler zu unterstützen, die an den zusätzlichen Arbeiten beteiligt waren.

Der voraussichtliche Nutzen, insbesondere die Verwertbarkeit des Ergebnisses - auch konkrete Planungen für die nähere Zukunft - im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplans

Die im Rahmen dieses Projekts durchgeführten Arbeiten werden folgende Vorteile mit sich bringen:

- Sie ermöglichen es, bestehende und geplante Plattformen zur Quantensimulation des Hubbard-Modells und andere physikalische Modelle effizient zu untersuchen.
- Sie erlauben außerdem neue Zugänge in der Erforschung des Fermi-Hubbard-Modells mit klassischen Computern.
- Sie zeigen, dass ein Quantenvorteil in der Quantensimulation möglich ist, und unterstützen damit die aktuellen Bemühungen, Quanten-Simulatoren (sowohl analog als auch digital) zu entwickeln.
- Alle Ergebnisse stehen dem Industriepartner zur Verfügung.

Die konkreten Zukunftspläne umfassen:

- Die Übertragung der Projektergebnisse auf weitere Modelle.
- Die Zusammenarbeit mit anderen Gruppen zur Simulation des Fermi-Hubbard-Modells.

Der während der Durchführung des Vorhabens dem Zuwendungsempfänger bekannt gewordenen Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Abgesehen von den Arbeiten anderer Gruppen innerhalb von EQUAHUMO, die in den entsprechenden Berichten ausführlich dargestellt werden, gab es mehrere Veröffentlichungen zu Quantenalgorithmen für das Hubbard-Modell:

- Ein Quantenalgorithmus zur Berechnung von Greenschen-Funktionen (Bishop et al., arxiv:2310.10412), der auf einem IBM-Quantencomputer getestet wurde.
- Die Abschätzung des Trotter-Fehlers in der Quantensimulation des Hubbard-Modells (Schuber und Mendl, arxiv:2306.10603)
- Die Untersuchung des thermischen Gleichgewichts mit variierten Quantenalgorithmen (Araz et al., Phys. Rev. A 109, 062422 und Jones et al., arxiv:2411.13742d)

Darüber hinaus wurden mehrere Experimente zur Erforschung des Fermi-Hubbard-Modells bei null Temperatur mit analogen und digitalen Quantensimulatoren durchgeführt, beispielsweise:

- Ein Hubbard-Quantensimulator mit neutralen Atomen im kryogenen Bereich (arxiv:2502.00095)
- Untersuchung topologischer Materie und Fermionendynamik auf einem Quantencomputer mit supraleitenden Qubits aus unserem Verbund [Will2025] und zeitgleich mit neutralen Atomen, Nature 645, 341-347 (2025).
- Bildung von Streifen in einem Fermi-Hubbard-System basierend auf ultrakalten Atomen mit gemischten Dimensionen (Bourgund et al., arxiv:2312.14156)

Die erfolgten oder geplanten Veröffentlichungen des Ergebnisses

Das Projekt hat 26 Veröffentlichungen hervorgebracht. Darunter sind 1 in Nature, 2 in Phys. Rev. X, 4 in Phys. Rev. Lett.

AP1: Design und Optimierung einer Bibliothek grundlegender Quantenalgorithmen

1. N. Astrakhantsev, S.-H. Lin, F. Pollmann, A. Smith, Time Evolution of Uniform Sequential Circuits, Phys. Rev. Research 5, 033187 (2023)
2. S.-H. Lin, R. Dilip, A. G. Green, A. Smith, F. Pollmann, Real- and imaginary-time evolution with compressed quantum circuits, PRX Quantum 2, 010342 (2021)
3. B. Jobst, A. Smith, F. Pollmann, Finite-depth scaling of infinite quantum circuits for quantum critical points, Phys. Rev. Research 4, 033118 (2022)

4. Y.-J. Liu, K. Shtengel, F. Pollmann, Simulating 2D topological quantum phase transitions on a digital quantum computer, Phys. Rev. Research 6, 043256 (2024).
5. A. Smith, B. Jobst, A. G. Green, F. Pollmann, Crossing a topological phase transition with a quantum computer Phys. Rev. Research 4, L022020 (2022).
6. J. Boesl, Y.-J. Liu, W.-T. Xu, F. Pollmann, M. Knap, Quantum Phase Transitions between Symmetry-Enriched Fracton Phases, Phys. Rev. B 112, 125152 (2025)
7. Yu-Jie Liu*, Wen-Tao Xu*, Frank Pollmann, Michael Knap, Detecting emergent 1-form symmetries with quantum error correction, [arXiv:2502.17572]
8. Benjamin Sappler, Masataka Kawano, Michael P Zaletel, Frank Pollmann, Diagonal Isometric Form for Tensor Product States in Two Dimensions, arxiv:2507.08080.
9. Yantao Wu, Zhehao Dai, Sajant Anand, Sheng-Hsuan Lin, Qi Yang, Lei Wang, Frank Pollmann, Michael P. Zaletel, Alternating and Gaussian fermionic Isometric Tensor Network States, arXiv:2502.10695.

AP2: Benchmarking von Quantenalgorithmen

10. C. Kuhlenkamp, W. Kadow, A. Imamoglu, M. Knap, Chiral Pseudospin Liquids in Moire Heterostructures. Phys. Rev. X 14, 021013 (2024)
11. P. Das, V. Leeb, J. Knolle, M. Knap, Realizing Altermagnetism in Fermi-Hubbard Models with Ultracold Atoms. Phys. Rev. Lett. 132, 263402 (2024)
12. V. Leeb, A. Mook, L. Šmejkal, J. Knolle, Spontaneous Formation of Altermagnetism from Orbital Ordering, Phys. Rev. Lett. 132, 236701 (2025)
13. Wen-Tao Xu, Michael Knap, Frank Pollmann, Tensor-Network Study of the Roughening Transition in (2 + 1)D lattice gauge theories. Phys. Rev. Lett. 135, 036503 (2025)
14. Wen-Tao Xu, Frank Pollmann, Michael Knap, Critical behavior of the Fredenhagen-Marcu order parameter at topological phase transitions. npj Quantum Information 11, 76 (2025)
15. Wen-Tao Xu, Tibor Rakovszky, Michael Knap, Frank Pollmann, Entanglement Properties of Gauge Theories from Higher-Form Symmetries. Phys. Rev. X 15, 011001 (2025)
16. Hui-Ke Jin, Wilhelm Kadow, Michael Knap, Johannes Knolle, Kinetic Ferromagnetism and Topological Magnons of the Hole-Doped Kitaev Spin Liquid. npj Quantum Mater. 9, 65 (2024)
17. Wilhelm Kadow, Hui-Ke Jin, Johannes Knolle, Michael Knap, Single-hole spectra of Kitaev spin liquids: From dynamical Nagaoka ferromagnetism to spin-hole fractionalization. npj Quantum Mater. 9, 32 (2024)

AP3: Effiziente Quantenalgorithmen für das Hubbard-Modell

18. Uliana E. Khodaeva, Dmitry L. Kovrizhin, Johannes Knolle, Quantum simulation of the 1D Fermi-Hubbard model as a Z2 lattice-gauge theory, arXiv:2305.04648
19. Arash Jafarizadeh, Frank Pollmann, Adam Gammon-Smith, A recipe for local simulation of strongly-correlated fermionic matter on quantum computers: the 2D Fermi-Hubbard model, Phys. Rev. Research 7, 043018 (2025)
20. Alexander Schuckert, Annabelle Bohrdt, Eleanor Crane, Michael Knap, Probing finite-temperature observables in quantum simulators with short-time dynamics. Phys. Rev. B 107, L140410 (2023)
21. Wonjune Choi, Michael Knap, Frank Pollmann, Finite Temperature Entanglement Negativity of Fermionic Symmetry Protected Topological Phases and Quantum Critical Points in One Dimension, Phys. Rev. B 109, 115132 (2024).
22. Reza Haghshenas*, Eli Chertkov*, Michael Mills, Wilhelm Kadow, Sheng-Hsuan Lin, et al, Digital quantum magnetism at the frontier of classical simulations, [arXiv:2503.20870]
23. Wilhelm Kadow, Frank Pollmann, Michael Knap, Isometric tensor network representations of two-dimensional thermal states. Phys. Rev. B 107, 205106 (2023)
24. M. Will*, T. A. Cochran*, E. Rosenberg, B. Jobst, N. M Eassa, P. Roushan, M. Knap, A. Gammon-Smith, F. Pollmann, Probing Non-Equilibrium Topological Order on a Quantum Processor. Nature 645, 348 (2025)
25. Hui-Ke Jin, Johannes Knolle, Michael Knap, Fractionalized Prethermalization in a Driven Quantum Spin Liquid. Phys. Rev. Lett. 130, 226701 (2023)
26. Anton Romen, Johannes Knolle, Michael Knap, Fractionalized Prethermalization in the One-Dimensional Hubbard Model, [arXiv:2502.09708]