Sachbericht zum Verwendungsnachweis

Optimale Kontrollverfahren für FermiQP - FKZ 13N15891

Zuwendungsempfänger:
Forschungszentrum Jülich GmbH - Peter Grünberg Institut (PGI)

Teil I: Kurzbericht

Kurzbericht

Das Vorhaben betraf die Entwicklung optimaler Kontrollverfahren für zentrale Operationen des FermiQP-Quantenprozessors. Im Mittelpunkt standen zwei Kontrollaufgaben, die für neutrale Atome in optischen Potentialen unmittelbar relevant sind: der schnelle und präzise Transport einzelner Atome sowie die Realisierung schneller kollisionsbasierter Zwei-Qubit-Gatter. Beide Aufgaben stellen ähnliche Anforderungen an die Theorie und die numerische Modellierung. Die Kontrollsequenzen sollen kurz sein, damit Dekohärenz und technische Störungen möglichst wenig Zeit haben, sich auszuwirken. Zugleich dürfen sie die Atome nicht unerwünscht in Bewegungszustände außerhalb des vorgesehenen Rechenraums anregen. An diesen wissenschaftlich-technischen Stand knüpfte das Projekt an: optimale Quantenkontrolle, effiziente Simulation quantenmechanischer Bewegung und die enge Abstimmung mit experimentellen Randbedingungen wurden zusammengeführt, um praktisch nutzbare Kontrollsequenzen für den FermiQP-Demonstrator zu erhalten.

Der Ablauf des Vorhabens folgte dieser Zielsetzung. Zunächst wurden gemeinsam mit den experimentellen Partnern die relevanten Modelle, Systemparameter, Kontrollfreiheitsgrade und Schnittstellen zur experimentellen Steuerung herausgearbeitet. Für den Atomtransport betraf dies insbesondere den Transfer einzelner Atome zwischen statischen optischen Fallen mit Hilfe einer bewegten optischen Pinzette. Für die Zwei-Qubit-Gatter standen Kollisionsprozesse in optischen Gittern beziehungsweise Doppeltopf-Potentialen im Vordergrund. Darauf aufbauend wurden Simulationsprogramme implementiert und mit Optimierungsverfahren verbunden. In späteren Projektphasen wurden die Modelle verfeinert, Robustheit und Kalibrierbarkeit untersucht und Methoden betrachtet, mit denen programmierte Kontrollsignale an die tatsächliche Wirkung der experimentellen Hardware angepasst werden können. Die Arbeiten erfolgten im Austausch mit den Partnern an der Universität Tübingen für den Atomtransport und am Max-Planck-Institut für Quantenoptik für die Zwei-Qubit-Gatter.

Ein wesentliches Ergebnis ist die systematische Behandlung des schnellen Atomtransports. Untersucht wurden analytisch motivierte Shortcuts-to-Adiabaticity-Protokolle, experimentell naheliegende Pulsfamilien und numerisch optimierte Kontrollsequenzen. Die Simulationen zeigen, wie der Transfer zwischen statischen optischen Fallen und der bewegten optischen Pinzette so gestaltet werden kann, dass kurze Transportzeiten mit sehr geringer Bewegungsanregung verbunden werden. Für die betrachteten realistischen Parameter liegen die numerischen Fehler deutlich unter der im Projekt vorgegebenen Zielmarke von zwei Prozent. Damit wurde das Ziel erreicht, Kontrollsequenzen bereitzustellen, die schnellen Atomtransport ermöglichen und zugleich als belastbare Grundlage für die experimentelle Integration dienen.

Für die Zwei-Qubit-Gatter wurden komplementäre Simulations- und Optimierungsansätze entwickelt. Effiziente Mehrband-Fermi-Hubbard-Modelle ermöglichen eine schnelle Suche nach geeigneten Pulsformen und machen sichtbar, wie höhere Energiebänder für kürzere Gatterzei-

ten kontrolliert genutzt werden können. Ergänzend wurden genauere Simulationen mit effektiv eindimensionalem Einschluss eingesetzt, um die physikalischen Annahmen der vereinfachten Modelle zu prüfen und an experimentell relevanten Fällen zu validieren. Die Ergebnisse zeigen, dass die angestrebten Gatterzeiten unter einer Millisekunde und Fehlerraten unterhalb von zwei Prozent in den numerischen Modellen erreicht werden können. Zusätzlich wurde untersucht, wie empfindlich die optimierten Pulse gegenüber Parameterabweichungen und unterschiedlichen Anfangsfällen sind. Dadurch entstanden nicht nur einzelne optimierte Pulssequenzen, sondern auch ein besseres Verständnis dafür, welche Modellierungstiefe für eine robuste experimentelle Umsetzung erforderlich ist.

Ein dritter Ergebnisbereich betrifft die Schnittstelle zwischen numerischer Kontrolle und Experiment. Reale Kontrollsignale werden durch elektronische und optische Komponenten gefiltert und verzerrt, sodass die am Experiment wirkende Kontrollform von der programmierten Sequenz abweichen kann. Im Projekt wurden daher Transferfunktionsmethoden einbezogen, mit denen diese Signalkette charakterisiert und in die Optimierung aufgenommen werden kann. Diese Methoden unterstützen die spätere Gesamtintegration, weil sie eine kontrollierte Verbindung zwischen Software, Kontrollelektronik und physikalischer Wirkung im Atom herstellen. Sie bilden damit eine wichtige Ergänzung zu den Pulsoptimierungen für Atomtransport und Zwei-Qubit-Gatter.

Insgesamt wurden damit die im Vorhaben angestrebten Beiträge zu optimalen Kontrollverfahren und zur experimentellen Kontrollintegration erbracht. Die erzielten Ergebnisse bilden zugleich eine anschlussfähige Grundlage für weitere experimentelle Tests, Kalibrierverfahren und Anwendungen in der fermionischen Quantensimulation.

Veröffentlichungen

1. J. Singh, R. Zeier, T. Calarco und F. Motzoi, “Compensating for Nonlinear Distortions in Controlled Quantum Systems”, *Physical Review Applied* 19, 064067 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevApplied.19.064067
2. J. A. P. Reuter, M. Mäusezahl, F. Moumtsilis, T. Pfau, T. Calarco, R. Löw und M. M. Müller, “Analyzing the collective emission of a Rydberg-blockaded single-photon source based on an ensemble of thermal atoms”, *Physical Review A* 109, 013705 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevA.109.013705
3. C. Cicali, M. Calzavara, E. Cuestas, T. Calarco, R. Zeier und F. Motzoi, “Fast neutral-atom transport and transfer between optical tweezers”, *Physical Review Applied* 24, 024070 (2025). DOI: 10.1103/7r3w-8m61
4. J. Singh, J. A. P. Reuter, T. Calarco, F. Motzoi und R. Zeier, “Optimizing two-qubit gates for ultracold atoms using Fermi-Hubbard models”, *Physical Review Applied* 24, 034007 (2025). DOI: 10.1103/xqzw-m27l
5. J. A. P. Reuter, J. Singh, T. Calarco, F. Motzoi und R. Zeier, “Optimizing two-qubit gates for ultracold fermions in optical lattices”, *Physical Review A* 113, 052603 (2026). DOI: 10.1103/j6x3-hh74

Sachbericht zum Verwendungsnachweis

Optimale Kontrollverfahren für FermiQP - FKZ 13N15891

Zuwendungsempfänger:
Forschungszentrum Jülich GmbH - Peter Grünberg Institut (PGI)

Teil II: Eingehende Darstellung

Überblick

Der vorliegende Teil des Sachberichts fasst die im Projekt erarbeiteten Simulations- und Kontrollverfahren für zentrale Operationen des FermiQP-Quantenprozessors zusammen. Im Mittelpunkt stehen der schnelle Transport einzelner neutraler Atome zwischen statischen optischen Pinzetten mithilfe einer bewegten optischen Pinzette und die Optimierung kollisionsbasierter Zwei-Qubit-Gatter in optischen Gittern. Ergänzend wird die Schnittstelle zur experimentellen Umsetzung diskutiert, insbesondere die Beschreibung von Transferfunktionen, mit denen programmierte Kontrollsignale mit der tatsächlich wirkenden optischen Antwort verknüpft werden können.

Die Ergebnisse wurden in insgesamt fünf Veröffentlichungen dokumentiert: drei Arbeiten in *Physical Review Applied* und zwei Arbeiten in *Physical Review A*. Vier dieser Arbeiten bilden die Hauptgrundlage der folgenden Abschnitte: eine Arbeit zum schnellen Atomtransport, zwei Arbeiten zur Optimierung von Zwei-Qubit-Gattern und eine Arbeit zur Kompensation nichtlinearer Verzerrungen in kontrollierten Quantensystemen.

Für den Atomtransport wurden analytisch motivierte Kontrollsequenzen und numerische Optimierungsverfahren untersucht. Die Arbeiten zeigen, wie der Transfer zwischen statischen optischen Pinzetten und der bewegten optischen Pinzette so gestaltet werden kann, dass kurze Transportzeiten mit geringer Bewegungsanregung verbunden werden. Verglichen werden experimentell motivierte Pulsfamilien, Shortcuts-to-Adiabaticity-Protokolle und numerische Optimierungen.

Für die Zwei-Qubit-Gatter wurden komplementäre Simulationsansätze entwickelt: effiziente Mehrband-Fermi-Hubbard-Modelle zur schnellen Optimierung und genauere Simulationen mit effektiv eindimensionalem Einschluss zur experimentnahen Validierung. Die erzielten Gatterzeiten und Fehlerraten liegen in den zentralen numerischen Ergebnissen deutlich innerhalb der Projektziele. Zugleich zeigen die Simulationen, welche Modellverfeinerungen und Robustheitsanalysen für schnelle nichtadiabatische Gatter notwendig sind.

Die abschließende Diskussion der Transferfunktionen ordnet diese Ergebnisse in die experimentelle Kontrollintegration ein. Sie beschreibt, wie Verzerrungen der elektronischen und optischen Signalkette charakterisiert und in modellbasierte Pulsoptimierungen einbezogen werden können. In diesem weiteren Kontext ist auch die Arbeit J. A. P. Reuter, M. Mäusezahl, F. Moumtsilis, T. Pfau, T. Calarco, R. Löw und M. M. Müller, “Analyzing the collective emission of a Rydberg-blockaded single-photon source based on an ensemble of thermal atoms”, Phys. Rev. A 109, 013705 (2024), einzuordnen, die sich mit kollektiver Beschreibung und Kontrolloptimierung für neutrale Atome befasst und die methodische Breite der Arbeiten zu neutralatomaren Kontrollproblemen ergänzt.

Atom-Transport

Ein wesentlicher Teil unserer Arbeiten im Vorhaben betraf die Entwicklung von Simulations- und Kontrollverfahren für den Transport einzelner neutraler Atome zwischen statischen optischen Pinzetten mithilfe einer bewegten optischen Pinzette. Diese Arbeiten sind in der Veröffentlichung von C. Cicali, M. Calzavara, E. Cuestas, T. Calarco, R. Zeier und F. Motzoi, “Fast neutral-atom transport and transfer between optical tweezers”, Phys. Rev. Applied 24, 024070 (2025), DOI: 10.1103/7r3w-8m61, systematisch dargestellt worden. Im Folgenden beschreiben wir die dort erarbeiteten Ergebnisse und ordnen sie im Hinblick auf die Zielsetzung ein, kurze und präzise Kontrollsequenzen für den FermiQP-Prozessor bereitzustellen.

Der Atomtransport ist für Plattformen mit neutralen Atomen ein zentrales Kontrollproblem. Bewegte optische Pinzetten erlauben es, Atome räumlich umzuordnen, sie zwischen verschiedenen Bereichen eines Registers zu bewegen und damit zur effektiven Konnektivität eines Prozessors beizutragen. Gleichzeitig darf ein solcher Transport die Atome nicht merklich aus ihrem gewünschten Bewegungszustand anregen. Langsame, näherungsweise adiabatische Protokolle sind in dieser Hinsicht günstig, benötigen aber zu viel Zeit und erhöhen damit die Empfindlichkeit gegenüber Dekohärenz und experimentellem Rauschen. Schnelle Protokolle sind daher erforderlich, können aber ohne geeignete Kontrollpulse zu Schwingungsanregungen und Transportfehlern führen. Unsere Arbeiten zielten darauf, diesen Zielkonflikt mit Hilfe analytischer und numerischer Kontrollverfahren systematisch zu untersuchen.

Modellierung des Transports

In der Veröffentlichung haben wir ein eindimensionales Modell für den Transport eines einzelnen ^{39}K-Atoms zwischen zwei statischen optischen Pinzetten untersucht. Eine zusätzliche bewegte optische Pinzette übernimmt das Atom aus der Anfangsfalle, transportiert es über die Distanz zur Zielfalle und gibt es dort wieder ab. Damit wird nicht nur der reine Transport in einer bewegten Falle beschrieben, sondern auch das Einfangen aus der statischen Anfangsfalle und das Freigeben in die statische Zielfalle. Dieser Punkt ist für die experimentelle Relevanz wesentlich, weil der Transfer zwischen den Fallen einen erheblichen Anteil der Gesamtdauer ausmachen kann und daher nicht von der Optimierung getrennt betrachtet werden sollte.

Das Modell basiert auf Gauß-förmigen optischen Fallen. Die statischen Pinzetten definieren die Anfangs- und Zielpositionen, während die bewegte optische Pinzette durch zwei zeitabhängige Kontrollgrößen beschrieben wird: die Position des Fallenzentrums und die Tiefe der Falle. Die Anfangs- und Zielzustände werden als Grundzustände der jeweiligen statischen Falle gewählt. Als Fehlermaß verwenden wir die Infidelität gegenüber dem Zielzustand nach dem vollständigen Protokoll. Zusätzlich haben wir während des Protokolls die Besetzung höherer Bewegungszustände ausgewertet, um nicht nur den Endfehler, sondern auch die während des Transports auftretenden Schwingungsanregungen zu bewerten.

In den Simulationen wurden Parameter gewählt, die sich an aktuellen Experimenten mit neutralen Atomen orientieren. Dazu gehören insbesondere eine Transportdistanz von $7\,\mu$m, eine statische Fallentiefe von $A_{\mathrm{st}}/\hbar = 0{,}53 \times 2\pi$ MHz und eine maximale Tiefe der bewegten optischen Pinzette von $A_{\mathrm{mt}}^{\mathrm{max}}/\hbar = 3{,}57 \times 2\pi$ MHz. Damit wird der Vergleich der Pulsformen in einem experimentell plausiblen Parameterbereich durchgeführt. Als natürliche Zeiteinheit verwenden wir $\tau_{\mathrm{st}} = 2\pi/\omega_{\mathrm{st}}$ des statischen Fallenpotentials; für die verwendeten Parameter gilt $\tau_{\mathrm{st}} \approx 0{,}03$ ms. Die wesentlichen Steuergrößen sind Dauer, Position und Fallentiefe der bewegten optischen Pinzette; Abbildung 1 zeigt das Protokoll schematisch.

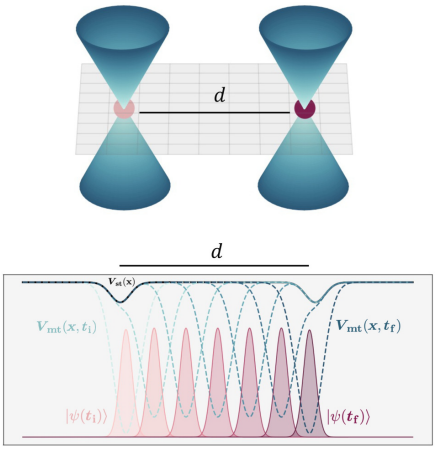

Abbildung 1: Transportprotokoll zwischen zwei statischen optischen Pinzetten mit einer bewegten optischen Pinzette. Die Abbildung zeigt das Einfangen aus der statischen Anfangsfalle, den Transport und die Freigabe in die statische Zielfalle und eignet sich damit als Einstieg in das verwendete Modell. Quelle: Cicali et al., Phys. Rev. Applied 24, 024070 (2025), DOI: 10.1103/7r3w-8m61.

Kontrollsequenzen

Zunächst haben wir verschiedene experimentell motivierte Pulsfamilien verglichen. Dazu gehören stückweise lineare Trajektorien, quadratische Trajektorien, Minimum-Jerk-Pulse sowie hybride Pulse. Diese Pulsformen repräsentieren typische Anforderungen aus dem Experiment: einfache Implementierbarkeit, geglättete Randbereiche und die Reduktion abrupter Änderungen von Geschwindigkeit und Beschleunigung. Besonders Minimum-Jerk-Pulse sind in diesem Zusammenhang interessant, weil sie Anfangs- und Endgeschwindigkeit sowie Anfangs- und Endbeschleunigung kontrollieren und dadurch abrupte Anregungen reduzieren können.

Darauf aufbauend haben wir ein analytisches Protokoll basierend auf sogenannten Shortcuts-to-Adiabaticity entwickelt, das den zeitabhängigen Einfluss der statischen Fallen in die Konstruktion der Pulse einbezieht. Der Grundgedanke dieser Verfahren ist, einen schnellen, nichtadiabatischen Prozess so zu gestalten, dass er am Ende den gleichen gewünschten Zustand erreicht wie ein langsamer adiabatischer Prozess. Für den hier betrachteten Atomtransport ist dabei entscheidend, dass die statischen Fallen nicht nur als Randbedingungen betrachtet werden. Ihr zeitabhängiger Einfluss auf die bewegte Falle wird vielmehr in der Konstruktion der Pulse berücksichtigt. Die Shortcuts-to-Adiabaticity-Pulse nutzen daher nicht nur die Position der bewegten optischen Pinzette als Kontrollgröße, sondern auch die zeitabhängige Fallentiefe.

Die verglichenen Kontrollpulse sind in Abbildung 2 zusammengefasst. Sie zeigen, welche experimentellen Größen tatsächlich angesteuert werden müssen. Die Amplitude beziehungsweise Fallentiefe bestimmt, wann das Atom eingefangen und wieder freigegeben wird. Die Position der bewegten optischen Pinzette legt die räumliche Trajektorie fest. Diese Darstellung war für die weitere Arbeit wichtig, weil sie die theoretische Optimierung unmittelbar mit den experimentellen Steuergrößen verbindet.

Die Pulsformen erfüllen unterschiedliche praktische Anforderungen. Stückweise lineare Pulse sind einfach zu implementieren und enthalten während des eigentlichen Transports eine konstante Geschwindigkeit. Gleichzeitig können die abrupten Änderungen an den Übergängen zwischen den Abschnitten zu unerwünschten Anregungen führen. Quadratische und Minimum-Jerk-Pulse glätten diese Randbereiche stärker, wodurch die Beschleunigung besser kontrolliert wird. Hybride Pulse verbinden beide Gedanken, indem sie zu Beginn und am Ende geglättete

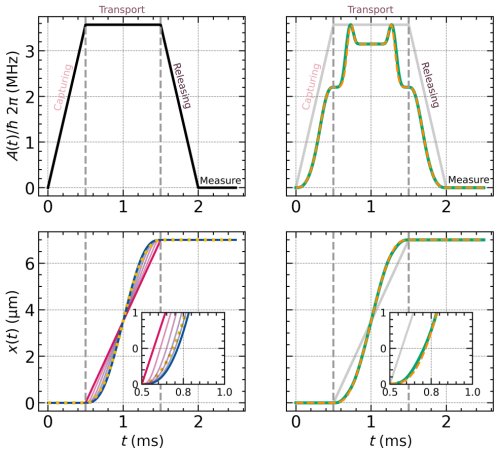

Abbildung 2: Verschiedene Kontrollpulse für Position und Fallentiefe der bewegten optischen Pinzette. Die Abbildung verdeutlicht die experimentelle Kontrollschnittstelle und den Unterschied zwischen experimentell motivierten Pulssequenzen und den Shortcuts-to-Adiabaticity-Pulsen. Quelle: Cicali et al., Phys. Rev. Applied 24, 024070 (2025), DOI: 10.1103/7r3w-8m61.

Teilstücke verwenden, während der mittlere Bereich näher an einem linearen Transport bleibt. Der Vergleich dieser Varianten war wichtig, um die analytischen Shortcuts-to-Adiabaticity-Pulse (oder auch STA-Pulse) nicht nur gegen einen einzelnen Referenzpuls, sondern gegen eine breite Klasse experimentell plausibler Sequenzen zu testen.

Numerische Optimierung und Transportgenauigkeit

Für den quantitativen Vergleich haben wir die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung numerisch gelöst und die Infidelität nach dem vollständigen Transportprotokoll bestimmt. Zusätzlich wurden die Pulse mit dem d-CRAB-Optimierungsverfahren aus der Python-Softwarebibliothek QuOCS (siehe `github.com/Quantum-OCS/QuOCS`) weiter optimiert. Dieses Verfahren kommt ohne Gradienten aus und beschreibt die Pulsform in einer reduzierten, zufällig gewählten Basis. Dadurch kann es die relevanten Freiheitsgrade der Kontrollsequenz effizient durchsuchen.

Abbildung 3 zeigt einen klaren Unterschied zwischen den betrachteten Pulsfamilien. Ohne Optimierung bleiben stückweise lineare Pulse im betrachteten Zeitbereich oberhalb einer Infidelität von 10^{-2}; nach Optimierung erreichen sie den Schwellenwert von 10^{-4} erst bei etwa $55\tau_{\mathrm{st}}$. Besonders Minimum-Jerk- und STA-Pulse zeigen ein glattes und stabiles Verhalten und erreichen niedrigere Fehler. Die von uns entwickelten Shortcuts-to-Adiabaticity-Pulse erreichen den Fehlerschwellenwert von 10^{-4} für die betrachteten Parameter am schnellsten. Für eine Transportdistanz von $7\,\mu$m und eine maximale Fallentiefe von $3{,}57 \times 2\pi$ MHz wird dieser Schwellenwert nach etwa $18\tau_{\mathrm{st}}$ erreicht, also nach ungefähr $0{,}54$ ms. Damit erlauben diese Pulse einen wesentlich schnelleren Transport als die rein experimentell motivierten Trajektorien. Zugleich wird das Projektziel einer Fehlerrate unter $2\,\%$ deutlich unterschritten: Die Veröffentlichung berichtet für den vollständigen STA-Puls bei $T = 2{,}5$ ms als numerisches Fehlermaß eine Infidelität von $5{,}3 \times 10^{-6}$.

Die numerische Optimierung verbessert viele der experimentell motivierten Pulse weiter. Je nach Pulsfamilie verringert sich die benötigte Dauer, um den gewählten Fehlerschwellenwert zu erreichen. Bei den Shortcuts-to-Adiabaticity-Pulsen ändert die nachfolgende Optimierung dagegen nur wenig. Dies interpretieren wir als Hinweis darauf, dass diese analytisch konstruierten Pulse bereits nahe an die in der Simulation beobachtete untere Zeitgrenze von etwa $8\tau_{\mathrm{st}}$ heranführen. Damit erfüllen sie eine doppelte Funktion: Sie liefern direkt gute Kontrollse-

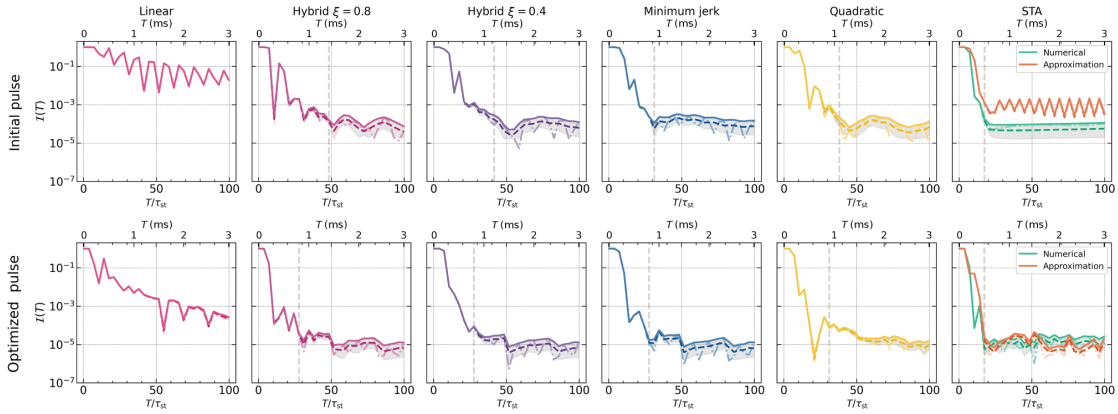

Abbildung 3: Infidelität nach dem Transport als Funktion der Gesamtdauer für verschiedene Pulsfamilien vor und nach numerischer Optimierung. Die Abbildung ist die zentrale Ergebnisdarstellung für die Bewertung der Transportgenauigkeit. Quelle: Cicali et al., Phys. Rev. Applied 24, 024070 (2025), DOI: 10.1103/7r3w-8m61.

quenzen und dienen zugleich als physikalisch motivierte Startpunkte für weitere numerische Optimierungen.

Neben der minimal erreichbaren Infidelität ist auch die Stabilität der Ergebnisse über den letzten Abschnitt des Protokolls relevant. In der Veröffentlichung wurden deshalb nicht nur einzelne Endwerte betrachtet, sondern auch Mittelwerte, Maximalwerte und Schwankungen der Infidelität im abschließenden Messintervall ausgewertet. Diese Auswertung zeigt, ob ein Puls nur zu einem sehr speziellen Zeitpunkt eine hohe Güte erreicht oder ob der Zielzustand über ein kleines Zeitfenster stabil bleibt. Für eine spätere experimentelle Umsetzung ist diese Stabilität wichtig, weil die Bewertung der Pulsform dann nicht nur von einem einzelnen idealisierten Endzeitpunkt abhängt.

Die Ergebnisse zeigen außerdem, dass die reine Verkürzung der Transportdauer nicht das einzige Optimierungsziel sein kann. Bei sehr kurzen Zeiten steigt die Infidelität für alle Pulsfamilien stark an. Dies weist auf eine effektive untere Zeitgrenze hin, unterhalb derer die gewünschte Zustandsübertragung mit den betrachteten Potentialen nicht mehr zuverlässig möglich ist. Die Shortcuts-to-Adiabaticity-Pulse erreichen diese Grenze am besten, ohne dass die Pulsform durch die numerische Optimierung noch wesentlich verbessert werden muss.

Schwingungsanregungen und Aufheizung

Für die Bewertung des Atomtransportes reicht es nicht aus, nur den Fehler am Ende des Protokolls zu betrachten. Ein Puls kann zwar am Ende eine hohe Überlappung mit dem Zielzustand erreichen, während des Transports aber trotzdem stark angeregte Bewegungszustände besetzen. Solche vorübergehenden Anregungen sind experimentell relevant, weil sie mit Aufheizung und möglichen Verlusten verbunden sein können. Deshalb haben wir zusätzlich zur Infidelität verschiedene Maße für die während des Protokolls auftretende Aufheizung untersucht.

Dazu wurde die zeitabhängige Wellenfunktion auf die Eigenzustände der bewegten Falle projiziert. Aus dieser Verteilung lassen sich der mittlere besetzte Bewegungszustand, die Breite der Verteilung und eine effektive Temperatur abschätzen. Wie erwartet nehmen diese Größen bei sehr kurzen Protokolldauern zu. Der in Abbildung 4 gezeigte Vergleich der Pulsfamilien zeigt jedoch, dass Aufheizung und Endgenauigkeit stark von der Pulsform abhängen. Einzelne experimentell motivierte Pulsfamilien können in bestimmten Zeitbereichen günstige Zwischengrößen

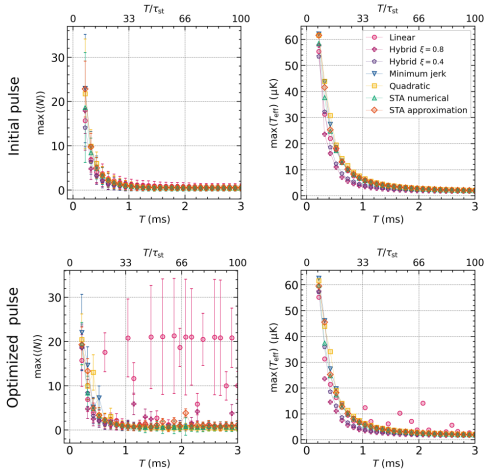

Abbildung 4: Maße für Aufheizung und Bewegungsanregung während des Transports. Die Abbildung ergänzt den Fehler am Ende des Protokolls um die Frage, ob während des Protokolls höhere Bewegungszustände besetzt werden. Quelle: Cicali et al., Phys. Rev. Applied 24, 024070 (2025), DOI: 10.1103/7r3w-8m61.

zeigen; das robusteste Gesamtbild für kurze und präzise Protokolle liefern in den betrachteten Parametern jedoch die Shortcuts-to-Adiabaticity-Pulse.

Die Shortcuts-to-Adiabaticity-Pulse zeigen in diesem Vergleich ein günstiges Gesamtverhalten. Die numerischen Ergebnisse weisen auf eine untere Zeitgrenze in der Größenordnung von $8\tau_{st}$ hin; den konkreten Fehlerschwellenwert von 10^{-4} erreichen die STA-Pulse für die betrachteten Parameter bei etwa $18\tau_{st}$. In diesem Bereich halten sie auch die während des Protokolls auftretenden Schwingungsanregungen in einem kontrollierten Bereich. Damit erfüllen sie die Anforderung, die für eine experimentelle Implementierung zentral ist: Der Transport soll nicht nur am Ende korrekt sein, sondern auch während der Ausführung die Besetzung unerwünschter Bewegungszustände begrenzen.

Bedeutung der Ergebnisse

Die Arbeiten zeigen, dass eine realistische Beschreibung des Atomtransportes den Transfer von und zu den statischen optischen Pinzetten berücksichtigen muss. Gerade dieser Transfer kann ein wesentlicher Geschwindigkeitsengpass sein. Durch die gemeinsame Optimierung von Einfangen, Transport und Freigabe konnten wir deutlich kürzere Kontrollsequenzen ohne unkontrollierte Bewegungsanregungen zeigen. Dies ist für die Nutzung bewegter optischer Pinzetten in einem neutralen-Atom-Prozessor wichtig.

Die untersuchten Fallentiefen und Transportdistanzen liegen in einem Bereich, der für aktuelle Experimente erreichbar ist. Die STA-Pulse zeigen dort eine geringe Abhängigkeit von der Fallentiefe und ein stabiles Verhalten bei veränderten Transportdistanzen. Zudem konnten sie durch einfache analytische Näherungen für Position und Fallentiefe beschrieben werden. Damit entsteht eine praktische Brücke zwischen theoretischer Optimierung und experimenteller Steuerungssoftware.

Zusammenfassend liefern STA-Pulse und numerische optimale Kontrolle präzise, kurze Pulssequenzen; die ausgewiesenen Infidelitäten liegen deutlich unter der Zielmarke von $2\,\%$.

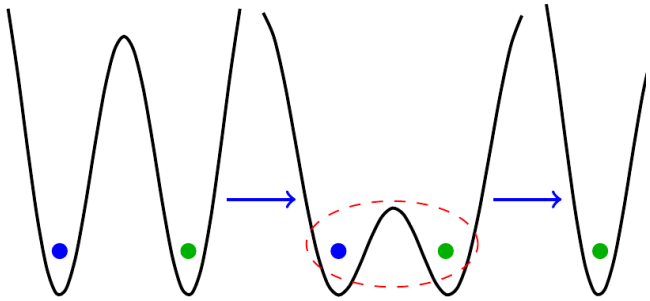

Abbildung 5: Prinzip eines kollisionsbasierten Gatters in einem optischen Doppeltopf. Die kontrollierte Absenkung der Barriere erzeugt die Wechselwirkung, aus der SWAP- und $\sqrt{\text{SWAP}}$-Operationen entstehen. Quelle: Singh et al., Phys. Rev. Applied 24, 034007 (2025), DOI: 10.1103/xqzw-m27l.

Zwei-Qubit-Gatter

Ein zweiter Schwerpunkt der Arbeiten betraf kollisionsbasierte Zwei-Qubit-Gatter für fermionische Atome in optischen Gittern. Diese Arbeiten knüpften direkt an die Projektziele an: Die Gatter sollten mit realistischen experimentellen Parametern in weniger als 1 ms ausgeführt werden, und die Fehlerrate sollte unter 2 % liegen. Im Projekt wurden dafür zwei komplementäre Simulations- und Optimierungswege entwickelt. Der erste Weg nutzt effiziente Fermi-Hubbard-Modelle und erweitert sie für schnelle Gatter um höhere Energiebänder. Der zweite Weg verwendet eine genauere direkte Simulation der Schrödinger-Gleichung mit effektiv eindimensionalem Einschluss, die über die Fermi-Hubbard-Näherung hinausgeht und zusätzliche experimentelle Randbedingungen einbezieht.

Die Ergebnisse sind in zwei Veröffentlichungen dargestellt: J. Singh, J. A. P. Reuter, T. Calarco, F. Motzoi und R. Zeier, “Optimizing two-qubit gates for ultracold atoms using Fermi-Hubbard models”, Phys. Rev. Applied 24, 034007 (2025), DOI: 10.1103/xqzw-m27l, sowie J. A. P. Reuter, J. Singh, T. Calarco, F. Motzoi und R. Zeier, “Optimizing two-qubit gates for ultracold fermions in optical lattices”, Phys. Rev. A 113, 052603 (2026), DOI: 10.1103/j6x3-hh74. Im Folgenden werden die dort erarbeiteten Ergebnisse im Hinblick auf die erreichten Projektziele zusammengefasst.

Kollisionsgatter im Doppeltopf

Das physikalische Grundprinzip ist in Abbildung 5 dargestellt. Zwei ^{6}Li-Atome befinden sich in einem optischen Doppeltopf. Durch eine kontrollierte Absenkung der Barriere können die Atome miteinander wechselwirken und dadurch SWAP- beziehungsweise $\sqrt{\text{SWAP}}$-Operationen ausführen. Die logischen Zustände werden dabei durch interne Spinzustände der Atome beschrieben, während die Ortsfreiheitsgrade im Doppeltopf die kontrollierte Kollision vermitteln. Diese Kopplung zwischen Spin, Ort und Wechselwirkung macht die Gatter leistungsfähig, stellt aber auch hohe Anforderungen an die Pulsform: Die Atome sollen während der Gatteroperation hinreichend stark wechselwirken, am Ende aber wieder im gewünschten räumlichen Zustand liegen.

Im experimentellen Kontext werden die relevanten Größen über optische Gitterpotentiale eingestellt. Die kurzen und langen Gitter erzeugen die Form des Doppeltopfs; ihre zeitabhängigen Tiefen bestimmen insbesondere die Tunnelkopplung zwischen linker und rechter Seite des

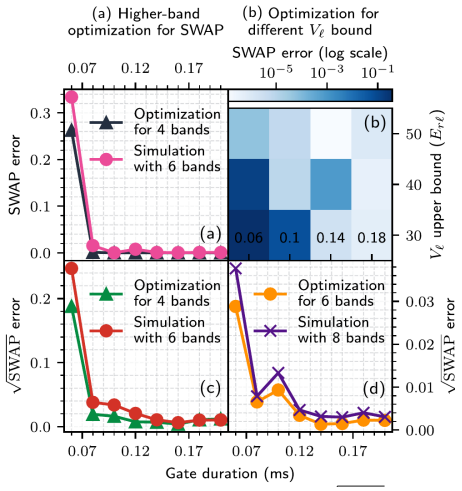

Abbildung 6: Mehrband-Fermi-Hubbard-Optimierung für SWAP- und $\sqrt{\text{SWAP}}$-Gatter. Die Abbildung zeigt, dass Fehler unterhalb der Projektzielmarke von $2\,\%$ bereits für Gatterzeiten weit unter $1\,\text{ms}$ erreicht werden. Quelle: Singh et al., Phys. Rev. Applied 24, 034007 (2025), DOI: 10.1103/xqzw-m27l.

Doppeltopfs. Für das $\sqrt{\text{SWAP}}$-Gatter kommt zusätzlich die Wechselwirkungsstärke hinzu, die über die Streulänge beschrieben wird. Die zentrale Kontrollaufgabe besteht darin, diese experimentellen Stellgrößen so zu formen, dass ein schneller nichtadiabatischer Prozess entsteht, der am Ende dennoch eine hohe Gattergenauigkeit liefert.

Mehrband-Fermi-Hubbard-Optimierung

Für die schnelle Optimierung wurde zunächst eine Fermi-Hubbard-Beschreibung verwendet. Dieses Modell beschreibt die Dynamik über effektive Hopping- und Wechselwirkungsparameter und ist daher wesentlich effizienter als eine direkte Simulation der vollständigen Wellenfunktion. Im ersten Schritt wurde ein Zwei-Band-Fermi-Hubbard-Modell untersucht. Es erlaubt analytische Einsichten, etwa für zeitoptimale SWAP-Pulse unter Kontrollbeschränkungen, und dient als Startpunkt für numerische Optimierungen. Für sehr schnelle Gatter zeigte sich jedoch, dass dieses einfache Modell die Dynamik nicht vollständig erfasst.

Der entscheidende Befund der Veröffentlichung ist, dass höhere Bänder für die nichtadiabatische Dynamik schneller Gatter nicht nur eine Fehlerquelle sind, sondern gezielt in die Modellierung einbezogen werden müssen. Während der Pulssequenz können höhere Energiebänder vorübergehend besetzt werden; am Ende des Gatters müssen diese Anregungen jedoch wieder weitgehend verschwinden. Für die Optimierung bedeutet dies, dass ein realistisches Modell mehrere Bänder und die zugehörigen Hopping- und Wechselwirkungsterme enthalten muss. Die Veröffentlichung zeigt, dass vier Bänder für das SWAP-Gatter ausreichen, während das $\sqrt{\text{SWAP}}$-Gatter von einer Optimierung mit sechs Bändern profitiert.

Die zentralen Ergebnisse der Mehrband-Optimierung sind in Abbildung 6 zusammengefasst. Für das SWAP-Gatter werden Fehler unter 10^{-3} für Gatterzeiten größer als $0{,}08\,\text{ms}$ erreicht. Die entsprechenden Sechs-Band-Simulationen stimmen für Gatterzeiten größer als $0{,}1\,\text{ms}$ eng mit den Vier-Band-Optimierungen überein. Für das $\sqrt{\text{SWAP}}$-Gatter werden mit Vier-Band-Optimierungen Fehler unter $0{,}007$ für Gatterzeiten größer als $0{,}12\,\text{ms}$ erreicht. Eine Optimierung mit sechs Bändern und größerem zulässigem Wert der langen Gittertiefe senkt den Fehler auf unter $0{,}005$ für Gatterzeiten größer als $0{,}12\,\text{ms}$. Diese Werte liegen deutlich unter der Projektzielmarke von $2\,\%$.

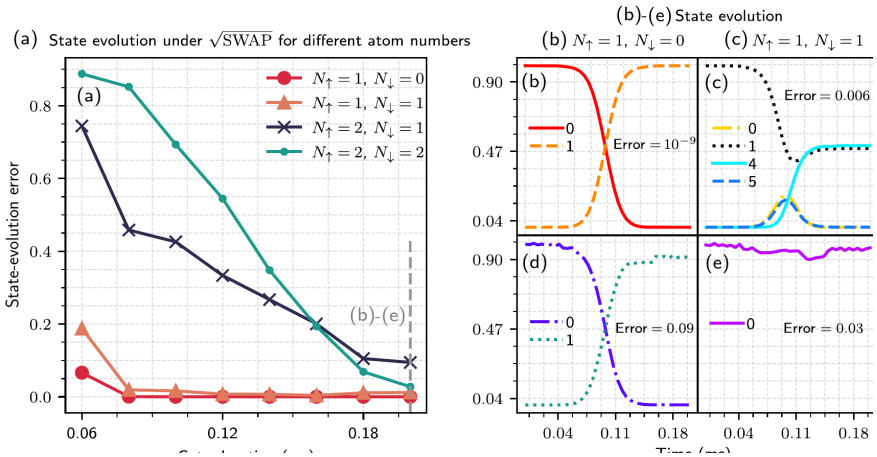

Abbildung 7: Wirkung der optimierten $\sqrt{\text{SWAP}}$-Pulse auf unterschiedliche Atomzahlen im Doppeltopf. Der Zwei-Atom-Fall liefert die gewünschte Gatterdynamik; Drei- und Vier-Atom-Konfigurationen beschreiben relevante Fehlerfälle der Präparation. Quelle: Singh et al., Phys. Rev. Applied 24, 034007 (2025), DOI: 10.1103/xqzw-m27l.

Besonders wichtig ist der Vergleich mit der Zielzeit des Projektes. Die erreichten Gatterzeiten liegen nicht nur unter 1 ms, sondern im Bereich von wenigen Zehntel Millisekunden oder darunter. In der Veröffentlichung wird ein SWAP-Transfer mit einer Güte von $0{,}999$ in $0{,}08$ ms und ein $\sqrt{\text{SWAP}}$-Transfer mit einer Güte von $0{,}995$ in $0{,}12$ ms berichtet. Die vollständigere Gatteroptimierung, bei der auch die Anfangszustände $|\uparrow\uparrow\rangle$ und $|\downarrow\downarrow\rangle$ berücksichtigt werden, liefert eine SWAP-Güte von $0{,}997$ in $0{,}10$ ms und eine $\sqrt{\text{SWAP}}$-Güte von $0{,}993$ in $0{,}16$ ms. Auch diese strengere Betrachtung unterschreitet die vorgegebene Fehlermarke deutlich.

Die Ergebnisse belegen damit zwei Punkte zugleich. Erstens wurden die quantitativen Projektziele für die Zwei-Qubit-Gatter in den Simulationen erreicht. Zweitens wurde gezeigt, welche Modellgenauigkeit für schnelle Kollisionsgatter erforderlich ist: Eine effiziente Fermi-Hubbard-Beschreibung bleibt möglich, muss für kurze nichtadiabatische Pulse aber als Mehrbandmodell formuliert werden.

Besetzungsfehler und zusätzliche Atome

Neben dem idealen Fall mit zwei Atomen ist für die experimentelle Bewertung wichtig, wie die Kontrollpulse auf andere Atomzahlen im Doppeltopf wirken. Abbildung 7 zeigt solche Ein-, Zwei-, Drei- und Vier-Atom-Konfigurationen. Diese Analyse trennt die eigentliche Gattergüte von möglichen Präparationsfehlern und zeigt, welche Konfigurationen zusätzliche Optimierung benötigen können.

Im idealen Gatterfall befindet sich genau ein Spin-up- und ein Spin-down-Atom im Doppeltopf. In realen Experimenten können jedoch auch einfach besetzte oder überbesetzte Doppeltöpfe auftreten. Für eine spätere Integration ist deshalb entscheidend, wie die optimierten Pulse auf solche Zustände wirken und ob sie zusätzliche Anregungen erzeugen. Die Veröffentlichung untersucht dazu die Wirkung der optimierten $\sqrt{\text{SWAP}}$-Pulse auf unterschiedliche Atomzahlen. Für Einzelatomzustände ergeben sich bei Gatterzeiten größer als $0{,}08$ ms Infidelitäten unter 5×10^{-4}. Der Zwei-Atom-Fall entspricht den eigentlichen Optimierungsergebnissen. Drei- und Vier-Atom-Konfigurationen zeigen dagegen größere Fehler, insbesondere bei kurzen Gatterzeiten.

Diese Ergebnisse sind für die Einordnung wichtig. Die höheren Fehler der Drei- und Vier-Atom-Konfigurationen stellen die erreichte Gattergenauigkeit im vorgesehenen Unterraum mit zwei

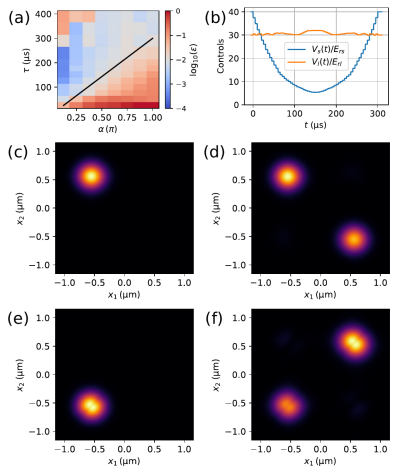

Abbildung 8: Optimierung eines kollisionsbasierten Gatters in der Simulation mit effektiv eindimensionalem Einschluss. Die Abbildung zeigt die optimierten Kontrollen und die resultierenden Anfangs- und Endzustände für verschiedene Startkonfigurationen. Quelle: Reuter et al., Phys. Rev. A 113, 052603 (2026), DOI: 10.1103/j6x3-hh74.

Atomen nicht in Frage. Sie zeigen vielmehr, dass gute Zustandspräparation für die experimentelle Umsetzung relevant bleibt. Zugleich weist die Veröffentlichung darauf hin, dass solche Fehlerzustände bei Bedarf ebenfalls in eine erweiterte Optimierung einbezogen werden können. Damit liefert die Analyse eine realistische Einschätzung der Grenzen der optimierten Pulse und ihrer möglichen Weiterentwicklung.

Simulation jenseits der Fermi-Hubbard-Näherung

Die zweite Veröffentlichung vertieft die Modellierung durch eine Simulation mit effektiv eindimensionalem Einschluss, die über die Fermi-Hubbard-Näherung hinausgeht. Die Optimierung berücksichtigt dabei realistische Beschränkungen der Laserintensitäten, eine endliche Schrittweite der stückweise konstanten Pulse und eine Transferfunktion zwischen elektrischem Signal und optischer Antwort. Ein Beispiel für diese Optimierung ist in Abbildung 8 gezeigt.

Diese zweite Modellierungsebene erfüllt im Projekt eine andere Funktion als die effiziente Mehrbandbeschreibung. Das Fermi-Hubbard-Modell ermöglicht eine schnelle systematische Suche nach guten Pulsen. Die Simulation mit effektiv eindimensionalem Einschluss erlaubt dagegen eine genauere Prüfung der zugrunde liegenden physikalischen Annahmen. Sie beschreibt die Bewegung im Doppeltopf direkter und kann Effekte erfassen, die in einer reinen Hubbard-Parametrisierung nur vereinfacht auftreten. Dazu gehört insbesondere die vom Impuls abhängige Wechselwirkungsenergie der wechselwirkenden Atome.

Die Optimierung in dieser Simulation wird als mehrstufiger Prozess aufgebaut. Zunächst werden Einteilchen-Übergänge betrachtet, anschließend Zweiteilchen-Gatter, und schließlich werden die Kontrollen für die relevanten Zieloperationen angepasst. Die Veröffentlichung berücksichtigt dabei experimentelle Randbedingungen: die oberen Grenzen der Laserintensitäten, die diskrete Zeitauflösung der stückweise konstanten Pulse und eine gemessene beziehungsweise modellierte Transferfunktion zwischen dem elektrischen Steuersignal und der optischen Antwort. Dadurch wird die Simulation näher an das Experiment herangeführt.

Für die Gatteroptimierung wird ein verschränkendes Kollisionsgatter in einem Doppeltopf betrachtet. Bei einem Beispiel mit $\alpha = \pi$ und einer Gatterzeit von $300\ \mu$s wird eine optimierte Puls-

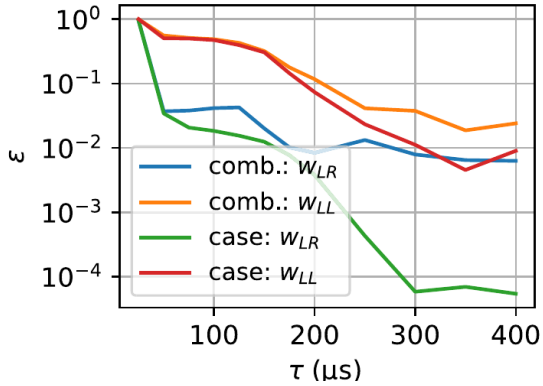

Abbildung 9: Vergleich einer gemeinsamen Optimierung mit einer fallweisen Optimierung für unterschiedliche Anfangszustände. Besonders für Atome auf verschiedenen Seiten des Doppeltopfs verbessert die getrennte Optimierung die Infidelität für längere Gatterzeiten deutlich. Quelle: Reuter et al., Phys. Rev. A 113, 052603 (2026), DOI: 10.1103/j6x3-hh74.

form angegeben; die resultierenden Endzustände zeigen aber bereits, dass eine gemeinsame Optimierung verschiedener Anfangsfälle nicht in allen Fällen gleich gut funktioniert. Genau dieser Befund führt zur fallweisen Optimierung im nächsten Abschnitt.

Fallweise Optimierung

Ein zentrales Ergebnis der genaueren Simulation ist die unterschiedliche Dynamik für Atome, die auf verschiedenen Seiten des Doppeltopfs starten, und Atome, die auf derselben Seite starten. Diese Unterscheidung ist in der Fermi-Hubbard-Näherung nicht vollständig sichtbar, weil die Simulation mit effektiv eindimensionalem Einschluss eine vom Impuls abhängige Wechselwirkungsenergie erfasst. Die fallweise Optimierung in Abbildung 9 nutzt diese Unterscheidung und verbessert die Infidelität für relevante Anfangsfälle deutlich.

Physikalisch liegt der Unterschied darin, dass die Wechselwirkung nicht nur von der räumlichen Überlappung der Atome abhängt. In der genaueren Beschreibung spielt auch die Impulsstruktur der Wellenfunktion eine Rolle. Atome, die auf verschiedenen Seiten des Doppeltopfs starten, besitzen während der Kollision andere relative Impulsanteile als Atome, die zunächst auf derselben Seite lokalisiert sind. Die Veröffentlichung zeigt, dass diese Impulsabhängigkeit zu unterschiedlichen effektiven Wechselwirkungsstärken führt. Eine einzige Pulsform, die beide Fälle gleichzeitig optimiert, ist für die vollständige Gatteroptimierung notwendig aber auch herausfordernder.

Die fallweise Optimierung trennt diese Situationen. Ein Fall beschreibt Atome, die auf verschiedenen Seiten des Doppeltopfs starten; dies ist besonders relevant für Quantensimulation und Quantencomputing. Der andere Fall beschreibt Atome, die auf derselben Seite starten; dies kann für Anwendungen in der Quantenchemie relevant sein. Beide Optimierungen enthalten weiterhin die Einteilchendynamik, weil die Pulse auch für einfach besetzte Doppeltöpfe sinnvoll wirken sollen. Das Ergebnis ist deutlich: Für Atome auf verschiedenen Seiten des Doppeltopfs verbessert die fallweise Optimierung die Infidelität bei längeren Gatterzeiten um etwa zwei Größenordnungen gegenüber der gemeinsamen Optimierung. Für Atome auf derselben Seite ist der Vorteil kleiner, aber ebenfalls sichtbar.

Diese Analyse ist ein wichtiges Projektergebnis, weil sie über eine reine Verbesserung einzelner Pulsformen hinausgeht. Sie zeigt, wie eine gute Optimierung von der späteren Anwendung

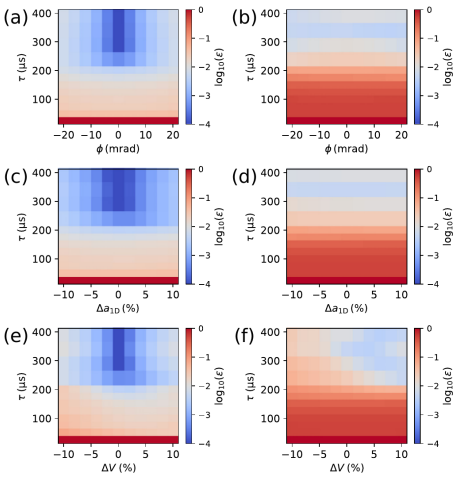

Abbildung 10: Robustheit der falloptimierten Pulse in der Simulation mit effektiv eindimensionalem Einschluss gegenüber relativer Phase, effektiver eindimensionaler Streulänge und Laserintensität. Quelle: Reuter et al., Phys. Rev. A 113, 052603 (2026), DOI: 10.1103/j6x3-hh74.

abhängt. Für eine Quantensimulation oder eine quantenchemische Anwendung können unterschiedliche Anfangszustände relevant sein; die Kontrolloptimierung sollte diese Unterschiede gezielt berücksichtigen. Damit wurde eine Grundlage geschaffen, um die Gattersequenzen nicht nur allgemein schnell, sondern anwendungsspezifisch präzise zu gestalten.

Robustheit der verfeinerten Pulse

Für die experimentelle Anschlussfähigkeit ist entscheidend, wie empfindlich die optimierten Pulse gegenüber Abweichungen von idealen Bedingungen sind. In Abbildung 10 werden eine asymmetrische Gitterphase, eine Unsicherheit der effektiven eindimensionalen Streulänge und Intensitätsabweichungen betrachtet. Diese Analyse ergänzt die Robustheitstests der Fermi-Hubbard-Optimierung und zeigt, welche Fehlerquellen in der experimentellen Umsetzung besonders relevant sind.

Bereits in der Fermi-Hubbard-Veröffentlichung wurden mehrere Fehlerquellen untersucht. Dazu gehören Kopplungen zu benachbarten Doppeltöpfen, Phasenfluktuationen und Intensitätsinhomogenitäten. Für die dort betrachteten optimierten SWAP-Pulse bleibt die Güte nach einem Gatter für alle untersuchten Fehlerquellen größer als $0{,}998$. Aus wiederholten Gatteranwendungen wird eine exponentielle Abklingzeit von mehr als $74\,\mathrm{ms}$ beziehungsweise mehr als 460 Gatterzyklen abgeschätzt. Diese Robustheit ist wesentlich, weil die verkürzte Gatterdauer nicht durch eine erhöhte Empfindlichkeit gegenüber experimentellem Rauschen erkauft werden soll.

Die Simulation mit effektiv eindimensionalem Einschluss ergänzt diese Betrachtung mit einer anderen Fragestellung. Dort wird untersucht, wie empfindlich die falloptimierten Pulse gegenüber einer relativen Phasenverschiebung der Gitter, einer Abweichung der effektiven eindimensionalen Streulänge und einer Änderung der Laserintensität sind. Die Ergebnisse zeigen, dass Pulse mit sehr niedriger Infidelität im fehlerfreien Fall empfindlicher gegenüber kleinen Abweichungen werden können, insbesondere für Atome, die auf verschiedenen Seiten des Doppeltopfs starten, und für längere Gatterzeiten. Für kürzere Gatterzeiten ist das Verhalten in den untersuchten Fällen robuster, allerdings auf Kosten einer höheren Infidelität. Damit entsteht eine experimentell relevante Abwägung zwischen minimaler Infidelität im idealen Modell und Robustheit gegenüber Parameterabweichungen.

Für die Projektziele ist diese Robustheitsanalyse zentral. Sie zeigt, dass die entwickelten Methoden nicht nur einzelne optimale Pulse in einem idealisierten Modell liefern, sondern auch die wichtigsten experimentellen Fehlerquellen quantitativ untersuchen können. Damit werden die Voraussetzungen geschaffen, um die Pulse in enger Zusammenarbeit mit dem Experiment weiter zu kalibrieren und an die tatsächlichen Steuerungs- und Rauschbedingungen anzupassen.

Einordnung der Ergebnisse

Zusammenfassend wurden für die Zwei-Qubit-Gatter die wesentlichen quantitativen Projektanforderungen in den Simulationen erfüllt. Die Mehrband-Fermi-Hubbard-Optimierung liefert Gatterzeiten deutlich unter 1 ms und Infidelitäten deutlich unter 2 %. Die in der Veröffentlichung berichteten Werte von $0{,}08$ ms bei einer Güte von $0{,}999$ für SWAP und $0{,}12$ ms bei einer Güte von $0{,}995$ für $\sqrt{\text{SWAP}}$ unterschreiten die Zielmarken klar. Auch die vollständigere Gatteroptimierung mit mehreren Anfangszuständen bleibt mit $0{,}10$ ms beziehungsweise $0{,}16$ ms und Güten von $0{,}997$ beziehungsweise $0{,}993$ deutlich im Zielbereich.

Gleichzeitig wurde die Modellbasis für die experimentelle Umsetzung substanziell erweitert. Die Arbeiten zeigen, dass schnelle Gatter nicht mit einem zu einfachen Zwei-Band-Modell bewertet werden sollten, sondern eine Mehrbandbeschreibung benötigen. Die genauere Simulation mit effektiv eindimensionalem Einschluss zeigt darüber hinaus, welche Effekte in einer Hubbard-Näherung verborgen bleiben, insbesondere die vom Impuls abhängige Wechselwirkung. Damit stehen zwei komplementäre Werkzeuge zur Verfügung: ein effizientes Modell zur schnellen Optimierung und ein genaueres Modell zur Validierung, Verfeinerung und anwendungsspezifischen Anpassung.

Damit wurde im Rahmen von FermiQP ein wichtiger Baustein für die kontrollierte Ausführung schneller kollisionsbasierter Zwei-Qubit-Gatter erarbeitet. Die entwickelten Methoden liefern nicht nur konkrete Pulssequenzen, sondern auch ein belastbares Verständnis der relevanten Fehlerquellen, Modellgrenzen und Robustheitsanforderungen.

Schnittstelle zum Experiment und Transferfunktionen

Die in den vorangehenden Abschnitten beschriebenen Kontrollverfahren liefern zeitabhängige Pulse, die in den Modellen die gewünschte Dynamik erzeugen. Für die experimentelle Umsetzung ist jedoch eine weitere Schnittstelle entscheidend: Das im Rechner definierte Kontrollsignal wird nicht direkt als optisches Potential oder allgemeines Kontrollfeld realisiert, sondern durchläuft zunächst die experimentelle Steuerungssoftware und anschließend eine reale elektronische und optische Signalkette. Genau an dieser Stelle liegt ein wesentlicher Teil der Schnittstelle zu den Experimenten: Die abstrakten Kontrollfreiheitsgrade der Simulation müssen auf programmierbare Größen der Kontrollelektronik und auf die tatsächlich entstehenden optischen Potentiale bezogen werden. Im Folgenden geht es vor allem um den physikalischen Teil dieser Schnittstelle, also um die Abbildung programmierter Eingangssignale auf die tatsächlich wirkenden Felder. Elektronische Filter, Verstärker, Modulatoren, akustooptische Komponenten und optische Elemente können dabei Amplituden dämpfen, Phasen verschieben, Flanken abrunden oder allgemein nichtlineare Verzerrungen erzeugen. Ein im idealisierten Modell optimaler Puls kann daher an Güte verlieren, wenn das im Experiment wirkende Feld deutlich vom programmierten Eingangssignal abweicht.

Die Arbeit von J. Singh, R. Zeier, T. Calarco und F. Motzoi, “Compensating for Nonlinear Distortions in Controlled Quantum Systems”, Phys. Rev. Applied 19, 064067 (2023), adressiert diese Lücke zwischen optimaler Kontrolle und experimenteller Hardware (DOI: 10.1103/PhysRevApplied.19.064067). Ziel ist es, Verzerrungen der Signalkette aus Eingangs- und Ausgangsdaten zu bestimmen und dieses Modell anschließend in die Pulsoptimierung einzubeziehen. Damit liefert die Methode einen Baustein für die präzise Modellierung der experimentellen Schnittstellen, die im Projektkontext auch mit der Ebene der Steuerungssoftware verbunden werden müssen. Zugleich liefert sie eine Grundlage für Kalibrierungsverfahren, mit denen Kontrollsequenzen an reale und sich gegebenenfalls ändernde Systemparameter angepasst werden können.

Im einfachsten Fall kann eine solche Signalkette als lineares System beschrieben werden. Dann ist die Transferfunktion im Frequenzraum durch das Verhältnis

$$T(\omega) = \frac{Y(\omega)}{X(\omega)}$$

gegeben, wobei $X(\omega)$ das Spektrum des programmierten Eingangssignals und $Y(\omega)$ das Spektrum des tatsächlich erzeugten Ausgangssignals bezeichnet. Die Transferfunktion enthält damit sowohl die Amplitudenübertragung als auch die Phasenverschiebung der Signalkette. Dieses Bild ist experimentell besonders naheliegend, wenn die dominante Abweichung durch eine endliche Bandbreite entsteht. Es reicht aber nicht aus, wenn die Hardwareantwort von der Signalamplitude abhängt oder wenn verschiedene Frequenzanteile nichtlinear miteinander gekoppelt werden. Singh et al. zeigen daher, dass eine rein lineare Beschreibung bei stark nichtlinearen Verzerrungen zu unzuverlässigen Korrekturen führen kann.

Ein konkreter linearer Transferfunktionsbezug tritt auch in der Arbeit von J. A. P. Reuter, J. Singh, T. Calarco, F. Motzoi und R. Zeier, “Optimizing two-qubit gates for ultracold fermions in optical lattices”, Phys. Rev. A 113, 052603 (2026), DOI: 10.1103/j6x3-hh74, auf. Dort werden die optischen Intensitäten als stückweise konstante Signale mit einem Zeitschritt von $\Delta t = 5\,\mu$s programmiert. Aufgrund der endlichen Bandbreite der optischen Signalkette ist die tatsächliche optische Antwort jedoch nicht mehr exakt stückweise konstant. Die Arbeit verwendet deshalb eine gemessene komplexe Transferfunktion der optischen Ansteuerung, um aus dem elektrischen Signal die optische Antwort zu rekonstruieren. Damit werden in der Gatteroptimierung nicht nur ideale Kontrollparameter, sondern auch realistische experimentelle Randbedingungen der Kontrollelektronik und der optischen Antwort berücksichtigt.

Die methodische Erweiterung in Singh et al. besteht darin, nichtlineare Verzerrungen durch eine endliche Volterra-Reihe zu beschreiben. Diese Darstellung verallgemeinert die lineare Impulsantwort auf höhere Ordnungen. Im linearen Anteil hängt der Ausgang zu einem gegebenen Zeitpunkt von aktuellen und vergangenen Eingangswerten ab. Im quadratischen Anteil, der in der Arbeit im Detail ausgearbeitet wird, kommen zusätzlich Produkte von Eingangswerten zu verschiedenen Zeiten hinzu. Die endliche Speicherlänge der Signalkette legt fest, wie viele vergangene Zeitschritte in diese Beschreibung eingehen. Damit lassen sich Verzerrungen beschreiben, die nicht nur eine Frequenzantwort besitzen, sondern auch von der Amplitude und von der zeitlichen Struktur des Eingangssignals abhängen.

Die Koeffizienten dieser Volterra-Beschreibung werden aus Paaren von Eingangs- und Ausgangspulsen bestimmt. Entscheidend ist dabei, dass die Trainingspulse genügend relevante Frequenzanteile enthalten, damit die Signalkette über den für die spätere Kontrolle wichtigen Bereich charakterisiert wird. Die Veröffentlichung zeigt anhand numerischer Beispiele für ein kontrolliertes Rydberg-System, dass die quadratische Schätzung nichtlineare Verzerrungen

deutlich besser erfassen kann als eine rein lineare Schätzung. Zugleich wird herausgearbeitet, dass die Qualität der Schätzung durch geeignete Trainingsdaten und durch eine günstige Parametrisierung der Schätzaufgabe verbessert werden kann. Besonders wichtig für die optimale Kontrolle ist, dass für den quadratischen Fall auch die Ableitungen der verzerrten Pulse nach den programmierten Kontrollparametern angegeben werden. Damit kann die Transferfunktionsbeschreibung direkt in eine gradientenbasierte Optimierung eingebunden werden.

Die geschätzte Verzerrung kann auf zwei Arten genutzt werden. Eine erste Möglichkeit ist die Vorverzerrung des programmierten Pulses: Das Eingangssignal wird so angepasst, dass nach der Verzerrung durch die Hardware möglichst der gewünschte Zielpuls entsteht. Singh et al. zeigen jedoch, dass diese Strategie bei komplexeren optimierten Pulsen nicht immer ausreicht. Stattdessen ist es oft zweckmäßiger, die Verzerrung selbst als Teil des Kontrollmodells zu behandeln. Die Optimierung sucht dann nicht nach einem Puls, der in einem idealisierten Modell gut funktioniert, sondern nach einem programmierten Signal, dessen verzerrte experimentelle Wirkung die gewünschte Quantendynamik erzeugt. In den numerischen Tests der Veröffentlichung kann die Einbindung der geschätzten Verzerrung in die offene Pulsoptimierung die durch die nichtlineare Signalkette verursachten Fehler für das betrachtete Rydberg-Beispiel deutlich reduzieren.

Für FermiQP ist diese Methodik ein wichtiger Baustein für die experimentelle Anschlussfähigkeit der entwickelten Kontrollverfahren. Die Abschnitte zum Atomtransport und zu Zwei-Qubit-Gattern zeigen, dass kurze und präzise Pulse in realistischen Modellen berechnet werden können. Die Transferfunktionsarbeiten ergänzen diese Ergebnisse um die Frage, wie solche Pulse unter den Bedingungen einer realen Steuerhardware umgesetzt werden können. Lineare Transferfunktionen decken den häufig auftretenden Fall endlicher Bandbreiten und Phasenverzögerungen ab. Die Volterra-basierte Erweiterung erlaubt darüber hinaus die Behandlung nichtlinearer Verzerrungen, die bei schnellen, amplitudenmodulierten Kontrollsequenzen relevant werden können. Damit wird die Brücke zwischen Theorie, numerischer optimaler Kontrolle, experimenteller Steuerungssoftware und Kalibration geschlossen.

Mit Blick auf die Gesamtintegration des FermiQP-Demonstrators ist dieser Punkt als methodische Grundlage besonders relevant. In der späteren Integration müssen Kontrollsequenzen auf der Ebene der Kontrollelektronik programmiert, mit den übrigen Prozessorteilen koordiniert und bei Änderungen experimenteller Parameter weiter angepasst werden. Transferfunktionsmodelle liefern hierfür eine kontrolltheoretische Zwischenschicht: Sie können die numerisch optimierten Programmsequenzen mit der physikalischen Wirkung der Hardware verknüpfen und erlauben es, zusätzliche Fehlerquellen oder Nebenbedingungen in die Optimierung einzubeziehen. Damit unterstützen sie nicht nur einzelne Pulse für Atomtransport oder Zwei-Qubit-Gatter, sondern auch die spätere Abstimmung mehrerer Kontrollbausteine, wie sie für Programmanwendungen in der fermionischen Quantensimulation erforderlich wird.

Zusammenfassend zeigen diese Arbeiten, dass die Projektziele nicht nur auf der Ebene idealisierter Pulse verfolgt wurden. Vielmehr wurden auch Methoden entwickelt, um die für eine Laborumsetzung entscheidenden Schnittstellen zwischen Steuerungssoftware, Kontrollelektronik und optischer Antwort zu charakterisieren und in die Optimierung einzubeziehen. Dadurch können modellbasierte Kontrollpulse robuster gegenüber Hardwareverzerrungen gemacht werden, und die im Projekt entwickelten Optimierungsverfahren werden enger an die tatsächlichen experimentellen Steuergrößen angebunden.