

I. Kurzbericht

Aufgabenstellung und wissenschaftlicher und technischer Stand

Das Hauptziel des Projekts war die Entwicklung und Verbesserung von Quantenalgorithmen zur Lösung des Fermi-Hubbard-Modells im thermodynamischen Gleichgewicht. Dabei wurden folgende konkrete Ziele verfolgt:

Z1: Entwicklung von grundlegenden Quantenalgorithmen: Präparation von Variationszuständen 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.

Zu Beginn des Projekts war die Situation in Bezug auf diese Ziele wie folgt:

(i) Es gab keine Algorithmen, die direkt Zustände mit beliebiger Energie präparieren können, mit Ausnahme von Algorithmen, die auf Manipulation des Grundzustandes basierten. Zertifizierbare Methoden skalieren exponentiell mit der Systemgröße, weshalb adiabatische und variationelle Algorithmen trotz ihrer Einschränkungen praktikable Alternativen bieten. Die Darstellung von Fermionen als Qubits ist aufgrund des Berechnungsaufwands von Methoden wie der Jordan-Wigner-Transformation eine Herausforderung und schwierig zu implementieren.

(ii) Quantenalgorithmen für Vielteilchenprobleme im thermischen Gleichgewicht waren rar. Techniken wie die imaginäre Zeitentwicklung zur Erzeugung von Gibbs-Zuständen und stochastische Methoden zeigten Potenzial, erforderten jedoch exponentielle Rechenzeit und fehlertolerante Hardware.

(iii) Klassische Software zur Simulation von Quantencomputern war nicht ausreichend. Benchmark Daten für die konkret betrachteten Anwendungsfälle waren nicht ausreichend vorhanden.

Ablauf des Vorhabens

Das Projekt bestand aus drei Arbeitspaketen, die in sieben Tasks unterteilt sind. Wir haben die Arbeit größtenteils wie geplant durchgeführt und die Aufgaben erfolgreich abgeschlossen. Die Arbeit hat zu 26 Veröffentlichungen in internationalen Fachzeitschriften geführt (zB. in Phys. Rev. X, PRX Quantum, Phys. Rev. Lett.).

Ergebnisse und Zusammenarbeiten

Effiziente Präparierung von Quantenzuständen: Wir haben Quantenschaltkreise entwickelt, die Vielteilchenzustände mit unterschiedlicher Ordnung (auch topologischer Ordnung) darstellen können. Diese Zustände fallen in die Klasse isometrischer Tensornetzwerke, die mit unitären Gattern auf einem Quantencomputer realisiert werden können. Darüber hinaus haben wir die Darstellung von gemischten Zuständen bei endlicher Temperatur durch isometrische Tensornetzwerkzustände untersucht und dazu einen effizienten Algorithmus entwickelt.

Benchmarking von Quantenalgorithmen: Wir haben verschiedene Anwendungen von Matrixproduktzuständen untersucht, die als Benchmarks für Quantenalgorithmen verwendet werden können. Außerdem haben wir neue numerische Methoden basierend auf Tensornetzwerken entwickelt und untersucht, wie man solche Zustände effizient auf Quantencomputern realisieren kann. Wir haben auch einfache exakte Quantenschaltkreise entwickelt, um interessante Zustände auf Quantencomputern zu realisieren.

Effiziente Quantenalgorithmen: Wir haben einen Algorithmus basierend auf der Jarzynski-Gleichung zur Realisierung thermischer Zustände des Hubbard-Modells (oder allgemein von Quanten-Vielteilchenmodellen) entwickelt und mit Hilfe eines klassischen Algorithmus, der auf dem Quantenalgorithmus basiert, untersucht.

Periodisch angetriebene Systeme absorbieren Energie und es wird allgemein erwartet, dass sie sich auf einen merkmalslosen unendlichen Temperaturzustand erwärmen. Bei genügend hoher Treibfrequenz, kann jedoch ein präthermaler Zustand stabilisiert werden, der sich wie ein konventioneller thermischer Zustand verhält. Es konnte von einem Projektpartner (MPQ) gezeigt werden, dass die klassische Simulation solcher Zustände schwierig ist. Gemeinsam mit Quantinuum haben wir solche präthermalen Zustände auf deren Quantencomputer analysiert und mit klassischen Benchmark-Methoden verglichen. Außerdem haben wir die Theorie von präthermalen Zuständen weiterentwickelt, um Systeme mit fraktionierten Anregungen zu verstehen.

Ein Großteil der Arbeit wurde in Zusammenarbeit mit dem Team an der TUM (Knap, Knolle, Pollmann), sowie mit Doktoranden und Postdocs der Gruppe durchgeführt. Darüber hinaus haben wir eine gemeinsame Kollaboration mit dem Projektpartner Quantinuum gestartet. Wir trafen uns regelmäßig mit allen Mitgliedern von EQUAHUMO, was einige der Ideen des Projekts anregte und inspirierte.