

TECHNISCHE UNIVERSITÄT MÜNCHEN
Department Chemie
Lehrstuhl II
für Organische Chemie

Numerische und Analytische Lösungen für Quanteninformatisch-relevante Probleme

Andreas Spörl

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Chemie der Technischen
Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr. U. K. Heiz
Prüfer der Dissertation: 1. Univ.-Prof. Dr. St. J. Glaser
2. Univ.-Prof. Dr. Th. Huckle

Die Dissertation wurde am 13. 05. 2008 bei der Technischen Universität München
eingereicht und durch die Fakultät für Chemie am 05. 06. 2008 angenommen.

Kurzfassung

Quantencomputer stellen eine der nächsten technologischen Entwicklungsstufen der modernen Computerwissenschaften dar. In der vorliegenden Arbeit sollen einige Aspekte vorgestellt und untersucht werden, die bei der Implementierung von Quantenoperationen (als Bausteine von Quantenalgorithmen) und der Simulation von Quantensystemen relevant sind. Es werden ausgeprägte numerische Untersuchungen zur Implementierung verschiedenster Quantenoperationen auf einer Reihe von Systemen (NMR-Systeme, Josephson-Elemente, u.a.) vorgestellt. Um solche Operationen (beispielsweise QuantenFourierTransformationen, SWAP- oder vielfach-kontrollierte NOT-Operationen) auch noch auf größeren Systemen untersuchen zu können, wurde ein parallelisiertes C++-Programm entwickelt und optimiert. Neben einer hohen Qualität der Operationen wird ein besonderes Augenmerk auf die minimale Implementierungsdauer gelegt. Die minimalen Zeiten stellen sowohl für den Experimentator sowie für den Mathematiker eine interessante Größe dar. Der Erste versucht durch die schnelle Umsetzungen dissipative Effekte zu minimieren, während der Zweite aus dieser Kenngröße Rückschlüsse über die analytischen Lösungen ziehen kann. Dissipative Effekte können jedoch auch direkt in die Optimierung mit einbezogen werden. Die so erhaltenen Lösungen sind sowohl relaxations- als auch zeitoptimiert. Für Systeme mit 3 linear gekoppelten Spin- $\frac{1}{2}$ -Qubits lassen sich für die Simulation indirekter Ising-Kopplungen oder trilinearere Wechselwirkungen auch analytische Lösungen finden. Weiter wurde untersucht, in wie weit sich ein erschöpfender Satz von einfachen Kriterien aufstellen lässt, um Systeme zu identifizieren deren Dynamik sich durch lokale Operationen invertieren lässt. Als Letztes wurde ein vollständiger Quantenalgorithmus zur Unterscheidung von zwei Knoten auf einem Spin- $\frac{1}{2}$ -System implementiert. Die notwendigen Quantenoperationen wurden in diesem Fall analytisch berechnet. Die erhaltenen Resultate weisen eine hohe Übereinstimmung mit theoretischen Werten auf.

Abstract

Quantum computers are one of the next technological steps in modern computer science. Some of the relevant questions that arise when it comes to the implementation of quantum operations (as building blocks in a quantum algorithm) or the simulation of quantum systems are studied. Numerical results are gathered for variety of systems, e.g. NMR systems, Josephson junctions and others. To study quantum operations (e.g. the quantum Fourier transform, SWAP operations or multiply-controlled NOT operations) on systems containing many qubits, a parallel C++ code was developed and optimised. In addition to performing high quality operations, a closer look was given to the minimal times required to implement certain quantum operations. These times represent an interesting quantity for the experimenter as well as for the mathematician. The former tries to fight dissipative effects with fast implementations, while the latter draws conclusions in the form of analytical solutions. Dissipative effects can even be included in the optimisation. The resulting solutions are relaxation and time optimised. For systems containing 3 linearly coupled spin $\frac{1}{2}$ qubits, analytical solutions are known for several problems, e.g. indirect Ising couplings and trilinear operations. A further study was made to investigate whether there exists a sufficient set of criteria to identify systems with dynamics which are invertible under local operations. Finally, a full quantum algorithm to distinguish between two knots was implemented on a spin $\frac{1}{2}$ system. All operations for this experiment were calculated analytically. The experimental results coincide with the theoretical expectations.

Inhaltsverzeichnis

1	Motivation und Überblick	13
2	Grundlagen	19
2.1	Gruppentheorie	19
2.1.1	Definitionen	19
2.1.2	Matrixdarstellung	20
2.1.3	Einfache Matrixoperationen	21
2.1.4	Lie-Gruppen und -Algebren	22
2.1.5	Superoperatorformalismus	27
2.2	Graphentheorie	28
2.3	Quantendynamik und Quantencomputer	28
2.3.1	Dynamik geschlossener Systeme	28
2.3.2	Dynamik offener Systeme	30
2.3.3	Überlegenheit von Quantenalgorithmen	31
2.3.4	Zustände des Quantensystems	33
2.4	Kontrolltheorie	33
2.4.1	Kontrollierbarkeit	34
2.4.2	Gradientenfluss-Algorithmus für Quantenkontrolle	34
3	Parallelisierung des kontrolltheoretischen Computeralgorithmus	41
3.1	Einführung	41
3.2	Quantenkontrollalgorithmen auf Parallelcomputern	41
3.2.1	Quantenkompilation als Kontrollproblem	41
3.2.2	Vergleich mit bisherigem Programmcode	42
3.3	Parallele Matrixmultiplikation	43
3.3.1	Scheibenweise Propagation	43
3.3.2	Baumweise Propagation: Parallel-Prefix-Algorithmus	45
3.4	Optimierte Matrix-Exponentialabbildung	47
3.5	Schlussfolgerung	50
4	Zeitoptimierte Quantengatter auf supraleitenden Schaltelementen	53
4.1	Einleitung	53
4.2	Hamilton-Dynamik von gekoppelten Ladungsqubits	54
4.3	Kontrollierbarkeit und CNOT-Implementierung	54
4.4	Robustheit und unerwünschte Übergänge	59

Inhaltsverzeichnis

4.5	Ansatz einer analytische Lösung für das CNOT auf 2 Ladungsqubits	61
4.6	TOFFOLI-Gatter für 3 linear gekoppelte Ladungsqubits	62
4.7	Schlussfolgerung	63
5	Zeitoptimierte Quantengatter auf Spin-$\frac{1}{2}$-Systemen	65
5.1	Einleitung	65
5.2	Systembeschreibung	66
5.3	Anwendungen	69
5.3.1	Zeitoptimierte QFT auf linearen Spinketten	69
5.3.2	Zeitoptimierte C^{n-1} NOT auf kompletten Spinnetzwerken . .	71
5.3.3	Indirekte Kopplungen auf linearen Spinketten	73
5.4	Diskussion	88
5.5	Schlussfolgerung	90
6	Rekursiv aufgebaute Quantengatter	93
6.1	Theorie	93
6.1.1	Prinzip	93
6.1.2	Fehlerabschätzung und -fortpflanzung	94
6.2	Anwendung	97
6.2.1	Die $1, n$ SWAP Operation	97
6.2.2	Die Quanten-Fourier-Transformation (QFT)	99
6.2.3	C^n NOT auf L_{n+2}	102
6.3	Schlussfolgerungen	105
7	Relaxationsoptimierte Quantengatter	107
7.1	Einleitung	107
7.2	Kontrollierbarkeit offener Quantensysteme	108
7.2.1	Bewegungsgleichung	108
7.2.2	Kontrollierbarkeit des Modellsystems	109
7.3	Erläuterung am Modellsystem	110
7.3.1	Vergleich der relaxations-, zeitoptimierten und einer Standardimplementierung	110
7.3.2	Interpretation der Ergebnisse	113
7.4	Schlussfolgerung	115
8	Analytische optimierte Implementierungen	117
8.1	Indirekte Kopplung bzw. (1,3) CNOT auf der L_3 -Topologie	117
8.1.1	Einleitung	117
8.1.2	Theorie	118
8.1.3	Diskussion	122
8.2	Planare trilineare Wechselwirkung	124
8.3	Schlussfolgerungen	126

9	Lokale Inversion Hamiltonscher Dynamik auf Spin-$\frac{1}{2}$-Systemen	127
9.1	Einleitung	127
9.1.1	Fallunterscheidung	129
9.1.2	Notation	129
9.2	Typ-I: Lokal invertierbare unitäre 1-Parameter Gruppen	129
9.2.1	Geometrie	129
9.2.2	Algebra I: Eigenoperatoren	132
9.2.3	Ising- und Heisenberg-Paarwechselwirkungen	135
9.2.4	Kopplungsnetzwerke von Paarwechselwirkungen	136
9.2.5	Erweiterung auf Multi-Qubit-Interaktionen	138
9.2.6	Sequenzen von Interaktionspropagatoren	139
9.2.7	Multi-Qubit-Hamiltonian der Quantenordnung p	139
9.2.8	Algebra II: Wurzelraum-Zerlegung	142
9.2.9	Beziehung der Zeitumkehr zur Cartan-Zerlegung	146
9.2.10	Zusammenfassung der Typ-I Inversion	148
9.3	Typ-II: Punktweise lokal invertierbare Propagatoren	150
9.4	Schlussfolgerung	154
10	Thermisches Quantencomputing und der Jones-Algorithmus	155
10.1	Einleitung	155
10.1.1	Knoten und Zöpfe	155
10.1.2	Jones-Polynom	160
10.1.3	Quantenmechanischer Algorithmus	161
10.1.4	Thermische Quantenalgorithmien	162
10.2	Skalierbarkeitsaspekte	164
10.2.1	Unitäre Darstellungen der Zopfgruppenelemente	165
10.2.2	Zeitabschätzungen für höhere Zopfgruppen	169
10.2.3	Experimentelle Fehlerquellen	171
10.3	Resultate auf einem 2-Qubit-NMR-Quantencomputer	174
10.3.1	Implementierung von Zopfgruppenelementen mit 3 Strängen	174
10.3.2	Experimenteller Setup	175
10.3.3	Experimente	176
10.4	Schlussfolgerung	178
11	Zusammenfassung und Ausblick	181
12	Appendix	183
12.1	Theorie	183
12.2	Bedienungsanleitung des PAROCT-Programms	183
12.2.1	Compiler-Optionen	184
12.2.2	Eingabe-Optionen	185
12.3	Rekursion	188
12.3.1	Fehlerfortpflanzung in Sequenzen unitärer Gatter	188

Inhaltsverzeichnis

12.3.2	Rekursive Zerlegung der QFT auf L_n	192
12.3.3	Variante II der skalierbaren Zerlegung der QFT	194
12.3.4	cP-SWAP innerhalb der $k \cdot 10$ -Qubit QFT	196
12.4	Relaxationsoptimierte Quantengatter	197
12.4.1	Ausführliche Trotter-Zerlegung	197
12.5	Inversion	204
12.5.1	Typeneinteilung	204
12.5.2	Allgemeine Darstellung von F_z	205
12.5.3	Untertypen der punktweise lokal invertierbaren Unitären .	206
12.5.4	Symmetrien im Argument	208
12.6	Thermisches Quantencomputing und Jones-Polynom	211
12.6.1	Äquivalente Zopfgruppendarst. in Kapitel 10 und [29] . . .	211
12.6.2	Implementierung von $U(2)$ -Operationen als cU - Gatter . .	212

Publikationsliste

- T. SCHULTE-HERBRÜGGEN, A. K. SPÖRL, S.J. GLASER: Quantum CISC Compilation by Optimal Control and Scalable Assembly of Complex Instruction Sets beyond Two-Qubit Gates, e-print: arXiv.org/pdf/0712.3227 auch in Proceedings of the HLRB-Workshop Dec. 2007 zusammen mit T. Huckle
- T. SCHULTE-HERBRÜGGEN, A. K. SPÖRL: Which Quantum Evolutions Can Be Reversed by Local Unitary Operations? Algebraic Classification and Gradient-Flow-Based Numerical Checks, e-print: arXiv.org/pdf/quant-ph/0610061
- T. SCHULTE-HERBRÜGGEN, A. K. SPÖRL, N. KHANEJA, S. J. GLASER: Optimal Control for Generating Quantum Gates in Open Dissipative Systems e-print: arXiv.org/pdf/quant-ph/0609037.
- N. KHANEJA, B. HEITMANN, A. K. SPÖRL, H. YUAN, T. SCHULTE-HERBRÜGGEN, S. J. GLASER: Shortest Paths for Efficient Control of Indirectly Coupled Qubits, *Phys. Rev. A* **75**, 012322/1-10 (2007)
- A. K. SPÖRL , T. SCHULTE-HERBRÜGGEN, S. J. GLASER, V. BERGHOLM, M. J. STORCZ, J. FERBER, F. K. WILHELM: Optimal Control of Josephson Qubits, *Phys. Rev. A* **75**, 012302/1-9 (2007)
- T. GRADL, A. K. SPÖRL, T. HUCKLE, S. J. GLASER, T. SCHULTE-HERBRÜGGEN: Parallelising Matrix Operations on Clusters for an Optimal Control-Based Quantum Compiler, *Proc. EUROPAR 2006, Parallel Processing Lecture Notes in Computer Science* 4128, 751-762 (2006)
- T. SCHULTE-HERBRÜGGEN, A. K. SPÖRL , R. MARX, N. KHANEJA, J. M. MYERS, A. F. FAHMY, S. J. GLASER: Quantum Computing Implemented via Optimal Control: Theory and Application to Spin- and Pseudo-Spin Systems, in *Lectures on Quantum Information*, Eds.: D. Bruß und G. Leuchs, 481-501, Wiley-VCH (2006)
- T. SCHULTE-HERBRÜGGEN, A. K. SPÖRL, N. KHANEJA, S. J. GLASER: From Network Complexity to Time Complexity via Optimal Control, *NATO Science Series, III: Computer and System Sciences* **199**, 353-357 (2006).
- T. SCHULTE-HERBRÜGGEN, A. K. SPÖRL, N. KHANEJA, S. J. GLASER: Optimal Control-Based Efficient Synthesis of Building Blocks of Quantum Algorithms Seen in Perspective from Network Complexity towards Time Complexity, *Phys. Rev. A* **72**, 042331/1-7 (2005)

Inhaltsverzeichnis

1 Motivation und Überblick

Bereits seit den Anfängen der Zivilisation ist es dem Menschen, sei es aus finan-
ziellem oder wissenschaftlichem Antrieb, wichtig Berechnungen durchzuführen.
Bereits im antiken Babylon wurde hierzu der Abakus entwickelt und benutzt. Im
Jahr 1645 entwickelte Blaise Pascal die erste Additionsmaschine, die von Gott-
fried Wilhelm Leibnitz im Jahr 1673 zu einer Rechenmaschine weiterentwickelt
wurde und alle vier Grundrechenarten beherrschte [1]. Seit über einem halben
Jahrhundert steht nun der Menschheit ein Werkzeug zur Verfügung, das es ihr
erlaubt komplexe mathematische Berechnungen auf eine schnelle und sichere Art
und Weise durchzuführen [2,3]: der Computer. Mit zunehmender Rechenleistung
war es bald möglich, komplexe physikalische Systeme zu simulieren [4]. Je kom-
plexer die Systeme wurden, desto mehr Rechenleistung wurde erforderlich. Um
die Rechnungen zu beschleunigen mussten die einzelnen Bauteile des Computers
immer näher zusammenrücken. Dadurch verkürzt sich die Kommunikation zwi-
schen verschiedenen Bauteilen. Somit setzte die Miniaturisierung der Schaltkreise
ein [5,6], welche letzten Endes zu Bauteilen von der Größe einzelner Atome führen
würde. Die aktuelle Entwicklung konventioneller Computer geht dahin, viele Ein-
zelcomputer zusammen zu schalten und parallel zu benutzen. Bei der Simulation
von Quantensystemen stoßen jedoch selbst heutige Superrechner an ihre Gren-
zen. Grund ist die exponentiell ansteigende Zahl der Freiheitsgrade.

Richard Feynman's wegweisender Vorschlag Quantensysteme zu benutzen, um
das Verhalten von anderen Quantensystemen vorherzusagen [7] oder effizientere
Computer zu konstruieren, hat Computerwissenschaften und Physik in folgende
gänzlich neue Forschungsrichtungen gelenkt:

- Entwicklung von Quantencomputerhardware [8–17]
- Simulation von Hamiltonoperatoren komplizierter Quantensysteme [18–24],
- Entwicklung von Quantenalgorithmen [25–32],
- Realisierung von Quantenverschlüsselungstechniken [33–39],
- Durchführung von Quantenteleportation [40–42] und
- Entwicklung der Quantenspieltheorie [43–48].

Bald nach Feynman's Vorschlag begann man die Fähigkeiten von Quantencompu-
tern zu untersuchen und die so gewonnenen Erfahrungen in effiziente Quantenal-

1 Motivation und Überblick

gorithmen umzusetzen¹. Die Überlegenheit von Quantencomputern wurde durch den ersten Quantenalgorithmus, Deutsch's Algorithmus [25], demonstriert: Dieser unterschied effizient, also exponentiell schneller als ein klassischer Computer, zwischen zwei Arten von Funktionen². Es folgten eine Reihe weiterer einfacher Quantenalgorithmen, die ihren klassischen Analoga überlegen waren [53–55]. Der Durchbruch wurde mit Shor's Faktorisierungsalgorithmus [26] erreicht. Die Komplexität dieses Algorithmus' auf dem Quantencomputer ist exponentiell niedriger als der beste zur Zeit bekannte klassische Algorithmus, um Primfaktoren einer zusammengesetzten Zahl zu bestimmen³.

Diese Quantenalgorithmen lassen sich zu einer Klasse von Algorithmen zusammenfassen [57], welche ein bestimmtes *HiddenSubgroupProblem* auf eine effiziente Weise auf einem Quantencomputer lösen. Shor's Algorithmus zählt zu einer Teilmenge dieser Klasse, bei der die zu Grunde liegende Gruppe abel'sch ist. Im abel'schen Fall beruht die schnellere Berechnung auf der Umsetzung der Fourier-Transformation [26, 58]: Während im klassischen Fall [59, 60], der schnellen Fourier-Transformation (FFT), einer N -dimensionalen Matrix $O(\log(N)N)$ Operationen notwendig sind, reduziert sich diese Anzahl im Fall der QFT auf $O(\log(N)^2)$, was eine exponentiell schnellere Implementierung darstellt.

Grover's Such-Algorithmus [27, 28] erzielt verglichen mit klassischer Datenbanksuche immerhin noch einen quadratischen Speed-up.

Daneben gibt es seit Kurzem eine weitere interessante Klasse von Quantenalgorithmen, die auf effiziente Weise topologische Invarianten von Knoten berechnen [61]. Das in dieser Arbeit untersuchte Beispiel ist die Approximation des Jones-Polynoms eines Knotens [29, 62]. Diese dienen dazu, zwei Knoten voneinander zu unterscheiden. Allerdings sind auch diese Invarianten nicht ein-eindeutig, da auch Beispiele existieren, bei denen verschiedene Knoten zu gleichen Invarianten führen. Eine Umsetzung dieses Algorithmus auf einem NMR-System wird in Kapitel 10 untersucht.

Wie werden nun Quantenalgorithmen durchgeführt? Analog einem klassischen Algorithmus, stellt ein Quantenalgorithmus eine Abfolge mehrerer komplexer Operationen, sogenannte Module, dar⁴. Diese sind bei Quantenalgorithmen im Allgemeinen unitäre Gatter $U_G = e^{-iH_{eff}}$. Innerhalb kurzer Zeit wurden Sätze von elementaren Ein- und Zwei-Bit-Gattern entdeckt, die es erlauben, jedes unitäre

¹Die Folgerungen aus den neuen Erkenntnissen über Quantenmechanik und Informationsverarbeitungen gehen soweit, dass mittlerweile das gesamte Universum als einzige Berechnung angesehen wird [49, 50], was eine Weiterführung der Idee in [51] darstellt.

²Später wurde jedoch gezeigt, dass ein modifizierter klassischer Algorithmus auch dazu in der Lage ist [52]. Dies beruht darauf, dass nur mit einer sehr geringen Wahrscheinlichkeit $2^n + 1$ (n sei die Anzahl der Bits) Funktionsevaluationen durchgeführt werden müssen. Dieser Algorithmus ist somit nur probabilistisch und nicht deterministisch.

³Die effiziente Lösung dieses Problems stellt vor allem heutige Verschlüsselungsverfahren (RSA [56]) in Frage.

⁴Im Faktorisierungsalgorithmus sind das (1) ein Initialisierungsschritt, (2) die Berechnung einer modularen Exponentialabbildung und (3) eine Fourier-Transformation.

Gatter, das auf m Qubits operieren, in eine Folge von solchen Elementargattern zu zerlegen [63–65]. Der gängigste Satz [66] besteht aus (1) den lokalen Operationen auf den einzelnen Qubits und (2) dem kontrollierten NOT-Gatter, auch CNOT-Gatter genannt, welches analog dem reversiblen XOR-Gatter in der klassischen Computerwissenschaft den Zustand eines Zielbits (Target-Qubit) in Abhängigkeit des Kontrollbits ändert. Daneben existieren auch andere elementare Sätze [64, 67].

Wie lässt sich die Komplexität eines bestimmten Quantengatter messen? Die Anzahl dieser Elementargatter (Gatterkomplexität) die benötigt wird, um ein Quantengatter zu implementieren oder einen Quantenhamiltonian zu simulieren, ist ein Maß für den zu betreibenden Aufwand [68–70].

Aus der Gatterkomplexität lässt sich jedoch nur eine sehr grobe Abschätzung für die minimale Dauer des Gatters ableiten, der es bedarf, um dieses im Experiment in die Tat umzusetzen [71–73]. Obere Schätzungen für solche minimalen Zeiten [74] sind sowohl aus geometrischer [75], als auch Lie-theoretischer [73, 76–82] Sicht ein höchst anspruchsvolles Ziel. Die minimale Dauer stellt ein realistischeres Maß der Komplexität eines Quantengatters, die sogenannte Zeitkomplexität [83], dar und lässt sich z.B. durch die Anwendung der Steuerungstheorie bestimmen. Die Erforschung der Zeitkomplexität der wichtigsten Quantengatter, wie z.B. die Quanten-Fourier-Transformation (QFT), sowie zeitoptimierte Realisierungen eines ganzen Quantenalgorithmus oder dessen Module in vom Experiment vorgegebene Kontrollen ist somit auch ein Problem von praktischem Interesse geworden [77, 84].

Nachdem die theoretischen Grundlagen gelegt sind, stellt sich die Frage nach der physikalischen Realisierung von Quantenalgorithm, der Simulation von Quantensystemen oder Teleportation. Hierzu bedarf kohärent kontrollierbarer Systeme. Die Anzahl solcher Systeme ist, mit Blick auf die erstrebenswerten Geschwindigkeitsgewinne in den letzten Jahren erheblich angestiegen [8–17]. Neben Ionenfallen und Doppelquantenpunkten stellen supraleitende Schaltelemente, basierend auf Josephson-Kontakten, einen attraktiven Kandidaten für ein skalierbares Setup [13] für Festkörperqubits dar. In Kapitel 4 werden die Ergebnisse auf diesem System vorgestellt. Auf einem System aus zwei kapazitiv gekoppelten Ladungsqubits soll das gängigste nicht-lokale Elementargatter, das CNOT, durch numerische Kontrolltheorie zeitoptimiert implementiert werden. Diese Aufgabe ist auf einfache Weise nicht mehr per Hand lösbar, stellt aber für den Computer kein Problem dar. Die gefundene Lösung erfüllt sogar noch weitere Ansprüche, wie z.B. Robustheit gegenüber experimentellen Imperfektionen und minimale Übergänge in mögliche angrenzende Nachbarzustände.

Auf vollständig heteronuklearen, schwach gekoppelten NMR-Spinsystemen wurden für die QFT, SWAP, sowie vielfach-kontrollierte NOT-Gatter (C^{n-1} NOT), die minimalen Zeiten berechnet. Dies liefert Anhaltspunkte für die wirklichen Zeitkomplexitäten dieser Quantengatter. Die Resultate werden in Kapitel 5 vorgestellt und liegen derzeit für Systeme mit bis zu 10 Qubits vor.

1 Motivation und Überblick

Die numerische Bestimmung der oberen Grenzen der minimalen Zeiten für verschiedene Quantengatter mit wachsender Zahl an Qubits stellt moderne Computer vor eine nicht leicht zu bewältigende Aufgabe. In Kapitel 3 werden die Grundlagen vorgestellt, um eine Computerinfrastruktur zur Verfügung zu stellen, die es auch bei großen Quantensystemen erlaubt, kontrolltheoretische Algorithmen anzuwenden. Bei der Steuerung von Quantensystemen werden die optimierten Kontrollen schwieriger als bei klassischen Systemen zu berechnen sein, da die Evolution solcher Systeme durch Matrizen dargestellt wird, deren Größe exponentiell mit der Anzahl der einzelnen Subsysteme wächst. Um bei mittleren Systemen von bis zu 10 Qubits noch innerhalb vernünftiger Zeit Resultate zu erhalten, ist die Parallelisierung bzw. Optimierung einiger Matrixoperationen unabdingbar. Hierzu stehen mehrere Möglichkeiten zur Verfügung: (i) Es gibt mehrere Wege die Multiplikation einer Reihe von Matrizen zu parallelisieren und somit zu beschleunigen. Bei der Wahl der Parallelisierung werden zudem Fragen zum Speicherbedarf eine Rolle spielen. (ii) Die Exponentialabbildung von Matrizen ist, neben der vormals implementierten Pade-Approximation, entweder durch eine QR-Zerlegung oder eine Tschebycheff-Reihe berechenbar, was in beiden Fällen zu einer Beschleunigung des Algorithmus beiträgt. Im speziellen Fall heteronuklearer schwach gekoppelter Spinsysteme lässt sich zudem eine Reihe von Vereinfachungen benutzen, z.B. Symmetrieeigenschaften und Transformation der hermiteschen auf reell-orthogonale Matrizen. (iii) Einige andere Routinen, wie z.B. Spurberechnung und Schrittweitenoptimierung, liefern zwar keine maßgeblichen Beiträge zur Geschwindigkeit, sind aber dennoch auf einfache Weise zu optimieren.

Jedoch sind der numerischen Kontrolltheorie selbst mit diesen Verbesserungen Grenzen gesetzt. Wäre dem nicht so, gäbe es keinen Grund einen Quantencomputer zu bauen. Folgendes Zahlenbeispiel verdeutlicht dies: Bei einer Systemgröße von 20 Qubits übersteigen die Matrizen bereits einen Arbeitsspeicherbedarf von $2^{20} \times 2^{20} \times 2$ (*complex*) $\times 8$ (*double*) = 1.75×10^{13} Byte ≈ 17 TByte. Matrixoperationen solcher $N \times N$ Matrizen, wie die Matrixmultiplikation, benötigen $O(N^3)$ Elementaroperationen (Flops), was wiederum bei Systemgrößen von 20 Qubits $2^{60} = 1.15 \times 10^{18}$ entspricht. Nur mit Supercomputern sind solche Aufgaben noch zu bewältigen. Der derzeit schnellste Computer der Welt, BLUEGENE/L [85], mit einer Peakperformance von 367 TFlops/s, würde knapp 48 Minuten benötigen, um eine solche Matrixoperation durchzuführen. Nur selten genügt es jedoch, eine einzelne Matrixoperation durchzuführen. Bei der Suche nach zeit- oder relaxationsoptimierten Steuerungen treten solche zu Zehntausenden auf, was die Länge einer solcher Optimierung auf 217 Jahre strecken würde. Zur Zeit ist man in der Lage Kontrolltheorie mit bis zu 10 Qubits zu betreiben. Einfachere Aufgaben, wie z.B. die Anwendung elementarer 1-, 2-, und 3-Qubitgatter konnten auf Systemen mit bis zu 36 Qubits untersucht werden [86].

Schnellere Implementierungen von Quantenmodulen sind jedoch möglich, wenn diesen eine gewisse rekursive Struktur zu Grunde liegt. Lassen sie sich z.B. in

kleinere, mit kontrolltheoretischen Mitteln noch handhabbare, Blöcke unterteilen, steht folgende Vorgehensweise zur Verfügung: 1. Optimieren der einzelnen Blöcke und 2. Zusammensetzen der Einzelblöcke zum Gesamtgatter. Ein Geschwindigkeitsgewinn ist, verglichen mit Zerlegungen in 1- und 2-Qubitgatter, auf diese Weise zwar nicht garantiert, tritt aber in allen untersuchten Fällen auf. Beispiele für solche Gatter finden sich in Kapitel 6

Alle bisher aufgeführten Beispiele waren in gewisser Weise idealisiert, da ein wesentlicher Aspekt der Quantendynamik entweder gänzlich unberücksichtigt oder nur am Rande betrachtet blieb: die Dissipation. Kapitel 7 befasst sich mit dem Problem, Quantensysteme gegen dissipative Prozesse (“Dekohärenz”) zu schützen. Quantengatter relaxationsoptimiert auszuführen ist schwieriger, als im unitären, dekohärenz-freien Fall, da hier zwei Aufgaben simultan zu bewältigen sind: es gilt die Dekohärenz zu bekämpfen, während gleichzeitig alle Basiszustände gemäß dem Quantengatter in das lineare Abbild zu transformieren sind, welches den maximalen Überlapp mit dem Zielgatter hat. Ähnlich wie bei klassischen Systemen, wird dies durch eine Codierung der Information erreicht. Im vorliegenden Falle wird der Zustand eines logischen Bit in zwei physikalische Qubits kodiert. Eine unumgängliche Folge dissipativer Dynamik stellt die Darstellung des Problems im Superoperatorformalismus dar. Hier können die relevanten Relaxationsmechanismen passend beschrieben werden. Leider geht eine Quadrierung der Matrixdimension mit dieser Darstellung Hand in Hand. Dennoch ist es für einfache Systeme möglich, auf numerischem Wege Pulssequenzen zu finden, die diese Aufgabe von vollständigem Transfer einer kodierten Basis und der Minimierung relaxativer Prozesse meistern.

Inspiziert durch die numerisch erhaltenen Resultate, lassen sich für eine überschaubare Anzahl von Problemen auch analytische Lösungen finden. Für indirekte Kopplungen und planare trilineare Propagatoren ist das der Fall. Die Ergebnisse werden in Kapitel 8 vorgestellt: Für kleinere Systeme von ein bis zwei Qubits, mit schnellen lokalen Kontrollen und schwacher Ising-Kopplung, sind solche Lösungen auf einfache Weise zu erhalten. Die Implementierung der Pulssequenzen, die für die Approximation des Jones-Polynom nötig waren, soll als einfaches Beispiel dienen. Als anspruchsvolleres Beispiel soll die indirekte Kopplung in einer linearen 3-Spinkette untersucht werden. Lie-algebraische Methoden erlauben die Konstruktion einer Pulssequenz, welche exakt die numerisch erhaltenen minimalen Zeiten reproduziert.

Da Quantencomputer mit einer Vielzahl von Qubits immer noch weit von den heutigen technischen Möglichkeiten entfernt sind und Quantenalgorithmen erst in diesem Bereich heutige Superrechner zu überholen scheinen, stellt die Simulation von Quantensystemen ein erstrebenswertes mittelfristiges Ziel dar. Durch die zur Verfügung stehenden kontrollierbaren Systeme sollen Dynamik und Eigenschaften von anderen Quantensystemen untersucht werden. Eine spezielle Frage ist hier, ob mit den vorhandenen lokalen Kontrollen, die auf das System einwirken, die Evolution des Systems zeitlich invertiert werden kann. Die dazugehörigen Re-

1 Motivation und Überblick

sultate finden sich in Kapitel 9.

2 Grundlagen

2.1 Gruppentheorie

Im folgenden Abschnitt sollen die Grundlagen der Gruppentheorie wiederholt werden, soweit dies im weiteren Verlauf von Nöten ist. Es wird kein Anspruch auf Vollständigkeit erhoben. Der interessierte Leser sei auf folgende Standardwerke verwiesen: [87–90].

2.1.1 Definitionen

Gegeben sei eine Menge $\mathfrak{G} = \{G_1, G_2, \dots, G_n\}$ der Mächtigkeit n und eine Verknüpfung \circ zwischen Elementen $G_k \circ G_l$:

$$\circ : \mathfrak{G} \times \mathfrak{G} \rightarrow \mathfrak{G} .$$

Die Verknüpfung wird Multiplikation genannt. $G_k \circ G_l$ wird als $G_k G_l$ abgekürzt. Eine Gruppe wird dann wie folgt definiert:

Die Struktur (\mathfrak{G}, \circ) ist eine Gruppe, wenn

1. alle Produkte $G_k G_l \in \mathfrak{G}$ sind,
2. die Verknüpfung assoziativ ist, also $G_k(G_l G_m) = (G_k G_l)G_m$,
3. es genau ein Element E mit der Eigenschaft $EG_k = G_k E = G_k$ gibt und
4. zu jedem Element G_k genau ein Element G_k^{-1} mit der Eigenschaft $G_k G_k^{-1} = E$ existiert.

Ist die vierte Voraussetzung nicht erfüllt, spricht man von einer Halbgruppe. Ist n endlich, handelt es sich um eine endliche Gruppe. Sind unendlich viele Gruppenelemente vorhanden, spricht man von kontinuierlichen Gruppen.

Im Allgemeinen ist die Multiplikation zweier Elemente nicht kommutativ. Ist sie es doch, d.h. falls

$$G_k G_l = G_l G_k; \quad \forall G_k, G_l$$

gilt, heißt die Gruppe abel'sch.

Ein Homomorphismus zwischen zwei Gruppen \mathfrak{G} und \mathfrak{G}' ist eine Abbildung, die jedem G_k ein G'_k zuordnet und bei der Produkte von \mathfrak{G} in solche von \mathfrak{G}' übergehen: $G_k \rightarrow G'_k$, $G_l \rightarrow G'_l$ und $G_k G_l \rightarrow G'_k G'_l$. Diese Abbildung muss nicht umkehrbar

2 Grundlagen

sein. Ist sie es doch, spricht man von einem Isomorphismus.

Zwei Elemente G_k und G_l heißen zueinander konjugiert, wenn $\exists T \in \mathfrak{G}$ für das $G_l = T G_k T^{-1}$ gilt. Man schreibt $G_k \sim G_l$. Diese Relation ist

- reflexiv: $G_k \sim G_k$,
- symmetrisch: $G_k \sim G_l \Rightarrow G_l \sim G_k$,
- und transitiv: $G_l \sim G_k \wedge G_k \sim G_m \Rightarrow G_l \sim G_m$.

Die Relation definiert somit eine Einteilung der Gruppe in Klassen konjugierter Elemente.

Sind die Bedingungen 1. - 4. bereits für eine Untermenge \mathfrak{H} von \mathfrak{G} erfüllt, so ist \mathfrak{H} eine Untergruppe von \mathfrak{G} . Die Menge der $G\mathfrak{H}$, mit $G \in \mathfrak{G}$, wird als Linksnebenklasse bezeichnet, entsprechend $\mathfrak{H}G$ als Rechtsnebenklasse. Eine Untergruppe \mathfrak{N} heißt Normalteiler, wenn $\mathfrak{N}G = G\mathfrak{N}$, $\forall G \in \mathfrak{G}$ gilt. Hierbei werden zwei Mengen verglichen, deren Anordnung sich unterscheiden kann. Das Zentrum einer Gruppe stellt einen besonderen Normalteiler dar. Hiermit wird die Untergruppe \mathfrak{Z} bezeichnet, deren Elemente mit allen Elementen der Gruppe kommutieren, also $ZG = GZ$, $\forall Z \in \mathfrak{Z}$, $\forall G \in \mathfrak{G}$. Hat \mathfrak{G} einen Normalteiler \mathfrak{N} so lässt sich mit dem Homomorphismus κ

$$\begin{aligned} \kappa : \mathfrak{G} &\rightarrow \mathfrak{G}/\mathfrak{N} \\ G &\mapsto G\mathfrak{N} , \end{aligned} \tag{2.1}$$

die Quotienten- oder auch Faktorgruppe $\mathfrak{G}/\mathfrak{N}$ definieren.

Seien \mathfrak{G}_1 und \mathfrak{G}_2 zwei Gruppen. Das direkte Produkt von \mathfrak{G}_1 und \mathfrak{G}_2 , ist das geordnete Paar

$$\mathfrak{G} := \mathfrak{G}_1 \times \mathfrak{G}_2 = \{(G_1, G_2) \mid G_k \in \mathfrak{G}_k, k = 1, 2\} ,$$

mit der Verknüpfung

$$G \circ G' = (G_1, G_2) \circ (G'_1, G'_2) = (G_1 G'_1, G_2 G'_2) .$$

2.1.2 Matrixdarstellung

Von einer Darstellung D einer Gruppe \mathfrak{G} spricht man, wenn jedem $G_k \in \mathfrak{G}$ eine lineare Abbildung in einem N -dimensionalen Vektorraum $V = \mathbb{R}^N$ bzw. $V = \mathbb{C}^N$, also eine Matrix $D(G_k) \in \text{Mat}_N(\mathbb{C})$, zugeordnet werden kann, so dass der Gruppenmultiplikation die Matrixmultiplikation entspricht [91, 92]:

$$D(G_k G_l) = D(G_k) D(G_l) .$$

Der Eintrag in der k -ten Zeile und l -ten Spalte der Matrix $D(\cdot)$ wird mit $(D(\cdot))_{kl}$ bezeichnet. Weiter wird $D(E) = \mathbf{1}_N$ und $D(G_k^{-1}) = D(G_k)^{-1}$ gefordert. Aus der

letzten Forderung folgt, dass alle Matrizen nicht-singulär sind. Wenn die Abbildung $G_k \rightarrow D(G_k)$ umkehrbar ist, wird die Darstellung treu genannt.

Um festzustellen, ob zwei verschiedene Gruppenelemente G_k und G_l in der Darstellung D zur selben Konjugationsklasse gehören, kann die Spur dieser Matrizen, die Summe der Diagonalterme $\text{tr}(D(\cdot)) = \sum_{k=1}^N (D(\cdot))_{kk}$, herangezogen werden. Die Spur wird auch Charakter genannt und stellt eine Invariante unter jeder Ähnlichkeitstransformation dar. Für ein allgemeines Element $D(G)$ sei U die Matrix, die $D(G)$ diagonalisierere ¹. Es gilt $\text{tr}(D(G)) = \text{tr}(U^{-1}D(G)U)$. Matrizen mit gleicher Spur bilden eine Konjugationsklasse.

Weiter gilt, dass für alle $D(G) \in D(\mathfrak{G})$ ein Element M existiert, das $D(G)$ auf Diagonalform transformiert: $M^{-1}D(G)M = X$ und $X_{kl} = 0$, wenn $k \neq l$. \vec{M}_k bezeichne den k -ten Spaltenvektor der Matrix M . Dieser stellt einen Eigenvektor zum Eigenwert X_{kk} dar. Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind, im Falle normaler Matrizen, zueinander orthogonal.

Wenn zwei Matrizen A und B kommutieren, besitzen sie einen gemeinsamen Satz von Eigenvektoren $\{\psi_k\}$. Es gilt

$$a_k B \psi_k = AB \psi_k = BA \psi_k = b_k A \psi_k = a_k b_k \psi_k . \quad (2.2)$$

Sind nur die Eigenvektoren einer Matrix (A) bekannt, lässt sich die andere Matrix (B), durch diese Eigenvektoren blockdiagonalisieren.

Dem äußeren Produkt zwischen abstrakten Gruppen $\mathfrak{G}_1 \times \mathfrak{G}_2$ kann das Matrix-Tensorprodukt $D(\mathfrak{G}_1) \otimes D(\mathfrak{G}_2)$ gleich gesetzt werden. Dann entsteht aus den beiden Vektorräumen V_1 und V_2 , auf denen die Gruppen $D(\mathfrak{G}_1)$ und $D(\mathfrak{G}_2)$ wirken, ein Gesamtvektorraum $V = V_1 \otimes V_2$.

2.1.3 Einfache Matrixoperationen

Neben der Matrizenmultiplikation sind noch

1. die komplexe Konjugation $M \mapsto M^*$; $(M(\cdot))_{kl} \rightarrow (M(\cdot))_{kl}^*$,
2. die Transposition $M \mapsto M^T$; $(M(\cdot))_{kl} \rightarrow (M(\cdot))_{lk}$ und
3. die Adjunktion $M \mapsto M^\dagger = (M^*)^T$; $(M(\cdot))_{kl} \rightarrow (M(\cdot))_{lk}^*$

zu erwähnen.

Der Kommutator zweier Matrizen A und B wird wie folgt definiert: $[A, B]_- := (AB - BA)$. Analog erhält man den Antikommutator: $[A, B]_+ := (AB + BA)$.

¹Im Allgemeinen lassen sich alle normalen Matrizen A , also solche, die mit ihrem Adjungierten kommutieren $[A, A^\dagger] = 0$, unitär diagonalisieren.

2.1.4 Lie-Gruppen und -Algebren

Allgemeines

Wie bereits erwähnt, treten neben endlichen auch kontinuierliche Gruppen auf. Im Folgenden konzentrieren wir uns nur auf kontinuierliche Lie-Gruppen. Sie beschreiben kontinuierliche Rotationen in entsprechenden Vektorräumen. Diese Gruppen werden Lie-Gruppen genannt [93]. Ihre Relevanz ergibt sich daraus, dass sich viele physikalisch interessante Problemstellungen durch solche Gruppen beschreiben lassen. Die hier behandelten kontinuierlichen Gruppen sind allesamt lineare, oder auch Matrixgruppen, also Gruppen von linearen Abbildungen. Beispiele für Matrixgruppen sind

1. $\mathbf{GL}(N)$, die volle lineare Gruppe aller nichtsingulären Matrizen,
2. $\mathbf{SL}(N)$, die Untergruppe der $\mathbf{GL}(N)$ mit $\{G \in \mathbf{GL}(N) \mid \det(G) = +1\}$,
3. $\mathbf{U}(N)$, die Untergruppe der $\mathbf{GL}(N)$ mit $\{G \in \mathbf{GL}(N) \mid G^\dagger = G^{-1}\}$,
4. $\mathbf{SU}(N)$, die Untergruppe der $\mathbf{U}(N)$ mit $\{G \in \mathbf{U}(N) \mid \det(G) = +1\}$, und
5. $\mathbf{Sp}(N)$, die Untergruppe der $\mathbf{GL}(N)$ mit $\{G \in \mathbf{GL}(N) \mid GJG^{-1} = J\}$ und $J = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix}$.

Die Untergruppen der $\mathbf{GL}(N)$ können als Invarianzgruppen geometrischer Größen betrachtet werden [93]. Alle Elemente der Gruppe $\mathbf{U}(N)$, angewandt auf einen Vektor $v \in \mathbb{C}^N$, lassen $\sum_{k=1}^N v_k^* v_k$, also die Länge des Vektors invariant. Die Elemente der Gruppe $\mathbf{U}(N)$ sind also längenerhaltend. Betrachten wir eine Matrix M , so bleibt durch Multiplikation mit einem Element der $\mathbf{SL}(N)$ die Determinante $\det(M)$ erhalten. Da $\det(M)$ im \mathbb{R}^3 das Volumen der drei Vektoren $\text{vec } M_1$, $\text{vec } M_2$ und $\text{vec } M_3$ beschreibt, heißen Elemente der $\mathbf{SL}(N)$ auch volumenerhaltend. Die Gruppe $\mathbf{Sp}(N)$ erhält die Länge von Vektoren unter der Metrik J .

Eine Lie-Gruppe hat neben den Gruppeneigenschaften zudem noch die Eigenschaften einer differenzierbaren Mannigfaltigkeit. Dies bedeutet, dass Gruppenmultiplikation und Inversion unendlich oft differenzierbar sind, bezüglich der Koordinaten im \mathbb{R}^N . Die Definition einer differenzierbaren Mannigfaltigkeit findet sich in [94].

Jedes Gruppenelement U einer kontinuierlichen Lie-Gruppe lässt sich darstellen als: $U = e^{\beta x}$, wobei β der Drehwinkel und x der Generator des Gruppenelements genannt wird. Die Exponentialabbildung kann über die Taylorreihe

$$e^{\beta x} := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (\beta x)^k, \quad (2.3)$$

definiert werden. Für eine effektive Berechnung führen allerdings andere Algorithmen schneller zu genaueren Ergebnissen, s. Kapitel 3.

Die Gesamtheit der Generatoren $\{x_k\}$ bildet einen Tangentialraum am neutralen Element $\mathbf{1}$ und wird Lie-Algebra genannt [93, 94]. Sie repräsentieren zunächst einen Vektorraum. Dieser Vektorraum verfügt mit $\text{tr}(a^\dagger b)$ für $a, b \in \text{span}(x_k)$ über ein Skalarprodukt. Für zusammengesetzte Systeme gilt zudem

$$\text{tr}((a \otimes b)^\dagger (c \otimes d)) = \text{tr}(a^\dagger c) \text{tr}(b^\dagger d) . \quad (2.4)$$

Weiter ist dieser Vektorraum unter Kommutatorbildung abgeschlossen: Sind a, b und c Elemente einer Lie-Algebra, so ist auch $[a, b]_-$ Element dieser Lie-Algebra. Es gilt weiter:

$$[a, b]_- = -[b, a]_- \text{ und} \quad (2.5)$$

$$[a, [b, c]_-]_- + [b, [c, a]_-]_- + [c, [a, b]_-]_- = 0 \text{ (Jacobi-Identität)} . \quad (2.6)$$

Im Falle der $\mathfrak{su}(2)$ lässt sich der Kommutator mit dem Vektorprodukt des \mathbb{R}^3 identifizieren. Entsprechend ihrer Gruppen werden sie mit (1.) $\mathfrak{gl}(N)$, (2.) $\mathfrak{sl}(N)$, (3.) $\mathfrak{u}(N)$ oder (4.) $\mathfrak{su}(N)$ bezeichnet und enthalten entweder

1. beliebige,
2. spurlose ($\text{tr}(x) = 0$),
3. schief-hermitsche ($x = -x^\dagger$) oder
4. schief-hermitsche und spurlose

Matrizen, je nachdem zu welcher der vier oben aufgelisteten Gruppen das Gruppenelement gehört.

Ein Isomorphismus f zwischen zwei Lie-Algebren a und b beschreibt eine eindeutige Abbildung aller Elemente von a auf b , also $f((a)_n) = (b)_n, \forall (a)_n \in a$ und $\forall (b)_n \in b$. Desweiteren werden auch alle Kommutatoren ineinander überführt, also $f([(a)_n, (a)_m]_-) = [(b)_n, (b)_m]_-$.

Um Lie-Algebren zu unterscheiden können die sogenannten Strukturkonstanten zu Hilfe genommen werden. Sei $\{x_k\}$ die Basis einer Algebra. Die Werte $c_{\mu\nu}^\lambda$, mit

$$[x_\mu, x_\nu]_- = c_{\mu\nu}^\lambda x_\lambda \quad (2.7)$$

heißen Lie-Strukturkonstanten. Die $c_{\mu\nu}^\lambda$ erfüllen wiederum Gleichung (2.5) und (2.6). Die Werte $d_{\mu\nu}^\lambda$, mit

$$[x_\mu, x_\nu]_+ = d_{\mu\nu}^\lambda x_\lambda \quad (2.8)$$

heißen Clifford-Strukturkonstanten.

2 Grundlagen

Produktoperatorbasis

An dieser Stelle sei ein besonderer Basissatz für den Vektorraum der Lie-Algebra $\mathfrak{su}(N)$, mit $N = 2^n$ und $n \in \mathbb{N}$, erwähnt: die Produktoperatorbasis oder in der NMR Zeeman-Basis. Ausgehend von den (skalierten) Paulimatrizen,

$$I_x := \frac{1}{2}\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad I_y := \frac{1}{2}\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{und } I_z := \frac{1}{2}\sigma_z = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

stellen wir zunächst fest, dass diese bereits eine orthogonale Basis für die $\mathfrak{su}(2)$ bilden, da $\text{tr}(I_\nu^\dagger I_\mu) = \frac{1}{2}\delta_{\nu\mu}$, mit $\nu, \mu \in \{x, y, z\}$ gilt. Des Weiteren gilt für $\nu, \mu, o \in \{x, y, z\}$ und alle zyklischen Permutationen von $\{x, y, z\}$ die Kommutatorrelation $-i[I_\nu, I_\mu]_- = \epsilon_{\nu\mu o} I_o$. Wir erhalten somit eine Darstellung der $\mathfrak{su}(2)$.

Zusammen mit dem Tensorprodukt und dem Einheitsoperator $\mathbf{1}$ lässt sich, nach passender Normierung, für ein System aus n Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen leicht eine Basis der $\mathfrak{u}(2^n)$ aufstellen: $\{I_{1x}, I_{1y}, I_{1z}, \mathbf{1}\} \otimes \{I_{2x}, I_{2y}, I_{2z}, \mathbf{1}\} \otimes \cdots \otimes \{I_{nx}, I_{ny}, I_{nz}, \mathbf{1}\}$. Durch Entfernen des Elements $\mathbf{1}_{2^n}$ erhält man eine Basis der $\mathfrak{su}(2^n)$. Entsprechend der Anzahl ihrer vom Einheitsoperator verschiedenen Faktoren, werden Produktoperatoren linear, bilinear, trilinear oder multilinear genannt. Mit Gleichung (2.4) lässt sich die Orthogonalität leicht nachweisen. Den Produktoperatoren wird noch ein Faktor 2^{n-m-1} vorangestellt, wobei m die Anzahl der Einheitsoperatoren darstellt. In dieser Normierung bedeutet ein Drehwinkel β für alle Produktoperatoren, also Drehachsen, das gleiche. Zwei Kurzschreibweisen für Produktoperatoren sollen noch kurz erwähnt werden: Beispielsweise schreiben wir für den Produktoperator $4I_{1x} \otimes I_{2z} \otimes \mathbf{1} \otimes I_{4y}$ entweder $4I_{1x}I_{2z}I_{4y}$ oder noch kürzer $xz1y$.

Lie-Untergruppen

Analog den diskreten Gruppen kann auch eine Lie-Gruppe Untergruppen haben. Sehr allgemeine Beispiele, Untergruppen der $\mathbf{GL}(N)$, wurden bereits erwähnt. Untergruppen können kontinuierlich oder diskret sein. Im Folgenden sollen einige Beispiele für Untergruppen der $\mathbf{SU}(N)$ aufgeführt werden, um dies zu verdeutlichen.

Diskrete Untergruppen

Ein Beispiel für eine diskrete Untergruppe der $\mathbf{SU}(N)$ stellt ihr Zentrum $\mathfrak{3}$ dar. Es wird dargestellt durch die zulässigen Vielfachen von $\mathbf{1}$: $\mathfrak{3}(\mathbf{SU}(N)) = \{U = e^{i\phi}\mathbf{1}_N \mid \det(U) = +1\}$. Die Anzahl der Elemente ist N und die Drehwinkel ϕ sind $2\pi ik/N$ mit $k = 0, 1, \dots, N-1$. Das Zentrum stellt, wie bereits erwähnt, einen Normalteiler dar².

²Die damit verknüpfte Faktorgruppe ist die projektiv speziell unitäre Gruppe $\mathbf{PSU}(N)$, s. Kapitel 2.4.2

Kontinuierliche Untergruppen

Ein Beispiel für eine Lie-Untergruppe von $\mathbf{SU}(N)$ mit $N := 2^n$ stellt z.B. die Gruppe aller lokalen Operationen auf n Spins- $\frac{1}{2}$ $\mathbf{SU}(2) \otimes \dots \otimes \mathbf{SU}(2) = \mathbf{SU}(2)^{\otimes n}$ dar. Weitere Beispiele sind die folgenden Einbettungen der $\mathbf{SU}(2)$ in die $\mathbf{SU}(4)$:

$$1. \quad \{U = e^{-i\beta H} \mid H \in \text{span}_{\mathbb{R}}\{x1, yz, zz\}\}, \quad (2.9)$$

$$2. \quad \{U = e^{-i\beta H} \mid H \in \text{span}_{\mathbb{R}}\{\frac{1}{2}(xx + yy), \frac{1}{2}(yx - xy), \frac{1}{2}(z1 - 1z)\}\} \text{ und} \quad (2.10)$$

$$3. \quad \{U = e^{-i\beta H} \mid H \in \text{span}_{\mathbb{R}}\{\frac{1}{2}(xx - yy), \frac{1}{2}(yx + xy), \frac{1}{2}(z1 + 1z)\}\}. \quad (2.11)$$

Die drei Produktoperatoren erfüllen jeweils die gleichen Kommutatorrelationen wie die $\mathfrak{su}(2)$ und sind somit zur ihr isomorph.

Eine weitere Untergruppe ist die maximal abel'sche Untergruppe der $\mathbf{SU}(N)$. Sie enthält die maximale Anzahl von paarweise kommutierenden Untergruppen der $\mathbf{SU}(N)$. Zwei interessante Darstellungen seien kurz am Beispiel der $\mathbf{SU}(4)$ angeführt:

$$\{U = e^{-i\beta H} \mid H \in \text{span}_{\mathbb{R}}\{1z, z1, zz\}\} \text{ und} \quad (2.12)$$

$$\{U = e^{-i\beta H} \mid H \in \text{span}_{\mathbb{R}}\{xx, yy, zz\}\}. \quad (2.13)$$

Das erste Beispiel hebt sich noch dadurch hervor, dass es nur Diagonalmatrizen enthält.

Darstellungen von Untergruppen

Das erste Beispiel zeigt eine einfache Methode, um höher-dimensionale Darstellungen der $\mathfrak{su}(2)$ zu erhalten:

Zunächst wird die $\mathfrak{su}(2)$ -Darstellung aus Gleichung (2.9) gewählt. Ein Operator aus $\mathfrak{su}(2) \subset \text{Mat}_{\mathbb{C}}(2)$ wird mit $\mathbf{1}$, die beiden anderen mit I_z tensormultipliziert. Dies lässt sich beliebig fortsetzen. So stellt $\{x1 \times z, yz \times 1, zz \times z\}$ ebenso eine $\mathfrak{su}(2)$ dar.

Um das zweite Beispiel zu einer Darstellung der $\mathfrak{u}(2)$ zu erweitern, müsste die Algebra noch um den Operator $\frac{1}{2}(11 + zz)$ ergänzt werden.

Um kompliziertere Darstellungen der $\mathfrak{su}(2) \subset \text{Mat}_{\mathbb{C}}(2^3)$ zu finden, lassen sich beide Beispiele auch kombinieren. Bezeichnen wir die Algebra-Elemente von (2) $\{\frac{1}{2}(xx + yy), \frac{1}{2}(yx - xy), \frac{1}{2}(z1 - 1z)\}$ als $\{x_0, y_0, z_0\}$. $\frac{1}{2}(11 + zz)$ soll mit 1_0 abgekürzt werden. Jetzt lassen sich folgende Kombinationen bilden:

$$1. \quad \{x_0 1, y_0 z, z_0 z\} \stackrel{iso}{=} \mathfrak{su}(2) \text{ und}$$

$$2. \quad \{x 1_0, y z_0, z z_0\} \stackrel{iso}{=} \mathfrak{su}(2) .$$

Permutiert man bei der zweiten Kombination den ersten und zweiten Spin, erhält man eine Darstellung der $\mathfrak{su}(2)$, die eine wesentliche Rolle bei der zeitoptimierten Synthese von Propagatoren mit trilinearen Hamiltonians auf linearen 3-Spinketten spielt [78].

2 Grundlagen

Produkte von Lie-Matrixgruppenelementen

Bei der Berechnung von Produkten zweier oder mehr Lie-Matrixgruppenelementen tritt folgendes Problem auf: Die Formel

$$e^x e^y = e^{x+y} \quad (2.14)$$

gilt für Matrizen nicht mehr. Nur für kommutierende Matrizen X und Y , wenn also $[X, Y]_- = 0$, gilt Gleichung (2.14) auch für Matrizen:

$$e^X e^Y = e^{X+Y}, \text{ wenn } [X, Y]_- = 0. \quad (2.15)$$

Die beiden Matrizen kommutieren im allgemeinen Fall nicht, deshalb gilt für das Lie-Algebra-Element des Produktes folgende, als Baker-Campbell-Hausdorff-Formel bekannte, Gleichung [95–99]

$$\begin{aligned} Z(X, Y) &= \log(\exp X \exp Y) \\ &= X + Y + \frac{1}{2}[X, Y] + \frac{1}{12}[X, [X, Y]] - \frac{1}{12}[Y, [X, Y]] \\ &\quad - \frac{1}{24}[Y, [X, [X, Y]]] \\ &\quad - \frac{1}{720}(\ [[[X, Y], Y], Y], Y + \ [[[Y, X], X], X], X) \\ &\quad + \frac{1}{360}(\ [[[X, Y], Y], Y], X + \ [[[Y, X], X], X], Y) \\ &\quad + \frac{1}{120}(\ [[[Y, X], Y], X], Y + \ [[[X, Y], X], Y], X) + \dots \end{aligned} \quad (2.16)$$

Zerlegung in kommutierende Komponenten

Jedes Element der $\mathbf{U}(N)$ kann in maximal N kommutierende Teile zerlegt werden. Im Falle der $\mathbf{SU}(N)$ erhält man eine Algebra-Dimension weniger. Algorithmisch kann das sehr leicht durch folgendes Schema erreicht werden:

1. Gegeben sei ein $U \in \mathbf{SU}(N)$, daraus folgt $\exists V$ mit $VUV^\dagger \in D$, wenn D die Untergruppe der diagonalen Einheitsmatrizen darstellt. Oder kürzer: U lässt sich mit V unitär diagonalisieren.
2. Wenn V nun U diagonalisiert, so gilt auch $VUV^\dagger = Ve^{-iH}V^\dagger = e^{-iVHV^\dagger} = e^{-iH_D}$, wobei H_D nun ebenfalls diagonal ist.
3. H_D kann nun aufgrund der Vektorraumstruktur der Algebra in seine diagonalen Komponenten zerlegt werden. Im Falle der $\mathbf{su}(4)$ erhalten wir $H_D = c_1 1z + c_2 z + c_3 zz$.
4. Da die einzelnen Elemente der Zerlegung von H_D kommutieren, gilt (wieder im Falle der $\mathbf{SU}(4)$) $e^{-iH_D} = e^{-ic_1 1z} e^{-ic_2 z} e^{-ic_3 zz}$.

5. Als Letztes steht noch die Rücktransformation mit V aus und wir erhalten:

$$\begin{aligned}
 U &= V^\dagger e^{-iH_d} V \\
 &= V^\dagger e^{-ic_1 1z} e^{-ic_2 z1} e^{-ic_3 zz} V \\
 &= V^\dagger e^{-ic_1 1z} V V^\dagger e^{-ic_2 z1} V V^\dagger e^{-ic_3 zz} V \\
 &= U_1 U_2 U_3 ,
 \end{aligned} \tag{2.17}$$

wobei alle U_k paarweise miteinander kommutieren.

Eine in diesem Zusammenhang interessante Größe stellt die Anzahl der kommutierenden Elemente dar.

2.1.5 Superoperatorformalismus

Als letztes wichtiges Konzept soll der Superoperatorformalismus vorgestellt werden [100]. Hierfür wird zunächst die vec -Operation definiert, welche eine Matrix $M \in \text{Mat}_N(\mathbb{C})$ auf einen Vektor aus \mathbb{C}^{N^2} abbildet. Man erhält diesen Vektor, indem man die einzelnen Spaltenvektoren der Matrix M_k übereinander stapelt. Dann gilt:

$$\begin{aligned}
 \text{vec} : \text{Mat}_N(\mathbb{C}) &\rightarrow \mathbb{C}^{N^2} \\
 M &\mapsto \begin{pmatrix} \vec{M}_1 \\ \vdots \\ \vec{M}_N \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{2.18}$$

\vec{M}_k bezeichne wieder den k -ten Spaltenvektor der Matrix M . Anstatt $\text{vec}(X)$ schreibt man auch oft nur $|X\rangle$.

Man betrachte nun für $X \in \text{Mat}_N(\mathbb{C})$ und $M \in \mathbf{GL}(N)$ die Konjugation von X mit M , also $M X M^{-1}$. Die Konjugation kann mittels der vec -Operation auch wie folgt umformuliert werden:

$$M X M^{-1} \rightarrow ((M^{-1})^T \otimes M) \text{vec}(X) \tag{2.19}$$

Für $((M^{-1})^T \otimes M) \text{vec}(X)$ schreiben wir auch $\text{Ad}_M \text{vec}(X)$ oder kürzer $\hat{M} \text{vec}(X)$ oder ganz kurz $\hat{M} |X\rangle$. Im Falle unitärer Evolutionen existiert eine weitere gebräuchliche Notation: \hat{M} bedeutet dort zum einen, dass in Gleichung (2.19) Beschriebene. Ist M jedoch ein Hamilton-Operator H , so bedeutet

$$\hat{H} = \mathbf{1} \otimes H - H^T \otimes \mathbf{1} . \tag{2.20}$$

Siehe hierzu auch Gleichung (9.16). Um eine Verwechslung zu vermeiden, schreiben wir hierfür auch kurz ad_H . Es besteht folgende Beziehung:

$$\hat{M} = \text{Ad}_M = e^{-i \text{ad}_M} . \tag{2.21}$$

2 Grundlagen

Für Spurberechnungen von Produkten von Matrizen X und Y erhalten wir folgende Schreibweise im Superoperatorformalismus

$$\text{tr}(X^\dagger Y) \Rightarrow \langle X|Y \rangle. \quad (2.22)$$

Die Berechnung der Spur stellt also ein Skalarprodukt dar.

2.2 Graphentheorie

Der folgende kurze Abschnitt dient dazu, die Grundbegriffe der Graphentheorie zu vermitteln, soweit sie bei der Behandlung von Kopplungstopologien relevant sind. Der interessierte Leser sei auf die einschlägige Literatur, z.B. [101], verwiesen.

Ein ungerichteter Graph besteht aus einer nicht-leeren Menge von Punkten V (von *engl.* vertex = Punkt) und einer nicht-leeren Menge von Kanten E (von *engl.* edge = Kante). Beispiele für Graphen sind in Abbildung 2.1 aufgezeigt. Eine im weiteren Verlauf interessante Eigenschaft ist die chromatische Zahl $\chi(G)$

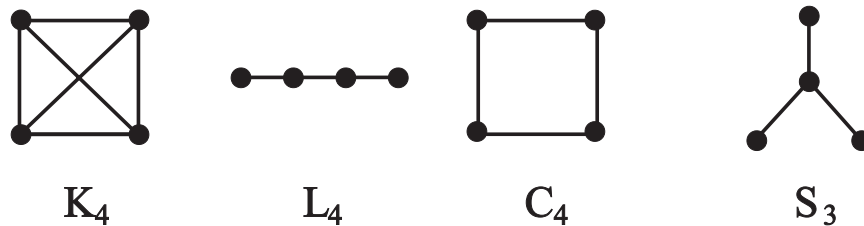


Abbildung 2.1: Beispiele für Graphen mit 4 Punkten

eines Graphen G . Sie beschreibt die minimale Anzahl von Farben, die notwendig ist, um alle Ecken eines Graphen so einzufärben, dass Ecken die eine gemeinsame Kante besitzen unterschiedliche Farben aufweisen. Graphen heißen bipartit, wenn ihre chromatische Zahl 2 ist. Für planare Graphen gilt $\chi(G) \leq 4$ [102].

2.3 Quantendynamik und Quantencomputer

2.3.1 Dynamik geschlossener Systeme

Im folgenden Abschnitt sollen in aller Kürze einige wesentliche Aspekte der Dynamik endlich dimensionaler, geschlossener Quantensysteme wiederholt werden. Der Zustand des Systems wird durch Vektoren $|\psi(t)\rangle$ eines Hilbertraumes ³ wiedergegeben. Nach der Festlegung einer orthonormierten Basis des Hilbertraumes

³Ein Hilbertraum ist ein vollständiger Vektorraum mit einer Metrik, die durch ein Skalarprodukt $\langle \psi|\psi \rangle$ induziert wird.

2.3 Quantendynamik und Quantencomputer

$\{|\psi_k\rangle\}$ und der Definition des Skalarproduktes $\langle\psi_k|\psi_l\rangle$, lässt sich jeder Zustand in dieser Basis entwickeln: $|\Psi\rangle = \sum_k c_k |\psi_k\rangle$, mit $c_k = \langle\Psi|\psi_k\rangle$. Die zeitliche Entwicklung eines abgeschlossenen Systems wird durch seinen Hamiltonoperator H (oft auch Hamiltonian genannt) bestimmt und durch die Schrödinger Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} H_{tot}(t) |\psi(t)\rangle \quad (2.23)$$

beschrieben. Der Einfachheit halber sei $\hbar = 1$ gesetzt. H ist hermitisch und besitzt deshalb nur reelle Eigenwerte. Diese Eigenwerte sind mit den Energien der entsprechenden stationären Zustände unter H , die durch die Eigenvektoren dargestellt werden, verknüpft. Gleichung (2.23) lässt sich im Falle eines zeitunabhängigen Hamiltonians wie folgt lösen:

$$|\psi(T)\rangle = U(T) |\psi(0)\rangle . \quad (2.24)$$

Alle Matrizen $U(T) := e^{-iH_{tot}T}$ stellen eine 1-Parameter unitäre Lie-Gruppe mit dem Generator $-iH$ dar. Dass dies die korrekte Beschreibung für die Dynamik abgeschlossener Systeme ist wurde bereits von Dirac [103] erkannt.

H kann aus mehreren Summanden bestehen. Neben systemspezifischen, statischen Komponenten, dem sogenannten Drifthamiltonian H_{drift} , der z.B. Kopplungen zwischen verschiedenen Subsystemen beinhaltet, treten mehrere extern kontrollierbare Komponenten $H_{control}$ auf, welche z.B. den Einfluss von elektromagnetischen Feldern auf das System beschreiben. Der Gesamthamiltonian baut sich somit folgendermaßen auf: $H = H_{drift} + \sum_k u_k H_{control,k}$. u_k steht für die extern eingestellte Stärke des entsprechenden Kontrollhamiltonians. Terme im Hamiltonian, die neben einem Faktor $I_{k\mu}$ nur Einheitsoperatoren besitzen, beschreiben lokale Operationen auf dem k -ten Spin, z.B. Pulse. Terme mit zwei vom Einheitsoperator verschiedenen Faktoren werden gemeinhin als Kopplungsterme bezeichnet.

Eigenvektoren $|\psi_k\rangle$ von H_{drift} stellen stationäre Zustände des Systems dar. Die entsprechenden Eigenwerte, also das Skalarprodukt

$$E_k := \langle\psi_k|H_{drift}\psi_k\rangle \quad (2.25)$$

sind mit den Energien dieser Zustände identifizierbar. Über das Skalarprodukt kann auch der Erwartungswert \bar{o} einer Messung am Quantensystem berechnet werden. Sei O eine Observable, dargestellt durch eine hermitesche Matrix, dann ist

$$\langle\Psi|O\Psi\rangle = \bar{o} . \quad (2.26)$$

$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |\psi_k\rangle$ ist im Allgemeinen vor der Messung kein Eigenzustand von O . Nach der Messung, mit dem Ergebnis o_k , wird der Zustand jedoch auf einen Eigenzustand $|\omega_k\rangle$ mit eben dem Eigenwert o_k von O projiziert. Eine eventuell vorher vorhandene Superposition von Zuständen wird somit zerstört. Dieser Vorgang wird gemeinhin als Kollaps der Wellenfunktion bezeichnet.

2.3.2 Dynamik offener Systeme

In der Realität treten geschlossene Systeme nur sehr selten auf. Und selbst wenn, wären sie, ob ihrer Abgeschlossenheit, einer Messung durch einen externen Beobachter nicht zugänglich. Der nächste Abschnitt beschäftigt sich deswegen mit der Dynamik von offenen Systemen [104].

Die zentrale Größe bei der Beschreibung offener Systeme stellt die Dichtematrix ρ dar. ρ ist hermitsch und hat nur Eigenwerte größer gleich Null, $\rho = \rho^\dagger \geq 0$. Zudem gilt $\text{tr}(\rho) = 1$. Die Dichtematrix lässt sich auf zwei Wegen einführen.

Auf dem ersten Weg wird zunächst wieder von einem abgeschlossenen Gesamtsystem ausgegangen. Dieses ist in das zu beobachtende Quantensystem QS , sowie die, den Beobachter umfassende, Umgebung $env.$ ⁴, aufgeteilt. Zustände des Gesamtsystems $|\Psi\rangle$ können, wenn für die beiden Teilsysteme die orthonormierten Basen $\{|\psi_k\rangle\}_{QS}$ und $\{|\phi_l\rangle\}_{env.}$ gewählt werden, wie folgt ausgedrückt werden:

$$|\Psi\rangle = \sum_{k,l} c_{k,l} |\psi_k\rangle_{QS} \otimes |\phi_l\rangle_{env.} = \sum_{k,l} c_{k,l} |\psi_k \otimes \phi_l\rangle \quad (2.27)$$

Die Messung einer Observablen O ist nun ein hermitescher Operator, der nur auf dem Quantensystem operiert, wohingegen die Umgebung invariant bleiben soll: $O = O_{QS} \otimes \mathbf{1}_{env.}$. Der Erwartungswert berechnet sich zu [105]

$$\begin{aligned} \langle \Psi | O \Psi \rangle &= \sum_{m,n} \sum_{k,l} c_{mn}^* c_{kl} \langle \psi_m \otimes \phi_n | O \psi_k \otimes \phi_l \rangle \\ &= \sum_{k,l} \sum_{mn} c_{mn}^* c_{kl} \langle \psi_m | O_{QS} \psi_k \rangle \langle \phi_n | \mathbf{1}_{env.} \phi_l \rangle \\ &= \sum_{k,l} \sum_{mn} c_{mn}^* c_{kl} (O_{QS})_{mk} \delta_{nl} \\ &= \sum_{k,m} \underbrace{\sum_n c_{mn}^* c_{kn}}_{=\rho_{km}} (O_{QS})_{mk} \\ &= \sum_{k,m} \rho_{km} (O_{QS})_{mk} \\ &= \sum_m (\rho O_{QS})_{mm} \\ &= \text{tr}(\rho O_{QS}) . \end{aligned} \quad (2.28)$$

Da der Dichteoperator durch die Beschränkung des Gesamtsystems auf das quantenmechanische Teilsystem erhalten wurde, wird er oft als reduzierter Dichteoperator bezeichnet.

Der zweite Zugang zum Dichteoperatorformalismus erfolgt über Gemische reiner Zustände, wie sie z.B. in der NMR-Spektroskopie auftreten [106]. Seien ρ_a

⁴Umgebung = *engl.* environment

2.3 Quantendynamik und Quantencomputer

und ρ_b zwei beliebige reine Quantensysteme. Ein Gemisch beider lässt sich durch $\rho = p\rho_a + (1-p)\rho_b$, mit $0 \leq p \leq 1$, beschreiben, wobei p den Anteil von System a am Gemisch quantifiziert.

Natürlich ist es auch möglich, geschlossene oder reine Quantensysteme im Dichteoperatorformalismus zu behandeln. Das entsprechende ρ erhält man über das dyadische Produkt $|\psi\rangle\langle\psi| = \rho_r$. Für sie gilt $\rho_r^2 = \rho_r$ und $\text{rk}(\rho_r) = 1$. Reine Zustände entsprechen also atomaren Projektoren im Dichteoperatorformalismus. Die Evolution eines Dichteoperators unter einem Hamiltonian H wird durch die Liouville-Gleichung beschrieben:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = -i[H, \rho(t)]_- . \quad (2.29)$$

Im Falle eines zeitunabhängigen H lässt sich Gleichung (2.29) wie folgt integrieren:

$$\rho(t) = U\rho(0)U^\dagger . \quad (2.30)$$

Eine Form der Wechselwirkung des Systems mit seiner Umgebung stellen dissipative Prozesse dar. Der Einfluss solcher relaxativer Prozesse kann auf einfache Weise mit in die Bewegungsgleichung aufgenommen werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho(t) &= -i[H, \rho(t)]_- - \Gamma(\rho(t) - \rho_0) \\ &\Rightarrow -i\hat{H}\text{vec}(\rho(t)) - \hat{\Gamma}\text{vec}(\rho(t) - \rho_0) \end{aligned} \quad (2.31)$$

wobei ρ_0 den thermischen Gleichgewichtszustand darstellt. In $\hat{\Gamma}$ soll die Relaxationsdynamik zusammengefasst sein. Man nennt $\hat{\Gamma}$ den Relaxationssuperoperator. Bei allen Überlegungen soll, wenn nicht ausdrücklich anders erwähnt, angenommen werden, dass die Relaxationsprozesse Markov'sche sind. In allen hier auftretenden Fällen werden die Relaxationsmechanismen zudem auch noch zeitunabhängig sein, was einer weiteren Spezialisierung gleich kommt. Beispiele für nicht-Markov'sche Relaxationsmechanismen finden sich in [107].

2.3.3 Überlegenheit von Quantenalgorithmen

Die Überlegenheit von Quantenalgorithmen gegenüber klassischen Algorithmen kann auf drei Quanteneffekte zurückgeführt werden [108]:

1. exponentiell schnellere Realisierungen komplexer Operationen,
2. Quantenparallelismus durch Superposition von Zuständen und Interferenzeffekten und
3. Verschränkung von Zuständen.

2 Grundlagen

Da der Nutzen von Verschränkung zwischen verschiedenen Teilchen beim Quantencomputing noch nicht völlig verstanden ist, soll hier nur auf die ersten beiden Effekte eingegangen werden.

Weitere Eigenschaften, ohne klassisches Analogon sind die Nicht-Lokalität [109, 110] (v.a. wichtig für Teleportation [40–42, 111]), die Nicht-Klonierbarkeit⁵ (v.a. wichtig bei Quantenkryptographie [33–37, 111]). Des Weiteren kann mit verschränkten Zuständen bei der Messung von Systemparametern eine höhere Genauigkeit erreicht werden, als mit rein klassischen Methoden [113–119].

Schnellere Realisierung auf Quantencomputern

Durch die sogenannte *Fast-Fourier-Transformation* (FFT) konnte die klassische diskrete Fourier-Transformation eines N -dimensionalen Vektors durch geschickte Wahl der Elementaroperationen von einer Komplexität $O(N^2)$ auf $O(N \log N)$ beschleunigt werden [59, 60]. Auf einem Quantencomputer ist es nun möglich diese Transformation in nur $O((\log N)^2)$ Elementaroperationen durchzuführen [26]. Auf diese Weise erreicht man, verglichen mit klassischen Computern einen exponentiellen Speed-up.

Quantenparallelismus

Analog dem klassischen Bit, welches zwei Zustände, z.B. (*Stromfluss an*) und (*Stromfluss aus*) annehmen kann, gibt es beim Quantenbit, kurz Qubit, auch zwei grundlegende Zustände, z.B. die Präzession des Spin *entlang* ($|\uparrow\rangle$) oder *entgegen* ($|\downarrow\rangle$) eines extern angelegten Magnetfeldes der Stärke B_0 . Die beiden Zustände spannen einen 2-dimensionalen Vektorraum über \mathbb{C}^2 auf, welcher mit dem Skalarprodukt $\langle \cdot | \cdot \rangle$ zu einem Hilbertraum wird.

Die beiden Einstellungen werden mit $|0\rangle$ und $|1\rangle$ identifiziert. Da es sich hier um Zustände eines Quantensystems handelt, sind neben diesen kanonischen Basiszuständen auch alle, auf 1 normierten, komplexen Superpositionen

$$|\psi\rangle = \cos(\alpha) |0\rangle + e^{i\beta} \sin(\alpha) |1\rangle \quad (2.32)$$

zulässige Zustände des Systems. Betrachten wir nun ein System von n Qubits, die sich alle im Zustand $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ befinden. Der Zustand ist also:

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes \cdots \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}^n} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle . \end{aligned} \quad (2.33)$$

$|k\rangle$ ist hier die Dezimalschreibweise für die entsprechende Binärzahl, z.B. bei drei (Qu-)Bits $(5)_{10} = (101)_2$. Wenden wir nun eine Funktion f , dargestellt durch

⁵Nicht-Klonierbarkeit oder Nicht-Kopierbarkeit beschreibt die Tatsache, dass es unmöglich ist perfekte Kopien eines unbekanntem Quantenzustands zu fertigen [112].

einen unitären Propagator U_f , auf diesen Zustand an, so werden alle Funktionswerte gleichzeitig berechnet:

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle \mapsto U_f \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{k=0}^{2^n-1} |U_f k\rangle . \quad (2.34)$$

Unglücklicherweise kollabiert dieser Zustand bei der Messung auf einen einzelnen der möglichen Eigenzustände des Messoperators. Durch geschickte Manipulation lässt sich jedoch, bei manchen speziellen Fällen, trotzdem Information über die angewandte Funktion f erlangen. Als Beispiel sei hier der Faktorisierungsalgorithmus von Shor [26, 58] genannt.

2.3.4 Zustände des Quantensystems

Wenn wir den Zustand des Systems im Dichteoperatorformalismus betrachten gibt es einige interessante Aspekte die hier kurz erwähnt werden sollen. Auf zwei Eigenschaften des Dichteoperators ρ wurde bereits hingewiesen:

$$\text{tr}(\rho) = 1 \text{ und} \quad (2.35)$$

$$\rho = \rho^\dagger (> 0) \quad (2.36)$$

Fügen wir einen passenden Einheitsoperator $\mathbf{1}$ in den Spurausdruck ein und schreiben dann Gleichung (2.35) im Superoperatorformalismus, so erhalten wir

$$\text{tr}(\mathbf{1}^\dagger \rho) \Rightarrow \langle \mathbf{1} | \rho \rangle = 1 . \quad (2.37)$$

Alle möglichen Zustände ρ einer bestimmten Dimension liegen also auf dem Teilraum der einen bestimmten „Winkel“ zu $|\mathbf{1}\rangle$ einnimmt.

Schreiben wir Gleichung (2.36) im Superoperatorformalismus (s. Gleichung (2.22)), so erhalten wir

$$\widehat{\text{Adj}} |\rho\rangle = +1 |\rho\rangle \quad (2.38)$$

Zulässige Dichteoperatoren sind also Superpositionen von Eigenvektoren des Adjunktionssuperoperators $\widehat{\text{Adj}}$ zum Eigenwert $+1$. An dieser Stelle sei noch darauf hingewiesen, dass $\widehat{\text{Adj}}$ für komplexe Matrizen keine lineare Darstellung hat. In Kapitel 9.3 wird eine mögliche reelle Darstellung des Adjunktionssuperoperators vorgestellt.

Eine weiterführende Betrachtung der Eigenschaften von Dichteoperatoren findet sich in [120].

2.4 Kontrolltheorie

Im Folgenden sollen einige Aspekte der Kontrolltheorie wiederholt werden, so sie für den weiteren Verlauf wichtig sind.

2.4.1 Kontrollierbarkeit

Ein N -dimensionales Quantensystem heißt vollständig Operator-kontrollierbar [121], wenn durch die systemspezifischen Drift- und Kontrollterme unter wiederholter Kommutatorbildung die gesamte Algebra $\mathbf{su}(N)$ aufgespannt wird. Einfache Beispiele sind

1. Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen, $H_{drift} = I_z$ und $H_{control} = I_x$,
2. heteronukleare, Ising gekoppelte n -Spin- $\frac{1}{2}$ -systeme mit zusammenhängenden Kopplungsnetzwerken ($H_{drift} = \pi \sum_{k<l} J_{kl} 2I_{kz} I_{lz}$; $J_{k,l}$ sind systemspezifische Kopplungskonstanten zwischen den einzelnen Spins) und Radiofrequenzpulsen aus x - und y -Richtung⁶ ($H_{control} = \sum_k u_{kx} I_{kx} + u_{ky} I_{ky}$)
3. Ising gekoppelte $3n$ -Spinsysteme linearer Topologie mit periodischer Abfolge dreier verschiedener Sorten von Kernen A , B und C und Radiofrequenzpulsen aus x - und y -Richtung [122, 123]
4. Systeme kapazitiv gekoppelter Ladungsqubits ($H_{drift} = E_1 \sigma_x \otimes \mathbf{1} + E_2 \mathbf{1} \otimes \sigma_x + E_m \sigma_z \otimes \sigma_z$) mit extern kontrollierbaren Spannungsniveaus der einzelnen Ladungsqubits ($H_{control} = u_1 \sigma_z \otimes \mathbf{1} + u_2 \mathbf{1} \otimes \sigma_z$).

Neben der vollständigen Kontrollierbarkeit existieren noch andere Arten, z.B. die Zustandskontrollierbarkeit. Hier wird verlangt, dass durch eine gegebene Menge von Operationen jeder beliebige Anfangszustand in jeden beliebigen Zielzustand überführt werden kann. Vollständige Kontrollierbarkeit kann jetzt auch wie folgt interpretiert werden: Jede Basis des Hilbert-Raumes muss in jede andere Basis überführt werden können.

2.4.2 Gradientenfluss-Algorithmus für Quantenkontrolle

Iteratives Schema des Algorithmus

Die algorithmischen Werkzeuge der Quantenkontrolle [124–128] basieren auf Gradientenflüssen [129–131], welche auf die unitäre Gruppe der Hamilton'schen Quantendynamik adaptiert wurden [132–134]. Sei U_G die unitäre Darstellung des Quantengatters, also die Zielmatrix. Weiter sei $U(T) := e^{-it_M H_M} \dots e^{-it_k H_k} \dots e^{-it_1 H_1}$ der Propagator, der durch eine Sequenz von M Evolutionsperioden des Quantensystems, mit stückweise konstanten Hamiltonians H_k , erzeugt wird. Diese Abfolge von Propagatoren beschreibt die Trajektorie $U(t)$ vom Startpropagator $\mathbf{1}$ zum Endpropagator $U(T)$. Das Kontrollproblem lässt sich dann wie folgt beschreiben:

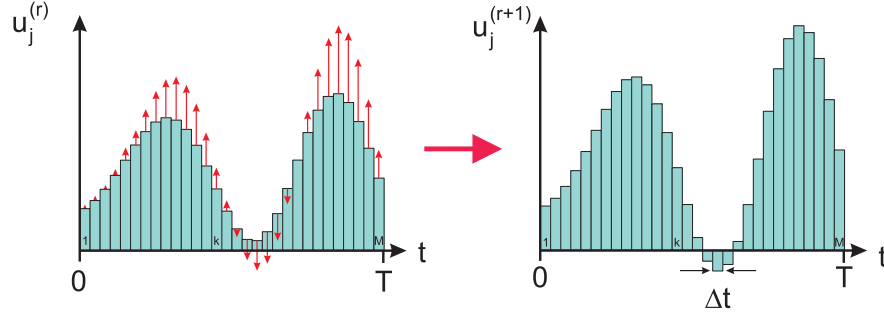
Maximiere die Kostenfunktion Φ unter der Nebenbedingung

$$\dot{U}(t) = -iHU(t)$$

⁶ x - oder y - allein genügt, bei Abwesenheit weiterer lokaler z -Terme im Driftheamiltonian, nicht.

Der Hamiltonian H kann sowohl Drift- als auch Kontrollterme beinhalten: $H = H_{drift} + \sum_j u_j H_j$, wobei u_j ein Element des (reell-wertigen) Kontrollamplitudenvektors darstellt.

Die Kostenfunktion Φ kann im Allgemeinen laufende Φ_r und abschließende $\Phi_f(U(T))$ Kosten enthalten: Laufende Kosten sind beispielsweise mit dem Auf-



1. man wähle eine zufällige oder geratene Ausgangspulssequenz $u_j^{(0)}(t_k)$ für alle t_k mit $k = 1, 2, \dots, M$;
2. ausgehend von $U_0 = \mathbb{1}$, berechne man die Vorwärtspropagation für alle t_1, t_2, \dots, t_k (der Einfachheit halber sei $\Delta t := t_{k+1} - t_k$ uniform)

$$U^{(r)}(t_k) = e^{-i\Delta t H_k^{(r)}} e^{-i\Delta t H_{k-1}^{(r)}} \dots e^{-i\Delta t H_1^{(r)}} \quad ;$$

3. man berechne, beginnend von $T = t_M$ und $\lambda(T) = \text{const} \cdot U_G$, die Rückwärtspropagation für alle $t_M, t_{M-1}, \dots, t_{k+1}$;

$$\lambda^{(r)}(t_{k+1}) = e^{i\Delta t H_{k+1}^{(r)}} e^{i\Delta t H_{k+2}^{(r)}} \dots e^{i\Delta t H_M^{(r)}} \lambda(T) \quad ;$$

4. man berechne den Gradienten $\frac{\partial \mathbf{H}(U(t_k))}{\partial u_j} = \text{Re tr}\{\lambda^\dagger(t_{k+1})(-iH_j)U(t_k)\}$;

5. man adaptiere die Pulssequenz $u_j^{(r+1)}(t_k) = u_j^{(r)}(t_k) + \varepsilon \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial u_j} \Big|_{t=t_k}$ und kehre zu Schritt 2 zurück.

Abbildung 2.2: Obere Kurve: der Vektor der Kontrollamplituden u_j wird durch die berechneten Gradienten (Pfeile) adaptiert. Das iterative Schema des GRAPE Algorithmus [124] ist in der Box dargestellt.

2 Grundlagen

wand verbunden, der während der Propagation geleistet werden soll, wohingegen abschließende Kosten durch den Abstand des erhaltenen Propagators zum Zielpropagator dargestellt werden können. Im Folgenden werden nur abschließende Kosten betrachtet. Optimale Kontrollen u^* werden nun dadurch charakterisiert, dass die Variation der Kostenfunktion Φ gegenüber der Variation der Trajektorie $U(t)$ und der Kontrollen $u(t)$ verschwindet:

$$\partial\Phi = \frac{\partial\Phi}{\partial U(t)}\partial U(t) + \frac{\partial\Phi}{\partial u(t)}\partial u(t) = 0 . \quad (2.39)$$

$U(t)$ und $u(t)$ sind über die Bewegungsgleichung

$$U\dot{(t)} = -iH(u(t))U(t) \quad (2.40)$$

miteinander gekoppelt. Das Minimierungsproblem ist also durch eine Nebenbedingung beschränkt. Die Einhaltung der Nebenbedingung wird wie üblich durch Lagrange Parameter $\lambda(t)$ in die Berechnung mit aufgenommen, sodass letztes Ende das Pontryagin'sche Maximumsprinzip im Quantensetting ausgenutzt werden kann [124,135]). Dazu fügen wir folgenden Term zur Kostenfunktion hinzu,

$$\int_0^T \lambda(t) \left(-iH(u(t))U(t) - U\dot{(t)} \right) dt , \quad (2.41)$$

welcher die Einhaltung der Nebenbedingung gewährleisten soll. Weiter definieren wir die Hamilton-Funktion:

$$\mathbf{H}(U(t), u(t)) = \Phi_r + \lambda(t) - iH(u(t))U(t) . \quad (2.42)$$

Nach einer partiellen Integration erhalten wir

$$\begin{aligned} \Phi &= \Phi_f - \lambda(T)U(T) + \lambda(0)U(0) \\ &+ \int_0^T \left(\mathbf{H}(U(t), u(t)) + \lambda\dot{(t)}U(t) \right) . \end{aligned} \quad (2.43)$$

Betrachten wir nun die Variationen von Φ bei Variationen von $U(t)$ und $u(t)$. Wir erhalten

$$\frac{\partial\Phi}{\partial U(t)} = \frac{\partial\Phi_f(U(T))}{\partial U(t)} - \lambda(T) + \int_0^T \left(\frac{\partial\mathbf{H}(U(t), u(t))}{\partial U(t)} + \lambda\dot{(t)} \right) dt \text{ und} \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial\Phi}{\partial u(t)} = \int_0^T \frac{\partial\mathbf{H}(U(t), u(t))}{\partial u(t)} dt \quad (2.45)$$

Das Pontryagin'sche Maximumsprinzip verlangt nun, dass im Falle eines Extremums die Variation verschwindet

$$\partial\Phi = 0 . \quad (2.46)$$

Dies gilt somit auch für alle Summanden in Gleichung (2.39). Daraus folgt, dass der Gradient für alle Zeiten t_k verschwindet, $\frac{d\mathbf{H}}{du_j(t)} \rightarrow 0$. Des Weiteren folgen einige Bedingungen für das sogenannte adjungierte System λ : Zum Ersten erhalten wir einen Startpunkt des adjungierten Systems

$$\lambda(T) = \frac{\partial \Phi_f(U(T))}{\partial U(t)} \quad (2.47)$$

und zum anderen eine Bewegungsgleichung

$$\dot{\lambda}(t) = -\frac{\partial \mathbf{H}(U(t), u(t))}{\partial U(t)}. \quad (2.48)$$

Wie sich die einzelnen Terme verhalten, wenn explizite Kostenfunktionen eingesetzt werden, wird im nächsten Kapitel behandelt. Ein Ablaufschema ist in Abbildung 2.2 darstellt.

Kontrolltheorie auf projektiven Gruppen

Für ein gegebenes unitäres Quantengatter U_G und den Propagator $U = U(t)$, der die Evolution eines Quantensystems beschreibt, gibt es zwei unterschiedliche Arten eine geometrische Beziehung zwischen beiden herzustellen [83]. Die eine ergibt für verschiedene Phasenfaktoren unterschiedliche Ergebnisse, während die andere für verschiedene Phasenfaktoren immer das gleiche Ergebnis liefert:

- (1) *Minimierung des Abstandes* $\|U - U_G\|_2$ *durch Maximierung von* $\Phi_1 := \text{Re tr}\{U_G^\dagger U\}$;
- (2) *Minimierung des Winkels* $\angle(U, U_G) \bmod(\pi)$ *durch Maximierung von* $\Phi_2 := |\text{tr}\{U_G^\dagger U\}|^2$.

(1) In der Sprache der Kontrolltheorie ist hier die Aufgabe, das Funktional $\Phi_1[U(t)] = \text{Re tr}\{U_G^\dagger U(T)\}$ zu maximieren⁷. Hierbei soll für alle t mit $0 \leq t \leq T$ die Bewegungsgleichung des Systems, $\dot{U}(t) = -iHU(t)$ (wobei $H = H_d + \sum_j u_j H_j$) eingehalten werden. Als Startbedingung wird $U(0) = \mathbf{1}$ gewählt. Eine Bedingung am Ende der Evolution soll nicht vorhanden sein, $U(T)$ ist somit frei wählbar. Das Problem wird durch die Einführung (i) eines operator-wertigen Lagrange'schen Multiplikators gelöst, welcher die Bewegungsgleichung $\dot{\lambda}(t) = -iH\lambda(t)$ erfüllt, und (ii) einer skalar-wertigen Hamilton-Funktion

$$\mathbf{H}(U(t_k), u(t_k)) = \text{Re tr}\{\lambda^\dagger(t_{k+1}) \left(-i(H_d + \sum_j u_j H_j) \right) U(t_k)\} \quad (2.49)$$

⁷An dieser Stelle sei auf Folgendes hingewiesen: Ein unitärer Propagator lässt sich als Basistransfer betrachten. Wichtig ist, dass für die einzelnen Basiselemente durch die Wahl der Qualitätsfunktion eine feste Phasenbeziehung gewählt werden kann. Optimierungen, in denen das nicht der Fall ist, finden sich in [136, 137].

2 Grundlagen

Der Lagrange'sche Multiplikator kann als ein zum wirklichen System adjungiertes System aufgefasst werden. Jetzt kann das Pontryagin'sche Maximumsprinzip [138] für die Optimierung im Quantensetting [124, 135] ausgenutzt werden. Dieses fordert zum einen, dass die Ableitung der Hamilton Funktion nach den Kontrollparametern zu allen Zeiten verschwindet,

$$\frac{\partial \mathbf{H}(U(t), u)}{\partial u_j} \equiv -\text{Im tr}\{\lambda^\dagger(t_{k+1})H_j U(t_k)\} \stackrel{!}{=} 0 \quad (2.50)$$

und zum anderen legt dieses Prinzip den Endzustand des adjungierten Systems

$$\lambda(T) = -\frac{\partial \Phi_1(T)}{\partial U(T)} = -U_G \quad (2.51)$$

fest. Dadurch wird es möglich, einen iterativen, auf einem Gradientenfluss basierenden, Algorithmus zu implementieren. Um in der $(r + 1)$ -ten Iteration des Algorithmus' die Amplitude der j -ten Kontrolle zur Zeit t_k zu verbessern, wird mit einer passend zu wählenden Schrittweite α die Amplitude $u_j^{(r)}(t_k)$ wie folgt adaptiert:

$$u_j^{(r+1)}(t_k) = u_j^{(r)}(t_k) + \alpha \frac{\partial \mathbf{H}(U(t), u(t))}{\partial u_j(t)} \quad (2.52)$$

Dieser Vorgang wird für eine feste Endzeit solange wiederholt bis keine weitere Verbesserung in der Qualitätsfunktion mehr feststellbar ist. Wird ein voller Transfer erreicht, ist die gewählte Zeit länger oder gleich dem Zeitminimum. Der gesamte Algorithmus ist somit bei kürzerer Endzeit T zu wiederholen, bis zu der Zeit, die gerade noch den vollen Transfer ermöglicht (vergleiche hierzu Abbildung 5.1). Sollte bei fester Zeit T und mehreren Durchgängen niemals voller Transfer erhalten werden, ist die gewählte Zeit zu kurz und der Algorithmus mit längerer Endzeit zu wiederholen. Einige Anmerkungen über Pulssequenzen finden sich auch im Appendix 12.2.2. Da, wie in Abbildung 5.1 gesehen, für unterschiedliche Phasenfaktoren unterschiedliche minimale Zeiten der Implementierung nicht auszuschließen sind, muss das Quantengatter mit allen erlaubten Phasenfaktoren optimiert und aus diesem Satz von Ergebnissen der mit der kleinsten Zeit ausgewählt werden. Dies entspricht N separaten Optimierungen. Im Fall schneller Pulse lassen sich jedoch bereits hier $N/2$ Phasenfaktoren vermeiden. In Gleichung (12.5) wird gezeigt, dass $e^{-i2\pi n I_{kx}} = (-1)^n \mathbf{1}$ gilt. Nimmt man nun noch an, dass lokale Pulse keine Zeit in Anspruch nehmen, folgt dass der Phasenfaktor $-\mathbf{1}$ in Nullzeit realisierbar ist.

(2) Das Problem der Maximierung von $\Phi_2 := |\text{tr}\{U_G^\dagger U\}|^2$ lässt sich auf das vorherige Maximierungsproblem zurückführen: Sei $U \in \mathbf{SU}(N)$, dann ist

$$\hat{U} := U^* \otimes U \quad (2.53)$$

eine Darstellung des entsprechenden Elementes der projektiven speziell unitären Gruppe [139]

$$\mathbf{PSU}(N) \stackrel{\text{iso}}{=} \frac{\mathbf{SU}(N)}{\mathbb{Z}_N} \stackrel{\text{iso}}{=} \frac{\mathbf{U}(N)}{\mathbf{U}(1)}, \quad (2.54)$$

eingebettet in die $SU(N^2)$. Diese Darstellung ist zwar hochgradig reduzibel, aber dennoch sehr praktikabel für unsere Zwecke. Es gilt:

$$\Phi_1[\hat{U}(t)] = \text{Re tr}\{\hat{U}_G^\dagger \hat{U}(T)\} = |\text{tr}\{U_G^\dagger U(T)\}|^2 = \Phi_2[U(t)]. \quad (2.55)$$

Alle unter (1) genannten Resultate lassen sich somit benutzen, um einen Gradientenfluss auf der $\mathbf{PSU}(N)$ zu erhalten. Für die Ableitung der Hamilton Funktion erhält man nun

$$\frac{\partial \mathbf{H}(U(t), u)}{\partial u_j} \equiv -2 \text{Im} (\text{tr}\{\lambda^t(t_k) H_j^t U^*(t_k)\} \cdot \text{tr}\{\lambda(t_k)^\dagger U(t_k)\}) \quad (2.56)$$

Das Tensorprodukt und die damit verbundene Vergrößerung der Dimension tauchen somit bei der expliziten Berechnung der Gradienten nicht auf. Die Endbedingung des adjungierten Systems bedarf keinerlei Information über die globale Phase. Auch eine weitere Suche nach der optimalen Phase in der $\mathbf{SU}(N^2)$ ist nicht notwendig [140], da die Einbettung der $\mathbf{PSU}(N)$ in die $\mathbf{SU}(N^2)$ eine globale Phase von Null erzwingt. Die Anzahl der durchzuführenden Optimierungen wird somit um einen Faktor $N = 2^n$ kleiner. Weiter behalten alle Konvergenz- und Schrittweitenüberlegungen [134] ihre Gültigkeit.

Qualitätskurven bei dissipativer Dynamik

Im Fall dissipativer Dynamik kommt es, nach dem Erreichen einer optimalen Qualität, zu einer Erniedrigung der Qualität durch relaxative Prozesse⁸. Sei F_{tr} die Spurqualität zum Zeitpunkt t . Die maximale Qualität kann dann wie folgt abgeschätzt werden: Seien $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_N$ die Eigenwerte des Relaxationssuperoperators $\hat{\Gamma}$ aus Gleichung (2.31). Die erreichbare Qualität q zum Zeitpunkt t lässt sich von oben und unten eingrenzen:

$$F_{tr}(t) e^{-\frac{t}{N} \sum_{k=1}^N \gamma_k} < q(t) < F_{tr}(t) \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N e^{-\gamma_k t} \quad (2.57)$$

t soll hier größer als die optimale Zeit sein. Numerische Simulationen zeigen, dass durch die unitären Transformationen die Realteile der Eigenwerte des Liouvillian im Laufe der Zeit gemischt werden. Sind alle Realteile schließlich gleich nimmt Γ die Form einer, mit $-\bar{\gamma} = -\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \gamma_k$ skalierten Einheitsmatrix an. Die Qualität wird dadurch nach unten beschränkt. Dass die linke Seite von Gleichung (2.57) wiederum kleiner als die rechte Seite ist, lässt sich für $N = 2$ wie folgt beweisen:

⁸Sollte der Einheitsoperator nicht für alle Zeiten t simulierbar sein, kann auch dies zu einer Reduktion der Qualität im relaxationsfreien Fall führen.

2 Grundlagen

Es gilt

$$\left(e^{-\frac{\gamma_1}{2}} - e^{-\frac{\gamma_2}{2}}\right)^2 > 0 \quad (2.58)$$

$$e^{-\gamma_1} - 2e^{-\frac{1}{2}(\gamma_1+\gamma_2)} + e^{-\gamma_2} > 0 \quad (2.59)$$

$$\frac{1}{2}(e^{-\gamma_1} + e^{-\gamma_2}) > e^{-\frac{1}{2}(\gamma_1+\gamma_2)} \quad (2.60)$$

Die Richtigkeit dieser Abschätzung lässt sich an dem einfachen Modellsystem eines einzelnen Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchens mit transversaler Relaxation (T_2 -Relaxation) und Pulsen variabler Stärke aus der x -Richtung überprüfen. Die Dynamik des Systems wird durch den Liouvillian \hat{L} beschrieben:

$$\hat{L} = -i\hat{H} - \hat{\Gamma} \quad (2.61)$$

Wenn $H = u_x I_x$, folgt $\hat{H} = u_x (\mathbf{1} \otimes I_x - I_x \otimes \mathbf{1})$. Im Falle transversaler Relaxation lässt sich $\Gamma(\rho(t))$ durch $\gamma[I_z, [I_z, \rho(t)]]$ beschreiben. Im Superoperatorformalismus erhalten wir dafür:

$$\gamma \hat{I}_z^2 \text{vec}(\rho(t)) = \gamma \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{vec}(\rho(t)). \quad (2.62)$$

Der Gesamtlouvillian \hat{L} ergibt sich in Matrixschreibweise zu:

$$-iu_x \hat{I}_x - \gamma \hat{I}_z^2 = -iu_x \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} - \gamma \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.63)$$

Betrachten wir nun die Eigenwerte λ von \hat{L} in Abhängigkeit von u_x . Wir erhalten

$$\lambda \in \left\{0, -\gamma, \frac{1}{2} \left(-\gamma - \sqrt{\gamma^2 - 4u_x^2}\right), \frac{1}{2} \left(-\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 4u_x^2}\right)\right\}. \quad (2.64)$$

In den Imaginärteilen der Eigenwerte spiegelt sich die unitäre Dynamik wider, in den Realteilen die dissipative Dynamik. Betrachten wir also zunächst nur die Realteile. Im Falle $u_x = 0$ erhalten wir $\text{Re } \lambda \in \{0, -\gamma, -\gamma, 0\}$. Für $u_x \geq \gamma$ erhalten wir $\text{Re } \lambda \in \{0, -\gamma, -\frac{\gamma}{2}, -\frac{\gamma}{2}\}$. Die beiden letzten Realteile der Eigenwerte stellen genau das arithmetische Mittel zwischen 0 und γ dar. Der vorliegende Fall liegt also zwischen den Grenzen von Gleichung (2.57) ⁹.

⁹Interessant ist in diesem Zusammenhang noch die Tatsache, dass die Eigenwerte erst ab $u_x = \gamma$ einen Imaginärteil aufweisen. Vorher findet also keine unitäre Dynamik statt. Des Weiteren ergibt sich dadurch eine leichte Abweichung des im rein unitären Fall linearen Zusammenhangs zwischen angelegter Pulsstärke und am Qubit ankommender Pulsstärke. Um beispielsweise eine β -Rotation auszuführen, bedarf es einer Pulsstärke von $u_\beta = \frac{1}{2}\sqrt{4\beta^2 - \gamma^2}$.

3 Parallelisierung des kontrolltheoretischen Computeralgorithmus

3.1 Einführung

Um die Fähigkeiten von Quantensystemen zu nutzen, ist es notwendig, sie durch klassische Kontrolle der Spannungsniveaus, Radiofrequenzpulse oder Laserstrahlen zu steuern. Ziel soll sein, eine Computerinfrastruktur zur Verfügung zu stellen, die dies in einer optimalen Art und Weise tut. Bei der Steuerung von Quantensystemen werden die optimierten Kontrollen schwieriger zu berechnen sein, da die Evolution solcher Systeme durch Matrizen dargestellt wird, deren Größe exponentiell mit der Anzahl der einzelnen Subsysteme wächst. Im Folgenden soll die Adaption einiger Matrixoperationen auf Parallelrechnern, sowie deren grundlegende Optimierung vorgestellt werden.

3.2 Quantenkontrollalgorithmen auf Parallelcomputern

3.2.1 Quantencompilation als Kontrollproblem

Oft wird das Moore'sche Gesetz genannt, wenn es darum geht zu zeigen, dass die fortschreitende Miniaturisierung der Prozessoren innerhalb der nächsten Dekaden in einen Größenordnungsbereich vorstoßen wird, der sich auf atomarer Skala bewegt. Bereits lange bevor dies geschieht sind Quanteneffekte nicht mehr vernachlässigbar. Die Quantenkontrolle spielt unter den Werkzeugen, die zur Verfügung stehen, um solcher Effekte Herr zu werden [141], eine herausragende Rolle. Wie in Abbildung 3.1 dargestellt, kann die Aufgabe der Quantenkontrolle, durch die Übersetzung eines Quantengatters oder -moduls in die Maschinensprache eines entsprechenden Quantensystems beispielhaft verdeutlicht werden. Dies kann auf unterschiedliche Weisen geschehen:

- durch einen vorgefertigten Satz von Elementargattern [25], welche in der Lage sind, alle denkbaren Quantengatter zu erzeugen, oder

3 Parallelisierung des kontrolltheoretischen Computeralgorithmus

- über den Weg der direkten Kontrolle des Systems durch die experimentell verfügbaren Kontrollen, mit der Hilfe von Gradientenfluss-basierten numerischen Algorithmen [84, 124].

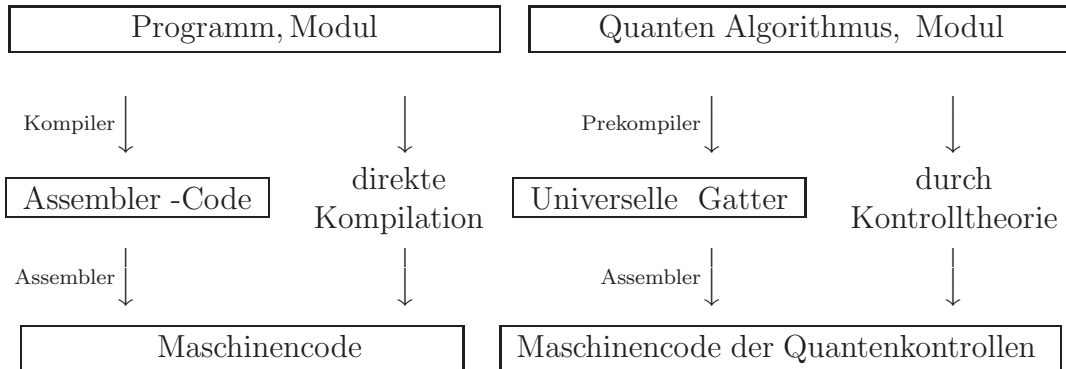


Abbildung 3.1: Kompilation auf klassischen (links) und Quantencomputern. Im Quantenszenario muss der Maschinencode zeit- oder relaxations-optimiert sein, da ansonsten Dekohärenzprozesse die kohärenten Überlagerungen der Quantenbits zerstören. Durch das Aneinanderreihen von universellen Quantengattern wird in der Regel keine Zeitoptimalität erreicht.

Während die Zerlegung von Quantengattern in Elementargatter auf diskreten Zustandsoperationen, wie Levelpermutationen oder Phasendrehungen, beruht, nutzt die Quantenkontrolle die Differentialgeometrie der Mannigfaltigkeitsstruktur aus, die der unitären Quantendynamik zugrunde liegt. Wie weiter gezeigt wird, sind dramatische Speed-ups möglich, z.B. bei der Implementierung der QFT auf Spinsystemen. Der Ansatz ist sehr generell und für alle Spin und Pseudo-Spinsysteme einsetzbar, deren Dynamik Lie-algebraisch abgeschlossen ist.

3.2.2 Vergleich mit bisherigem Programmcode

Der numerische Algorithmus basiert im Wesentlichen auf Matrixoperationen, wie Matrixmultiplikation, Matrix-Exponentialabbildungen oder Spurberechnungen. Für eine genauere Analyse des Algorithmus, s. Kapitel 2.4.2.

Eine Standard-C++-Implementierung mit CBLAS Matrix-Matrix-Operationen ist in der Lage, Quantenoperationen auf Systemen mit bis zu 7 Qubits zu berechnen. Auf einem AMD ATHLON Prozessor mit 2.13 GHz und 1GB RAM dauert dies jedoch Monate. Da die CPU-Zeiten pro weiterem Qubit sich um einen Faktor 8 verlangsamen, liegen 10-Qubitrechnungen weit außerhalb der Reichweite dieser Implementierung des Codes¹. Um alle Stärken von modernen Computerclustern

¹Man versucht, den Faktor 8 wie folgt zu begründen: Die Matrixmultiplikation ist ein N^3 -Prozess. Bei Hinzunahme eines weiteren Qubits erhalten wir: $(2^{n+1})^3 = 2^3(2^n)^3 = 8N^3$.

auszuschöpfen, wurden sowohl die verteilte Berechnung von Matrixprodukten unter Berücksichtigung minimaler Kommunikation zwischen den einzelnen Prozessoren, als auch Symmetrieeigenschaften der exponentiell abzubildenden Matrizen benutzt [142, 143].

3.3 Parallele Matrixmultiplikation

Im Folgenden sollen zwei Arten von Algorithmen verglichen werden, um eine Reihe von Matrizen zu multiplizieren. Die Algorithmen unterscheiden sich in Laufzeit und Speicherbedarf. Um die Algorithmen zu vergleichen, reicht es nicht aus, nur die Laufzeiten während des Propagationsschrittes zu betrachten. Wie gezeigt wird, ist es auch wichtig zu wissen, wie dieser im gesamten Programm eingebettet ist. Betrachtet man hierzu Abbildung 2.2, so erkennt man, dass dem Propagationsschritt (Schritt 2 und 3 in Abbildung 2.2), die Berechnung der Matrizen $U_k := e^{-i\Delta t H_k^{(r)}}$ vorangeht (Schritt 1). Berechnet jeder Prozessor eine Exponentialabbildung, so sind die Matrizen U_k mit $k = 1, \dots, M$, über alle Prozessoren verteilt. Um nun jedem Prozessor die Matrizen zur Verfügung zu stellen, die er in Schritt 3 braucht, müssen diese in einem Kommunikationsschritt verteilt werden. Ein weiterer Kommunikationsschritt wird notwendig, wenn nach der Propagation die Gradientenberechnung folgt.

3.3.1 Scheibenweise Propagation

Das Problem der Matrix-Matrix-Multiplikation lässt sich auf einfache Weise in Teilprobleme zerlegen [142, 143], die auf verschiedenen CPUs durchgeführt werden:

$$AB = (a_1; a_2; \dots; a_N)B = (a_1B; a_2B; \dots; a_NB) \quad (3.1)$$

Dieses Schema ist leicht auf das Produkt von M Matrizen erweiterbar, s. Abbildung 3.2. Jeder Prozessor benötigt dann neben dem Anfangsvektor a_k auch alle Matrizen $e^{-i\Delta t H}$, die in Schritt 2 auf alle Prozessoren verteilt werden müssen. Der notwendige Arbeitsspeicher jedes Prozessors liegt somit in der Ordnung $O(M \cdot N^2)$. Die Zeitkomplexität lässt sich in diesem Schema sehr einfach zu $O(M \cdot N^3/p)$ berechnen, wobei $N := 2^n$ die Größe der Matrizen und p die Anzahl der Prozessoren darstellt. Des Weiteren sind bei dieser Herangehensweise keine Stabilitätsprobleme zu erwarten [144, 145], da sich unitäre Matrizen durch numerisch stabile Algorithmen auszeichnen: das Produkt zweier unitärer Matrizen ist gutartig und lässt sich problemlos auf mehrere Produkte erweitern. Später wird man sehen, dass das für andere Schemata nicht zwingend gelten muss.

Neben der Parallelisierung lässt sich eine weitere Beschleunigung durch folgende Vereinfachung erreichen: in Schritt 4 wird der Spurausdruck $\text{Re tr}\{\lambda^\dagger(-iH_j U)\}$ berechnet, wobei λ und U als vollbesetzte Matrizen, $-iH_j$ oft jedoch auch als

Da aber nicht nur Matrixmultiplikationen eine Rolle spielen kann das nur eine grobe Abschätzung sein.

3 Parallelisierung des kontrolltheoretischen Computeralgorithmus

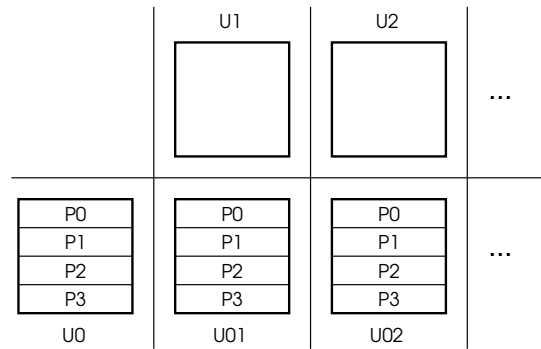


Abbildung 3.2: Schema für die scheibenweise Propagation. Zugrunde liegt die Tatsache, dass sich die Matrixmultiplikation als eine Reihe von Matrix-Vektor-Multiplikationen auffassen lässt.

dünnbesetzte Matrix dargestellt werden können, so z.B. im Fall von Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen bei der NMR-Spektroskopie. In diesem speziellen Fall erkennt man, dass das Produkt $H_j U$ als Permutation der einzelnen Zeilen von U geschrieben werden kann. Um nun $\lambda^\dagger(-iH_j U)$ zu berechnen, genügt es λ^\dagger mit einem zeilenpermutierten U zu multiplizieren. Wie in Abbildung 3.3 zu sehen ist, sind auf diese Weise

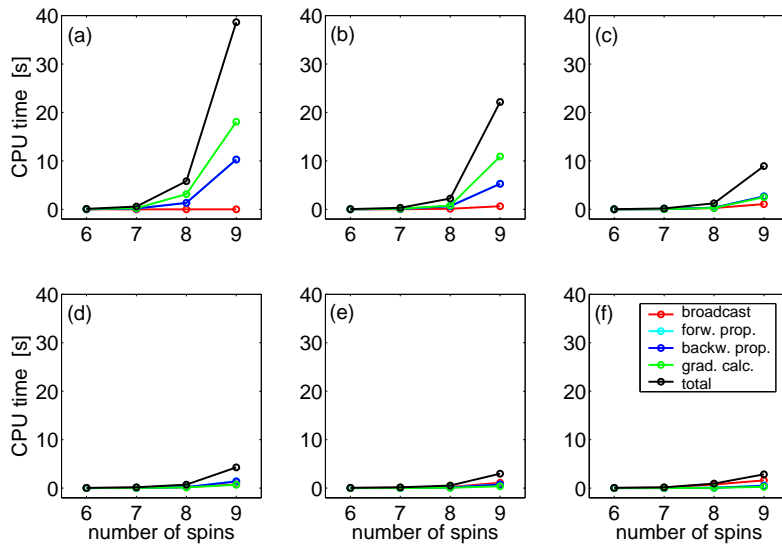


Abbildung 3.3: Abhängigkeit der Gesamt-CPU-Zeit von der Anzahl der Qubits bei scheibenweiser Propagation von 32 Zeitschritten. Die Matrixdimension von n Spins- $\frac{1}{2}$ sind $2^n \times 2^n$. Anzahl der parallel benutzten CPUs (a): 1 CPU (b): 2 CPUs (c): 4 CPUs (d): 8 CPUs (e): 16 CPUs (f): 32 CPUs.

bereits beträchtliche Speed-ups auf Systemen mit bis zu 9 Qubits zu erreichen. In noch größeren Systemen wird jedoch der Arbeitsspeicher limitierend, da jeder Prozessor alle aufzumultiplizierenden Matrizen benötigt. Eine Möglichkeit dies zu umgehen wäre, die Exponentialabbildung auf Anfrage auf allen Prozessoren lokal auszuführen. Da dieser Schritt jedoch der zeitraubendste ist, stellt diese Vorgehensweise keine Alternative dar. Deswegen können Systeme mit mehr als 9 Spins nicht mit der scheibenweisen Propagation bearbeitet werden und benötigen eine alternative Methode.

3.3.2 Baumweise Propagation: Parallel-Prefix-Algorithmus

Einen weiteren Ansatz, die Propagation zu berechnen, stellt die Parallel-Prefix-Multiplikation dar [142,143]. Dieser Ansatz ist prinzipiell für alle Kombinationen von Digitalisierung und Anzahl der Prozessoren anwendbar. Die maximale Anzahl der Prozessoren für eine komplette Propagation einer Pulssequenz der Länge M ist nach oben durch $p = M/2$ begrenzt. Im Gegensatz zur scheibenweisen Propagation, ist es bei der Parallel-Prefix-Multiplikation notwendig, dass die einzelnen Prozessoren während der Propagation miteinander kommunizieren. Die Anzahl der benötigten Matrixmultiplikationen $f(p)$ innerhalb eines Propagationsschrittes ergibt sich für eine beliebige Prozessorenzahl p zu

$$f(p) = \frac{M/2}{p} \log_2 M \quad . \quad (3.2)$$

Jedoch lassen sich viele Multiplikationen parallel ausführen. Im Falle $p = M/2$ bleiben genau $\log_2 M$ Multiplikationen, was genau der Anzahl der Levels in Ab-

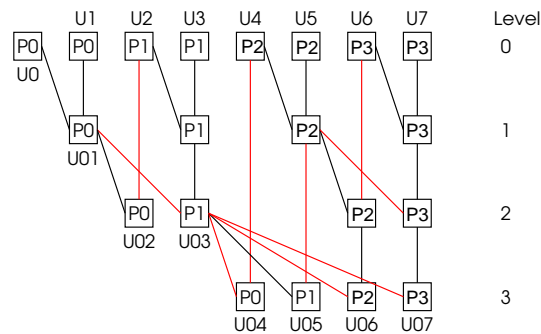


Abbildung 3.4: Schema für die baumweise Propagation. Die Propagation wird in diesem Beispiel in drei Schritten durchgeführt. Die roten Linien stellen Kommunikation zwischen den Prozessoren P_0 bis P_3 dar. Die Prozessoren besitzen in den jeweiligen Levels ein gewisses Teilstück des gesamten Propagationsweges. So hat P_1 in Level 1 beispielsweise das Teilstück U_3U_2 . Multipliziert mit U_1U_0 von P_0 erhält man $U_3U_2U_1U_0$.

3 Parallelisierung des kontrolltheoretischen Computeralgorithmus

bildung 3.4 entspricht. Festzuhalten bleibt, dass effektiv mehr Multiplikationen durchgeführt werden. Das hat zur Folge, dass es eine Mindestanzahl von Prozessoren p_{min} gibt, ab der eine effektive Beschleunigung beobachtet werden kann. Mit weniger Prozessoren sind mehr Multiplikationen durchzuführen als im nicht-parallelen Fall, welcher $M - 1$ Multiplikationen benötigt. Diese Mindestanzahl berechnet sich zu

$$f(p) = \frac{M/2}{p} \log_2 M \leq M - 1 \leq M \quad \rightarrow \quad p_{min} \geq \frac{\log_2 M}{2} \quad . \quad (3.3)$$

Zu den reinen Berechnungszeiten kommen noch die Zeiten für die Kommunikation hinzu. Für eine allgemeine Anzahl von Prozessoren p lässt sich die Anzahl der Kommunikationsschritte wie folgt abschätzen. Multipliziert mit der Zeit für die *Broadcast*- und *Send*-Schritte liefern sie einen Ausdruck $c(p)$ für die Dauer der Kommunikation:

$$c(p) = (2p \log_2 p - 2) \tau_{Broadcast} + \left(M/2 - \frac{M/2}{p} \right) \tau_{Send} \quad . \quad (3.4)$$

Hier wird klar, dass mit wachsendem p , das Gesamtproblem aufgrund zunehmenden Kommunikationsaufkommens größer wird. Sei $\tau_{MatMult}(N)$ die Dauer der einzelnen Matrixmultiplikation zweier N -dimensionaler Matrizen. Für die Gesamtdauer $\tau_{total}(N, M, p)$ als Funktion von N , M und p ergibt sich:

$$\begin{aligned} \tau_{total}(N, M, p) &= f(p) \tau_{MatMult}(N) + c(p) \\ &= \frac{M/2}{p} \log_2 M \tau_{MatMult}(N) \\ &\quad + (2p \log_2 p - 2) \tau_{Broadcast}(N) + \left(M/2 - \frac{M/2}{p} \right) \tau_{Send}(N) \quad . \end{aligned} \quad (3.5)$$

Der Vergleich mit der Komplexität der scheibenweisen Propagation $\mathcal{O}(M \cdot N^3/p)$ zeigt, dass für $p = M/2$ die Parallel-Prefix-Multiplikation niemals schneller sein sollte (Speichereffekte wie z.B. Prefetching ausgeschlossen). Andererseits werden in der letzteren Variante niemals alle Matrizen (U_k) auf allen Prozessoren benötigt. Dies erlaubt es, den erforderlichen Broadcast zu Beginn der Propagation zu eliminieren. Der dadurch erzielte Vorteil überwiegt die langsamere Propagationszeit.

Ein weiterer, noch wichtigerer, Punkt ist der reduzierte Speicheraufwand dieser Methode. Dieser beläuft sich auf $\mathcal{O}(\log_2 M)$ pro Prozessor. Dies ist wesentlich weniger als bei der Scheibenpropagation $\mathcal{O}(M)$.

Die Stabilität der Parallel-Prefix-Multiplikation [146] bedarf, anders als bei der Scheibenpropagation, einer genaueren Überprüfung. Nach [147] ist Erstere im Allgemeinen instabil. Als obere Grenze des Fehlers 1.Ordnung wird dort

$$\left| \text{rd}(U_1 \cdots U_M) - U_1 \cdots U_M \right| \leq 2(N - 1)\varepsilon \sum_{k=1}^{M-1} |B_k| + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (3.6)$$

3.4 Optimierte Matrix-Exponentialabbildung

angegeben. $|B_k|$ steht hier für das Produkt der Absolutwerte der größten Matrixelemente der einzelnen U_k . Da alle Matrizen unitär sind, lässt sich der Fehler als

$$\left| \text{rd}(U_1 \cdots U_M) - U_1 \cdots U_M \right| \leq 2(N-1)M\varepsilon + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \quad (3.7)$$

ausdrücken. In Einklang mit der Linearität in M beobachten wir linear ansteigende Werte für $\|U_{\text{Baum}} - U_{\text{reg}}\|_2$, s. Abbildung 3.5.

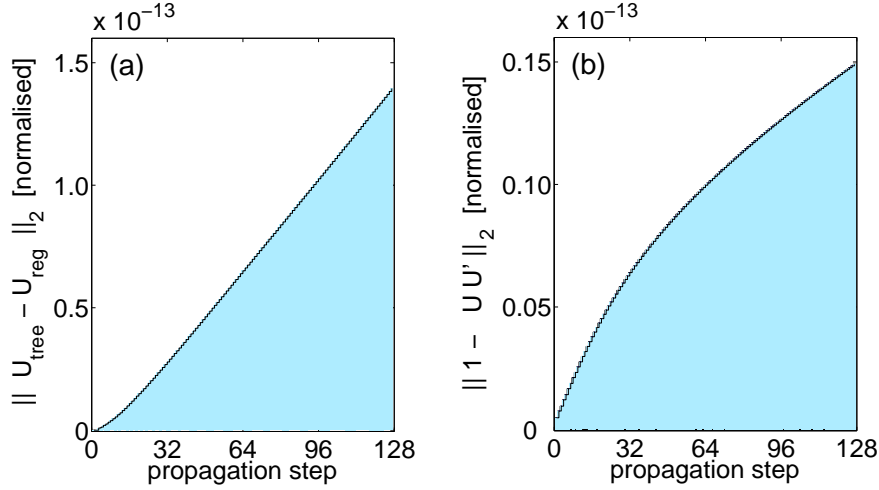


Abbildung 3.5: (a) Abweichung der Baumpropagation von der regulären Propagation auf einem Prozessor bei einem 9 Spinsystem und einer Digitalisierung von $M = 128$. Die lineare Abhängigkeit der Abweichung steht in Einklang mit Gleichung (3.7). (b) Abweichung von der Unitarität für scheiben- und baumweise Propagation.

3.4 Optimierte Matrix-Exponentialabbildung

Die Exponentialabbildung von Matrizen stellt ein notorisch schwieriges Problem dar [148, 149]. Wir vergleichen hier die Standard-Pade-Approximation mit einem generischen QR -Algorithmus und einer symmetrieadaptierten Variante. Das erlaubt uns auf optimierte $LAPACK$ -Routinen zurückzugreifen. Im NMR-Fall, wie auch bei anderen Systemen, weisen die stückweise konstanten Hamiltonians eine als 'Persymmetrie' [144, 150] bekannte Eigenschaft auf. Eine persymmetrische Matrix ist bezüglich ihrer Antidiagonalen symmetrisch. Definiert man mit J_N die $N \times N$ -Umkehrmatrix (Umkehr der Spalten der Einheitsmatrix), dann ist die Persymmetrie mit der Bedingung $J_N A J_N = A^T$ identisch.

Lemma 1 (1) Ein (endliches) Kronecker- oder Tensorprodukt persymmetrischer Matrizen ist wieder persymmetrisch. (2) Das gleiche gilt für eine ungerade Anzahl an Tensorprodukten anti-persymmetrischer Matrizen. Dort gilt $J_N A J_N = -A^T$.

3 Parallelisierung des kontrolltheoretischen Computeralgorithmus

Beweis:

Behauptung (1) folgt aus der Tatsache, dass die Tensormultiplikation mit der Transposition bezüglich der Antidiagonalen kommutiert (sowie auch die gewöhnliche Transposition mit der Tensormultiplikation kommutiert). Behauptung (2) folgt aus der Konstruktion von $J_N = J_2 \otimes J_2 \cdots J_2 \otimes J_2$. Daraus folgt

$$\begin{aligned} J_N(A_1 \otimes \cdots \otimes A_k)J_N &= (J_2 A_1 J_2 \otimes \cdots \otimes J_2 A_k J_2) \\ &= (-1)^{2r} (A_1^T \otimes \cdots \otimes A_k^T) \\ &= (A_1 \otimes \cdots \otimes A_k)^T. \quad \blacksquare \end{aligned} \quad (3.8)$$

Bemerkung 1 Gegeben seien $\{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\} = \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\}$. Aus (2) folgt, dass der Driftterm aus persymmetrischen Termen $\sigma_z \otimes \sigma_z + \alpha(\sigma_x \otimes \sigma_x + \sigma_y \otimes \sigma_y)$ für reelle α besteht. Die Kontrollterme sind Tensorprodukte von $\mathbf{1}$ mit $\sigma_{x,y}$, welche wegen (1) persymmetrisch sind.

Der Hamiltonian H lässt sich aufteilen, in einen Diagonalanteil D und eine Matrix C der Form $C = C_1 \otimes \mathbf{1}_{N/2} + \mathbf{1}_2 \otimes C_2 \otimes \mathbf{1}_{N/4} + \cdots + \mathbf{1}_{N/2} \otimes C_n$ mit 2×2 Matrizen

$$C_k := \begin{pmatrix} 0 & \gamma_k \\ \gamma_k^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

Jede dieser Matrizen lässt sich durch $V_k := \text{diag}(1, \gamma_k/|\gamma_k|)$ auf eine reelle zirkulante Matrix transformieren. Durch das Tensorprodukt aller V_k lässt sich der gesamte Hamiltonian H auf eine reell-symmetrische und persymmetrische Matrix \tilde{H}_{NMR} der Form

$$\tilde{H}_{NMR} = \begin{pmatrix} A_1 & r\mathbf{1} \\ r\mathbf{1} & A_2 \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

transformieren, wobei r reell, $A_{1,2}$ symmetrisch und $\mathbf{1}$ eine Einheitsmatrix sind. Die Persymmetrie von \tilde{H}_{NMR} fordert nun $A_2 = JA_1J$ und deswegen folgt

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{1} & J \\ \mathbf{1} & -J \end{pmatrix}}_W \begin{pmatrix} A_1 & r\mathbf{1} \\ r\mathbf{1} & A_2 \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{1} \\ J & -J \end{pmatrix}}_{W^\dagger} = \begin{pmatrix} A_1 + A_2 + 2rJ_{N/2} & 0 \\ 0 & A_1 + A_2 - 2rJ_{N/2} \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Die Persymmetrie und die damit verbundene Blockdiagonalisierung lässt sich noch auf eine weitere Weise interpretieren: Der Hamiltonian besteht nach der Transformation auf eine rein reelle Matrix aus folgenden Termen:

$$H = \sum_k u_k I_{kx} + \sum_{k < j} J_{kj} 2I_{kz} I_{jz}. \quad (3.12)$$

Die Matrix H kommutiert mit dem Produktoperator $P = 2^{n-1} I_{1x} I_{2x} \cdots I_{nx}$, d.h. Eigenvektoren von P , zusammengefasst in $W = e^{-i\pi(-1 + \frac{1}{\sqrt{2}} I_{1z} + \frac{2^{n-1}}{\sqrt{2}} I_{1x} I_{2x} \cdots I_{nx})}$, blockdiagonalisieren H , siehe Abbildung 3.6 und Gleichung (2.2).

3.4 Optimierte Matrix-Exponentialabbildung

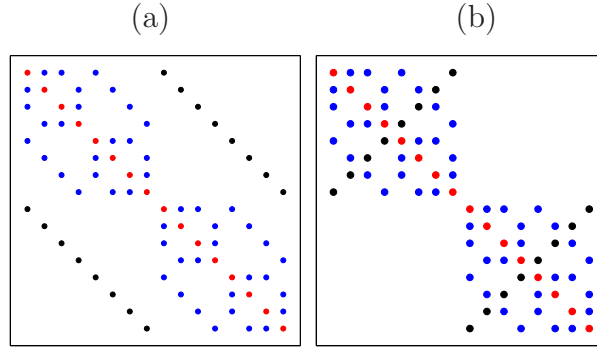


Abbildung 3.6: Beispiel für die Block-Transformation für 4 Spins. Die rechts schwarz gefärbten außerblocdiagonalen Einträge der Matrix werden durch die Transformation in die einzelnen Blöcke überführt. Die Transformation entspricht einem Übergang zwischen I_{1x} und $8I_{1z}I_{2x}I_{3x}I_{4x}$.

Dies entspricht genau dem in Gleichung (3.11) beschriebenen Vorgang. Als Konsequenz lässt sich die Exponentialabbildung von \tilde{H}_{NMR} der Dimension N auf die Exponentialabbildung von zwei reellen Matrizen der Dimension $N/2$ zurückführen². Um die Exponentialabbildung zu berechnen, wurden zwei verschiedene Ansätze gewählt [151]:

1. Padé Approximation;
2. Eigenwert-/Eigenvektormethoden für persymmetrische H . Aus $H = UDU^{-1}$ folgt nach einer Taylorreihenentwicklung

$$\exp(iH) = \exp(iUDU^{-1}) = U \exp(iD)U^{-1} = U \text{diag}(\exp(i \cdot d_j))U^{-1}.$$

Weiter sind alle Eigenwerte reell und die Methode an sich stabil, da H hermitsch ist [148, 149].

Der Nachteil der Padé Approximation, die Matrixinversionen vollbesetzter Matrizen benötigt, lässt sich durch eine Reihenentwicklung umgehen, welche nur mit Produkten von dünnbesetzten Matrizen operiert. Eine Entwicklung durch Chebyshev-Polynome ist einer Taylorreihenentwicklung in diesem Fall überlegen [152]. Weiter lässt sich der Fehler δ der Approximation von $\exp(i\tau H)$ im Falle der Chebyshev-Reihe asymptotisch durch eine Besselfunktion 1. Ordnung $|J(m, |\tau H|)|$ ausdrücken. Das versetzt uns in die Lage, die Anzahl der Schritte anzugeben, die notwendig ist, um eine gewünschte Genauigkeit zu erreichen. Unglücklicherweise sind aufgrund der Kontrollamplituden auch Werte $|\tau H| \geq$

²Die Persymmetrie geht in Systemen verloren, die neben den bilinearen Kopplungstermen noch zusätzliche lokale I_{kz} -Driftterme aufweisen, z.B. homonukleare Spinsysteme.

3 Parallelisierung des kontrolltheoretischen Computeralgorithmus

100 möglich; eine Chebychev-Entwicklung zahlt sich nur dann aus, wenn eine niedrige Genauigkeit ausreicht. Eine Beschleunigung der Chebychev-Reihe kann jedoch durch eine geschickte Kombination der erforderlichen Produkte erreicht werden [152].

3.5 Schlussfolgerung

Der Nutzen kohärenter Überlagerungen von Quantenzuständen in bestimmten Quantenalgorithmen ist enorm. Um solche Systeme in optimaler Weise zu steuern, bedarf es eines ebenso enormen Aufwandes. Das Problem sind die exponentiell wachsenden Vektorräume, die es zu beschreiben gilt. Es wurde gezeigt, dass eine Beschleunigung des kontrolltheoretischen Algorithmus' um einen Faktor 500 für ein 10 Spinsystem möglich ist [142]. Ermöglicht wurde dies durch eine ganze Reihe von nun optimierten Matrixroutinen (Tabelle 3.1) und eine weitgehende Parallelisierung der Matrixoperationen, insbesondere der Matrixmultiplikation. Diese lässt sich auf zwei Weisen parallelisieren. Die scheibenweise Propagation ist dabei der baumweisen bei Systemen mit weniger als 10 Spins überlegen.

Durch eine Matrixmultiplikation nach Strassen [153] ließe sich die elementare Matrizenmultiplikation eventuell noch beschleunigen.

Bisher wurden die einzelnen Teile des Programms separat betrachtet. In einem nächsten Schritt könnte es von Nutzen sein, auch das Zusammenspiel mehrerer Unterroutinen des Programms gemeinsam zu betrachten. So stellt sich die Frage, ob es im Zusammenhang mit der Schrittweitenoptimierung möglich ist, auch andere Unterroutinen für die Vorwärtspropagation zu nutzen. Da bei gegebenem Gradienten über einen Parabelfit die optimale Schrittweite approximiert wird, sollte es möglich sein, die jeweiligen Vorwärtspropagationen mit einer zu testenden Schrittweite auch auf einer andere Weise zu berechnen. Da in diesem

Tabelle 3.1: Beiträge parallelisierter bzw. optimierter Matrixoperationen zur Gesamtbeschleunigung.

Unterroutine	CPU-Zeitanteil		gewichteter Speed-up
	1 CPU	128 CPUs	
maxStepSize	0.9	0.713	521
getGradient	0.091	0.287	52.6
Expm	0.075	0.049	43.0
Propagation	0.01	0.194	6.0
Gradient	0.006	0.044	3.5
Gesamt	1	1	576

speziellen Fall nur das Endergebnis von Interesse ist, bietet sich eine Parallelisierung in Form eines sogenannten Binärbaumes [154] an.

Des Weiteren lassen sich, im Falle von heteronuklearen, Ising-gekoppelten NMR-Spinsystemen eine Reihe von Symmetrieeigenschaften der exponentiell abzubildenden Matrix ausnutzen, um diese um einen Faktor 4 zu beschleunigen. Eine solche Symmetrieanalyse sollte, vor allem bei größeren Systemen, durchgeführt werden, bevor eine Optimierung gestartet wird.

Durch die Erweiterungen sind die Zeiten für Optimierungen auf größeren Systemen in einem vertretbaren Bereich angelangt.

Supercomputer-Cluster, wie der HLRB-II, liefern die passende Hardware, um den optimierten Code anzuwenden [143]. Die bereits vorher bekannten Resultate für minimale Zeiten von diversen Quantenmodulen und deren Zeitkomplexitäten können somit auf eine breitere Basis gestellt werden.

3 Parallelisierung des kontrolltheoretischen Computeralgorithmus

4 Zeitoptimierte Quantengatter auf supraleitenden Schaltelementen

4.1 Einleitung

Supraleitende Schaltelemente bilden, wie bereits eingangs erwähnt, einen attraktiven Kandidaten für ein skalierbares Setup von Qubits [13]. Da im Festkörper die Kopplungen der einzelnen Energieniveaus zu den Freiheitsgraden der Umgebung allgegenwärtig sind, bleibt die Kohärenzzeit limitierend, selbst wenn mit den vorgestellten Methoden die theoretischen Grenzen erreicht werden können [13]. Die Herausforderung liegt deshalb darin, Quantengatter in kürzest möglicher Zeit zu realisieren, um die Schwelle zur Anwendung von Fehlerkorrekturprotokollen zu durchbrechen. Dies führt im vorliegenden Fall zu folgenden fundamentalen Fragen:

- Was ist die kürzeste Dauer für ein CNOT aus einem System von zwei gekoppelten Josephson-Ladungsqubits? Lassen sich auch Systeme mit 3 Qubits behandeln und wieviel Zeit gewinnt man auf diese Weise?
- Wie robust sind solche numerisch gefundenen Pulssequenzen gegenüber Schwankungen der Systemparameter?
- Inwieweit sind Gattergenauigkeiten und Implementierungszeiten abhängig von der Anwesenheit naheliegender höherer Energieniveaus?
- Stört oder fördert eine konstante und vergleichbar starke Kopplung der Qubits die Realisierung des Gatters und welche Parameter limitieren die minimale Zeit?
- Welche Eigenschaften muss die nächste Generation von Pulsgeneratoren haben, um solche Systeme effektiv zu steuern?

Im folgenden Abschnitt sollen diese Fragen durch die Anwendung der numerischen Kontrolltheorie und analytischer Überlegungen beantwortet werden. Teile dieser Arbeit finden sich auch in [155].

4.2 Hamilton-Dynamik von gekoppelten Ladungsqubits

Ein praktisch relevantes und illustratives Beispiel stellt ein System von zwei kapazitiv gekoppelten Ladungsqubits dar, welche über Gleichstrompulse gesteuert werden. Der prinzipiell unendlich-dimensionale Hilbertraum der Ladungszustände des Systems kann auf den entsprechenden niederenergetischen Unterraum, welcher durch Zustände mit keiner oder einer Überschussladung dargestellt wird, eingeschränkt werden. Diese zwei Ladungszustände können als Pseudo-Spin aufgefasst werden. Der auf den Unterraum eingeschränkte Hamiltonian lässt sich in zwei Teile, einen statischen Drift- und einen extern steuerbaren Kontrollterm, aufspalten $H_{tot} = H_{drift} + H_{control}$. Diese lassen sich nun wiederum durch Produktoperatoren ausdrücken:

$$\begin{aligned}
 H_{drift} = & - \left(\frac{E_m}{4} + \frac{E_{c1}}{2} \right) \sigma_z^{(1)} \otimes \mathbf{1} - \frac{E_{J1}}{2} \sigma_x^{(1)} \otimes \mathbf{1} \\
 & - \left(\frac{E_m}{4} + \frac{E_{c2}}{2} \right) \mathbf{1} \otimes \sigma_z^{(2)} - \frac{E_{J2}}{2} \mathbf{1} \otimes \sigma_x^{(2)} \\
 & + \frac{E_m}{4} \sigma_z^{(1)} \otimes \sigma_z^{(2)} \quad ,
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

und

$$\begin{aligned}
 H_{control} = & \left(\frac{E_m}{2} n_{g2} + E_{c1} n_{g1} \right) \sigma_z^{(1)} \otimes \mathbf{1} - \\
 & \left(\frac{E_m}{2} n_{g1} + E_{c2} n_{g2} \right) \mathbf{1} \otimes \sigma_z^{(2)} \quad .
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

E_m , E_{c1} , E_{c2} , E_{J1} und E_{J2} stellen systemabhängige Konstanten dar, deren numerische Werte in der Unterschrift zu Abbildung 4.1 angegeben sind. Diese Pseudo-Spin-Schreibweise lässt sich auch auf andere Systeme wie Doppelquantenpunkte oder Flux-Qubits anwenden.

4.3 Kontrollierbarkeit und CNOT-Implementierung

Die auftretenden Drift- und Kontrollterme generieren durch Mehrfachkommutatorbildung eine $\mathfrak{su}(4)$ -Lie-Algebra. Das System ist somit voll kontrollierbar. Die Kontrollamplituden $n_{g\nu}(t)$, $\nu = 1, 2$ sind Ladungen, die extern durch Spannungsniveaus $V_{g\nu}(t)$ kontrollierbar sind. Es besteht folgende lineare Relation: $n_{g\nu} = \frac{V_{g\nu} C}{2e}$, wobei C die Kapazität und e die Elementarladung darstellt. Sie werden in einem Zeitintervall t_k als konstant angenommen. Das System evolviert in einem solchen Zeitintervall unter dem Hamiltonian $H_{tot}^{(k)} = H_{drift} + H_{control}^{(k)}$. Die Herausforderung liegt nun darin, eine Abfolge von Kontrollamplituden zu finden, die zusammen

4.3 Kontrollierbarkeit und CNOT-Implementierung

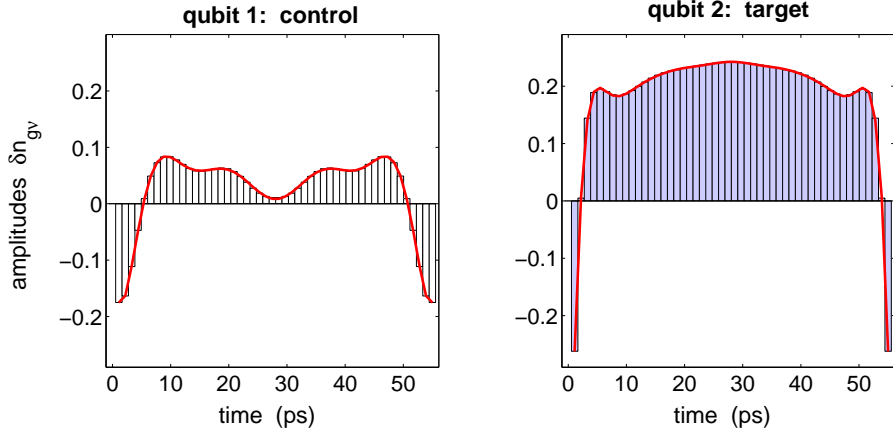


Abbildung 4.1: Bisher schnellste Zerlegung eines CNOT-Gatters mit den verfügbaren Kontrollen. Die Gesamtladungen berechnen sich durch $n_{g\nu} = n_{g\nu}^{(0)} + \delta n_{g\nu}$ mit $\nu = 1, 2$ und $n_{g1}^{(0)} = 0.24$, $n_{g2}^{(0)} = 0.26$. Die auftretenden Energien sind $E_{c1} = 140.2$ GHz, $E_{c2} = 162.2$ GHz, $E_{J1} = 10.9$ GHz, $E_{J2} = 9.9$ GHz, und $E_m = 23.0$ GHz. Alle Werte wurden in Übereinstimmung mit [13] gewählt. Die in 50 Intervalle der Dauer $\Delta = t_k = 1.1ps$ aufgeteilte Pulssequenz wird durch konstante Balken dargestellt. Die Spurqualität liegt bei $\frac{1}{N} |\text{tr}\{U_{\text{target}}^\dagger U_T\}| > 1 - 10^{-9}$. Die roten Linien stellen die analytischen Kurven aus Gleichung (4.4) dar.

mit dem Driftterm einen Propagator ergeben, der einen maximalen Überlapp mit einem gegebenen Zielgatter hat. Damit die Zerlegung des Gatters in eine Abfolge von Propagatoren $U_T := e^{-it_m H_m} \dots e^{-it_1 H_1}$ zeitoptimiert ist, muss $T := \sum_k t_k$ minimal sein.

Im Folgenden werden die Parameter wie in [13] beschrieben gewählt. Abbildung 4.1 zeigt die schnellste Zerlegung eines CNOT Gatters, die durch numerische Kontrolltheorie gefunden wurde.

Anders als in [13] genügen 55ps, verglichen mit 255ps, um eine Differenznorm $\|U_T - U_{\text{Target}}\|_2 = 5 \cdot 10^{-5}$ zu erreichen, was einer Spurqualität von $1 - 10^{-9}$ entspricht. Abbildung 4.2 illustriert die Wirkung der Pulssequenz bei Anwendung auf verschiedene Anfangszustände. Dies geschieht durch eine Abbildung der Zustände auf die lokalen Blochsphären. In dieser Darstellung lassen sich die erhaltenen Resultate teilweise physikalisch interpretieren: Aufgrund der Zerlegung des effektiven Hamiltonians des CNOT-Gatters in verfügbare Kontroll- und Driftterme lässt sich erkennen, dass neben einer $\pi/2$ Rotation unter dem Kopp- lungsterm $(\sigma_z \otimes \sigma_z)/2$ mit einer Dauer von 21.7ps, auch zwei $\pi/2$ Rotationen um lokale Achsen des Drifthamiltonians $\sigma_x/2$, der Länge 25.3ps, benötigt wer-

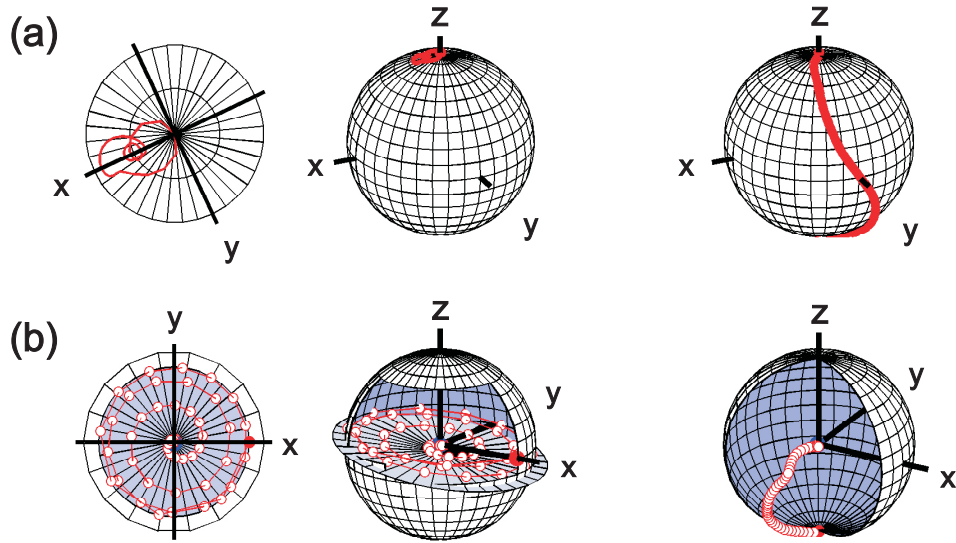


Abbildung 4.2: (a) Zeitliche Entwicklung des separablen Zustands $|\Theta(0)\rangle = |0\rangle|0\rangle$, welcher unter der optimierten Pulssequenz zu $|\Theta(0)\rangle = |0\rangle|1\rangle$ evolviert. Die gesamte Evolution $0 \leq t \leq T$, mit $T = 55ps$, wird durch die reduzierten Dichtematrizen $\text{tr}_B(|\Theta(t)\rangle\langle\Theta(t)|)$ (linke Kugel) und $\text{tr}_A(|\Theta(t)\rangle\langle\Theta(t)|)$ (rechte Kugel) dargestellt. Die Auflösung des Gitternetzes auf den Kugeln beträgt 10° . Auf der linken Seite ist zudem eine vergrößerte Ansicht des Nordpols der linken Kugeln zu sehen. (b) Zeitliche Entwicklung des verschränkten Zustands $|\Phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$. Nach Anwendung des CNOTs liegt ein separabler Zustand $\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |11\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)|1\rangle$ vor. Der Grad an Verschränktheit lässt sich durch die Nähe zum Zentrum der Kugel angeben: maximal verschränkte Zustände liegen genau im Zentrum, während separable Zustände auf die Oberfläche der Kugel projiziert werden. Auf der linken Seite findet sich eine Vergrößerung der äquatorialen Scheibe der linken Kugel.

den. Die Tatsache, dass die lokalen Operationen auf einzelnen Qubits eine mit der Kopplungsevolution vergleichbare Zeit benötigen, steht dem Setting in der NMR-Spektroskopie, im Falle vollständig heteronuklearer Systeme, gegenüber. Für solche NMR-Spinqubits sind lokale Operationen quasi unendlich schnell durchführbar. Das trifft für Josephson-Ladungsqubits nur auf die Kontroll- σ_z -Terme zu. Nehmen wir nun vereinfacht an, dass nur die beiden lokalen $\pi/2 - \sigma_x$ -Pulse zeitlimitierend sind, dann kann die minimale Zeit nie kürzer als 50.6ps sein. Die sigmoidale Verzerrung der Trajektorie in Abbildung 4.2(a) kostet aufgrund schneller

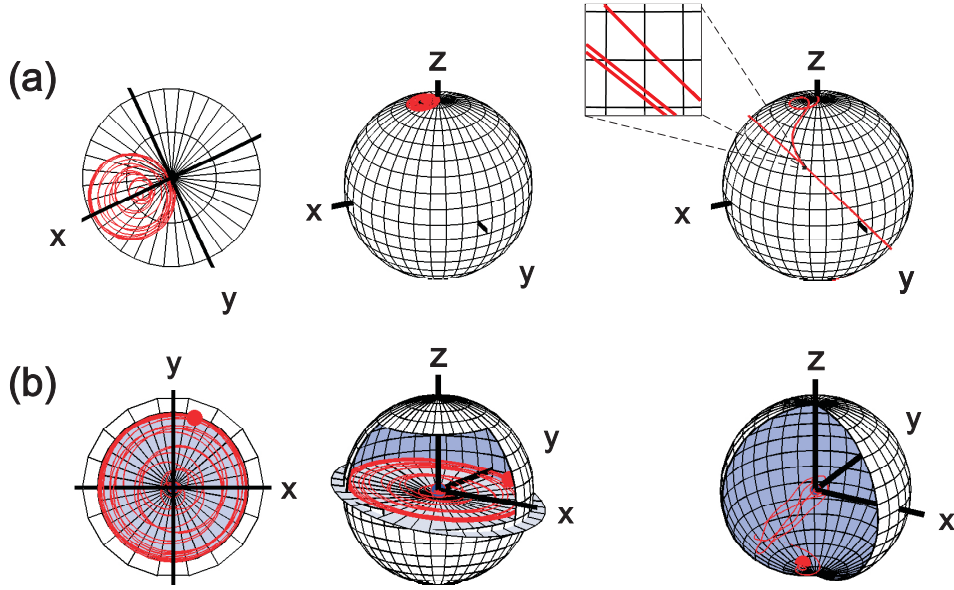


Abbildung 4.3: (a) Zeitliche Entwicklung des separablen Zustands $|\Theta(0)\rangle = |0\rangle|0\rangle$ und (b) des verschränkten Zustands $|\Phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ unter den in [13] angegebenen Pulsen. Die Trajektorie in (a) vollführt zwei komplette Umrundungen der Blochkugel, bevor sie in der Nähe des Südpols zum Erliegen kommt. Die Diskretisierung des Gitternetzes beträgt 10° und 1° für den vergrößerten Ausschnitt links oberhalb der rechten Kugel.

σ_z -Kontrollen keine zusätzliche Zeit. Verglichen mit den 255ps aus [13], ist unsere Pulssequenz mit 55ps nahe an der unteren Schranke des Zeitminimums. Die Wirkung der Pulse in [13] ist in Abbildung 4.3 dargestellt. Die Trajektorie enthält mehrere Umrundungen der Blochkugeln bevor der gewünschte Zielzustand erreicht wird und ist somit von einer Geodäte weit entfernt.

Eine weitere Visualisierung komplementär zu den lokalen Blochkugeln, stellt die Weyl-Kammer in Abbildung 4.4 dar [156]. In ihr wird lediglich die Koppelungsevolution im Quotientenraum $\mathbf{G}/\mathbf{K} = \mathbf{SU}(4)/\mathbf{SU}(2)^{\otimes 2}$ dargestellt, wobei G den Propagator der Pulssequenz bei einer bestimmten Zeit $\sum_{k=1}^m t_k$ darstellt. Während für zwei NMR-Spinqubits die Koppelungsevolution zeitlimitierend und die Trajektorie somit eine Geodäte (in der Weyl-Kammer eine gerade Linie) in \mathbf{G}/\mathbf{K} ist, sind bei Ladungsqubits die Zeitskalen lokaler und nicht-lokaler Operationen vergleichbar. Deshalb ergibt sich für die optimierte Pulssequenz eine leicht gekrümmte Trajektorie, während sie für die Pulse aus [13] mehrere Male hin und her wandert.

Weiter ist zu beobachten, dass die erhaltene Pulssequenz palindromisch ist. Es

4 Zeitoptimierte Quantengatter auf supraleitenden Schaltelementen

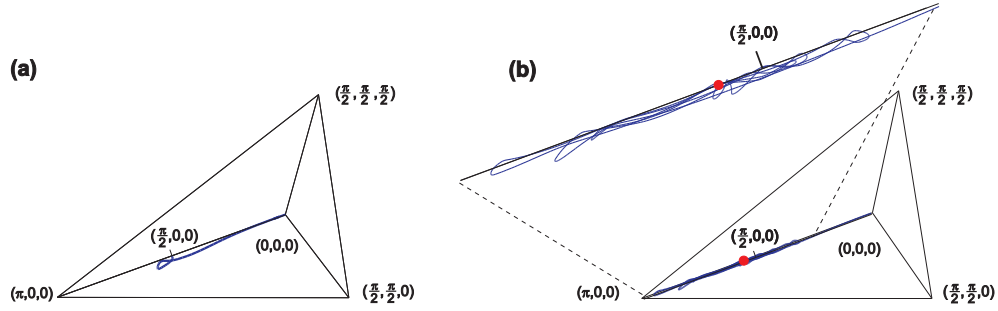


Abbildung 4.4: Kopplungsevolution unter den optimierten Kontrollen von Abbildung 4.1, dargestellt in der Weyl-Kammer. Da lokale und nicht-lokale Anteile des Gesamthamiltonians auf der gleichen Zeitskala liegen und die Zeit für einen lokalen $\pi/2 - \sigma_x$ -Puls zeitlimitierend ist, nimmt die Kurve eine von der Geodäte leicht abweichende Form an, welche bei $(\pi/2, 0, 0)$ endet. Dies ist auch zu erwarten, da ein CNOT eine Kopplungsevolution unter $(\sigma_z \otimes \sigma_z)/2$ mit Drehwinkel $\pi/2$ benötigt. Im Gegensatz dazu zeigt die Trajektorie unter dem Puls aus [13] eine von der Geodäte stark abweichende Form, ohne $\pi/2$ am Ende exakt zu erreichen.

besteht also eine Achsensymmetrie der Kontrollamplituden um $t = T/2$. Daraus lässt sich in diesem speziellen System ein Zusammenhang zwischen selbst-inversen Gattern der generellen Zeit-Phasen-Umkehr-Symmetrie herstellen.

Allgemein gilt, dass eine beliebige Abfolge lokaler Operationen $e^{-it_x \sigma_x} e^{-it_y \sigma_y} e^{-it_z \sigma_z}$ sich durch jede Abfolge von 1. Transposition, 2. Zeitumkehr und 3. Umkehr der Phase der σ_y -Terme invertieren lässt.

$$\begin{array}{l}
 \text{Transposition} \\
 \text{Zeitumkehr} \\
 \text{Phasenumkehr}
 \end{array}
 \begin{array}{ccc}
 e^{-it_x \sigma_x} & e^{-it_y \sigma_y} & e^{-it_z \sigma_z} \\
 \downarrow & & \\
 e^{-it_z \sigma_z} & e^{it_y \sigma_y} & e^{-it_x \sigma_x} \\
 \downarrow & & \\
 e^{it_z \sigma_z} & e^{-it_y \sigma_y} & e^{it_x \sigma_x} \\
 \downarrow & & \\
 e^{it_z \sigma_z} & e^{it_y \sigma_y} & e^{it_x \sigma_x}
 \end{array}
 \quad (4.3)$$

Da die verschiedenen Teile des gesamten Hamiltonians (s. Gleichung (4.1) und (4.2)) allesamt reell-symmetrisch sind, ergibt sich derselbe Propagator, egal ob die Pulssequenz vorwärts oder rückwärts angewendet wird. Dies gilt, weil die Umkehrung der Reihenfolge einer Transposition gleichkommt und das CNOT-Gatter selbst-invers ist. Die beiden Effekte heben sich also auf.

Da die Pulssequenz palindromisch ist, lässt sie sich als reine Cosinus-Reihe

4.4 Robustheit und unerwünschte Übergänge

schreiben und so einfach darstellen

$$n_{g\nu}(t) = \sum_{\ell=0}^{19} a_{\nu}(\ell) \cos\left(2\pi\ell\frac{t-T/2}{T}\right) . \quad (4.4)$$

20 Komponenten reichen aus, um eine genügend hohe Qualität zu ergeben. Alternativ können die Pulse auch von Gaußpulsen, Single-Flux-Quantum-Pulsen (SFQ) oder schnellen SFQ-Pulsen generiert werden, wobei die Kopplungsstärke die minimale Dauer der Pulse festlegt.

Sei F_{tr} die Qualität des Gatters der Dauer T , und T_2 die zum System gehörende Relaxationszeit. Unter der Annahme unabhängiger Fehler ergibt sich $q = F_{tr}e^{-T/T_2}$, wobei ein Wert von $1 - 10^{-4}$ als Grenze zur Anwendung von Fehlerkorrekturprotokollen angesehen wird. Mit der hier vorgestellten Pulssequenz wird ein Gesamtfehler von $1 - q = 0.0055$ erreicht, verglichen mit $1 - q = 0.5917$ für die entsprechende Sequenz aus [13].

4.4 Robustheit und unerwünschte Übergänge

Die numerisch optimierten Pulse weisen nach einer Fourier-Transformation eine relativ schmale Bandbreite auf (s. Abbildung 4.5, Kurve an der hinteren Wand). Diese schmale Bandbreite erlaubt eine selektive Anregung der erwünschten Übergänge zwischen dem Zustand mit keiner (0) und einer (1) Überschussladung im Josephson-Ladungsqubit. Dadurch wird zudem eine hohe Qualität gewährleistet, selbst wenn weitere höher- oder niederenergetische Zustände, z.B. die Zustände mit -1 und 2 Überschussladungen, mit einbezogen werden. Um dies zu überprüfen, wird die Pulssequenz auf ein, um diese Zustände, erweitertes System angewendet. Aus den elementaren 2-Level-Systemen werden nun 4-Level-Systeme. Das 2-Qubit-CNOT wird also in eine $\mathbf{SU}(4^2)$ eingebettet. Der nun generierte Propagator liefert bei der Projektion auf das ebenfalls eingebettete CNOT-Gatter immer noch eine Qualität von > 0.99 . Ebenso verlassen die Zustandstrajektorien der kanonischen 2-Qubit-Basisvektoren kaum den Unterraum $\{|0\rangle, |1\rangle\}$: Zu keiner Zeit übersteigt die Projektion in den unerwünschten Unterraum 0.6%. Eine Optimierung unter Einschluss dieser Leakage-Zustände könnte die Qualität weiter verbessern. Das Zustandekommen dieser hohen Qualität, wie in Abbildung 4.5 gezeigt, kann erklärt werden: Dazu setzt man die limitierte Bandbreite mit den Übergängen zwischen den Eigenzuständen des lokalen Anteils des Drifthamiltonians der einzelnen Ladungsqubits in Beziehung zueinander. Der lokale Anteil aus Gleichung (4.1) ergibt sich zu

$$H_{\text{drift, lokal } \nu} = -\left(\frac{E_m}{4} + \frac{E_{c\nu}}{2}\right) \sigma_z^{(\nu)} - \frac{E_{J\nu}}{2} \sigma_x^{(\nu)}$$

mit $\nu \in \{1, 2\}$.

Während die einfachen Ladungsübergänge $|-1\rangle \leftrightarrow |0\rangle$, $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ und $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$

4 Zeitoptimierte Quantengatter auf supraleitenden Schaltelementen

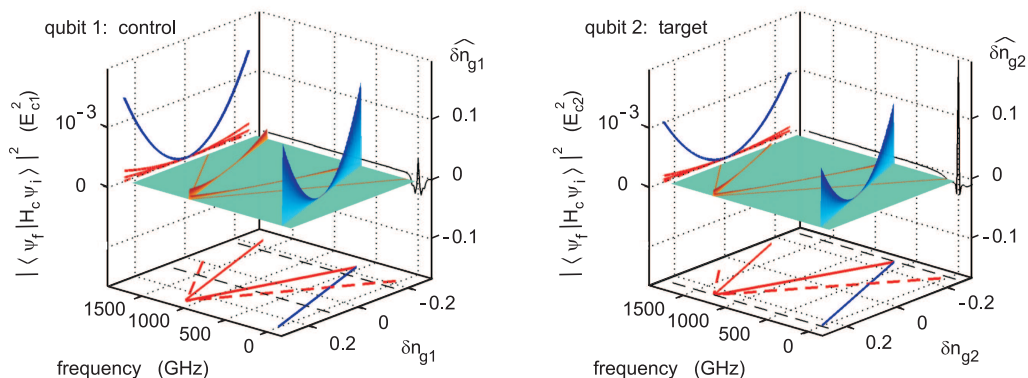


Abbildung 4.5: Spektroskopische Erklärung für die hohe Qualität der optimierten Pulse unter Einschluss von höher- und niederenergetischen Zuständen: Der spektrale Überlapp des Fourier-transformierten zeitlichen Verlaufs der Kontrollamplituden (rechte hintere Wand) aus Abbildung 4.1 mit den Differenzen der Energien der entsprechenden einfachen Übergänge (durchgezogene Linien am Boden) ist, bei den verwendeten Kontrollamplituden, für Übergänge vom Arbeitsunterraum $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ in den Leakageunterraum $\{|-1\rangle, |2\rangle\}$ klein. Der spektrale Überlapp für zweifache Übergänge (unterbrochene Linien am Boden) ist größer, diese sind jedoch verboten. In der 3D-Darstellung sind die Übergangsmatrixelemente vom Arbeitsraum in den Leakageerraum $|\langle\psi_f|H_c|\psi_i\rangle|^2$ dargestellt, wobei $H_c(\delta n_{g\nu})$ den erweiterten Hamiltonian darstellt, welcher auch auf dem Leakageerraum operiert: Nur die erwünschten Arbeitsübergänge im Arbeitsraum (blaue durchgezogene Linien) haben nennenswerte Wahrscheinlichkeitsamplituden und einen spektralen Überlapp mit der Anregungsbandbreite.

erlaubt sind, trifft das nicht für die zweifachen Ladungsübergänge $|-1\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ und $|0\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ zu. Der spektrale Überlapp mit diesen unerwünschten einfachen Übergängen ist jedoch klein, wohingegen der mit dem Übergang der erwünschten Arbeitslevels, sprich den Qubitzuständen $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ groß ist. Ein weiterer starker Überlapp tritt nur noch bei den sowieso unerlaubten zweifachen Übergängen auf. Einfache spektroskopische Überlegungen unterstreichen somit die hohe Qualität der Pulssequenz.

Eine auffallende Robustheit weist die Pulssequenz gegen $\pm 5\%$ -Variationen der Tunnelfrequenzen $E_{J1,2}$ und des Kopplungsterms E_m auf. Diese experimentellen Parameter variieren durch nicht exakt reproduzierbare Oxidation der Josephson-Kontakte und müssen für jedes Setup individuell spektroskopisch bestimmt werden, wobei der Messfehler 5% nicht überschreiten sollte. Weiter ist die Pulsse-

4.5 Ansatz einer analytische Lösung für das CNOT auf 2 Ladungsqubits

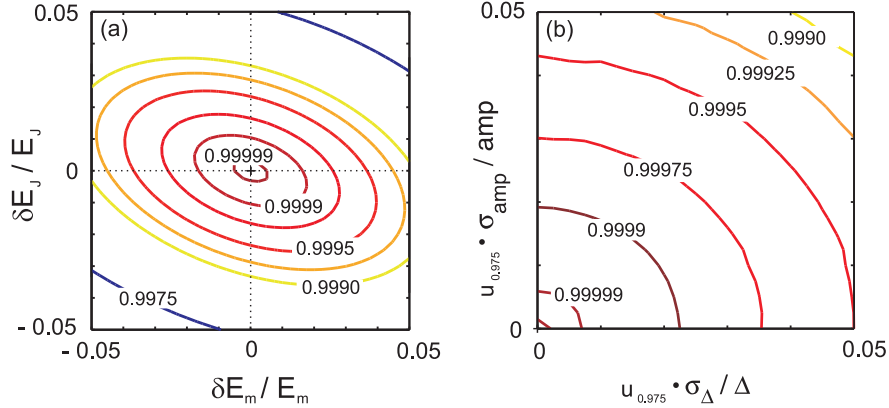


Abbildung 4.6: (links) Qualitäten der Pulssequenz aus Abbildung 4.1, für den Fall variierender experimenteller Parameter E_m und E_J aus Gleichung (4.1) und (4.2). (rechts) Qualitäten unter Gauß'schem Rauschen auf den Kontrollamplituden und der Dauer der Zeitintervalle t_k . Die Standardabweichungen von $2\sigma_{\Delta}/\Delta$ und $2\sigma_{amp}/amp$ reichen von 0 bis 5%. (Δ ist wie in Abbildung 4.1 definiert und amp entspricht den Amplituden n_{gv} .) Jeder Datenpunkt ist der Mittelwert aus 25.000 Monte Carlo Simulationen.

quenz gegen Gauß'sches Rauschen auf den Kontrollamplituden und der Dauer der einzelnen Intervalle relativ resistent. Alle Daten sind in Abbildung 4.6 zusammengefasst.

4.5 Ansatz einer analytische Lösung für das CNOT auf 2 Ladungsqubits

Der folgende Abschnitt gilt nur für die speziellen Bedingungen, die bei 2 gekoppelten Ladungsqubits auftreten. Das CNOT besitzt aufgrund seiner Struktur

$$\text{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \mathbb{1}_2 \oplus \sigma_x$$

eine leicht zu erkennende $\text{SU}(2)$ -Symmetriegruppe, die auf den ersten beiden Diagonaleinträgen operiert: $S = \{g \oplus \mathbb{1} \mid g \in \text{U}(2)\}$ ¹.

Es gilt also, mit $s \in S$:

$$s \cdot \text{CNOT} \cdot s^\dagger = \text{CNOT} . \quad (4.5)$$

¹Es gilt sogar $S = \{g \oplus \mathbb{1} \mid g \in \text{Gl}(2)\}$, was aber keinen Nutzen für die Implementierung hat.

4 Zeitoptimierte Quantengatter auf supraleitenden Schaltelementen

Wenden wir nun die Symmetriegruppe, bzw. eine ihrer Untergruppen, auf die einzelnen kommutierenden Komponenten des CNOT-Hamiltonian an. Der effektive Hamiltonian errechnet sich mit $\text{CNOT} = e^{-iH_{\text{CNOT}}}$ zu $H_{\text{CNOT}} = \frac{\pi}{2} (I_{1z} + I_{2x} - 2I_{1z}I_{2x})$. Wir erhalten dann, mit $\tilde{s}(\beta) \in \{g \oplus \mathbb{1} \mid g \in e^{-i\beta I_y}\}$ und $\beta = \pi/2$:

$$\begin{aligned} \tilde{s}(\pi/2)I_{1z}\tilde{s}(\pi/2)^\dagger &= I_{1z} \\ \tilde{s}(\pi/2)I_{2x}\tilde{s}(\pi/2)^\dagger &= \frac{1}{2}(I_{2x} - I_{2z} - 2I_{1z}I_{2x} - 2I_{1z}I_{2z}) \\ \tilde{s}(\pi/2)(-2I_{1z}I_{2x})\tilde{s}(\pi/2)^\dagger &= \frac{1}{2}(I_{2x} + I_{2z} - 2I_{1z}I_{2x} + 2I_{1z}I_{2z}) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Vergleichen wir nun die rechte Seite von Gleichung (4.6) mit den Drift- (vgl. Gleichung (4.1)) und Kontrolltermen (vgl. Gleichung (4.2)). Man erkennt, dass 3 von 4 Terme auftreten. Entlang dieser Linien sollte sich eine analytische Lösung des CNOT auf solchen Systemen konstruieren lassen.

4.6 TOFFOLI-Gatter für 3 linear gekoppelte Ladungsqubits

In einem System von drei linear gekoppelten Ladungsqubits lassen sich weitere interessante Gatter untersuchen. Um die Beschleunigung der Realisierung und die damit einhergehenden Effekte zu demonstrieren, wurde als Beispiel ein permutiertes TOFFOLI-Gatter gewählt. Hierbei ist das Target-Qubit in der Mitte. Die optimierte Pulssequenz ist in Abbildung 4.8 zu sehen. Die Zerlegung eines TOFFOLI-Gatters, bei dem das mittlere Qubit als Target-Qubit dient, benötigt 9 nichtlokale Operationen. Eine Zerlegung in lokale Operationen und CNOTs ist in Abbildung 4.7 dargestellt.

Vergleicht man nun die Dauer der zeitoptimierten Realisierung durch den Kontrollalgorithmus mit den netzwerksynthetischen Zerlegungen, unter Vernachlässigung der σ_y -Rotationen, die auf den verschiedenen Realisierungen des CNOTs beruhen, erhält man ein Speed-up von 2.8 bzw. 13, falls das optimierte CNOT aus Kapitel 4.3, respektive das ursprüngliche CNOT aus [13], verwendet wird. Verwenden wir die Qualitäten, die unter realistischen Bedingungen, also mit Relaxation, erreicht werden können, lassen sich die Fehlerraten berechnen: Sie

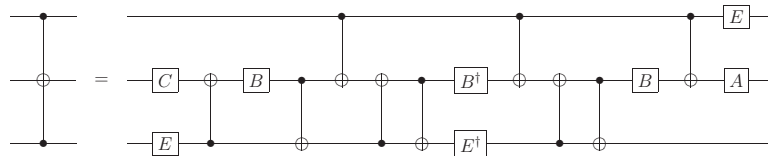


Abbildung 4.7: Zerlegung eines TOFFOLI-Gatters in 9 CNOTs und 8 lokale Operationen. Diese sind $A = e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2z}}e^{-i\frac{\pi}{4}I_{2y}}$, $B = e^{i\frac{\pi}{4}I_{2y}}$, $C = e^{i\frac{\pi}{2}I_{2z}}$ und $E = e^{-i\frac{\pi}{4}I_{1z}}$. Die auftretenden lokalen Gatter haben folgende Eigenschaften: $A \cdot B \cdot C = \mathbb{1}$ und $A \cdot \sigma_x \cdot B \cdot \sigma_x \cdot C = i\sigma_x$.

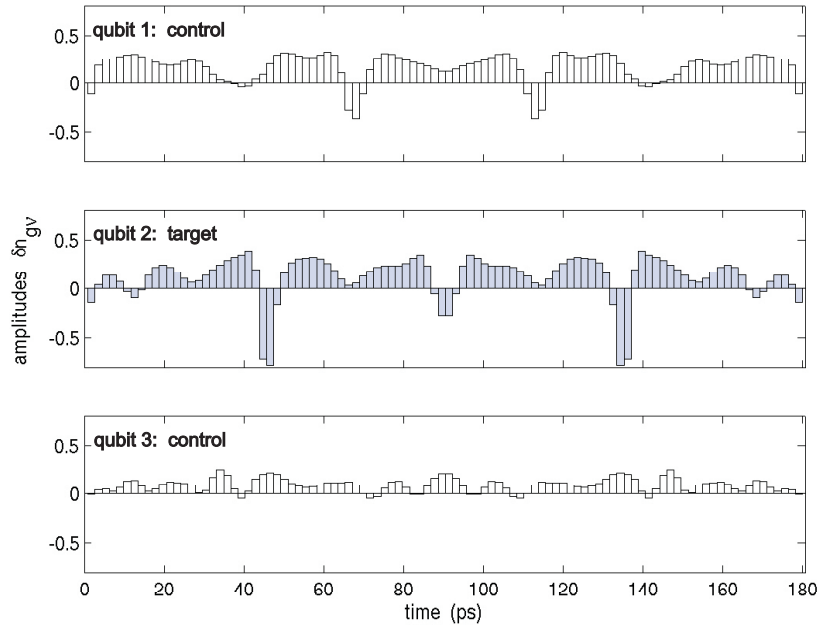


Abbildung 4.8: Schnellste numerisch erhaltene Sequenz für ein TOFFOLI-Gatter auf einer linear angeordneten Kette von Josephson-Qubits. Die Qualität beträgt $\frac{1}{2^n} |\text{tr}\{U_{\text{target}}^\dagger U_T\}| > 1 - 10^{-5}$. Parameter: $n_{g1}^{(0)} = 0.24$, $n_{g2}^{(0)} = 0.26$ und $n_{g3}^{(0)} = 0.28$; $E_{c1} = 140.2$ GHz, $E_{c2} = 120.9$ GHz und $E_{c3} = 184.3$ GHz; $E_{J1} = 10.9$ GHz, $E_{J2} = 9.9$ GHz und $E_{J3} = 9.4$ GHz ; $E_{m1,m2} = 23.0$ GHz.

lügen bei $1 - (0.9945)^9 = 0.00483$ bei Verwendung der optimierten CNOTs bzw. $1 - (0.4083)^9 = 0.9997$ bei Verwendung der CNOTs aus [13]. Die direkte Realisierung des TOFFOLI, ohne den Umweg über die Zerlegung in lokale Gatter und CNOTs hingegen hat eine Fehlerrate $1 - 0.99999 \cdot e^{-180ps/10ns} = 0.0178$, wenn für den Moment angenommen wird, dass die T_2 Relaxationszeit auch in diesem System 10ns beträgt.

4.7 Schlussfolgerung

Die Eigenschaften der nächsten Generation von Pulsgeneratoren sind wohl für die Realisierung skalierbarer Quantencomputer auf der Basis von supraleitenden Josephson-Kontakten am wichtigsten. Nach [157] ist eine Fehlerrate von maximal 10^{-4} erlaubt, damit Fehlerkorrekturprotokolle gewinnbringend eingesetzt werden können. Das Ziel solch hohe Gesamtqualitäten zu erreichen, lässt sich durch die Kombination verschiedener Ansätze erreichen:

1. Bekämpfung der Dekohärenz
2. schnellere Realisierung der Gatter

4 Zeitoptimierte Quantengatter auf supraleitenden Schaltelementen

3. Erhöhung der Qualität der Gatter

Die letzten beide Punkte sind für das spezielle Setup 2 bzw. 3 Ladungsqubits zumindest theoretisch abgedeckt.

zu 1. Die heute bekannten Josephson-Elemente haben bereits eine lange Erfolgsgeschichte der Hardwareoptimierung hinter sich. Die Dekohärenzzeiten sind somit bereits nahe ihrem theoretischen Limit. Sie variieren zwischen 0.5ns und 2.5ns für gekoppelte Systeme und 10ns für einzelne Qubits. Beide lassen sich durch Echo-Techniken weiter verlängern, was auf $1/f$ -Rauschen als begrenzenden Faktor hindeutet. Weitere Verbesserungen ließen sich durch das Arbeiten mit Mikrowellenpulsen erreichen. T_2 -Zeiten werden hier auf Kosten längerer Pulse kürzer. Da unser Verfahren es erlaubt beide Techniken mit aufzunehmen, basiert die technologische Abschätzung des folgenden Abschnitts auf dem optimistischen T_2 -Wert von 10ns, was erreichbar erscheint, wie bereits in [13] beschrieben.

zu 2. Die derzeit verfügbaren Pulsgeneratoren sind zu langsam, um das Potential des experimentellen Setups voll auszuschöpfen: Innerhalb von 10ns Relaxationszeit können nur 40 CNOTs der Dauer 255ps ausgeführt werden. Dem stehen 200 zeitoptimierte CNOTs gegenüber.

zu 3. Um in zukünftigen Experimenten hohe Qualitäten zu erreichen, wird es notwendig sein, die Systemantwort des jeweiligen Setups auf einzelne Pulse, sowie auf Pulssequenzen genau zu kennen. Ist die Systemantwort hinreichend bekannt, kann sie ohne Probleme mit in die Optimierung aufgenommen werden. Die Qualität der Gatter ist dann abhängig von der Stabilität des Systems.

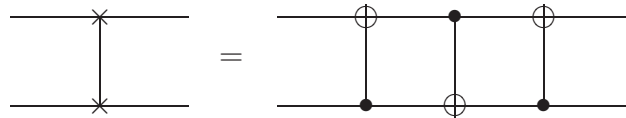
Da, bei kleinen Systemen innerhalb kurzer Zeit, theoretisch Qualitäten bis zu $1 - 10^{-9}$ erreichbar sind, ist die Dekohärenz der einzig limitierende Faktor.

5 Zeitoptimierte Quantengatter auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

5.1 Einleitung

Die minimalen Zeiten, ein Quantengatter zu implementieren, hängen sowohl von der spezifischen Kopplungsart, -stärke und -topologie, als auch vom Verhältnis der charakteristischen Zeitskalen von lokalen und nicht-lokalen bzw. statischen und kontrollierbaren Operationen ab. Setzt man die minimalen Zeiten in Relation zu der Anzahl der Qubits, erhält man die derzeit besten oberen Abschätzungen für die wirklichen Zeitkomplexitäten der Quantengatter [76, 80, 83]. Weiter wird gezeigt, dass, aufgrund unterschiedlicher Zeitskalen für lokale und nicht-lokale Kontrollen sowie unterschiedlicher Topologien, welche unterschiedliche Grade an Quantenparallelisierung erlauben, keine einfache Übersetzung der Gatterkomplexität in die Zeitkomplexität besteht.

Dies soll kurz an einem einfachen Beispiel erläutert werden. Vergleichen wir hierzu zwei unterschiedliche Systeme, auf denen zwei Gatter ausgeführt werden sollen. System-I soll ein schwach gekoppeltes Qubitpaar ($H_{d,I} = zz$) sein, System-II ein stark gekoppeltes Paar ($H_{d,II} = xx + yy + zz$). Auf beiden Systemen sind zusätzlich alle lokalen Operationen erlaubt. Beide Systeme sind voll kontrollierbar. Auf beiden soll nun jeweils ein CNOT und ein SWAP implementiert werden. Zur Implementierung des SWAP betrachten wir folgende Identität:



Wir erkennen daraus bereits, dass die Gatterkomplexität des SWAP (in CNOTs zerlegt) kleiner oder gleich 3 ist. Aus [76, 77] folgt, dass genau 3 freie Evolutions der Dauer $\frac{1}{2J}$ benötigt werden, was exakt 3 CNOTs entspricht. Ein Elementargatter soll einer Evolution des Drifthamiltonians mit Drehwinkel $\frac{\pi}{2}$ (lokal äquivalent zu einem CNOT im schwach gekoppelten System) entsprechen. Die Ergebnisse sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst.

Tabelle 5.1: Vergleich der Gatterkomplexität und der minimalen Zeiten τ^* bei der Implementierung eines CNOTs und eines SWAPs auf zwei unterschiedlichen Qubitsystemen. Während im schwach gekoppelten System-I ein Bezug zwischen Gatter- und Zeitkomplexität besteht, ist dies im stark gekoppelten System-II nicht der Fall. Eine Zerlegung des CNOTs im stark gekoppelten System verläuft über zwei Evolutionen mit Drehwinkel $\frac{\pi}{4}$.

	τ_I^*	τ_{II}^*
CNOT	$\frac{1}{2J}$	$\frac{1}{2J}$
SWAP	$\frac{3}{2J}$	$\frac{1}{2J}$

5.2 Systembeschreibung

Im Folgenden werden NMR-Spinsysteme betrachtet [133, 158–161]. Um zu garantieren, dass alle Quantengatter realisiert werden können, dass das System also voll kontrollierbar ist, genügen einige wenige Voraussetzungen: (1) alle Spins sind, mit Pulsen, einzeln adressierbar und (2) alle Spins bilden ein zusammenhängendes Kopplungsnetzwerk.

Der Systemshamiltonian nimmt für ein Zeitintervall t_k folgende Form an:

$$H^{(k)} = H_d + \sum_j u_j^{(k)} H_j^{(k)} \quad , \quad (5.1)$$

wobei u_j die Amplitude des entsprechenden extern steuerbaren Kontrollterms und H_d den statischen Driftterm des Systems darstellt. Im Falle von NMR-Spinsystemen werden Pulse durch Paulimatrizen dargestellt. Der Driftterm setzt sich wie folgt zusammen:

$$H_d = \pi \frac{1}{2} \sum_{\ell < m} J_{x,\ell m} \sigma_{\ell x} \otimes \sigma_{m x} + J_{y,\ell m} \sigma_{\ell y} \otimes \sigma_{m y} + J_{z,\ell m} \sigma_{\ell z} \otimes \sigma_{m z} \quad (5.2)$$

Sind, wie im angenommenen Fall, die Unterschiede zwischen den einzelnen Eigenfrequenzen Ω der Kerne, verglichen mit den Kopplungskonstanten ($|J_{\ell m}| \ll |\Omega_\ell - \Omega_m|$) groß so, reduziert sich der Kopplungstyp. Die planaren Anteile können vernachlässigt werden. Wenn nur longitudinale, also $\sigma_{\ell z} \otimes \sigma_{m z}$ - oder kurz zz -Terme vorkommen, spricht man von einer skalaren Ising-Wechselwirkung.

Ist es nun möglich durch Mehrfachkommutatorbildung aus Drift- und Kontrolltermen ($\{H_d\} \cup \{H_j\}$) alle Elemente der Lie-Algebra zu erzeugen, ist das vorliegende System voll kontrollierbar.

Globale Phasenfaktoren

Es ist möglich, dass sich zwei Propagatoren U_1 und U_2 nur durch einen globalen Phasenfaktor unterscheiden, also $U_2 = e^{-i\phi_p} U_1$ gilt. Bei Anwendung auf einen Zustand $|\psi_0\rangle$ erhalten wir demnach entweder $U_1 |\psi_0\rangle = |\psi_1\rangle$ oder $U_2 |\psi_0\rangle = |\psi_2\rangle = e^{-i\phi_p} |\psi_1\rangle$. Diese sind jedoch durch Messungen nicht von einander zu unterscheiden. Weiter sieht man bei der Evolution eines Dichteoperators unter diesen Propagatoren, dass bei beiden derselbe Endzustand erreicht wird. Deswegen spielt es für einen Quantenalgorithmus keine Rolle, ob der eine oder andere Propagator implementiert wird. Da die Evolution des Quantensystems im Falle von n Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen durch die Algebra der spurlosen, hermiteschen Operatoren, $\mathbf{su}(2^n)$ beschrieben wird, sind jedoch nicht beliebige Phasenfaktoren erlaubt. Nur solche Phasenfaktoren können realisiert werden, deren Propagatoren eine Determinante von $+1$ aufweisen. Dies gilt für alle

$$\mathbb{Z}_N := \{e^{i\frac{2\pi p}{N}} \mathbf{1}_N \mid p = 0, 1, \dots, N-1\} \quad . \quad (5.3)$$

Sie bilden die größte abel'sche Untergruppe der $\mathbf{SU}(2^n)$, die mit allen anderen Gruppenelementen kommutiert, und somit das Zentrum der Gruppe. Die Dimension des Zentrums ist N .

Für ein gegebenes Quantengatter ergeben sich somit N verschiedene Realisierungen mit den Phasen

$$\phi_p \in \left\{ \phi_0 + \frac{2\pi p}{N} \mid p = 0, 1, \dots, N-1 \right\} \quad , \quad (5.4)$$

wobei $\phi_0 \in [0, \pi]$ den kleinsten Winkel darstellt, so dass $\det\{e^{i\phi_0} U_G\} = +1$ gilt. Wie bereits erwähnt, sind die Effekte globaler Phasenfaktoren nicht messbar. Jedoch spielen sie eine Rolle, wenn es darum geht Implementierungen von Quantengattern minimaler Dauer zu finden. Als ein Beispiel diene folgende Äquivalenz:

$$e^{-i\frac{\pi}{2}\sigma_{\ell z} \otimes \sigma_{mz}} = e^{i\frac{\pi}{2}} e^{-i\frac{\pi}{2}(\sigma_{\ell z} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \sigma_{mz})} \quad . \quad (5.5)$$

Der linke Teil der Gleichung stellt eine nicht-lokale, im NMR-Fall, langsame Kopplungsevolution dar, während auf der rechten Seite nur lokale, im NMR-Fall, schnelle Pulse und ein Phasenfaktor auftreten. Der gleiche Propagator ist somit auf zwei Weisen realisierbar, die sich in ihrer Dauer, im NMR-Fall, drastisch unterscheiden. Die Beziehung aus Gleichung (5.5) gilt allerdings nur für die spezielle Wahl des Drehwinkels $\frac{\pi}{2}$ für die Evolution unter $\sigma_{\ell z} \otimes \sigma_{mz}$. Ein weiteres Beispiel sei die Implementierung der QFT auf einem linearen 3 Spinsystem.

Da, wie in Abbildung 5.1 gesehen, für unterschiedliche Phasenfaktoren unterschiedliche minimale Zeiten der Implementierung nicht auszuschließen sind, muss das Quantengatter mit allen erlaubten Phasenfaktoren optimiert und aus diesem Satz von Ergebnissen der mit der kleinsten Zeit ausgewählt werden. Dies entspricht N separaten Optimierungen. Im Fall schneller Pulse lassen sich jedoch

5 Zeitoptimierte Quantengatter auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

bereits hier $N/2$ Phasenfaktoren vermeiden, weil der Phasenfaktor -1 in Nullzeit realisierbar ist, vgl. Gleichung (12.5) bzw. (7.16):

$$e^{-i\pi\sigma_{\ell z}} = e^{-i2\pi\sigma_{\ell z}/2} = e^{-i2\pi I_z} = -\mathbf{1} \quad . \quad (5.6)$$

Auch bei anderen physikalischen Systemen, bei denen die Zeitskalen von Drift- und Kontrolltermen nicht übereinstimmen, werden Unterschiede in den Zeiten auftreten. Ein Beispiel dafür stellen die Josephson-Elemente dar.

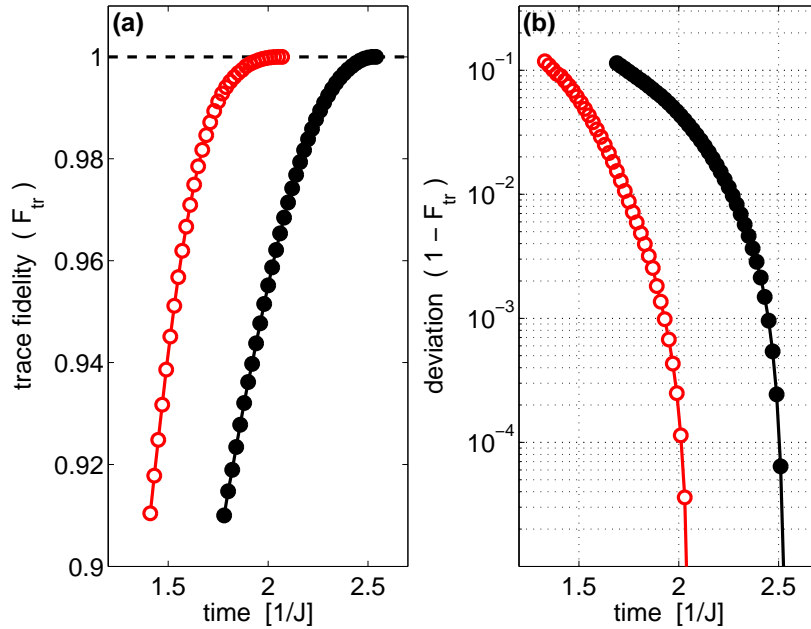


Abbildung 5.1: Abhängigkeit der minimalen Gatterdauer von der globalen Phase am Beispiel der Realisierung der QFT auf einem L_3 Ising-Kopplungsnetzwerk. (a) gibt die Qualität gegen die Zeit an, (b) die Abweichung von 100% gegen die Zeit in semilogarithmischer Darstellung. Die rechte Kurve (●) zeigt jeweils die speziell unitäre Implementierung der QFT mit der kleinsten globalen Phase $\phi_0 = \frac{1\pi}{16}$. Die Zeit, um eine Qualität ≥ 0.99999 zu erreichen, beträgt $2.53 J^{-1}$. Die linke Kurve (○) zeigt die schnellste Implementierung mit einer globalen Phase von $\phi_1 = \frac{5\pi}{16}$. Eine Qualität von ≥ 0.99999 wird nach $2.05 J^{-1}$ erreicht. Die Dauer lokaler Kontrollen wird als vernachlässigbar angenommen. Der zeitraubende Anteil entfällt somit auf die Kopplungsevolution.

5.3 Anwendungen

Der Einfachheit halber werden in den folgenden Beispielen alle Kopplungskonstanten gleich gesetzt, was es ermöglicht, die Zeiten in Einheiten von J^{-1} anzugeben. Der Algorithmus ist auch in der Lage mit ungleichen Kopplungskonstanten zu arbeiten, wie sie in Experimenten vorkommen.

5.3.1 Zeitoptimierte QFT auf linearen Spinketten

Die Quanten-Fourier-Transformation (QFT) ist der zentrale Baustein aller Quantenalgorithmen vom abel'schen HiddenSubgroup-Typ [111,162]. Neben ihrer Bedeutung für Quantenalgorithmen besitzt die QFT jedoch noch eine weitere Eigenschaft, die sie für die Quantenkryptographie interessant macht¹.

Die Zeit, die benötigt wird, um die QFT auf einem n -Qubit System zu implementieren, hängt von der Topologie des Kopplungsnetzwerkes ab. Abbildung 5.2 zeigt einige Topologien und die dazugehörigen numerisch gefundenen minimalen Zeiten für die Implementierung der QFT.


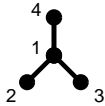

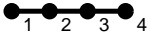
Topology				
	K_4	S_4	C_4	L_4
τ [$1/J$]	1.75	3.05	3.11	3.15

Abbildung 5.2: Minimale Zeiten der Realisierung der QFT auf verschiedenen Topologien. Die vier zusammenhängenden Graphen mit 4 Punkten stellen Kopplungsnetzwerke mit paarweisen Kopplungen (Kanten) zwischen 4 Qubits (Ecken) dar. Die Werte sind auf $0.01 J^{-1}$ gerundet.

Die Kopplung aller Qubits untereinander entspricht einem kompletten Kopplungsgraphen K_n . Dieser erlaubt eine schnelle Implementierung, wohingegen eine Kette gekoppelter Spins L_n nur eine langsamere Implementierung zulässt. Die minimalen Zeiten hängen auch von der Anordnung der Spins ab, da verschiedene Permutationen zeitraubende SWAP-Operationen zur Folge haben. Im kompletten

¹Die Spaltenvektoren der Matrix bilden eine sogenannte *Mutually Unbiased Bases* oder kurz *MUB* [163–165]. Verglichen mit der Standardbasis besitzen alle Vektoren einen Überlapp von $\frac{1}{\sqrt{N}}$. Einer potentiellen dritten Person wird es bei Unkenntnis der Basis, in welcher ein Qubit verschickt wird unmöglich gemacht, die Nachricht abzuhören und zum anderen werden die kommunizierenden Parteien auf die abgehörte Kommunikation aufmerksam.

5 Zeitoptimierte Quantengatter auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

Graphen lässt sich die minimale Zeit in Einheiten J^{-1} als Funktion der Anzahl der Qubits ausdrücken [168, 169]:

$$\tau(n)/J = \frac{1}{4}(n + 3). \quad (5.7)$$

Die abschließenden SWAP-Operationen sind für den konstanten Term verantwortlich. Für komplette Kopplungstopologien ist der Gewinn, der durch numerische zeitoptimierte Kontrolle erreicht wird, eher gering. Was darauf schließen lässt, dass die Standardzerlegung der QFT nahe am Optimum ist: Da alle notwendigen Kopplungen vorhanden sind, ist es nicht erforderlich eine indirekte Kopplung zeitaufwendig zu simulieren. Der Zeitgewinn der numerischen Ergebnisse ist, verglichen mit Standardzerlegungen, auf linearen Kopplungstopologien L_n deutlich größer, wie in Abbildung 5.3 und Tabelle 5.2 zu sehen ist: für sechs Qubits sind die numerisch gefunden Zeiten achtmal, bei sieben Qubits sogar neunmal schneller. Die numerischen Resultate lassen sich durch eine Ausgleichsgerade approximieren, die dann unter Vernachlässigung der Werte für 2 und 7 Qubits folgende Form

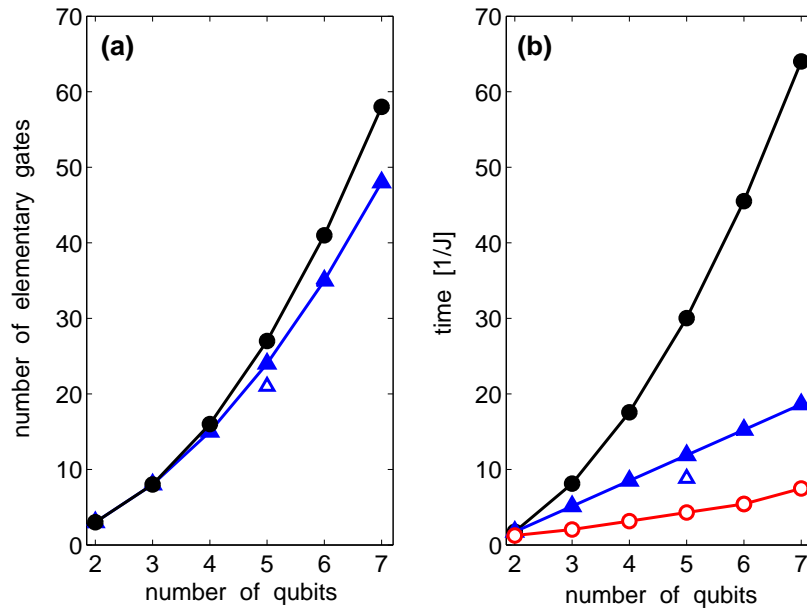


Abbildung 5.3: (a) Gatterkomplexität der QFT auf einer linearen Kopplungstopologie L_n für die Standardzerlegung (●) [166] und optimierte skalierbare Zerlegung (▲) [167]. (b) Zeitkomplexitäten derselben QFT. Die oberen Kurven zeigen die analytischen Zeiten der Standardzerlegung (●) [166] und die optimierte skalierbare Zerlegung (▲) [167]; (Δ) zeigt eine optimierte (*d.h.* nicht skalierbare) fünf Qubit Zerlegung [167]. Die untere Kurve zeigt die Resultate der minimalen Zeiten, die durch numerische Kontrolltheorie erhalten wurden. Weitere Details s. Tabelle 5.2.

Tabelle 5.2: Zeiten und Speed-up der QFT auf einer linearen Spinkette L_n . Verglichen werden die analytischen Zeiten für die Zerlegung in Standardgatter nach [166], die Zeiten einer optimierten Zerlegung nach [167] (nicht skalierbare 5-Qubits-QFT (in Klammern)) und die oberen Grenzen der minimalen Zeiten durch numerische Kontrolltheorie.

Qubits	stand. QFT	Blais	best Ergeb.	Speed-ups	
	$\tau [1/J]$	$\tau [1/J]$	$\tau [1/J]$	stand.	Blais
2	1.75	1.75	1.25	1.40	1.40
3	8.13	5.13	2.05	3.94	2.50
4	17.56	8.50	3.15	5.58	2.70
5	30.03	11.88(8.81)	4.30	6.98	2.76(2.05)
6	45.52	15.25	5.43	8.38	2.81
7	64.01	18.63	7.47	8.57	2.49

annimmt:

$$\tau_{fit}^*(n)/J = 1.1290n - 1.3480 \quad (5.8)$$

Die Summe der Fehlerquadrate ist $4.70 \cdot 10^{-4}$ und der χ^2 -Wert liegt bei $8.33 \cdot 10^{-5}$.

Eine noch schnellere Standard- Realisierung lässt sich erzielen, wenn man eine Permutation der Qubits am Ende der QFT zulässt. Diese Tatsache nutzen Blais und Fowler bei ihren Realisierungen [167, 170].

5.3.2 Zeitoptimierte C^{n-1} NOT auf kompletten Spinnetzwerken

Ein weiteres Beispiel wichtiger Quantenoperationen stellen vielfach kontrollierte NOT-Operationen C^{n-1} NOTs dar. Vor allem bei der Kodierung von Quantenzuständen finden sie ihre Anwendung [172]. Eine weitere Anwendung ergibt sich in der sogenannten Verstärkung der Wahrscheinlichkeitsamplituden [173]

Eine Zerlegung dieser Gatter auf einer kompletten Kopplungstopologie findet sich bei Barenco [171]. Diese weist einen exponentiellen Anstieg der Zeitkomplexität bis zu sechs Qubits auf. Ab sieben Qubits steigt die Komplexität dann quadratisch. Auch hier erhält man mit zeitoptimierter Kontrolle dramatische Beschleunigungen, wie in Abbildung 5.4 und Tabelle 5.3 zu sehen ist. Die erhaltenen Resultate lassen sich durch eine quadratische Funktion

$$\tau_{fit}^*(n)/J = 0.1291n^2 + 0.0135n - 0.0932 \quad (5.9)$$

fitten. Die Summe der Abstandsquadrate ist 0.0587 und der χ^2 -Wert liegt bei 0.0156. An dieser Stelle soll darauf hingewiesen werden, dass für die Zerlegung

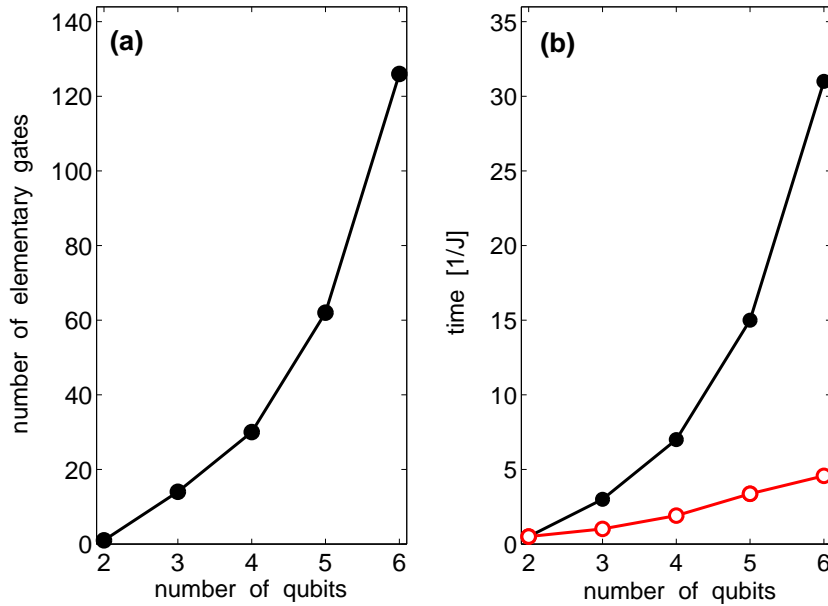


Abbildung 5.4: (a) Gatterkomplexität des C^{n-1} NOT-Gatters auf einer kompletten Kopplungstopologie K_n [171]. (b) Zeitkomplexität des C^{n-1} NOT-Gatters auf einer kompletten Kopplungstopologie: Obere Kurve: Analytische Zeiten für die Implementierung durch Elementargatter (●) [171]. Untere Kurve: Speed-up durch zeitoptimierte Kontrolltheorie (○), gerundet auf $0.01 J^{-1}$.

Tabelle 5.3: Zeiten und Speed-up des C^{n-1} NOT-Gatters auf einer kompletten Kopplungstopologie K_n . Verglichen werden die Standardzerlegung von Barenco *et al.* [171] und die besten numerischen Resultate, die obere Grenzen der minimalen Zeiten darstellen.

Qubits	Stand. Zerlegung $\tau [1/J]$	best Ergeb. $\tau [1/J]$	Speed-up
2	0.5	0.50	1.00
3	3.0	1.01	2.97
4	7.0	1.90	3.68
5	15.0	3.37	4.45
6	31.0	4.59	6.75

des C^{n-1} NOT kein weiteres Ancilla-Qubit verwendet wird. Sollten jedoch weitere Qubits zur Verfügung stehen, ist eine Zerlegung mit linearer Komplexität möglich. Auf diese, um ein Ancilla-Qubit erweiterte, Zerlegung wird in Kapitel 6 Bezug genommen.

5.3.3 Indirekte Kopplungen auf linearen Spinketten

Der folgende Abschnitt stellt die Resultate effektiver indirekter Wechselwirkungen zwischen dem ersten und dem n -ten Spin einer schwach gekoppelten linearen Kopplungstopologie vor. Die drei untersuchten Beispiele sind

1. schwache bzw. Ising-Wechselwirkung,
2. planare bzw. Heisenberg- XX -Wechselwirkung und
3. isotrope bzw. starke bzw. Heisenberg- XXX -Wechselwirkung.

Der Drehwinkel war stets $\frac{\pi}{2}$. Interessant sind solche indirekten Kopplungen vor allem für die kohärente Spektroskopie und die Simulation von Quantensystemen [18–23].

Die einfachste und allgemeinste Zerlegung indirekter Kopplungen in 2-Qubitgatter nimmt die in Abbildung 5.5 dargestellte Form an.

Die untersuchten Propagatoren nehmen also folgende Form an: $U_G = e^{-i\phi \sum_{\nu \in \Sigma} 2I_{1\nu}I_{n\nu}}$, mit (1) $\Sigma = \{x\}$, (2) $\Sigma = \{x, y\}$ oder (3) $\Sigma = \{x, y, z\}$. Der interessanteste Drehwinkel ist $\phi = \pi/2$, da hier ein vollständiger Transfer zwischen verschiedenen

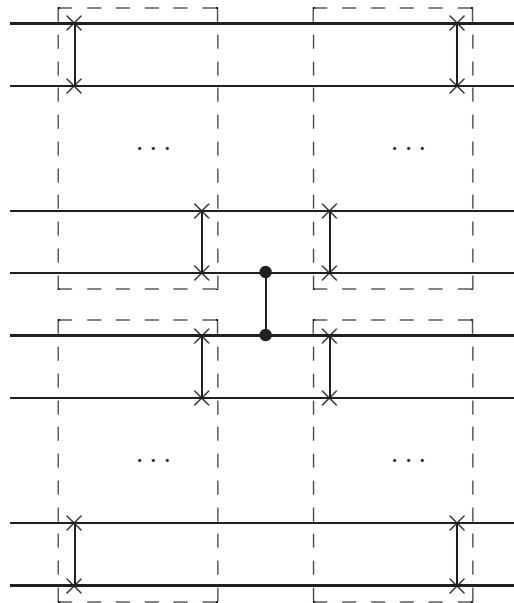


Abbildung 5.5: Allgemeine Zerlegung (Zerlegung-I) indirekter Kopplungen in 2-Qubitgatter. Diese Zerlegung gilt allgemein für alle Kopplungstypen (dargestellt durch die beiden mittleren verbundenen Punkte). Für die Ising-Wechselwirkung lässt sich jedoch ein schnellere Implementierung finden, wenn man die SWAP-Operationen $e^{-i\frac{\pi}{2}(xx+yy+zz)}$ durch planare Mischoperationen $e^{-i\frac{\pi}{2}(xx+yy)}$ ersetzt.

5 Zeitoptimierte Quantengatter auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

Zuständen stattfindet². Im Fall (1) schwacher Kopplung erhalten wir beispielsweise

$$e^{-i\frac{\pi}{2}2I_{1z}I_{nz}} I_{1y} e^{i\frac{\pi}{2}2I_{1z}I_{nz}} = 2I_{1x}I_{nz} , \quad (5.10)$$

im Fall (2) planarer und (3) isotroper Wechselwirkung erhalten wir

$$\begin{aligned} e^{-i\frac{\pi}{2}(2I_{1x}I_{nx}+2I_{1y}I_{ny}+2I_{1z}I_{nz})} I_{1z} e^{i\frac{\pi}{2}(2I_{1x}I_{nx}+2I_{1y}I_{ny}+2I_{1z}I_{nz})} &= \\ e^{-i\frac{\pi}{2}(2I_{1x}I_{nx}+2I_{1y}I_{ny})} I_{1z} e^{i\frac{\pi}{2}(2I_{1x}I_{nx}+2I_{1y}I_{ny})} &= I_{nz} , \end{aligned} \quad (5.11)$$

da die $2I_{1z}I_{nz}$ -Komponente der isotropen Wechselwirkung mit dem Anfangszustand I_{1z} kommutiert und somit keinen Effekt auf dessen Entwicklung hat. Des Weiteren wurde im Fall schwacher Kopplung auf einer 3-Spinkette die Abhängigkeit der minimalen Dauer des Propagators $e^{-i\phi(2I_{1z}I_{nz})}$ von ϕ untersucht.

Indirekte Ising-Wechselwirkung

Drehwinkel $\pi/2$ für verschiedene Anzahlen von Qubits

Indirekte Kopplungen können zu einem tieferen Verständnis zeitoptimierter Pulssequenzen führen. Im Falle der Ising-Wechselwirkung auf einer linearen 3-Spinkette sind die Ergebnisse für einige Drehwinkel auch analytisch verstanden. Ein Zusammenfassung der Resultate findet sich in Tabelle 5.4 und am Ende dieses Abschnitts in Abbildung 5.7.

Tabelle 5.4: Minimierte Zeiten für indirekte Ising-Kopplung für Drehwinkel $\frac{\pi}{2}$ auf linearen Spinketten.

Qubits	Zerlegung-I $\tau_I [1/J]$	Zerlegung-II $\tau_{II} [1/J]$	num. Resultat. $\tau_{opt} [1/J]$	Speed-up $\frac{\tau_I}{\tau_{opt}}$	Speed-up $\frac{\tau_{II}}{\tau_{opt}}$
2	0.50	0.50	0.50	1.00	1
3	2.50	2.00	1.27	1.97	1.57
4	2.50	-	2.38	1.05	-
5	4.50	4.00	2.92	1.54	1.37
6	4.50	-	3.63	1.24	-

Eine Ausgleichsgerade an die minimalen Zeiten nimmt folgende Form an:

$$\tau_{fit}^*(n)/J = 0.7910n - 1.0240 . \quad (5.12)$$

²Betrachten wir im Folgenden nur die Wirkung auf den interessanten Teil des Zustands der sich vom Einheitsoperator unterscheidet.

Die Summe der Fehlerquadrate ist 0.0758 und der χ^2 -Wert liegt bei 0.0021. Für die Konstruktion allgemeiner indirekter Kopplungen lässt sich das in Abb. 5.5 dargestellte Schema verwenden. SWAP-Gatter, welche $3/2J$ dauern, können im Falle der Ising-Wechselwirkung durch schnellere planare Mischoperationen der Dauer $1/J$ ersetzt werden, da der $2I_{1z}I_{2z}$ -Terms des isotropen Mischens, was mit dem Drehwinkel $\frac{\pi}{2}$ einer SWAP-Operation entspricht, mit der zentralen Ising-Kopplung kommutiert. Dies soll kurz am Beispiel für 4 Qubits vorgeführt werden. Da es sich hier um eine Konjugation mit den SWAP-Gattern handelt, gilt, unter Vernachlässigung der SWAP-Operation zwischen Qubit 3 und 4, folgendes:

$$\begin{aligned}
 & e^{-i\frac{\pi}{2}(xx11+yy11+zz11)} e^{-i\alpha 1zz1} e^{i\frac{\pi}{2}(xx11+yy11+zz11)} \\
 = & e^{-i\frac{\pi}{2}(xx11+yy11)} e^{-i\frac{\pi}{2}zz11} e^{-i\alpha 1zz1} e^{i\frac{\pi}{2}zz11} e^{i\frac{\pi}{2}(xx11+yy11)} \\
 = & e^{-i\frac{\pi}{2}(xx11+yy11)} e^{-i\alpha 1zz1} e^{i\frac{\pi}{2}(xx11+yy11)} \\
 = & e^{-i\alpha 1z1}
 \end{aligned} \tag{5.13}$$

Für die andere SWAP-Operation gilt dasselbe.

Das in Abbildung 5.5 gezeigte Schema lässt sich, wie bereits durch die gestrichelten Boxen angedeutet, sehr einfach erweitern. Geschieht das in symmetrischer Weise, erhalten wir eine indirekte Kopplung für eine gerade Anzahl von Qubits. Lassen wir eine der planaren Mischoperationen weg, erhalten wir Zerlegungen für eine ungerade Anzahl von Qubits. Die hier vorgestellte Zerlegung ist vom Drehwinkel der indirekten Kopplung unabhängig. Für die spezielle Wahl $\alpha = \frac{\pi}{2}$ existiert jedoch eine weitere Zerlegung-II. Sie beruht auf der Tatsache das ein CNOT äquivalent zu einer Kopplungsevolution von $\frac{\pi}{2}2I_{1z}I_{2z}$ ist, s. Kapitel 4.5 oder Gleichung (8.1). Zerlegung-II benutzt die in Abbildung 5.6 dargestellte Identität.

Diese Zerlegung lässt sich nun nicht wie Zerlegung-I, für alle Anzahlen von Qubits realisieren. Eine solche Zerlegung für indirekte $(1,n+1)$ CNOT existiert nur für $n \in \{2^p | p \geq 0, p \in \mathbb{Z}\}$ und $m = n$.

Theorem 1 *Zerlegung-II liefert für $n + 1$ Qubits dann und nur dann ein indirektes $(1,n+1)$ CNOT, wenn $n = 2^p$ und $m = 2^p$, mit $p \geq 1$.*

Beweis: Der Beweis baut sich aus folgenden Teilschritten auf:

1. Äquivalenz zwischen Zerlegung-II und einer Parallelogramm-artigen Zerlegung,
2. Darstellung der unitären Einzelmodule J als Elemente der $\mathbf{GL}(n + 1, \mathbb{Z}_2)$,
3. Beweis, dass nur bestimmte Potenzen von J zu den gewünschten Zielgattern führen.

5 Zeitoptimierte Quantengatter auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

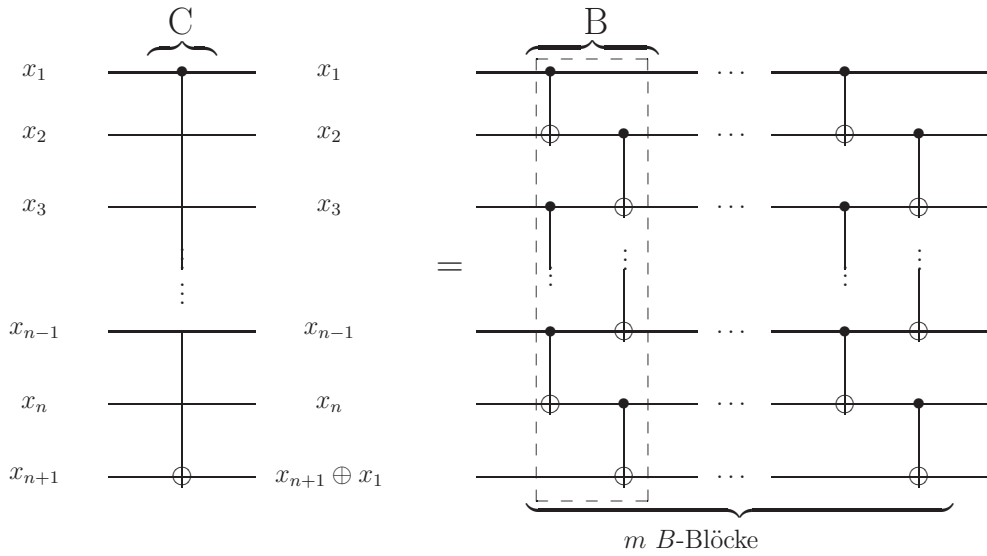
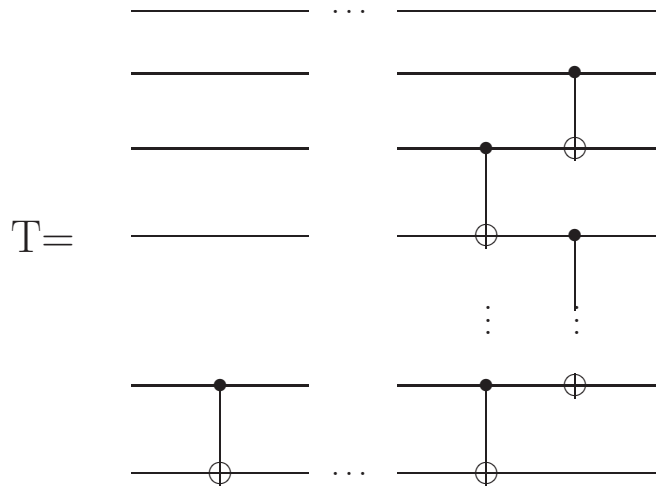


Abbildung 5.6: Zerlegung-II des indirekten CNOTs in eine Reihe aufeinanderfolgender Blöcke B , bestehend aus CNOTs. An die Anzahl der Qubits (n) und die Anzahl der Blöcke (m) sind gewisse Bedingungen gestellt, damit die Zerlegung funktioniert.

zu 1.

Gehen wir zunächst von der Richtigkeit der Zerlegung aus und betrachten als erstes die folgende Ähnlichkeitstransformation: $TCT^\dagger = TB^mT^\dagger$, bei der T folgende Form annimmt:



Man erkennt, dass $[C, T] = 0$: Die Hamiltonians der Einzelgatter von T

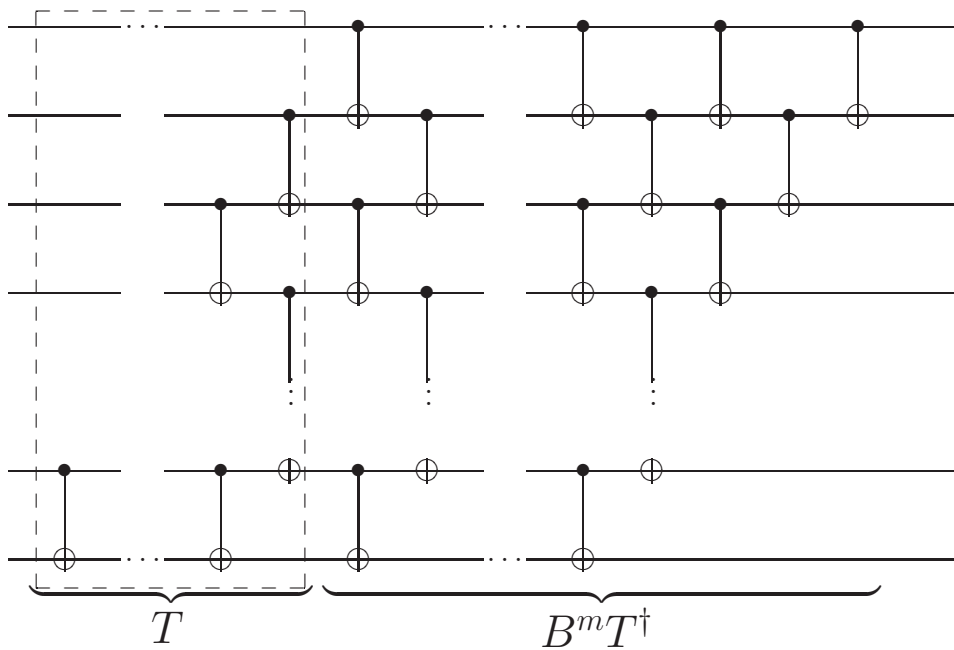
- haben am Qubit 1 entweder keine oder nur I_z -Produktoperatoren,
- haben am Qubit $n + 1$ entweder keine oder nur I_x -Produktoperatoren und
- auf allen anderen Qubits findet keine Operation durch C statt.

Daraus folgt

$$T C T^\dagger = C = T B^m T^\dagger . \quad (5.14)$$

Wir erhalten also dasselbe C -Gatter, ob mit oder ohne Äquivalenztransformation.

Nach der Transformation mit T nimmt $T B^m T^\dagger$ die gewünschte Parallelogrammstruktur an:

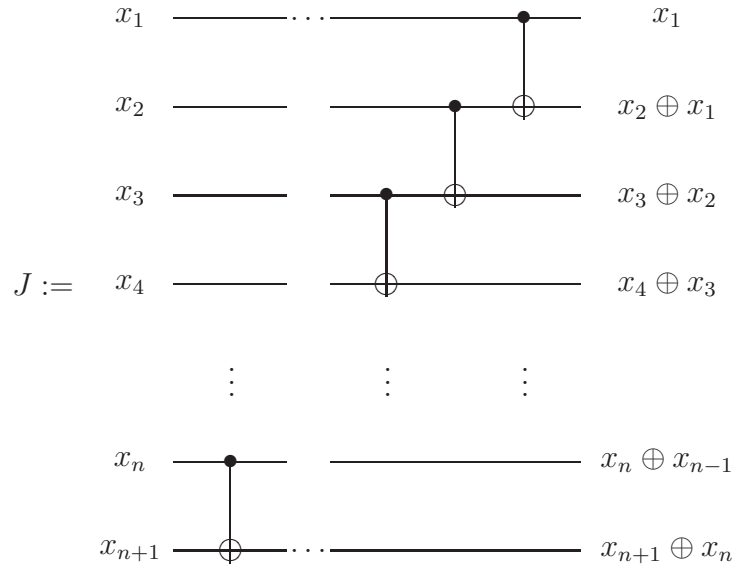


Auf der rechten Seite lassen sich so viele CNOT-Gatter zu $\mathbb{1}$ kombinieren, dass die oben gezeigte Struktur entsteht.

zu 2.

Das $T B^m T^\dagger$ -Gatter lässt sich nun in ein Produkt von m J -Gattern folgender Struktur zerlegen

5 Zeitoptimierte Quantengatter auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen



Wir erhalten also $C = TB^mT^\dagger = J^m$. Betrachten wir nun die Wirkung dieser J -Gatter. Sei $|x\rangle$ der $n+1$ -dimensionale Vektor des Vektorraumes \mathbb{Z}_2^{n+1} . Es gilt also $1 \oplus 1 = 0$, für alle Einträge von $|x\rangle$. Wenn J auf $|x\rangle$ wirkt, nimmt es folgende Matrixstruktur an:

$$(J)_{\mathbb{Z}_2^{n+1}} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^t \pmod{2} \quad (5.15)$$

J ist also eine Jordan-Matrix. Um die Anschaulichkeit zu erhöhen, werden die Matrizen transponiert dargestellt. Berechnen wir nun das Produkt von $m = k < n$ solcher Matrizen so fällt auf, dass nicht alle Einträge der Dreiecksmatrix besetzt sind [174]. Als erstes Zwischenergebnis erhalten wir somit

$$m = n \quad (5.16)$$

Das Produkt von n J -Matrizen liefert:

$$(J^k)_{\mathbb{Z}_2^{n+1}} = \begin{pmatrix} 1 & \binom{n}{1} & \binom{n}{2} & \binom{n}{3} & \cdots & \binom{n}{n-2} & \binom{n}{n-1} & \binom{n}{n} \\ 0 & 1 & \binom{n}{1} & \binom{n}{2} & \cdots & \binom{n}{n-3} & \binom{n}{n-2} & \binom{n}{n-1} \\ 0 & 0 & 1 & \binom{n}{1} & \cdots & \binom{n}{n-4} & \binom{n}{n-3} & \binom{n}{n-2} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & \binom{n}{n-5} & \binom{n}{n-4} & \binom{n}{n-3} \\ \vdots & & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & \binom{n}{1} & \binom{n}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \binom{n}{1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \pmod{2} \quad (5.17)$$

Da wir über dem Zahlenkörper \mathbb{Z}_2 arbeiten, werden die Einträge $\binom{n}{j}$ auf 0 oder 1 abgebildet je nachdem ob sie gerade oder ungerade sind.

zu 3.

Damit J^k nun identisch zu C wird, muss folgendes gelten:

$$\binom{n}{j} \pmod{2} = 0 \text{ für } j \in \{2, 3, \dots, n-1\} \quad (5.18)$$

Es gilt zu zeigen, dass Gleichung (5.18) nur dann gilt, wenn $n = 2^p$ ist. Es bleiben dann die Diagonaleinträge und $\binom{n}{n} = 1$ übrig und wir erhalten:

$$(J^k)_{\mathbb{Z}_2^{n+1}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \pmod{2} = (C)_{\mathbb{Z}_2^{n+1}}. \quad (5.19)$$

Aufgrund des Lucas-Theorems³ erhalten wir für die Binomialkoeffizienten, wenn sie als Pascal-Dreieck über \mathbb{Z}_2 angeordnet werden, eine Sierpinski-Dreiecksstruktur [176]. Dieser Struktur entnehmen wir, dass Gleichung (5.18) dann und nur dann gilt, wenn $n = 2^p$, mit $p \in \mathbb{Z}_+$. Zusammen mit Gleichung (5.16) ist das Theorem

³LUCAS' THEOREM [175]: Sei p eine Primzahl. Wir schreiben n und k in der p -adischen Darstellung als $n = a_0 + a_1pa_2p^2 + \cdots + a_dp^d$ und $k = b_0 + b_1p + b_2p^2 + \cdots + b_dp^d$, mit $0 \leq a_j, b_j \leq p-1$. Dann gilt

$$\binom{n}{k} = \prod_{j=0}^d \binom{a_j}{b_j} \pmod{p}. \quad (5.20)$$

Im Fall $p = 2$ ist $\binom{n}{k}$ gerade, sobald $a_j < b_j$ für ein j erfüllt ist.

5 Zeitoptimierte Quantengatter auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

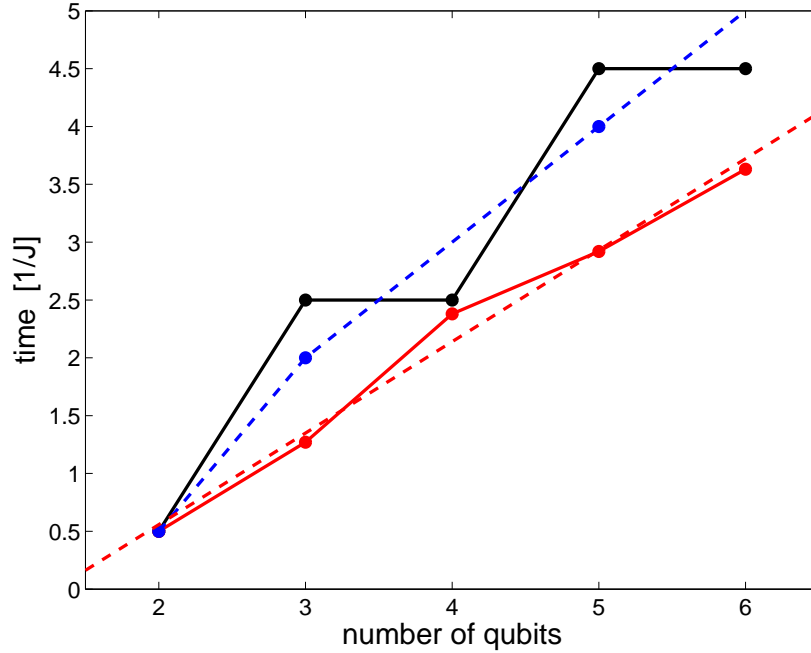


Abbildung 5.7: Vergleich der verschiedenen Implementierung der indirekten Ising-Wechselwirkungen mit Drehwinkel $\pi/2$ auf einer linearen Spinkette. Die schwarze Kurve zeigt die Zeiten für die Standardzerlegung-I. Die blaue Kurve stellt die verbesserte Zerlegung-II dar. Die numerisch erhaltenen Resultate sind in rot dargestellt, wobei die gestrichelte Linie die Ausgleichsgerade zeigt (s. Text).

bewiesen⁴. ■

Als Zeitkomplexität des $(1, 2^p + 1)$ CNOT erhalten wir

$$\tau((1, 2^p + 1)\text{CNOT}) = 2 \cdot 2^p \tau((1, 2)\text{CNOT}), \quad (5.22)$$

mit $p \in \mathbb{Z}$ und $p \geq 1$.

⁴Es gilt nun weiter zu zeigen, dass auch für den Fall, dass die Zerlegung falsch ist, durch die Transformation mit T keine Übereinstimmung von C und TB^mT^\dagger erreicht werden kann. Dies lässt sich zeigen, indem man die Spur der Matrixdarstellungen von C und B^m vergleicht. Wir erhalten als Bedingung

$$\text{tr}(TB^mT^\dagger) = \text{tr}(B^m) = \text{tr}(C) = \text{tr}((1, n+1)\text{CNOT} \bigotimes_2^n \mathbb{1}_2) = 2 \times 2^{n-1} = 2^n. \quad (5.21)$$

Wie wir gesehen haben, erhalten wir im Fall $m \neq 2^{n-1}$, ein Produkt mehrerer CNOTs. Das Spurkriterium ist also verletzt.

Indirekte Kopplungen auf K_3 -Topologien mit unterschiedlichen Kopplungskonstanten

Eine weitere interessante Frage ist die nach dem Nutzen indirekter Kopplungen in einem vollständig gekoppelten Spinsystem. Um dieser Frage nachzugehen, wurde folgendes Szenario gewählt: Gegeben sei ein 3-Spinsystem mit dem Kopplungshamiltonian

$$H_{drift} = J_a z_1 z + J_b (z z_1 + 1 z z) . \quad (5.23)$$

Nun soll numerisch untersucht werden, ab welchem Verhältnis $\frac{J_a}{J_b}$ eine merkliche Beschleunigung der Implementierung eines (1,3)-CNOTs auftritt. Dies soll als Indiz für die Verwendung der indirekten Kopplung dienen. Die Resultate sind in Abbildung 5.8 zusammengestellt. Es fällt auf, dass für die linke und rech-

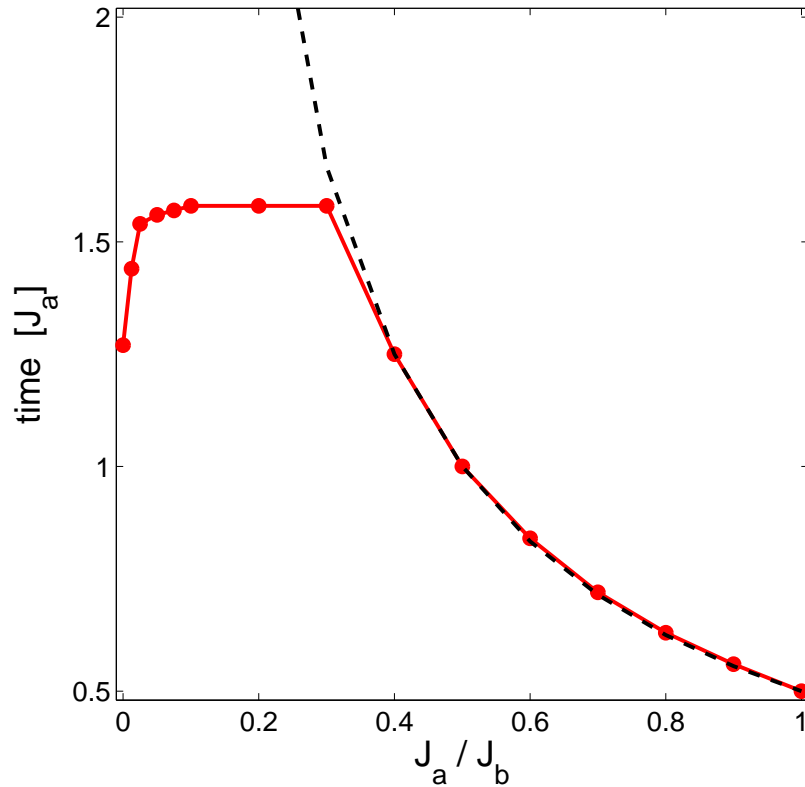


Abbildung 5.8: Numerisch erhaltene minimale Zeiten (rote Kurve) für die Implementierung einer indirekten Ising-Wechselwirkung $z_1 z$ auf einer Kopplungstopologie mit H_{drift} aus Gleichung (5.23). Die schwarze Kurve stellt eine analytische Realisierung dar. Sie wurde durch Simulation der L_3 -Topologie erreicht. Die Zeitkomplexität ist hier $(2\frac{J_a}{J_b})^{-1}$.

5 Zeitoptimierte Quantengatter auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

te Seite jeweils unterschiedliche Zeitkomplexitäten auftreten. Diese sollen τ_{links}^* und τ_{rechts}^* genannt werden. Die numerischen Ergebnisse auf der rechten Seite der Abbildung 5.8 folgen der Funktion

$$\tau_{rechts}^*\left(\frac{J_a}{J_b}\right) = \left(2\frac{J_a}{J_b}\right)^{-1}. \quad (5.24)$$

Dies lässt sich dadurch erklären, dass aus der jeweils gegebenen Kopplungstopologie die Kopplungen zum mittleren Spin eliminiert wurden. Dies geschieht durch folgenden Ansatz:

$$e^{-i\pi\Delta t(J_a z_1 z + J_b(z z_1 + 1 z z))} e^{-i\pi\Delta t(J_a z_1 z - J_b(z z_1 + 1 z z))} = e^{-i\pi 2\Delta t J_a z_1 z}. \quad (5.25)$$

Im jedem Zeitintervall Δt wird also die K_2 -Topologie simuliert. Setzen wir nun $\sum \Delta t = T$, dann folgt

$$\pi T J_a = \frac{\pi}{2} \Rightarrow T = \frac{1}{2J_a}. \quad (5.26)$$

Die Zeitkomplexität aus Gleichung (5.24) gilt allerdings nur für einen beschränkten Definitionsbereich von $\frac{J_a}{J_b}$, nämlich $\tau_1 \leq \frac{J_a}{J_b} \leq 1$, mit $\tau_1 \approx 0.3$. Da

$$\lim_{\frac{J_a}{J_b} \rightarrow 0} \tau_{rechts}^*\left(\frac{J_a}{J_b}\right) = \infty \quad (5.27)$$

gilt und außerdem für die indirekte Kopplung auf L_3 bereits ein Ergebnis bekannt ist ($\tau_1^*(0) = 1.27/J$), muss bei kleinem $\frac{J_a}{J_b}$ ein anderer Ansatz für die zeitoptimierte Lösung gefunden werden⁵. Der Ansatz, die L_3 -Topologie in Anwesenheit der direkten Kopplung zu simulieren, führt *nicht* zu den erhaltenen Resultaten:

Die Simulation der L_3 -Topologie kann zwar durch folgende Sequenz erreicht werden,

$$\begin{aligned} e^{-i\pi\Delta t J_b(z z_1 + 1 z z)} &= \\ e^{-i\pi c_0(J_a z_1 z + J_b z z_1 + J_b 1 z z)} &\times e^{-i\pi c_1(-J_a z_1 z - J_b z z_1 + J_b 1 z z)} \times \\ e^{-i\pi c_2(J_a z_1 z - J_b z z_1 - J_b 1 z z)} &\times e^{-i\pi c_3(-J_a z_1 z + J_b z z_1 - J_b 1 z z)}, \end{aligned} \quad (5.28)$$

mit $c_0 = \Delta t J_b$, $c_1 = \frac{1}{2}\Delta t J_b$, $c_2 = 0$ und $c_3 = \frac{1}{2}\Delta t J_b$, aber ihre Dauer beträgt $\sum_{k=0}^3 c_k = 2\Delta t J_b$. Die Simulation des L_3 benötigt also doppelt solange wie die freie Evolution. Des Weiteren ist die Dauer der Simulation unabhängig von J_a , was nicht mit den numerischen Resultaten übereinstimmt. Es muss also entweder eine andere Simulation des L_3 benutzt werden, oder eine völlig andere optimierte Lösung gefunden werden. Dass das Letztere zutrifft, zeigt sich auch dadurch, dass optimierte Pulssequenzen für $\frac{J_a}{J_b} > \tau_1$ nur bedingt als Ausgangssequenzen für Optimierungen mit $\frac{J_a}{J_b} < \tau_1$ genutzt werden können. Die Qualitäten bleiben

⁵Einen Hinweis darauf liefert die Dauer für Topologien mit $\frac{J_a}{J_b} \in [0.1, 0.3]$: Die numerisch gefundenen Werte der minimalen Dauer liegen im Bereich von $3 - \sqrt{2}$.

hier für viele Iterationen weit hinter dem Optimum zurück.

Abhängigkeit von τ_{z1z}^ vom Drehwinkel auf L_3 -Topologien*

Für die indirekte Ising-Wechselwirkung wurden neben dem Drehwinkel $\pi/2$ auch noch andere Drehwinkel untersucht. Diese tauchen z.B. in der Zerlegung des TOFFOLI-Gatters auf:

$$U_{\text{TOFFOLI}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = e^{-i\frac{\pi}{4}(111+11z+1z1+z11+1zz+z1z+zz1+zzz)} \quad (5.29)$$

Ein in diesem Zusammenhang interessantes Ergebnis ist, dass nicht für alle Drehwinkel $\beta < \pi/2$ wie erwartet kürzere minimale Zeiten erhalten werden. So benötigt eine Drehung um $\pi/4$ eine Mindestzeit von $1.66/J$. Eine Zusammenfassung dieser Ergebnisse findet sich in Abbildung 5.9. Die erhaltenen minimalen Zeiten zeigen ein zweigeteiltes Verhalten: Für kleine Winkel scheint die Zeitkomplexität eine andere zu sein als für Winkel in der Nähe von $\pi/2$. Das deutet darauf hin, dass für die verschiedenen Bereiche unterschiedliche Arten von Zerlegungen optimal

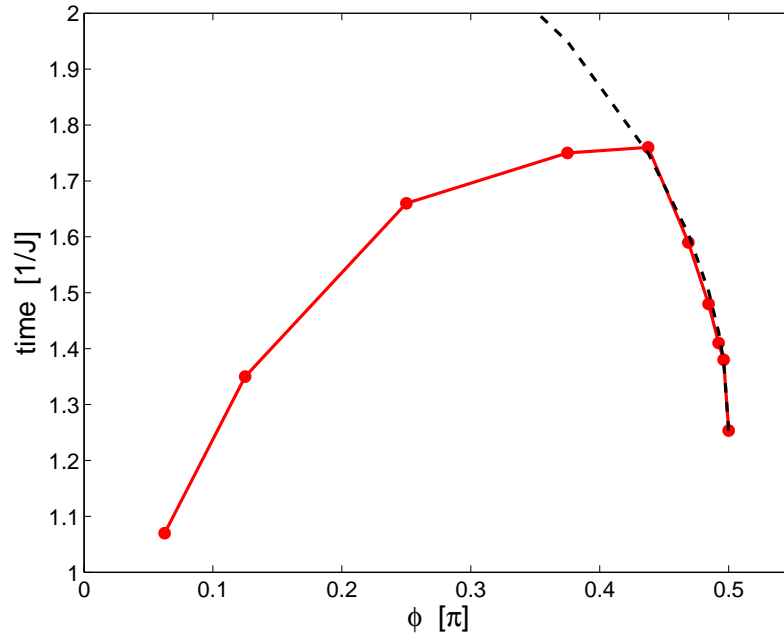


Abbildung 5.9: Zusammenstellung der minimalen Zeiten für den Propagator $e^{-i\phi 2I_{1z}I_{3z}}$ auf einer linearen 3-Spinkette in Abhängigkeit von ϕ . Die rote Kurve stellt die numerisch erhaltenen Ergebnisse dar, wohingegen die schwarze eine vermutete Zeitabhängigkeit $\tau_{fit}^*(\phi)/J = 1.253 + 2\sqrt{\alpha(2-\alpha)}$, mit $\alpha = \frac{\pi/2-\phi}{2}$ für $d \leq \phi \leq \pi/2$ und $d \approx 7\pi/16$, der analytischen Lösung darstellt.

5 Zeitoptimierte Quantengatter auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

sind. Der rechte Anstieg der minimalen Zeiten bei kleiner werdendem Drehwinkel weist einen interessanten Funktionalzusammenhang auf: So reproduziert folgende Gleichung

$$\tau_{fit}^*(\phi)/J = 1.253 + 2\sqrt{\frac{\pi/2 - \phi}{2}\left(2 - \frac{\pi/2 - \phi}{2}\right)} \quad (5.30)$$

mit $d \leq \phi \leq \pi/2$ und $d \approx 7\pi/16$, die numerisch erhaltenen Ergebnisse mit hoher Genauigkeit. Die Summe der Fehlerquadrate beträgt 0.0013 und der χ^2 -Wert $8.55 \cdot 10^{-4}$. Außerdem liefert dieses Ergebnis einen wichtigen Einblick in die zeitoptimierte Zerlegung: Die Wurzelfunktionen in Gleichung (5.30) sind die gleichen wie in Gleichung (5.36) bei der zeitoptimierten Zerlegung des trilinearen Propagators $e^{-i\phi zzz}$ auf einer linearen 3-Spinkette [78]. Es ist damit zwar nicht bewiesen, dass trilineare Propagatoren auch hier eine Rolle spielen, dennoch stellt es einen möglichen Ansatz weiterer Untersuchungen dar.

Indirekte planare Wechselwirkung

Besitzt man über den Zustand eines Systems eine gewisse Ausgangsinformation, z.B. dass ρ diagonal ist, so kann dieses Wissen genutzt werden, um z.B. den Transfer solcher Zustände zu beschleunigen. Ein solches Beispiel stellt der Trans-

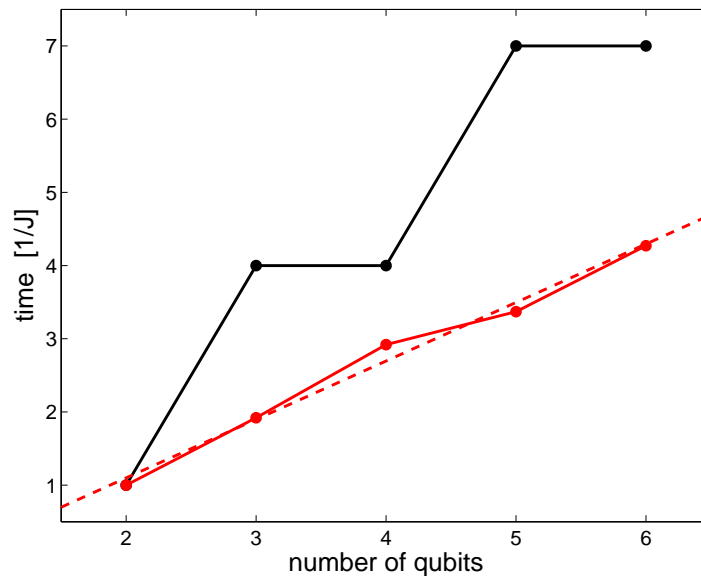


Abbildung 5.10: Vergleich der verschiedenen Implementierung der indirekten planaren Kopplung mit Drehwinkel $\pi/2$ auf einer linearen Spinkette. Die schwarze Kurve zeigt die Zeiten für die Standardzerlegung. Die numerisch erhaltenen Resultate sind in rot dargestellt. Die gestrichelte Linie stellt eine Ausgleichsgerade dar (s. Text).

Tabelle 5.5: Minimierte Zeiten für indirekte planare Wechselwirkung für Drehwinkel $\frac{\pi}{2}$ auf linearen Spinketten.

Qubits	Standardzerlegung $\tau [1/J]$	$2 \times$ ind. Ising $\tau [1/J]$	num. Resultat. $\tau [1/J]$	Speed-up $\frac{\tau_{Standard}}{\tau_{opt}}$
2	1.00	1.00	1.00	1.00
3	4.00	2.54	1.92	2.08
4	4.00	[4.76]	2.92	1.37
5	7.00	5.84	3.37	2.08
6	7.00	[7.26]	4.27	1.64

fer vom Grundzustand eines Systems dar. Dieser ist bei vielen Systemen bekannt. Ein solches Beispiel wurde bereits eingangs in Gleichung (5.11) untersucht. Einen weiteren wichtigen Aspekt stellt die Tatsache dar, dass die drei Produktoperatoren $\{\frac{1}{2}(xx + yy), \frac{1}{2}(yx - xy), \frac{1}{2}(z1 - 1z)\}$ eine zur $su(2)$ isomorphe Algebra darstellen. Vergleiche hierzu auch Gleichung (2.10). Diese Algebra ist weiter invariant unter dem globalen Fehler-Operator $F = \frac{1}{2}(z1 + 1z)$ und somit geschützt. Dies soll in Kapitel 7 weiter untersucht werden.

Simulierte planare Wechselwirkungen stellen somit einen wichtigen Baustein in vielen interessanten Anwendungen dar. Eine Zusammenfassung der erhaltenen Resultate findet sich in Tabelle 5.5 und Abbildung 5.10.

Eine Ausgleichsgerade an die erhaltenen Resultate ergibt

$$\tau_{fit}^*(n)/J = 0.7990n - 0.5000 . \quad (5.31)$$

Die Summe der Fehlerquadrate ist 0.0765 und der χ^2 -Wert liegt bei 0.0015.

Indirekte isotrope Wechselwirkung

Indirekte SWAPs

Die isotrope Interaktion stellt eine in vielen Quantensystemen vorkommende Wechselwirkung dar.

Der Propagator $e^{-i\phi(2I_{1x}I_{nx}+2I_{1y}I_{ny}+2I_{1z}I_{nz})}$ entspricht bei einem Drehwinkel ϕ von $\pi/2$ einer SWAP-Operation zwischen dem ersten und dem n -ten Qubit. Bei dieser Operation werden die Quantenzustände der beiden Spins vertauscht. Dies geschieht unabhängig vom Zustand und ist somit eine Verallgemeinerung des Transfers durch planares Mischen. Die Unabhängigkeit vom Anfangszustand wird durch eine aufwendigere Implementierung erkauft. Die erhaltenen Resultate sind in Tabelle 5.6 und Abbildung 5.11 zusammengefasst. Eine Ausgleichsgerade an

5 Zeitoptimierte Quantengatter auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

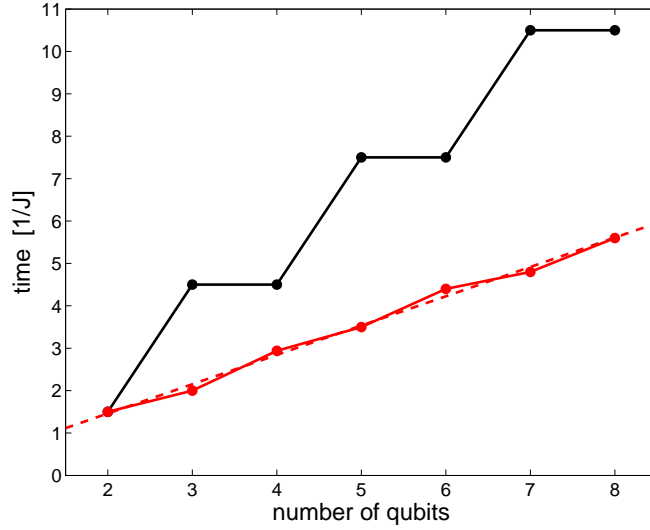


Abbildung 5.11: Vergleich der verschiedenen Implementierung der indirekten isotropen Wechselwirkung mit Drehwinkel $\pi/2$ auf einer linearen Spinkette. Die schwarze Kurve zeigt die Zeiten für die Standardzerlegung. Die numerisch erhaltenen Resultate sind in rot dargestellt, wobei die Ausgleichsgerade gestrichelt ist (s. Text).

Tabelle 5.6: Minimierte Zeiten für indirekte isotrope Wechselwirkung für Drehwinkel $\frac{\pi}{2}$ auf linearen Spinketten. Für 3 Qubits existiert eine analytische Lösung der Dauer $\frac{2}{J}$.

Qubits	Standardzerlegung τ [1/J]	ind. Ising + ind. planar τ [1/J]	num. Resultat. τ [1/J]	Speed-up $\frac{\tau_{Standard}}{\tau_{Opt}}$
2	1.50	1.50	1.50	1.00
3	4.50	3.19	1.95(2.00)	2.25
4	4.50	[5.30]	2.94	1.53
5	7.50	6.29	3.50	2.14
6	7.50	[7.90]	4.40	1.70
7	10.50		4.80	2.19
8	10.50		5.60	1.88

die erhaltenen Resultate ergibt

$$\tau_{fit}^*(n)/J = 0.6914n + 0.0772 . \quad (5.32)$$

Die Summe der Fehlerquadrate ist 0.0793 und der χ^2 -Wert liegt bei $5.4 \cdot 10^{-6}$.

BIT-FLIP-Operationen

Eine Nebenbedingung des (1,n)-SWAPs ist, dass die Qubits 2 bis $n - 1$ invariant bleiben. Lässt man diese Bedingung fallen, ist eines der nun möglichen Gatter die sogenannte BIT-FLIP-Operation. Sie taucht z.B. in der Standardzerlegung der QFT auf [111]. Der BIT-FLIP lässt sich als eine Folge von SWAP-Operationen darstellen:

$$(1,n)\text{-BIT-FLIP} = (1,n)\text{-SWAP} \circ (2,n-1)\text{-SWAP} \circ \dots \circ (k,k')\text{-SWAP} .$$

Die numerischen Resultate liefern eine Zeitkomplexität folgender Struktur:

$$\tau^*(n)/J = 0.5 + 0.5n \quad (5.33)$$

Ein Blick auf die bei 5 Qubits erhaltene Pulssequenz, s. Abbildung 5.12, lässt zudem folgenden Schluss zu: Die Pulssequenz besteht lediglich aus (i) Perioden freier Evolution und (ii) harten Pulsen. Es treten im vorliegenden Fall genau 6 solcher Perioden der Dauer $1/2J$ auf. Daraus folgt ein allgemeines Zerlegungsschema für die zeitoptimierten Pulssequenzen des BIT-FLIPs:

$$\left(e^{-i\pi J \frac{1}{2J} H_{Drift}} e^{-i\pi/2F_y} e^{-i\pi J \frac{1}{2J} H_{Drift}} e^{i\pi/2F_y} \right)_3 \quad (5.34)$$

Fassen wir die harten Pulse zusammen, lässt sich auch eine Zerlegung in CNOTs

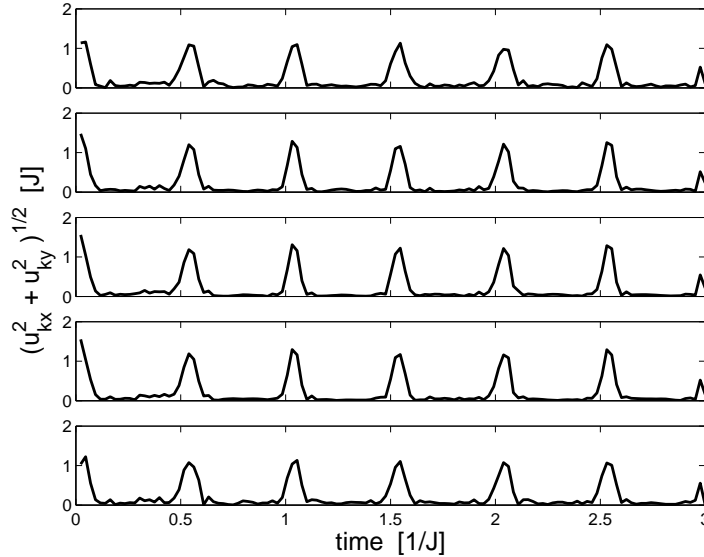
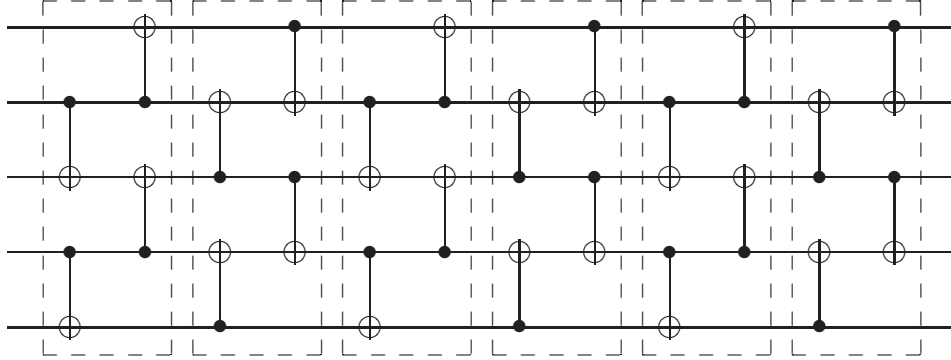


Abbildung 5.12: Zeitverlauf der Absolutwerte von x - und y -Kontrollen für alle 5 Qubits (Qubit 1 oben, Qubit 5 unten) der kürzesten Realisierungen des (1,5)-BIT-FLIP. Den Intervallen relativ freier Evolution der Dauer $1/2J$ folgen harte Pulse.

finden, hier am Beispiel für 5 Qubits demonstriert:



Die Gatter in den gestrichelten Boxen kommutieren und können parallel durchgeführt werden. Die Dauer einer Box entspricht somit der Dauer eines CNOTs, also $1/2J$. Das Schema ist leicht erweiterbar und stimmt mit den numerischen Resultaten perfekt überein. Eine analytische Lösung für ein ähnliches Problem findet sich in [177–179]. Dort wird der Transfer eines Zustandes entlang einer Kette untersucht, was als Teilproblem des BIT-FLIPS angesehen werden kann. Im Falle von 3 Qubits deckt sich der (1,3)-BIT-FLIP mit dem (1,3)-SWAP, somit erhält man auch für dieses Gatter eine zeitoptimierte Pulssequenz.

5.4 Diskussion

Ziel ist es, die kontroll-theoretischen Methoden auf noch größere Module von Quantenalgorithmien oder Simulationen zu erweitern, um diese dann zeitoptimiert und/oder robust zu implementieren. Die wachsende Anzahl von numerischen Beispielen wird hoffentlich dazu beitragen, zeitoptimierte Kontrollen analytisch zu verstehen, was jedoch für die vorgestellten Fälle bereits eine anspruchsvolle Aufgabe darstellt. Für andere Beispiele, wie den Propagator

$$U(t) = e^{-i\pi Jt \left(\frac{1}{2}\sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z} \otimes \sigma_{3z}\right)} \quad , \quad (5.35)$$

ist die Theorie komplett verstanden [78]. Man erhält eine Zeitkomplexität in Abhängigkeit von $\phi = Jt \in [0, \pi/2]$ zu

$$\tau^*(\phi)/J = \sqrt{\phi(2 - \phi)} \quad (5.36)$$

Die Vorhersagen, die auf sub-Riemann'schen Geodäten beruhen, werden durch den numerischen Algorithmus exakt reproduziert.

Das theoretische Verständnis wird durch die aufgeführten Zeiten und die Kontrollen positiv beeinflusst werden. Zwei weitere Beispiele für solche Kontrollen sind in Abbildung 5.13 abgebildet. Das ultimative Ziel wäre es, skalierbare Schemata aus den numerisch gefundenen Zeiten und Kontrollsequenzen zu erhalten.

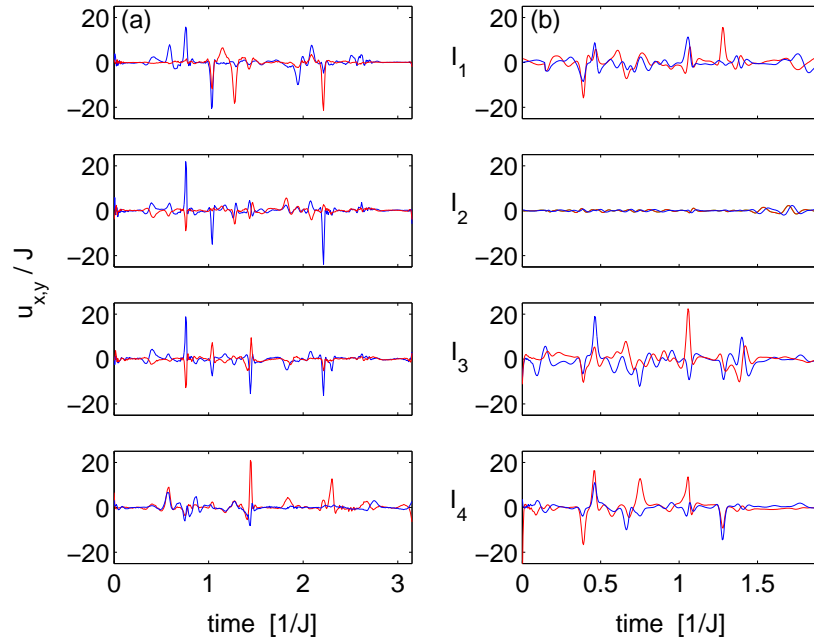


Abbildung 5.13: Zeitverlauf der Kontrollen der kürzesten Realisierungen für folgende Quantengatter: (a) QFT auf linearer 4-Spinkette, (b) C^3 NOT-Gatter auf komplettem 4-Spinsystem. Blau: Amplituden für σ_{ℓ_x} -Kontrolle (x -Pulse); rot: Amplituden für σ_{ℓ_y} -Kontrolle (y -Pulse).

Um diesem Ziel näher zukommen, lassen sich noch weitere Merkmale der Pulssequenz betrachten. In Frage kommen

1. die minimale Gesamtdauer,
2. das Aussehen der Pulssequenzen,
3. die Entwicklung des effektiven Hamiltonian und dessen Zerlegung in Produktoperatoren während der gesamten Pulssequenz,
4. (aus 3. folgend) der Anteil linearer, bilinearer und multilinearer Produktoperatoren im effektiven Hamiltonians,
5. die Evolution von Zuständen auf den lokalen Blochsphären nach dem „Ausspuren“ des restlichen Systems, vgl. Figur 4.2 und 4.3,
6. die Eigenwerte des effektiven Hamiltonians und daraus resultierende Größen, wie die Makhlin-Invarianten [156], vgl. Figur 4.4 und
7. die zeitliche Evolution reiner oder gemischter Zustände und die Veränderung von Zustandsgrößen, wie z.B. die Verschränkung eines Zustandes im Laufe der Pulssequenz.

Neben der Analyse der Pulssequenzen kann auch eine Analyse des Zielpropagators von Nutzen sein. Wie in Kapitel 2.1.4 gezeigt, ist es immer möglich, ein Element $U \in \mathbf{SU}(N)$ in eine Reihe von kommutierenden Elementen zu zerlegen. Sollte es auf den ersten Blick schwierig sein, eine analytische Lösung für ein Quantengatter zu erhalten, muss das für die einzelnen kommutierenden Teilgatter nicht zwingend gelten. Allerdings muss darauf hingewiesen werden, dass die sequentielle Implementierung der kommutierenden Teilgatter nicht zwingend zeitoptimiert ist. Ein Beispiel, bei dem genau dies der Fall ist, wird in Kapitel 8.2 vorgestellt. Weiter sei in diesem Zusammenhang darauf hingewiesen, dass eine zusätzliche Variationsmöglichkeit besteht: Besitzt das gewünschte Gatter eine Symmetriegruppe, so kann diese benutzt werden, um die einzelnen Komponenten zu transformieren. Ein in diesem Zusammenhang interessantes Beispiel stellt die Implementierung des CNOT auf Josephson-Elementen dar, s. Kapitel 4.

5.5 Schlussfolgerung

Der übliche Ansatz, Quantenmodule in 2-Qubit-Elementarbausteine zu zerlegen und ihre Komplexität durch die Anzahl dieser Gatter zu beschreiben, wurde verlassen. Stattdessen wurde die Zeitkomplexität als eine für die experimentelle Realisierung relevante Maßeinheit vorgeschlagen.

In ihr spiegelt sich die differential-geometrische Struktur der unitären Gruppen wieder. Diese Struktur kann in einem numerischen Algorithmus ausgenutzt werden, um durch Quantenkontrolltheorie obere Grenzen für die minimalen Implementierungszeiten von Quantengattern anzugeben.

Falls, wie im Fall der Flüssig-NMR-Systeme, lokale und nicht-lokale Operationen unterschiedlichen Zeitskalen angehören, erlauben unterschiedliche globale Phasen unterschiedlich lange minimale Zeiten. Im Limes unendlich schneller lokaler Kontrollen wurden Zerlegungen der QFT und der vielfach kontrollierten NOT-Gatter $C^{n-1}\text{NOT}$ gefunden, die dramatisch schneller waren, als die besten Zerlegungen in Elementargatter. Es gibt jedoch keine Garantie, dass das Zeitoptimum erreicht wird. Im Falle der QFT könnte eine Permutation der Qubits eine weitere Beschleunigung zu Folge haben. Auch für die Simulation verschiedener indirekter Kopplungen konnten numerischen Resultate erhalten werden, die einen deutlichen Speed-up gegenüber der Standardimplementierung aufweisen.

Die Resultate zeigen zudem, dass es im generischen Fall keine 1-zu-1 Beziehung zwischen Zeitkomplexität und Gatterkomplexität gibt: (1) nicht alle Elementargatter benötigen die gleiche Zeit, da jedes experimentelle Setting seine eigenen Zeithierarchien für lokale und nicht-lokale Operationen hat; (2) nicht alle Elementargatter müssen sequentiell abgearbeitet werden; manche von ihnen können, da sie unabhängig auf unterschiedlichen Qubits arbeiten, parallel ausgeführt werden; (3) die Kopplungstopologie zwischen den Qubits muss keinen kompletten Graphen (K_n) bilden. Für die volle Kontrollierbarkeit genügt bereits ein zusam-

menhängender Untergraph davon. Jeder dieser Graphen bietet ein anderes Potential, um zeitaufwendige Operationen zu parallelisieren, was am Beispiel der QFT auf verschiedenen Topologien K_n und L_n gezeigt wurde: Alle benötigten indirekten Phasengatter lassen sich auf eine elegante Weise anordnen (s. auch Kapitel 12.3.2), so dass möglichst viele Operationen parallel ausgeführt werden können. Die Zeitkomplexität lässt sich somit bereits von einer quadratischen auf eine lineare Abhängigkeit reduzieren. Durch Kontrolltheorie ist es möglich, diese Implementierungen noch weiter zu beschleunigen. (4) Eine gewisse Willkür der optimierten Netzwerkzerlegung wird zudem durch die spezifische Art der Interaktion (Ising, Heisenberg- XY oder $-XYZ$) und deren Stärke eingeführt.

Die Zeitkomplexität ist somit für den wirklichen experimentellen Aufwand ein besseres Maß als die Gatterkomplexität [71–73]. Um ein tieferes Verständnis für die analytischen Zusammenhänge zeitoptimierter Pulssequenzen zu entwickeln, wurde eine Reihe von Vorschlägen gemacht. Diese wurden auch teilweise bereits ausgenutzt, um das Verständnis der Resultate zu vertiefen.

5 Zeitoptimierte Quantengatter auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

6 Rekursiv aufgebaute Quantengatter

Aufgrund der exponentiell wachsenden Matrixdimensionen mit zunehmender Anzahl der Qubits, wird es irgendwann schwierig, wenn nicht sogar unmöglich werden, numerische Resultate für zeitoptimierte Quantengatter zu finden. Zwar ist die Möglichkeit analytischer Resultate zeitoptimierter Gatter nicht auszuschließen, dennoch befindet sich unser Verständnis auf diesem Sektor noch in den Kinderschuhen [76, 77].

Nicht-optimale Zerlegungen sind für eine geringe Anzahl von Gattern bereits bekannt. Darunter z.B. Gatter aus direkten Summen von lokalen Operationen, sogenannte uniform kontrollierte Ein-Qubit-Gatter [180–182]. Des Weiteren existieren Zerlegungen für ganz allgemeine unitäre Gatter [183, 184].

Im folgenden Kapitel soll die Möglichkeit untersucht werden, die bisher erhaltenen Resultate zu nutzen, um aus zeitoptimierten Realisierungen von Quantengattern mit wenigen Qubits, Zerlegungen für Quantengatter mit mehr Qubits aufzubauen.

6.1 Theorie

6.1.1 Prinzip

Für verschiedene Gattertypen liegen Zerlegungen vor, bei denen wenige Typen von Quantengattern mit wenigen Qubits dazu dienen kann, ein Gatter eines Typs mit mehr Qubits aufzubauen. Ein einfaches Beispiel stellt das SWAP-Gatter auf einer linearen Kopplungstopologie dar. So lässt sich aus einem SWAP-Gatter zwischen dem ersten und zweiten Qubit, ein SWAP-Gatter zwischen dem ersten und vierten Qubit konstruieren (Abbildung 6.1 (links)). Dieser Vorgang lässt sich natürlich auf noch größere Systeme erweitern (Abbildung 6.1 (rechts)). Neben dem SWAP-Gatter sind noch rekursive Zerlegungen für die QFT und C^n NOT-Gatter bekannt. Alle Beispiele sollen im Folgenden untersucht werden. Zunächst gilt es jedoch, die Fehlerfortpflanzung bei einer Mehrfachverwendung zu untersuchen, da es sich bei den numerischen Resultaten nur um Approximationen dieser Gatter handelt.

6 Rekursiv aufgebaute Quantengatter

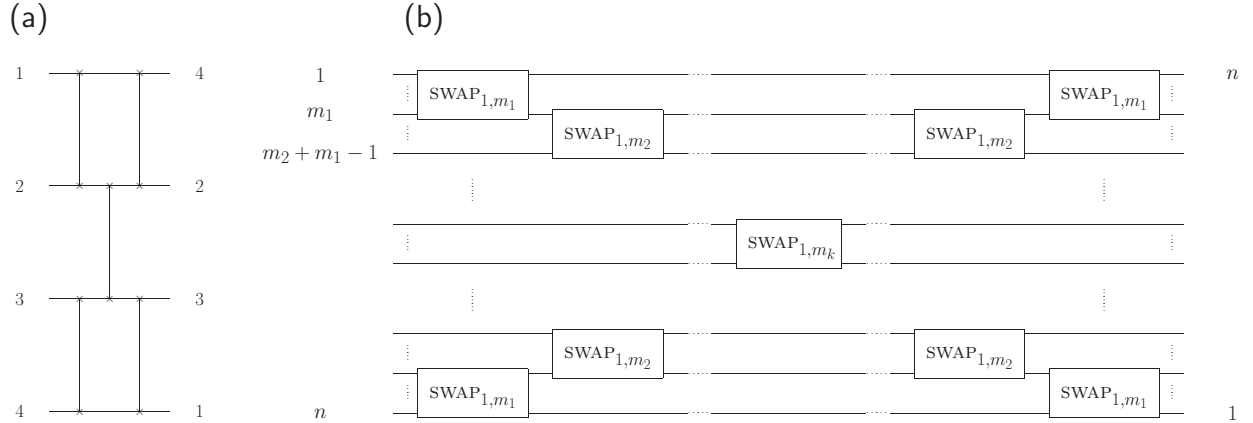


Abbildung 6.1: (a) Einfaches Beispiel rekursiver Gatter: Konstruktion eines $\text{SWAP}_{1,4}$ Gatters aus 5 $\text{SWAPS}_{1,2}$. (b) Verallgemeinerung: Konstruktion eines $\text{SWAP}_{1,n}$ durch jeweils 4 SWAPS_{1,m_j} mit $j = 1, 2, \dots, k - 1$ und einem einzelnen SWAP_{1,m_k} , so dass $m_k + 2 \sum_{j=1}^{k-1} (m_j - 1) = n$.

6.1.2 Fehlerabschätzung und -fortpflanzung

Erste Abschätzung

Um die Güte einer Operation auf einem Quantensystem auszudrücken, betrachten wir deren Qualität q , die sich aus dem Produkt von F_{tr} und einem Dämpfungsterm zusammensetzt, der durch die Relaxationsratenkonstante $1/T_R$ und die Gesamtzeit des Gatters τ ausgedrückt wird:

$$q = F_{\text{tr}} e^{-\tau/T_R} . \quad (6.1)$$

Dieser Ausdruck ist insofern als Näherung anzusehen, als er die Unabhängigkeit aller Fehler voraussetzt. Für n Qubits ist F_{tr} die Spurqualität eines experimentell erhaltenen unitären Gatters U_{exp} in Bezug auf das Zielgatter V_{Ziel} ($U, V \in \mathbf{U}(N)$ und $N := 2^n$)

$$\begin{aligned} F_{\text{tr}} &:= \frac{1}{N} \text{Re tr}\{V_{\text{Ziel}}^\dagger U_{\text{exp}}\} \\ &= 1 - \frac{1}{2N} \|V_{\text{Ziel}} - U_{\text{exp}}\|_2^2 , \end{aligned} \quad (6.2)$$

was aus der einfachen Beziehung zur euklidischen Distanz

$$\begin{aligned} \|V - U\|_2^2 &= \|U\|_2^2 + \|V\|_2^2 - 2 \text{Re tr}\{V^\dagger U\} \\ &= 2N - 2N \frac{1}{N} \text{Re tr}\{V^\dagger U\} \\ &= 2N(1 - F_{\text{tr}}) , \end{aligned} \quad (6.3)$$

folgt. Die beiden letzten Umformungen benutzen die Unitarität der Gatter.

Betrachten wir nun ein Multi-Qubit-Gatter der Qualität $q_m = F_m e^{-\tau_m/T_m}$, die sich in eine Folge von r universellen 2-Qubit-Gatter der Dauer τ_2 zerlegen lässt. $r' \leq r$ dieser Gatter sind sequentiell durchzuführen. Ferner besitzen alle 2-Qubit-Gatter die gleiche Qualität $q_2 = F_2 e^{-\tau_2/T_2}$. Weiter nehmen wir an, dass die Relaxationsratenkonstanten gleich sind: $1/T_2 = 1/T_m = 1/T_R$. Nach all dem erhalten wir als eine erste Abschätzung, ob es lohnt Multi-Qubit-Gatter zu verwenden: Unter Vernachlässigung von Relaxation ist letzteres vorteilhaft, wenn $F_m > (F_2)^r$ gilt. Unter Berücksichtigung der Relaxation gilt dies, wenn

$$F_m > (F_2)^r e^{-(r' \cdot \tau_2 - \tau_m)/T_R} \quad , \quad (6.4)$$

erfüllt ist.

Monte-Carlo-Fehlersimulation

Ein genaueres Bild erhält man durch Monte-Carlo-Simulationen der Fehlerfortpflanzung. Um dies zu zeigen, soll nun der unabhängige Fehler mit zwei Szenarien von Gattersequenzen mit jeweils r Gattern verglichen werden: (i) der r -fachen Wiederholung eines einzelnen unitären Gatters A (Fall $AAAA$) und (ii) die Wiederholung einer Sequenz von 4 unterschiedlichen Gattern A, B, C, D (Fall $ABCD$).

Damit perfekte und fehlerhafte Gatter generisch sind, wurden zufällige unitäre Matrizen benutzt. Diese waren zudem zufällig auf der gesamten $\mathbf{SU}(N)$ gemäß dem Haar-Maß verteilt [185]. Für ein gegebenes zufälliges unitäres m -Qubitgatter $A_0 \in U(2^m)$, wobei der Hamiltonian H_{A_0} durch $A_0 = e^{-iH_{A_0}}$ definiert sein soll, wurde nun ein generischer Fehler wie folgt simuliert: Der Hamiltonian H_{A_j} eines weiteren Gatters E_j wurde durch den Matrixlogarithmus bestimmt, so dass $e^{-iH_{A_j}} = E_j$ gilt. Bei gegebenem F_{tr} ist nun in der folgenden Gleichung δ so zu bestimmen, dass beide Seiten gleich werden,

$$\begin{aligned} F_{tr} &= 1 - \frac{1}{2N} \|A_0 - A_j\|_2^2 \\ &= 1 - \frac{1}{2N} \|A_0 - e^{-i(H_{A_0} + \delta \cdot H_{A_j})}\|_2^2 \quad . \end{aligned} \quad (6.5)$$

Dies ist im allgemeinen Fall nur numerisch möglich, was aber den Anforderungen genügt. Die Qualitäten der Monte-Carlo-Simulationen im Fall $AAAA$ ergeben sich dann zu

$$F_{AAAA}(r) = 1 - \frac{1}{2N} \left\| (A_0)^r - \prod_{j=1}^r A_j \right\|_2^2 \quad (6.6)$$

und im Fall $ABCD$ zu

$$F_{ABCD}(r) = 1 - \frac{1}{2N} \left\| (D_0 C_0 B_0 A_0)^{\frac{r}{4}} - \prod_{j=1}^{\frac{r}{4}} (D_j C_j B_j A_j) \right\|_2^2 \quad . \quad (6.7)$$

6 Rekursiv aufgebaute Quantengatter

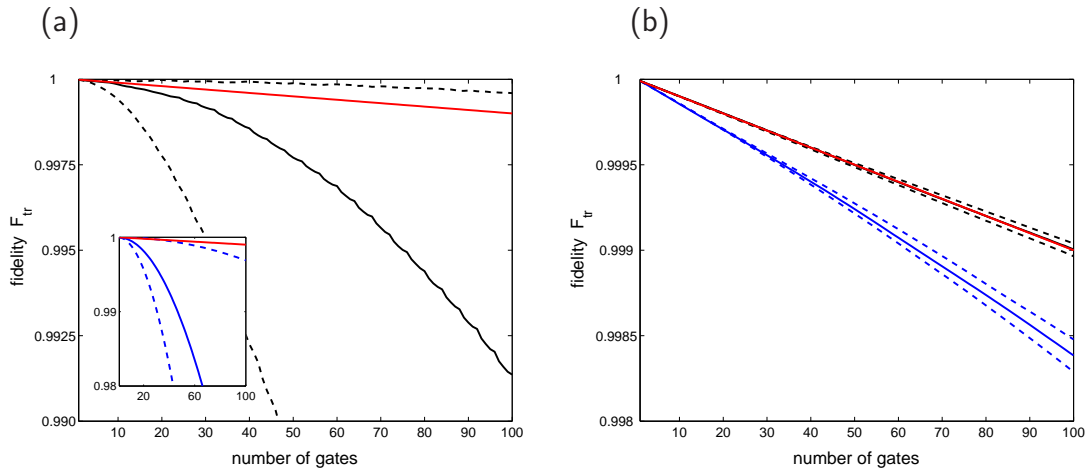


Abbildung 6.2: Vergleich der Fehlerpropagation für zufällige unitäre Gatter mit $m = 2$ Qubits (a) und $m = 8$ Qubits (b). Die Qualität der Einzelgatter beträgt $F_m = 0.99999$. Die Wiederholung eines Einzelgatters A (blau) wird zudem verglichen mit der Wiederholung einer Sequenz von 4 unterschiedlichen Gattern $ABCD$ (schwarz). Aus 10 Monte Carlo Simulationen werden jeweils die beste, die schlechteste (gestrichelt) und die dem Durchschnitt am nächsten kommende (durchgezogen) Kurve gezeigt. Die rote durchgezogene Linie stellt den unabhängigen Fehler dar $F_{tr} = (F_m)^r$. Für große Systeme ($m = 8$) mit unterschiedlichen Gattern ($ABCD$) sind der unabhängige und der wirkliche Fehler nahezu ununterscheidbar.

Wie nun in Abbildung 6.2(a) zu sehen ist, ergibt sich für die Fehlerfortpflanzung von 2-Qubitgattern eine sehr große Streuung für die entsprechenden Qualitäten. Diese große Streuung macht es nahezu unvorhersagbar, wie die Qualitäten sich entwickeln. Des Weiteren ist die Annahme der Unabhängigkeit der Fehler im Fall $AAAA$ eine viel zu optimistische Annahme. Im Fall $ABCD$ erhält man zwar immer noch zu optimistische Qualitäten, aber der Unterschied zum unabhängigen Fehler schrumpft bereits. Wirft man einen Blick auf größere Gatter bzw. Module, wird die generische Situation besser vorhersagbar. Für zufällige 8-Qubitgatter erhalten wir im Fall $AAAA$ wieder von der unabhängigen Fehlerkurve signifikant abweichende Resultate, wohingegen im $ABCD$ -Fall der Fehler der Monte-Carlo-Simulation, die dem Durchschnitt aller Simulationen am nächsten kommt, nahezu ununterscheidbar vom unabhängigen Fehler ist. Dieses Verhalten ist zudem unabhängig vom Einzelfehler $1 - F_{tr}$, was durch weitere Simulationen mit Gatterqualitäten von $F_{tr} = 0.99$ oder $F_{tr} = 0.96$ belegt werden konnte.

6.2 Anwendung

6.2.1 Die 1, n SWAP Operation

Die Verallgemeinerung der Zerlegung eines $\text{SWAP}_{1,n}$ in eine Abfolge von k unterschiedlichen SWAP_{1,m_j} Gattern, wobei $j = 1, 2, \dots, k$, ist in Abbildung 6.1(b) gezeigt. Hierbei ist zu beachten, dass $m_k + 2 \sum_{j=1}^{k-1} (m_j - 1) = n$ erfüllt ist. Aufgrund der Symmetrie ergibt sich für die Dauer des Gatters

$$\tau(\text{SWAP}_{1,n}) = \tau(\text{SWAP}_{1,m_k}) + 2 \sum_{j=1}^{k-1} \tau(\text{SWAP}_{1,m_j}) \quad (6.8)$$

und daraus resultierend für die Gesamtqualität

$$F(\text{SWAP}_{1,n}) = F(\text{SWAP}_{1,m_k}) \prod_{j=1}^{k-1} F(\text{SWAP}_{1,m_j})^4 \times e^{-\tau(\text{SWAP}_{1,n})/T_R} \quad (6.9)$$

Wie in Gleichung (6.8) gesehen, sind die Gesamtzeiten lineare Funktionen von k , sobald wir alle $\tau(\text{SWAP}_{1,m_j})$ gleichsetzen. Die Steigungen dieser Funktionen sind für $m = \{2, 4, 6, 8\}$ in Abbildung 6.3 dargestellt.

Um die minimalen Zeiten für höhere SWAPS abzuschätzen, soll ein Modell gefunden werden, das die gefundenen Resultate am besten approximiert. Als mögliche Kurvenverläufe für die Steigungen der Zeiten der rekursiven Zerlegungen aus Abb. 6.3 wurden zwei reziproke Funktionen und eine exponentielle Funktion angenommen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 6.4 und Tabelle 6.1 zusammengestellt. Das beste Modell für die Steigung der Geraden rekursiver SWAPS ist eine umgekehrt proportionale Abhängigkeit zusammen mit einem Offset. Über eine Integration lassen sich so Rückschlüsse auf die Zeitkomplexität der minimalen Dauer indirekter SWAP-Operationen auf Spinketten ziehen. Daraus folgt eine

Tabelle 6.1: Zusammenstellung der Fitparameter und Vergleich der Güte der Modelle für die Steigung der Geraden beim rekursiven SWAP.

Funktion	a	b	χ^2
$f_1(n) = a - \frac{b}{n}$	0.6758	0.7876	0.00044
$f_2(n) = \frac{a}{n+b}$	8.6905	3.9445	0.01811
$f_3(n) = ae^{-bn}$	0.7408	-0.2763	0.03774

6 Rekursiv aufgebaute Quantengatter

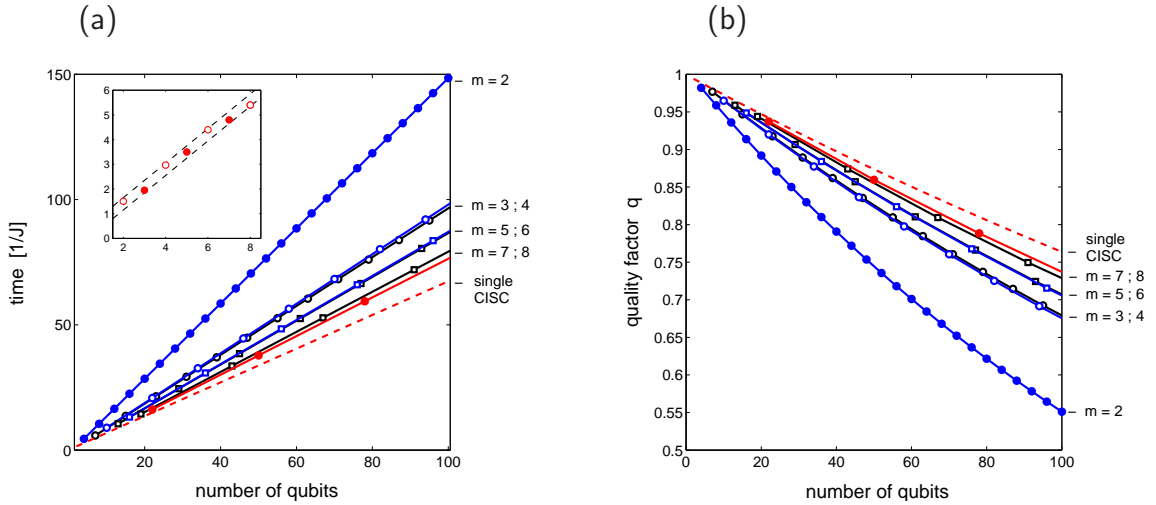


Abbildung 6.3: (a): Zeiten für indirekte $\text{SWAP}_{1,n}$ auf einer linearen Kette von n schwach gekoppelten Qubits durch eine entsprechende Konstruktion aus $\text{SWAP}_{1,m}$ -Gattern. m reicht von 2 bis 8. Die gestrichelte Linie stellt eine lineare Fortsetzung der Zeiten der zeitoptimierten Gatter dar. Diese sind jedoch für sehr große Systeme nicht numerisch handhabbar. Die Zeiten sind ausgedrückt in $1/J_{zz}$. (b): Gesamtqualität der effektiven Gatter unter der Annahme, dass eine homogene Relaxation vorliegt. Der Relaxationssuperoperator soll vereinfacht als $\Gamma = \gamma \mathbf{1}$ mit $\frac{\gamma}{J} = 0.004$ dargestellt werden. Somit ergibt sich ein einheitlicher Dämpfungsterm $e^{-\tau_m/T_R}$, der nur von der Gesamtdauer τ_m und der Relaxationsratenkonstante $1/T_R$ abhängt. Bei insgesamt r_m Gattern errechnet sich dann die Gesamtqualität q zu $q = (q_m)^{r_m}$, wobei $q_m := F_m e^{-\tau_m/T_R}$ die Einzelqualität des m -ten Gatters darstellt, welche sich wiederum aus der Spurqualität F_m und einem relaxativen Anteil zusammensetzt. Die Spurqualität liegt beim SWAP im Bereich $F_m \in [0.99994, 0.99999]$.

Summe aus logarithmischer und linearer Funktion. Des Weiteren bleibt festzuhalten, dass mittels der rekursiven Zerlegung eines indirekten $\text{SWAP}_{1,n}$ in Module mit mehr als 2 Qubits eine Beschleunigung um einen Faktor 1.96 (bei Module mit 8 Qubits) zu erreichen ist. Bei noch größeren Modulen wird eine weitere, jedoch weniger ausgeprägte, Beschleunigung erwartet. Des Weiteren kann aus Abbildung 6.3 sofort geschlossen werden, dass die Zeitkomplexität des $\text{SWAP}_{1,n}$ höchstens eine lineare sein kann. Eine logarithmische Zeitkomplexität lässt sich zwar nicht ausschließen, kann aber auch nicht bewiesen werden. Zusammenfassend kann über die rekursiven Zerlegungen des $\text{SWAP}_{1,n}$ gesagt werden, dass (i) unter Benutzung immer größerer Module die Zeiten immer weiter verkürzt werden können¹. und (ii) die numerischen Resultate auf eine lineare Zeitkomplexität

¹Die Beschleunigung erreicht jedoch, ab Systemen mit mehr als 8 Qubits, zunehmend eine

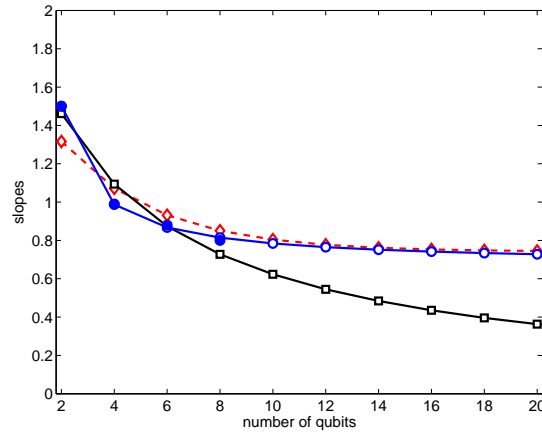


Abbildung 6.4: Steigungen der Zeitkomplexitäten für die rekursiven SWAPs aus Abbildung 6.3. Blaue (gefüllte) Punkte indizieren die numerisch gefundenen Resultate. Die Daten der Modelle sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst.

hindeuten. Diese Vermutung verstärkt sich zudem durch die linearen Zeitkomplexitäten der gefundenen Zerlegungen.

6.2.2 Die Quanten-Fourier-Transformation (QFT)

Um eine QFT auf einem Quantencomputer mit vielen Qubits durchzuführen, wird folgende Vorgehensweise vorgeschlagen: Gegeben sei eine m -Qubit QFT. Um eine $(k \cdot m)$ -Qubit QFT zu erhalten, benötigen wir ein weiteres Modul, welches aus einer Kombination von kontrollierten Phasengattern und SWAPs resultiert. Dieses kombinierte Gatter wird fortan m' -Qubit cP-SWAP genannt.

Nun sollen zwei Varianten der Zerlegung vorgestellt werden: Variante I mit $m' = 2m$ und Variante II $m' = m$. Wählen wir zunächst $m = 2$ und $k = 3$. Das rekursive Konstruktionsschema ist in Abbildung 6.6 dargestellt. Der obere Teil der Abbildung zeigt die Verallgemeinerung der Standardzerlegung der 6-Qubit QFT. Nach einer Verschiebung der abschließenden SWAP Operationen ergibt sich die im unteren Teil der Abbildung dargestellte Abfolge von Gattern. Die Gatter in den gestrichelten Kästen ergeben eine $2m$ -Qubit QFT (die wiederum aus zwei m -Qubit QFTs und einem zentralen m -Qubit cP-SWAP besteht). Die durchgezogenen Kästen müssen hinzugenommen werden, um eine $3m$ -Qubit QFT zu erhalten. Für $m = 2$ wurde also gezeigt, wie sich eine $3m$ -Qubit QFT aus einer $2m$ -Qubit QFT, weiteren zwei $2m$ -Qubit cP-SWAPs und einer m -Qubit QFT aufbauen lässt. Es wurde zudem gezeigt, wie der Induktionsschritt der Zerlegung einer $k \cdot m$ -QFT zu einer $(k + 1) \cdot m$ -QFT funktioniert. Das gleiche Konstruktionsprinzip gilt zudem auch für anderen Modulgrößen $m = 2, 3, \dots$. Abbildung 6.7 enthält das

Sättigung. Der Speed-up beträgt bei $m = 8$ einen Faktor 1.96.

6 Rekursiv aufgebaute Quantengatter

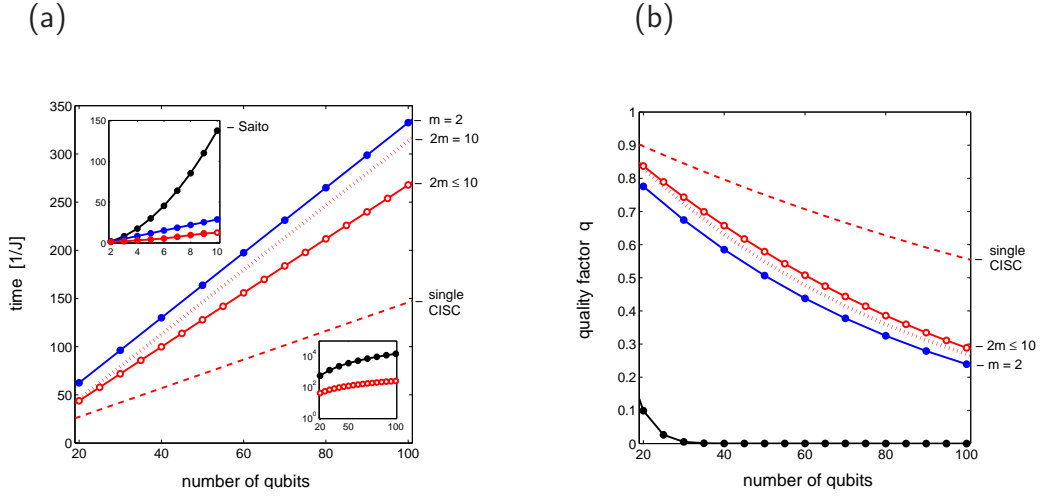


Abbildung 6.5: Vergleich der $(2m=10)$ -Zerlegung der QFT (rot) mit der Standardzerlegung $m = 2$ nach Saito [166] (schwarz) und Blais [167] (blau) (a): Zeitkomplexitäten und (b) Gesamtqualitäten für eine Relaxationsratenkonstante von $1/T_R = 0.004J_{zz}$. Die rote Linie (–) stellt die extrapolierte Zeitkomplexität der zeitoptimierten Implementierung (siehe oberes Inset) dar. Im unteren Inset sind die Zeitkomplexitäten der Standardzerlegungen einer QFT auf einer linearen Spinkette im semi-logarithmischen Maßstab wiedergegeben. Die rote Linie (· · ·) stellt die Zeitkomplexität für die weniger effektive Zerlegung der QFT dar.

allgemeine Zerlegungsschema² einer $(k \cdot m)$ -Qubit QFT: Sie benötigt k Module der m -Qubit QFT zwischen die sich weitere $\binom{k}{2}$ Module der $2m$ -Qubit cP-SWAP schieben. Letztere weisen $k - 1$ unterschiedliche Drehwinkel auf. Für alle m und $j = 1, 2, \dots, (k - 1)$ erhält man aufgrund der numerischen Resultate zudem:

1. cP-SWAP $_{2m}^j$ dauert mindestens genauso lange wie QFT $_m$;
2. QFT $_m$ dauert mindestens genauso lange wie cP-SWAP $_m^j$;
3. cP-SWAP $_m^j$ dauert mindestens genauso lange wie cP-SWAP $_m^{j+1}$.

Die Dauer der rekursive Implementierung einer $(k \cdot m)$ -Qubit QFT, aufgebaut aus m -Qubit- und $2m$ -Qubitmodulen, berechnet sich somit zu

$$\tau(\text{QFT}_{k \cdot m}) = 2 \cdot \tau(\text{QFT}_m) + (k-1) \cdot \tau(\text{cP-SWAP}_{2m}^1) + (k-2) \cdot \tau(\text{cP-SWAP}_{2m}^2) \quad . \quad (6.10)$$

Die Gesamtqualität unter Einbeziehung von Relaxation, berechnet sich zu

$$q_{\text{QFT}_{k \cdot m}} = (F_{\text{QFT}_m})^k \left(\prod_{j=1}^{k-1} (F_{\text{cP-SWAP}_{2m}^j})^{k-j} \right) \times e^{-(\tau_{\text{QFT}_{k \cdot m}}/T_R)} \quad . \quad (6.11)$$

²Die andere, aber weniger effiziente, Zerlegung ist als Variante II im Appendix 12.3.3 wiedergegeben.

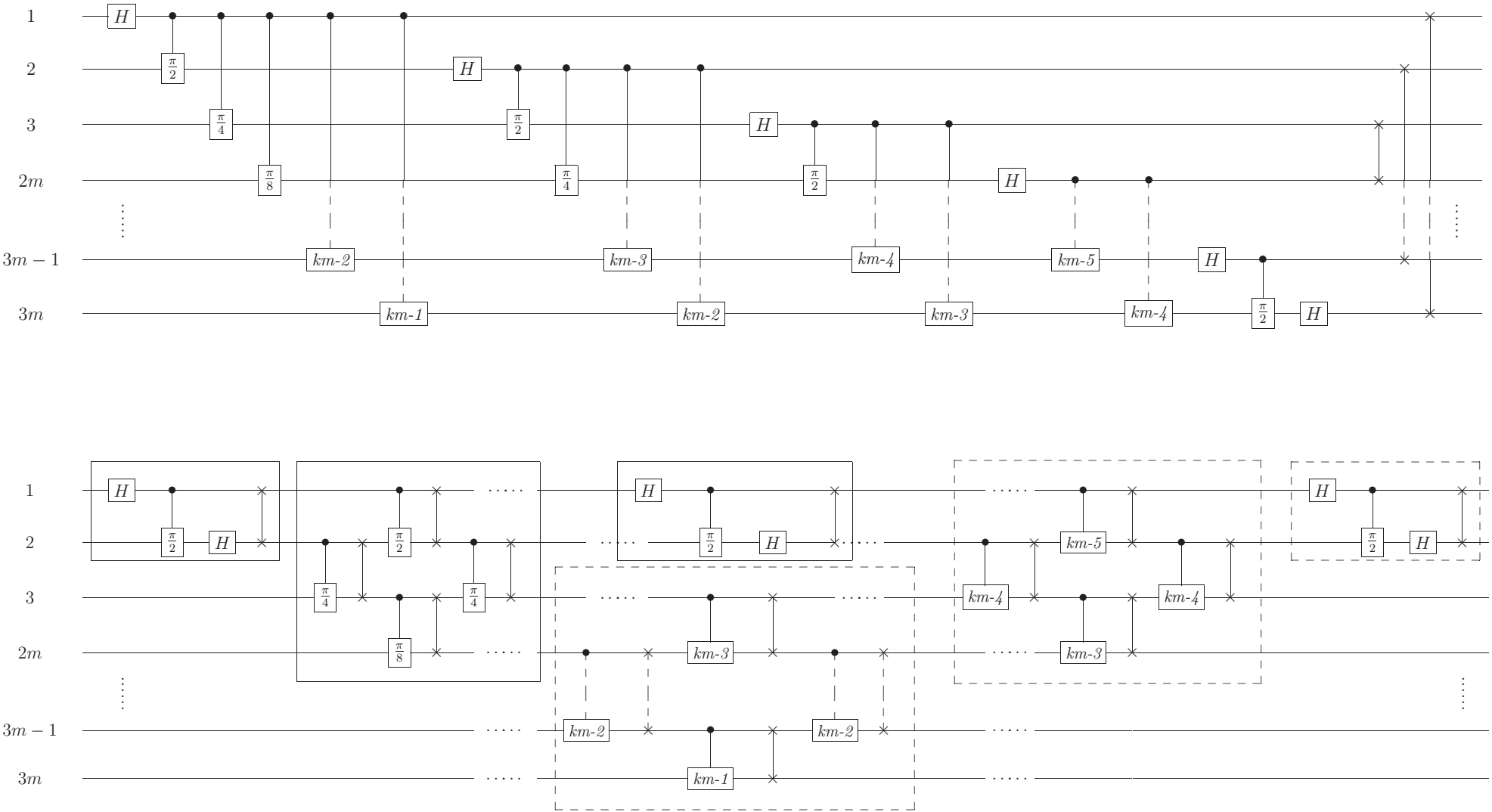


Abbildung 6.6: Durch Umordnung der Gatter einer $3m$ -qFT (links) reduziert sich die Realisierung auf der L_n -Topologie auf folgende Gattertypen (rechts): $2m$ -Qubit qFT, m -Qubit cP-SWAPS (durchgezogene Kästen) und m -Qubit qFT (gestrichelt). ($km - \nu$) steht für den Winkel $\frac{\pi}{2^{km-\nu}}$.

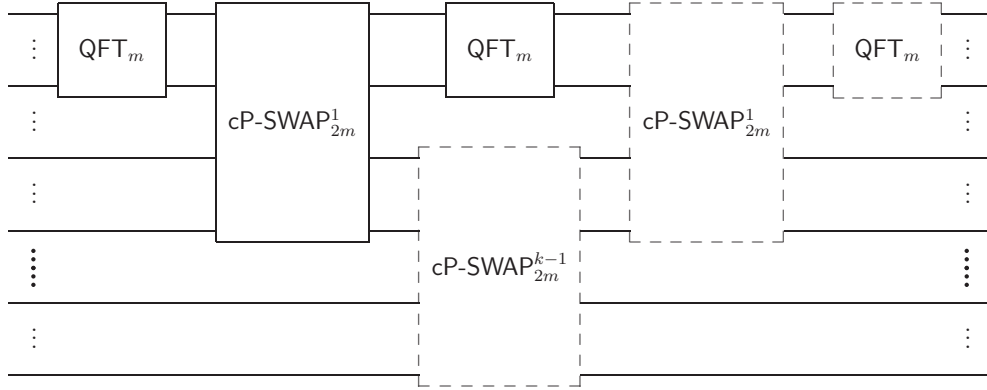


Abbildung 6.7: Für $k \geq 2$ kann eine (km) -Qubit QFT aus k Modulen einer m -Qubit QFT und $\binom{k}{2}$ Modulen des $2m$ -Qubit cP-SWAP_{2m}^j aufgebaut werden. Für die verschiedenen j werden jeweils verschiedene Drehwinkel angenommen. Die gestrichelten Kästen entsprechen denen in Abbildung 6.6 und zeigen den Induktionsschritt $k \mapsto (k + 1)$.

Im nun Folgenden sollen Drehwinkel von cP-SWAPS vernachlässigt werden, sobald sie die Grenze von $\pi/2^{10}$ unterschreiten. Diese Abschätzung ist deshalb unkritisch, weil die dadurch eingeführten Fehler kleiner sind als 10^{-5} , was der Spurqualität $F_{tr} = 0.99999$ entspricht, bis zu der alle in dieser Arbeit vorliegenden Gatter optimiert wurden. Gemäß der Zerlegung aus Abbildung 6.7, treten nun nur noch drei Arten von cP-SWAPS auf, da sich alle cP-SWAP_{10}^j Gatter mit $j \geq 3$, unter Vernachlässigung der auftretenden kontrollierten Phasengatter, auf reine SWAP -Gatter reduzieren lassen. Die entsprechenden cP-SWAP Module finden sich in Appendix 12.3.4. Mit diesen Bausteinen soll nun die Zerlegung einer $(k \cdot 10)$ -Qubit QFT und deren Zeitkomplexität, sowie deren Gesamtqualität betrachtet werden. Um dies zu erreichen, werden 10-Qubit cP-SWAP Module ($2m = 10$) und 5-Qubit QFT ($m = 5$) verwendet. Die Dauer $\tau(\text{QFT}_{2k \cdot 5})$ kann durch einfaches Einsetzen in Gleichung (6.10) erhalten werden und die daraus resultierende Gesamtqualität errechnet sich zu

$$\begin{aligned}
 q_{\text{QFT}_{2k \cdot 5}} &= (F_{\text{QFT}_5})^{2k} (F_{\text{cP-SWAP}_{10}^1})^{2k-1} (F_{\text{cP-SWAP}_{10}^2})^{2k-2} \\
 &\quad \times (F_{\text{cP-SWAP}_{10}^3})^{\binom{2k}{2}-4k+3} e^{-\tau_{\text{QFT}_{2k \cdot 5}}/T_R}.
 \end{aligned} \tag{6.12}$$

Der Speed-up ist für dieses Szenario, verglichen mit der Implementierung von Blais [167], nur gering.

6.2.3 $C^n\text{NOT}$ auf L_{n+2}

Für das $C^n\text{NOT}$ auf der kompletten Topologie K_{n+2} existieren bereits Zerlegungen [171, 180–182]. Die in [171] gefundenen Strategien lassen sich nun auch ver-

wenden, um effizientere Zerlegungen auf linearen Kopplungstopologien zu erhalten. Interessant ist, dass dort unterschiedliche Zerlegungen für Fälle mit und ohne zusätzliche Qubits angegeben werden. Diese dienen intermediär als Arbeitsqubit, bleiben aber effektiv invariant. Im Folgenden soll die Standardzerlegung eines C^n NOT auf L_{n+2} in 1- und 2-Qubitgatter (wobei n ungerade sein soll) mit einer Zerlegung verglichen werden, die zeitoptimierte Module benutzt.

Beweis der C^n NOT Zerlegung

Das einfachste Beispiel für die Zerlegung eines C^n NOT in 4 C^m NOTs mit $m < n$ erhält man für das C^3 NOT. Dieses wird, wie in Abbildung 6.8 gezeigt, in 4 C^2 NOT (TOFFOLI) zerlegt [171]. Es gilt die Wirkung dieser Abfolge von Gattern zu untersuchen und zu zeigen, dass deren Gesamteffekt dem des C^3 NOT-Gatters entspricht. Wir untersuchen den Effekt auf die gesamte 2^5 -dimensionale Basis. Deren Zustände werden wie folgt ausgedrückt: $|x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\rangle$, wobei $x_k \in \{0, 1\}$. \oplus stellt im Folgenden eine Addition modulo 2 dar, d.h. $x_k \oplus x_k = 0$. Des Weiteren ist $x_k x_\ell$ ein einfaches skalares Produkt.

$$|a\rangle = |x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\rangle$$

$$|b\rangle = |x_1, x_2, x_3 \oplus x_1x_2, x_4, x_5\rangle$$

$$\begin{aligned} |c\rangle &= |x_1, x_2, x_3 \oplus x_1x_2, x_4, x_5 \oplus x_4(x_3 \oplus x_1x_2)\rangle \\ &= |x_1, x_2, x_3 \oplus x_1x_2, x_4, x_5 \oplus x_4x_3 \oplus x_1x_2x_4\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |d\rangle &= |x_1, x_2, x_3 \oplus x_1x_2 \oplus x_1x_2, x_4, x_5 \oplus x_4x_3 \oplus x_1x_2x_4\rangle \\ &= |x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \oplus x_4x_3 \oplus x_1x_2x_4\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |e\rangle &= |x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \oplus x_4x_3 \oplus x_4x_3 \oplus x_1x_2x_4\rangle \\ &= |x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \oplus x_1x_2x_4\rangle \end{aligned}$$

Der letzte Zustand zeigt, dass die Gesamtoperation der 4 Einzelgatter dem eines entsprechenden C^3 NOTs entspricht, was die Richtigkeit der Zerlegung in diesem Beispiel zeigt.

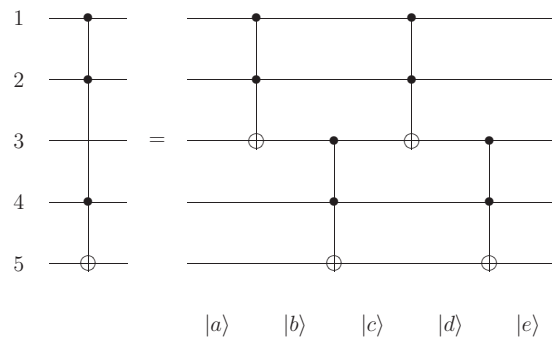


Abbildung 6.8: Zerlegung eines C^3 NOTs in TOFFOLI-Gatter.

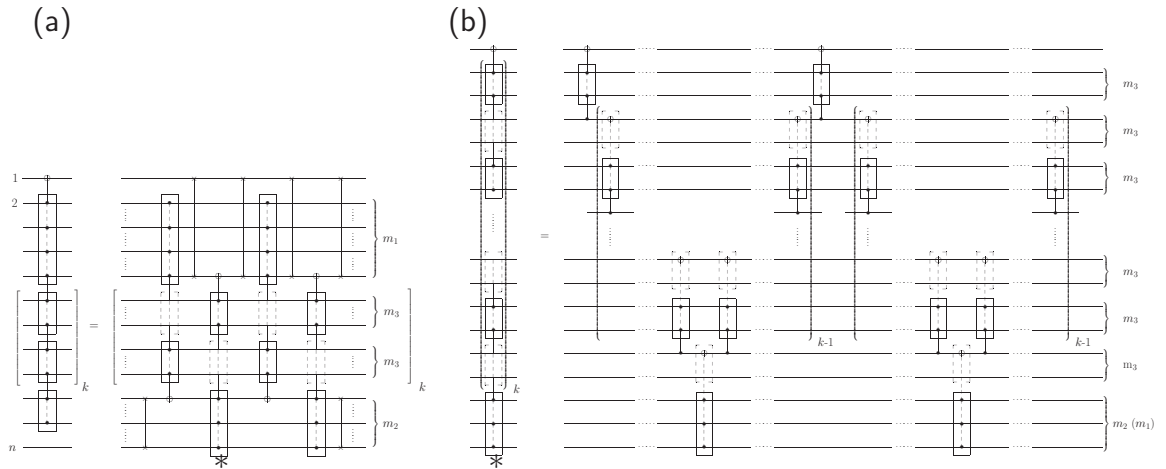


Abbildung 6.9: Zerlegung des C^{n-2} NOT-Gatters auf L_n -Kopplungstopologien: (a) Zerlegung in vier intermediäre Gatter mit weniger Kontrollqubits, sowie SWAP-Operationen und (b) Zerlegung der intermediären Gatter. Auf n -Qubitsystemen gibt es ein Arbeits- und ein Ancilla-, sowie $n-2$ Kontrollqubits. Daraus folgt, dass $m_1 + (m_2 - 1) + 2km_3 = n - 2$ mit $m_1, m_3 \geq 1$ und $m_2 \geq 2$. Die Klammern $[\cdot]_k$ stellen eine k -malige Wiederholung dar.

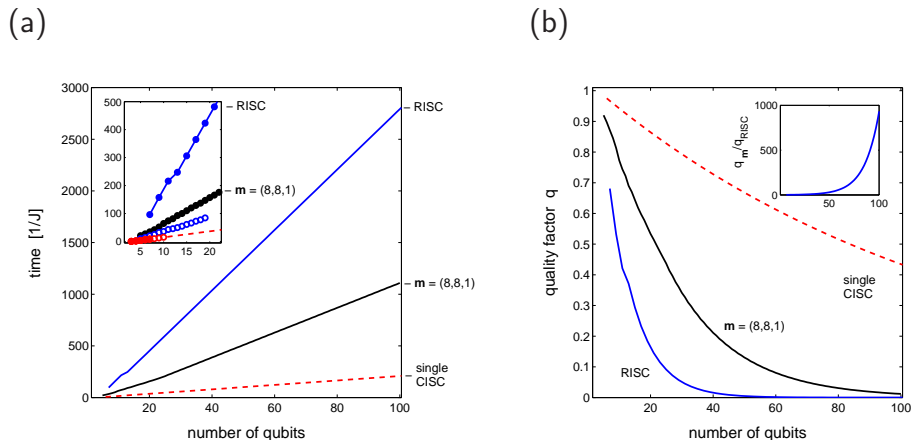


Abbildung 6.10: Vergleich der Implementierungen eines C^{n-2} NOTs auf L_n -Kopplungstopologien unter Verwendung der 2-Qubit Gatter CNOT und SWAP_{1,2} oder Multi-Qubit-Gattern. Die Anzahl der Kontrollqubits wird als $\mathbf{m} := (m_1, m_2, m_3)$ ausgedrückt. Die schwarze Kurve ergab sich unter Verwendung der Zerlegung in Abb. 6.9 und $k = 4, 5, 6, \dots$ mit $m_1 = 8$, $m_2 = 8$ (für ungerade n) bzw. $m_2 = 7$ (für gerade n). Weiter ist $m_3 = 1$. Die rote Kurve extrapoliert die zeitoptimierten Ergebnisse. Die blaue Kurve im Inset von Teil (a) ist eine nicht skalierbare Zerlegung, mit bis zu 19 Qubits.

Abbildung 6.9 liefert eine Verallgemeinerung des in Abbildung 6.8 vorgestellten Schemas: Zunächst wird in (a) die Anzahl der Kontrollqubits durch Einführen von k Blöcken mit jeweils m_3 invarianten Kontrollqubits reduziert. Dies geschieht durch vierfaches Auftreten der auf diese Weise reduzierten Module. In einem zweiten Schritt werden die reduzierten Module weiter zerlegt. Die entsprechenden Zeiten dieser Zerlegung sind in Abbildung 6.10 zusammengefasst.

6.3 Schlussfolgerungen

Die Rechnerleistung des Supercomputers HLRB-II wurde genutzt, um die Möglichkeiten rekursiver Zerlegungen von Quantengattern mit einer hohen Anzahl von Qubits auszuloten. Der bisherige Ansatz, sehr große Multi-Qubit-Gatter in 2-Qubitgatter und lokale Kontrollen zu zerlegen, wurde somit auf die Verwendung von zeitoptimierten Gattern mittlerer Größe erweitert. Es wurde gezeigt, wie solche zeitoptimierten Module zusammengefügt werden müssen, um daraus linear-skalierbare Zerlegungen für eben diese Multi-Qubit-Gatter zu erhalten. Ein solcher Ansatz ist deswegen notwendig, da einerseits die Zerlegungen in 2-Qubitgatter zu sehr langen Implementierungszeiten führen und andererseits das Problem für große Systeme nicht mehr numerisch handhabbar ist. Es wurden verschiedene Gattertypen untersucht: Indirekte SWAPS, die Quanten-Fourier-Transformation QFT und vielfach kontrollierte NOT -Gatter. Bei allen konnte eine Beschleunigung der Implementierung festgestellt werden. Die derzeitigen Speedups betragen zwischen 20% und einem Faktor 2.5.

Als interessanter Nebenaspekt wurde entdeckt, dass sich Fehler in den Einzelgattern bei Multi-Qubit-Gattern vorteilhafter fortpflanzen, verglichen mit solchen in 2-Qubitgattern. Dies unterstützt die Verwendung komplexer Gatter.

Obwohl bereits durch Beschleunigung der Implementierung durch Verwendung von Multi-Qubit-Gattern ein leistungsfähiges Mittel zur Dekohärenzbekämpfung gefunden wurde, kann durch ein Zusammenführen der Methoden der relaxationsoptimierten Gattersynthese und des hier vorgestellten rekursiven Ansatzes ein weiterer erheblicher Beitrag zur tatsächlichen Realisierung eines Quantencomputers geleistet werden. Es gilt allerdings zu bedenken, dass die Matrixdimension eines solchen Systems rapide wächst. Für ein relaxationsoptimiertes, 3 logische Qubit umfassendes, TOFFOLI-Gatter, wie es in der Zerlegung vielfach kontrollierter NOTs Verwendung finden würde, nähmen die entsprechenden Matrizen bereits die Größe 2^{12} an, also ein effektives 12 Qubitsystem³. Um eine solche Aufgabe zu bewältigen, bedarf es einer weiteren Optimierung des derzeit bestehenden

³Ein logisches Qubit entspricht, je nach Kodierung, mindestens zwei physikalischen Qubits. Durch Einbeziehung der Relaxationsoperatoren müssen alle Zeitevolutionsschritte im Superoperatorformalismus durchgeführt werden. Dies führt zu einer weiteren Quadrierung der Matrixdimensionen. Es werden also für 3 logische Qubits 6 physikalische benötigt und die Matrixdimension anschließend quadriert: $(2^{2 \times 3})^2 = 2^{12}$. Siehe hierzu auch Kapitel 7.

Programmcodes des GRAPE-Algorithmus.

Der Weg zur Optimierung auf dem Level der Zerlegungen unter Verwendung komplexer Multi-Qubit-Gatter wurde somit bereitet.

7 Relaxationsoptimierte Quantengatter

7.1 Einleitung

Quantensysteme zu benutzen, um aufwendige Berechnungen auszuführen, oder andere Quantensysteme [7, 186] zu simulieren, ist ein viel versprechendes Ziel: Durch die Verwendung von Quantenkohärenzen lässt sich die Komplexität des Problems in einigen Fällen reduzieren. Die Quantensysteme gegen dissipative Prozesse (“Dekohärenz”) zu schützen stellt eines der Hauptprobleme dar, wenn es darum geht kohärente Superpositionen als Schlüsselresource zu benutzen [187]. Bisher wurden dekohärenz-freie Unterräume untersucht [188] oder Bang-Bang-Kontrollen [189–191] vorgeschlagen, um das System von der dissipativen Wechselwirkung zur Umgebung zu entkoppeln. Ein weiterer Ansatz verwendet den Quanten-Zeno-Effekt [192], um das System gar nicht erst aus dem gewünschten Unterraum wandern zu lassen [193]. Ein Überblick wird in [194–196] gegeben.

Das Problem, ein Quantengatter relaxationsoptimiert zu realisieren, ist noch schwieriger: Es gilt, die Dekohärenz zu bekämpfen, während simultan alle Basiszustände gemäß dem Quantengatter in das lineare Abbild zu transformieren sind, welches den maximalen Überlapp mit dem Zielgatter hat.

In der Spektroskopie lässt sich ein Zustandstransfer dadurch optimieren, dass man eine Trajektorie entlang langsam relaxierender Richtungen des Liouville-Raumes wählt [197–199]. Im Quantencomputing muss jedoch eine gesamte Basis transformiert werden. Wählt man nun den gleichen Ansatz wie in der Spektroskopie, kann der Gewinn entlang der geschützten Richtungen durch die Verluste entlang der Ungeschützten aufgewogen werden. Dies muss aber nicht zwingend der Fall sein, da bei gewissen Problemen gar nicht alle Basisvektoren transformiert werden müssen.

Eine gegen Dekohärenz geschützte kodierte Basis muss also in einen größeren Liouville-Raum eines kodierenden physikalischen Systems eingebettet werden. Dies wiederum führt zu der Frage, in welchem Ausmaß das geschützte System durch die zur Verfügung stehenden Kontrollen kontrollierbar ist.

Der neue Superoperator-Gradienten-Algorithmus stellt sich in diesem Setting als eine wirkungsvolle Methode dar, die besten Approximationen an unitäre Quantengatter zu liefern. Des Weiteren erweitert er die Möglichkeiten der Quantenkontrolle, siehe z.B. [84, 125, 200–205].

7.2 Kontrollierbarkeit offener Quantensysteme

Die untersuchten Modellsysteme sind vollständig kontrollierbar [133, 158–161, 206], d.h. unter Vernachlässigung der Dekohärenz ist der ganze unitäre Orbit $U(\rho) := \{U\rho U^{-1} \mid U \text{ unitär}\}$ eines Ausgangsdichteoperators ρ durch Evolutionen unter dem Drifthamiltonian des Systems und den experimentell verfügbaren Kontrollen erreichbar. Weiter wird gezeigt, dass bestimmte Aufgaben vollständig in gewissen Unterräumen durchführbar sind.

7.2.1 Bewegungsgleichung

Um unitäre Gatter zu generieren, ist es notwendig ein simultanes lineares Abbild aller Basiszustände, die den ganzen oder einen Unterraum des Hilbertraums aufspannen, zu synthetisieren. Dies ist eine Verallgemeinerung einer typischen Aufgabe der Spektroskopie, wo nur ein gegebener Anfangszustand so transformiert wird, dass er einen maximalen Überlapp mit einem gewünschten Zielzustand hat.

Das Steuerungsproblem, diesen Überlapp zu maximieren, unter der Nebenbedingung, dass die Schrödinger-Gleichung (für geschlossene Systeme)

$$|\dot{\psi}\rangle = -iH |\psi\rangle \quad (7.1)$$

$$\dot{\rho} = -i[H, \rho] \equiv -i \text{ad}_H(\rho) \quad (7.2)$$

bzw. die Liouville-Gleichung (für offene Systeme)

$$\dot{\rho} = -(i \text{ad}_H + \Gamma) \rho \quad (7.3)$$

$$\dot{F}_{\text{Ad}_U} = -(i \text{ad}_H + \Gamma) \circ F_{\text{Ad}_U} \quad , \quad (7.4)$$

wobei Γ in der Lindblad-Form geschrieben wird

$$\Gamma(\rho) = \frac{1}{2} \sum_k \{2 V_k^\dagger \rho V_k - V_k^\dagger V_k \rho - \rho V_k^\dagger V_k\} \quad , \quad (7.5)$$

erfüllt ist, lässt sich mit dem GRAPE-Algorithmus [204] numerisch lösen. Verwendet man folgende Notation $\text{Ad}_U(\cdot) := U(\cdot)U^\dagger$, lässt sich die Operatorgleichung

$$\dot{U} = -iH U \quad (7.6)$$

$$\dot{\text{Ad}}_U = -i \text{ad}_H \circ \text{Ad}_U \quad (7.7)$$

benutzen, um Quantengatter $U(T)$ zu realisieren, welche eine maximale Spurqualität (i) $\text{Re tr}\{U_{\text{target}}^\dagger U(T)\}$ besitzen, falls die globale Phase eine Rolle spielt, oder (ii) $\text{Re tr}\{\text{Ad}_{U_{\text{target}}}^\dagger \text{Ad}_{U(T)}\}$, falls die globale Phase keine Rolle spielt.

F_{Ad_U} bezeichnet das kontraktive lineare Abbild aller Basiszustände des Liouville-Raums. Deren Dynamik wird durch die Superoperatorgleichung (7.4) und die Mastergleichung (7.3) beschrieben. Mit diesen Überlegungen lässt sich der GRAPE-Algorithmus auf die Superoperatorebene heben, um somit auch die Dynamik offener Systeme behandeln zu können. Für eine ausführlichere Beschreibung der Dynamik offener Quantensysteme sei auf Kapitel 2.3.2 verwiesen.

7.2.2 Kontrollierbarkeit des Modellsystems

Um die Fähigkeiten der Kontrolltheorie beim Schutz vor Dekohärenz zu untersuchen, konstruieren wir kodierte logische Qubits durch Einbettung in zwei physikalische Qubits $|0\rangle_L = |\psi^+\rangle$ und $|1\rangle_L = |\psi^-\rangle$. Die vier Bellzustände spannen einen Operatorraum $\mathcal{B} := \text{span}\{|\psi^\pm\rangle\langle\psi^\pm|, |\psi^\mp\rangle\langle\psi^\pm|\}$ auf, so dass jedes $\rho \in \mathcal{B}$ gegenüber dem gewählten Relaxationsprozess geschützt ist. Dies gilt nur im Rahmen des *slow-tumbling* Limits der Bloch-Redfield-Relaxation, d.h. der Relaxationssuperoperator nimmt folgende Form an: $\Gamma(\rho) := [A_{2,0}^\dagger, [A_{2,0}, \rho]] = [zz, [zz, \rho]] = 0$ ¹. Wenn die zwei Qubits nun durch eine Heisenberg- XX -Interaktion miteinander wechselwirken und der Kontrollterm die Form lokaler σ_z -Pulse, die gleichzeitig mit entgegengesetztem Vorzeichen auf beiden Qubits wirken, annimmt, erhält man ein vollständig kontrollierbares kodierte 1-Qubitsystem, da

$$\langle\{(xx + yy)/2, (z\mathbf{1} - \mathbf{1}z)/2, (yx - xy)/2\}\rangle \stackrel{\text{iso}}{=} \mathfrak{su}(2) \quad , \quad (7.8)$$

wobei $\langle\cdot\rangle$ die durch Kommutatorbildung generierte Algebra bezeichnet.

Wie in [208–210], erhält man ein voll kontrollierbares logisches 2-Qubit-System, wenn die Qubitpaare durch eine Ising- zz -Wechselwirkung gekoppelt werden. Dieses Setup sollte das Referenzsystem *System I* definieren, dessen Drifthamiltonian D_1 und die Kontrollen $C_{1,2}$ (mit nicht verschwindendem J_{xx} und J_{zz}) sich wie folgt beschreiben lassen:

$$D_1 := J_{xx}(xx\mathbf{1}\mathbf{1} + \mathbf{1}\mathbf{1}xx + yy\mathbf{1}\mathbf{1} + \mathbf{1}\mathbf{1}yy) + J_{zz}\mathbf{1}zz\mathbf{1} \quad (7.9)$$

$$C_1 := z\mathbf{1}\mathbf{1}\mathbf{1} - \mathbf{1}z\mathbf{1}\mathbf{1} \quad (7.10)$$

$$C_2 := \mathbf{1}\mathbf{1}z\mathbf{1} - \mathbf{1}\mathbf{1}\mathbf{1}z \quad . \quad (7.11)$$

Es lässt sich zeigen, dass $\langle\{D_1, C_1, C_2\}\rangle \stackrel{\text{iso}}{=} \mathfrak{su}(4)$ ist. Die durch vier physikalische Qubits kodierte reduzierbare Darstellung der $\mathfrak{su}(4)$ ist gegenüber T_2 -Relaxation geschützt, da sie auf den Liouville-Unterraum $\mathcal{B} \otimes \mathcal{B}$ beschränkt ist.

Erweitert man nun die Ising- zz -Interaktion zwischen den zwei Paaren zu einer isotropen Heisenberg- XXX -Interaktion, erhält man das, was hier *System II* heißen soll. Sein Drifthamiltonian

$$\begin{aligned} D_1 + D_2 &:= J_{xx}(xx\mathbf{1}\mathbf{1} + \mathbf{1}\mathbf{1}xx + yy\mathbf{1}\mathbf{1} + \mathbf{1}\mathbf{1}yy) \\ &\quad + J_{xyz}(\mathbf{1}xx\mathbf{1} + \mathbf{1}yy\mathbf{1} + \mathbf{1}zz\mathbf{1}) \end{aligned} \quad (7.12)$$

führt das System nun aus dem dekohärenz-geschützten Unterraum heraus. Die durch Drift- und Kontrollterme generierte Algebra ist nun 66-dimensional:

$$\dim\langle\{(D_1 + D_2), C_1, C_2\}\rangle = 66 \quad , \quad (7.13)$$

¹mit dem Spintensor $A_{2,0} := \frac{1}{\sqrt{6}}(\frac{3}{2}zz - \mathbf{I}_1\mathbf{I}_2)$ [207], wobei $zz := \sigma_z \otimes \sigma_z/2$ und außerdem $\mathbf{1}\mu\nu\mathbf{1} := \frac{1}{2}\mathbf{1}_2 \otimes \sigma_\mu \otimes \sigma_\nu \otimes \mathbf{1}_2$ für alle $\mu, \nu \in \{x, y, z\}$;

7 Relaxationsoptimierte Quantengatter

wobei $\mathfrak{su}(4)$ immer noch eine Unteralgebra ist. Die Dimension 66 entspricht der einer $\mathfrak{so}(12)$.

Des Weiteren erkennt man, dass $e^{-i\pi C_1}(D_1 + D_2)e^{i\pi C_1} = D_1 - D_2$. Unter Verwendung der *Trotter-Formel*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{-i(D_1+D_2)/(2n)} e^{-i(D_1-D_2)/(2n)} \right)^n = e^{-iD_1} \quad (7.14)$$

erkennt man sehr leicht, dass sich die Dynamik von (\vec{x}) im Limes unendlich vieler abwechselnder $C_{1,2}$ -Pulse auf die Dynamik von System I zurückführen lässt. In diesem “Entkopplungslimit” kann also auch in System II ein voll kontrollierbares logisches 2-Qubitsystem über der geschützten Basis $\mathcal{B} \otimes \mathcal{B}$ etabliert werden.

Im folgenden Kapitel werden die numerischen Resultate durch Kontrolltheorie mit alternativen Pulssequenzen, die auf einfache Weise durch die *Trotter-Formel* aufgebaut werden, verglichen. Als Beispielgatter sei das CNOT auf zwei logischen Qubits gewählt.

7.3 Erläuterung am Modellsystem

7.3.1 Vergleich der relaxations-, zeitoptimierten und einer Standardimplementierung

Um ein realistischeres Szenario zu erhalten, wird der Relaxationssuperoperator, der an den Dipol-Dipol-Relaxationssuperoperator für 2 Spins angelehnt ist, durch weitere Terme ergänzt. Diese sollen schwache T_1 - Prozesse verursachen. Die zusätzlichen Terme haben folgende Form:

$$\Gamma(\rho) := \sum_{m_1, m_2 = -1}^1 [A_{2, (m_1, m_2)}^\dagger, [A_{2, (m_1, m_2)}, \rho]] \quad (7.15)$$

wobei der Anteil der Tensoren 0. Ordnung $A_{2, (0,0)} \sim zz$ 100-mal stärker sein soll. Aus dem resultierenden Modelrelaxationssuperoperator berechnen sich die Relaxationszeiten zu $T_2^{-1} : T_1^{-1} = 4.027 \text{ s}^{-1} : 0.024 \text{ s}^{-1} \simeq 170 : 1$, während die Kopplungskonstanten zu $J_{xx} = 2 \text{ Hz}$ und $J_{xyz} = J_{zz} = 1 \text{ Hz}$ gesetzt werden.

In Abbildung 7.1 werden nun die verschiedenen Szenarien, ein CNOT zu approximieren, verglichen. Durch die dekohärenz-geschützten numerisch optimierten Kontrollen wird eine Qualität von 95% erreicht. Die zeitoptimierten Kontrollen hingegen zeigen eine breite Streuung: unter den 15 generierten Sequenzen sind mit Glück einige dabei, die Qualitäten um die 87% aufweisen, während andere nur 65 % erreichen. Nach dem Erreichen des Optimums fällt die Qualitätskurve vom oberen Limit ab. Dies kann mehrere Ursachen haben: Eine stellt die Schwierigkeit dar, auf diesem System einen Einheitspropagator $\mathbb{1}$ zu realisieren. Dies ist nicht für beliebig kleine Zeiten t möglich, da durch die verfügbaren Kontrollen der Drifthamiltonian nicht invertiert werden kann. Ein zunehmendes Vermischen

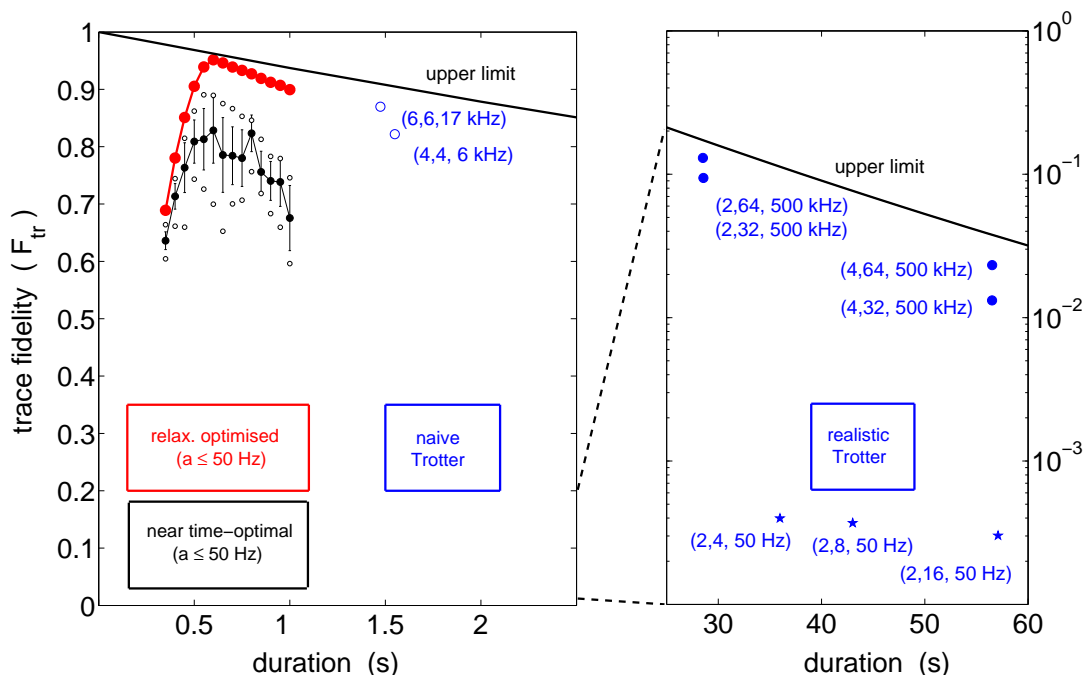


Abbildung 7.1: Qualität eines CNOT-Gatters, realisiert durch vier physikalische Qubits in unterschiedlichen Ansätzen: (●) durch numerische Kontrolltheorie unter expliziter Relaxation; (●) durch zeitoptimierte Kontrolltheorie, wobei eine starke Streuung der Qualitätsfaktoren auftritt, falls die Relaxation nachträglich eingeschaltet wird (die Intervalle sind der Durchschnitt \pm Standardabweichung für 15 gerechnete Pulssequenzen; \circ sind die besten bzw. schlechtesten Werte); (\circ) durch naiven *Trotter*-Ansatz, unter der Annahme, dass der inverse Drifthamiltonian instantan zu erhalten ist. (●) durch realistischen *Trotter*, wobei der inverse Drifthamiltonian explizit aus den zur Verfügung stehenden Operatoren generiert wird. Die Zahlen in Klammern geben die *Trotter*-Koeffizienten $n_{1,2}$ von Abbildung 7.3 und die maximalen Kontrollamplituden wieder. Die obere Grenze ist durch die langsame T_1 -Relaxation gegeben. Ohne Relaxation würden alle *Trotter*-Sequenzen Qualitäten zwischen 93 und 99 % ergeben, mit Ausnahme von (★). Hier wurden die Kontrollamplituden auf $a \leq 50$ Hz begrenzt: die Qualität fällt dann unter 0.1%.

der kleinen Eigenwerte und somit eine Annäherung an die untere Schranke der Qualität, gegeben durch Gleichung (2.57), stellt eine andere Möglichkeit dar.

In Abbildung 7.2 wird gezeigt, wie nun die dekohärenz-optimierten Kontrollen das System nahezu perfekt innerhalb des geschützten Unterraums halten, während unter nur zeitoptimierten Kontrollen dieser Unterraum zeitweise verlas-

7 Relaxationsoptimierte Quantengatter

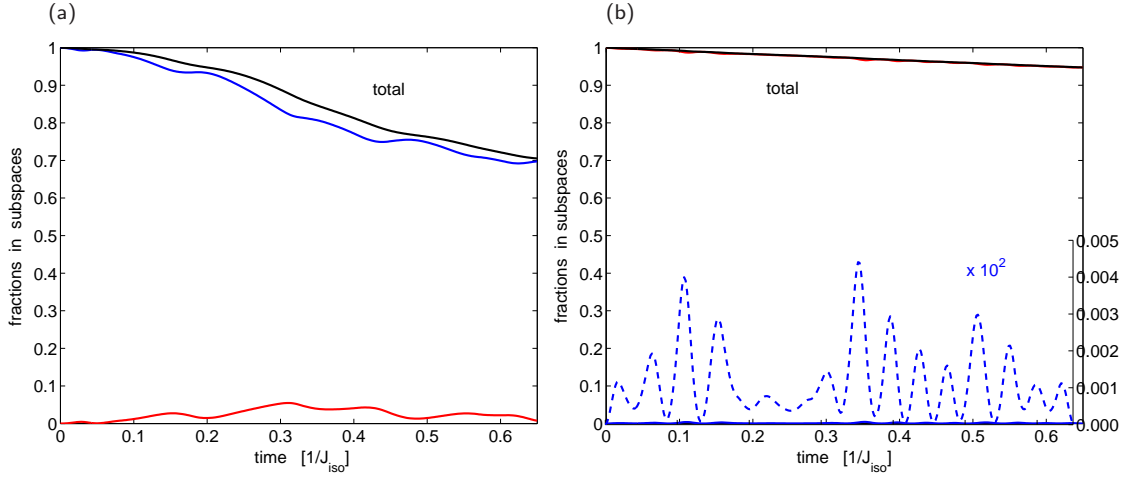


Abbildung 7.2: (a) Zeitverlauf aller geschützten Basiszustände während einer typischen zeitoptimierten Pulssequenz aus Abbildung 7.1. Gezeigt werden die Projektionen in den dekohärenz-armen und -reichen Anteil des Liouville-Raumes. (b) Die gleichen Projektionen für die dekohärenz-optimierten Pulssequenzen. Das System bleibt nahezu komplett im dekohärenz-armen Anteil des Liouville-Raumes.

sen wird und die Implementierung somit unter den dissipativen Effekten leidet.

Eine algebraische Alternative zu den numerischen Methoden der Kontrolltheorie benutzt die *Trotter*-Formel, um das System im armen Unterraum zu halten. Dieser Ansatz wurde auch in [211] benutzt. Die *Trotter*-Zerlegung soll im Einzelnen im Kapitel 12.4 des Appendix vorgestellt werden.

Bereits ein Blick auf Abbildung 7.3 zeigt, dass dieser Ansatz zwar machbar, aber sehr schnell sehr unübersichtlich wird. Unter der Annahme, dass neben H_d auch der inverse Drifthamiltonian $-H_d$ zur Verfügung steht (naiver *Trotter*-Ansatz), lassen sich Pulssequenzen konstruieren, die immer fast dreimal so lang wie die numerisch gefundene Lösung sind. Außerdem werden dort viel stärkere Amplituden verwendet (1 – 17 KHz an Stelle von 50 Hz).

In der Praxis jedoch muss auch der inverse Drifthamiltonian generiert werden. Da die Kontrollen nicht in der Lage sind H_d zu invertieren, soll dies durch die Periodizität von e^{-itH_d} erreicht werden. Die Eigenwerte von H_d im System II stehen jedoch nicht in einem ganzzahligen Verhältnis zueinander. Deshalb tritt keine Periodizität auf. Setzt man aber die Heisenberg- XX -Kopplung auf $J_{xx} = 2.23$ Hz, wird eine Periodizität erreicht. Man erhält dann nahezu perfekte Projektionen ($F_{\text{tr}} \geq 1 - 10^{-10}$) auf den inversen Drifthamiltonian des Systems II $U^{-1} := e^{+i\frac{\pi}{4}H_{(D_1+D_2)}}$ nach 3.98 s und auf $-U^{-1}$ nach 1.99 s. Durch Verwenden der Identität $\text{Ad}_{(-U^{-1})} = \text{Ad}_{(U^{-1})}$ kann die Dauer der Evolution unter U^{-1} auf 1.99 s verkürzt werden.

Eine realisierbare *Trotter*-Zerlegung dauert, selbst mit diesen Vereinfachungen,

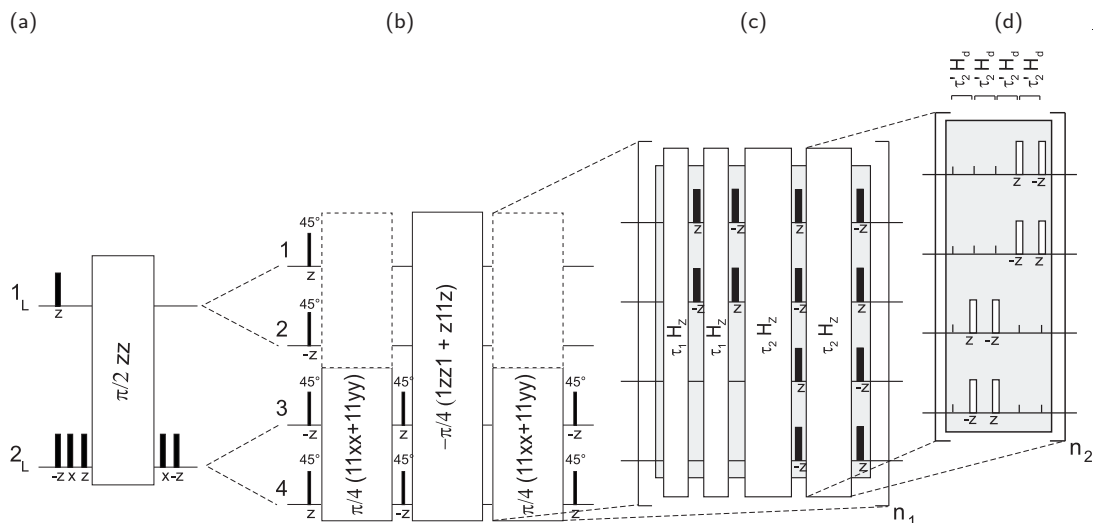


Abbildung 7.3: Alternative zur numerischen Kontrolltheorie: mühsame algebraische Ableitung der Kontrollen für ein CNOT im dekohärenzgeschützten Unterraum: Ausgehend von (a) zwei logische Qubits über (b) das schematisch-kodierte physikalische 4-Qubitsystem in die physikalische Realisierung durch (c) System I und anschließend (d) System II. Die schwarzen Boxen stellen lokale $\pi/2$ -Pulse dar, deren Phasen darunter angegeben sind (abweichende Rotationswinkel sind darüber angegeben); leere Boxen (in (d)) bezeichnen z -Rotationen mit Drehwinkel π . Der effektive Hamiltonian τH steht innerhalb der großen Boxen; n_1, n_2 sind die Tiefen der entsprechenden Trotter-Expansionen. Die effektiven Hamiltonoperatoren in (b) sind nur durch weitere kompliziertere Zerlegungen zu erhalten.

immer noch 28.5 s (bei einer Spurqualität von $F_{\text{tr}} \geq 94.1\%$ in Abwesenheit von dissipativen Effekten). Sobald nun leichte T_1 -Prozesse berücksichtigt werden, sind die Relaxationsratenkonstanten im dekohärenzgeschützten Unterraum nicht länger strikt Null (wie im Fall reiner T_2 -Relaxation). Sie überdecken hingegen einen Bereich $[0.019 \text{ s}^{-1}, 0.060 \text{ s}^{-1}]$. Als Konsequenz erreicht eine Trotter-Zerlegung der Dauer 28.5 s, unter diesen realistischen Bedingungen, nicht mehr als 15%, wohingegen die neuen numerischen Methoden Realisierungen mit bis zu 95% erlauben (sogar wenn $J_{xx} = 2.0 \text{ Hz}$).

7.3.2 Interpretation der Ergebnisse

Um die vorliegenden Resultate zu verstehen, greifen wir ein, in Kapitel 12.2.2 angesprochenes, Prinzip auf: Für ein Element H der $\mathfrak{su}(2)$ erhalten wir

$$e^{-i2\pi k H} = (-1)^k \mathbf{1}, \quad (7.16)$$

7 Relaxationsoptimierte Quantengatter

d.h. auf dieser $\mathbf{SU}(2)$ -Gruppe findet effektiv nur ein globaler Phasenshift statt. Betrachten wir weiter den Teil des Modellsystems, der für die Kopplung des relaxationsarmen Unterraumes mit dem relaxationsreichen Unterraum verantwortlich ist. Da Operationen unter $\{D_1, C_1, C_2\}$ den relaxationsarmen Unterraum invariant lassen, müssen die Komponenten in $D_2 = J_{xyz}(\mathbf{1}x\mathbf{1} + \mathbf{1}y\mathbf{1})$ dafür verantwortlich sein. Vernachlässigen wir im Folgenden die beiden endständigen Qubits. Es gilt also die Evolution unter D_2 effektiv zu entkoppeln. Dies geschieht durch eine Anpassung der Amplituden der zur Verfügung stehenden Kontrollen C_1, C_2 . Seien u_1 und u_2 die entsprechenden Kontrollamplituden. Da $C_{1,2}$ auch mit den planaren Wechselwirkungen zwischen Qubit 1 und 2, bzw. 3 und 4 interagiert, und deswegen ein gewisser Anteil auf diese Operationen entfällt, schreiben wir für den Hamilton-Operator $H_{arm/reich}$, der relaxationsarmen und relaxationsreichen Unterraum koppelt:

$$\begin{aligned} H_{arm/reich} &= (f(u_1)(z\mathbf{1}\mathbf{1}\mathbf{1} - \mathbf{1}z\mathbf{1}\mathbf{1}) + f(u_2)(\mathbf{1}\mathbf{1}z\mathbf{1} - \mathbf{1}\mathbf{1}\mathbf{1}z) + J_{xyz}(\mathbf{1}x\mathbf{1} + \mathbf{1}y\mathbf{1})) \\ &= (-2f(u_1)(z\mathbf{1})_{\log}/2 + 2f(u_2)(\mathbf{1}z)_{\log}/2 + 2J_{xyz}(xx + yy)_{\log}/2) . \end{aligned} \quad (7.17)$$

$f(a_k)$ sollen die effektiven Kontrollamplituden darstellen. Wählen wir für den Moment $f(u_1) = f(u_2) = f(u)$. Unter Verwendung von Gleichung (7.16) bzw. (5.5) bzw. (12.5) und Gleichung (7.8) bzw. (2.10) erhalten wir bei passender Wahl von $f(u)$ folgende Identität:

$$e^{-i\Delta t(-2f(u)(z\mathbf{1}-\mathbf{1}z)/2+2J_{xyz}(xx+yy)/2)} = (-1)^k \mathbf{1} . \quad (7.18)$$

Für die Parameter muss also

$$\sqrt{(2\Delta t f(u))^2 + (2\Delta t J_{xyz})^2} = 2\pi k , \quad (7.19)$$

mit $k \in \mathbb{N}$ gelten. Für ein festes J_{xyz} und Δt gibt es unendlich viele Möglichkeiten für $f(u)$. Man erhält somit einen Satz von Propagatoren, die alle eine perfekte Entkopplung vom relaxationsreichen Raum erlauben. Da fast jeder Satz von Quantengattern volle Kontrollierbarkeit zur Folge hat [65], stellt sich nun die Frage, wie die Elemente aus diesem Satz kombiniert werden müssen, um ein entsprechendes Gatter zu realisieren. Diese Zerlegung muss nicht zeitoptimiert sein.

Die erhaltene Pulssequenz lässt sich jetzt im Hinblick auf die erfolgte Interpretation analysieren. Man erwartet, dass durch die numerisch erhaltenen Pulse der relaxationsarme Unterraum nahezu vollständig vom relaxationsreichen Unterraum entkoppelt ist. In Figur 7.4 ist der effektive Übertrag vom armen in den reichen Unterraum dargestellt. Hohe Werte in der Mitte der Figur bedeuten einen hohen Übergang. Man erkennt für die relaxationsoptimierte Pulssequenz (●) einen deutlich geringeren Übertrag als für die zeitoptimierte Pulssequenz (■). Dennoch sind die Übergänge intensiver als erwartet. Das lässt sich jedoch durch Beimischung

von T_1 -Relaxation erklären. Dies führt dazu, dass alle Zustände des Systems, auch die relaxationsarmen, einem leichten Dissipationsprozess unterliegen. Eine Zerlegung in solche Kontrollamplituden, die Gleichung (7.19) erfüllen, kann zu sehr zeitaufwendigen Pulssequenzen führen und damit der T_1 -Relaxation zum Opfer fallen. Es gilt daher die Balance zwischen einer schnellen und einer relaxationsoptimierten Implementierung zu finden. Das erklärt die Abweichung der Kontrollamplituden in Figur 7.4.

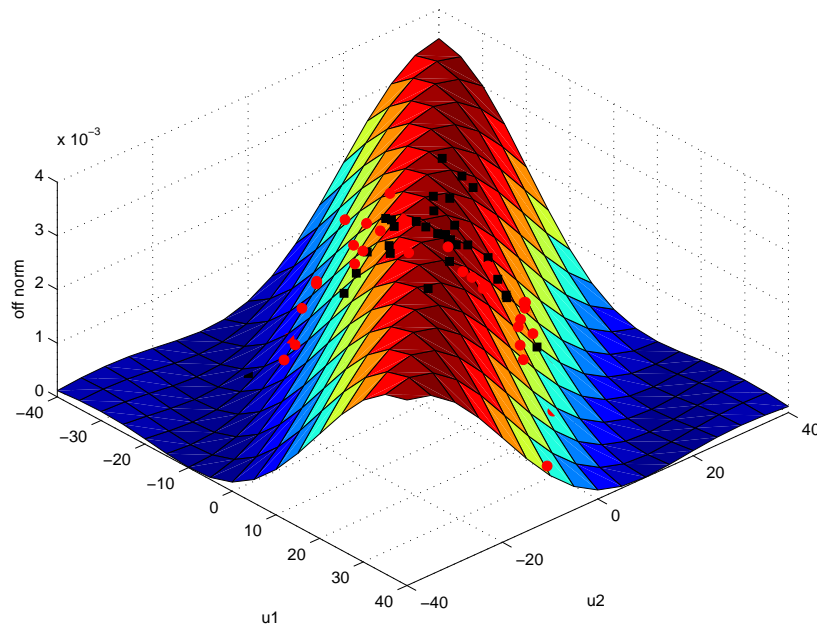


Abbildung 7.4: Übergang vom relaxationsarmen in den -reichen Unterraum für die einzelnen Zeitintervalle der relaxationsoptimierten (●) und der zeitoptimierten (■) Pulssequenz. Die relaxationsoptimierte Pulssequenz zeigt eine Tendenz zu Kontrollamplituden mit niedrigem Übertrag in den reichen Unterraum. Diese Tendenz ist aufgrund einer schnellen Implementierung jedoch nicht zu 100% ausgeprägt.

7.4 Schlussfolgerung

Es wurden kontrolltheoretische Werkzeuge vorgestellt, die es nun ermöglichen, optimierte Approximationen an die (projektiv) unitären Superoperatorarstellungen von Quantengattern zu finden [196]. Diese können nur approximiert werden, weil sie stets kontraktive lineare Abbilder einer gesamten kodierten Ausgangsbasis sind. Die Methoden stellen eine Erweiterung zur Optimierung von unitären

7 Relaxationsoptimierte Quantengatter

Superoperatoren [100,207] dar, wie sie bereits in der Quantenkontrolle, verwendet werden [84,205]. Der Fortschritt wird in einem typischen Modellsystem von vier physikalischen Qubits quantifiziert, die zwei logische Qubits kodieren:

Die neue Methode ist zeitoptimierten Realisierungen systematisch und signifikant überlegen. Dieser Vorteil kann allerdings nur ausgenutzt werden, wenn die Mastergleichung des Systems bekannt ist. Sollte dies nicht der Fall sein, kann ein Satz von 10 – 20 zeitoptimierten Sequenzen dennoch Sequenzen mit akzeptabler Qualität enthalten; er muss aber nicht.

Aus der Kontrollierbarkeitsanalyse folgt, dass eine *Trotter*-Zerlegung möglich ist, um ein Quantengatter komplett im dekohärenz-geschützten Unterraum zu realisieren. Hohe Qualitäten werden allerdings nur im Fall unendlich vieler und endlich schneller Pulse erreicht. Da in realistischen Szenarien, bei denen notwendige inverse Kopplungsevolutionen erst erzeugt werden müssen, diese Zerlegungen sehr zeitaufwendig werden, führen auch kleine T_1 -Relaxationsratenkonstanten im dekohärenz-geschützten Unterraum zu nicht akzeptablen Qualitäten.

Ist der Relaxationssuperoperator also bekannt, sollten diese neuen kontrolltheoretischen Werkzeuge als Optimierungsmethode gewählt werden. Dieser Ansatz ist anwendbar für alle Spin- und Pseudo-Spin-Systeme und sollte deshalb eine breite Anwendung in der praktischen Quantenkontrolle finden, wenn es darum geht Dekohärenzeffekte zu minimieren.

Um nun die neuen Methoden gewinnbringend bei der Kontrolle offener Systeme einzusetzen, sollten (i) die Relaxationsmechanismen der konkreten Quantenarchitekturen besser verstanden, und (ii) deren Parameter mit genügender Genauigkeit gemessen werden können.

8 Analytische optimierte Implementierungen

8.1 Indirekte Kopplung bzw. (1,3) CNOT auf der L_3 -Topologie

8.1.1 Einleitung

Für zwei Ising-gekoppelte Qubits mit instantanen Kontrollen sind zeitoptimierte Resultate für alle Propagatoren bekannt [71, 77, 212, 213]. Analytische Lösungen auf einer linearen 3-Spintopologie sind Gegenstand dieses Kapitels. Um diese Aufgabe zu lösen, bilden wir sie auf eine andere ab: Das Problem zeitoptimierte Quantengatter zu synthetisieren, wird auf das geometrische Problem, kürzeste Pfade in der Gruppe unitärer Transformationen unter bestimmten Metriken zu finden [77, 78, 214], abgebildet. Die numerischen Ergebnisse aus Kapitel 5.3.3 dienen hierzu als Leitlinien, da sie als obere Abschätzungen für die wirklichen minimalen Zeiten zu gebrauchen sind.

Die optimierten Pulssequenzen können dann durch explizite Berechnung der Geodäten erhalten werden. Die Metrik trägt der Tatsache Rechnung, dass nur ein beschränkter Satz von Hamiltonians aus den zur Verfügung stehenden Drift- und Kontrolltermen generiert werden kann. Diese Analogie wurde bereits an anderer Stelle benutzt, um Optimierungsprobleme dynamischer Systeme zu lösen [215–217].

Im Folgenden soll die Metrik untersucht werden, welche bei der Synthese indirekter Ising-Kopplungen in einer linearen 3-Spinkette auftritt. Solche Kopplungen treten sowohl im Quantencomputing, als auch in der kohärenten Spektroskopie auf. Beispiele sind 2-Qubit-Gatter zwischen entfernten Qubits [14, 218] und die Vermittlung von Kopplungen zwischen Spins durch Elektronen [219]. Multidimensionale NMR-Experimente benötigen ebenfalls schnelle Implementierungen indirekter Kopplungen, um hochaufgelöste Spektren zu erhalten [207]. Wie bereits in Kapitel 5.3.3 gesehen, besitzen solche indirekten Gatter, auf konventionelle Weise synthetisiert, eine zeitaufwendige Implementierung.

8.1.2 Theorie

Eine Geodäte ist ein kürzester Pfad zwischen zwei Punkten in einem gekrümmten Raum. Beispiele für Geodäten, die zwei Punkte in der Ebene verknüpfen, sind, unter der euklidischen Standardmetrik $(dx)^2 + (dy)^2 + (dz)^2$, Geraden. Geodäten auf Sphären sind die Großkreise. Im Folgenden sollen Geodäten auf einer Sphäre unter der Metrik $g = \frac{(dx)^2 + (dz)^2}{y^2}$ untersucht werden (auf einer Einheitskugel, zudem gilt $y^2 = 1 - x^2 - z^2$).

Die durchgezogene Linie in Abbildung 8.1 zeigt den kürzesten Pfad, der den Nordpol der Sphäre $(1, 0, 0)$ mit dem Punkt $(0, \cos \phi, \sin \phi)$ auf dem Äquator, unter der Metrik g verbindet. Die gestrichelte Linie zeigt den kürzesten Weg unter der Standardmetrik. Für $\phi = \frac{\pi}{4}$, ist, unter g , die Länge L der Geodäte

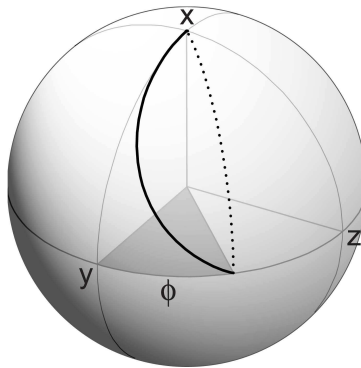


Abbildung 8.1: Die durchgezogene Linie zeigt den kürzesten Pfad, der den Nordpol der Sphäre $(1, 0, 0)$ mit dem Punkt $(0, \cos \phi, \sin \phi)$ auf dem Äquator, unter Metrik g verbindet. Die gestrichelte Linie zeigt den kürzesten Weg unter der Standardmetrik.

0.627π (im Gegensatz zu $\frac{\pi}{2}$ unter der Standardmetrik). Die beiden Situationen sind in Abbildung 8.1 visualisiert.

Die Berechnung der Geodäten unter g soll auch helfen, Techniken zu entwickeln, die es erlauben, andere zeitoptimierte Gatter im 63-dimensionalen Raum speziell-unitärer Rotationen auf 3 schwach gekoppelten Qubits mit linearer Kopplungstopologie zu synthetisieren. Die Kopplungskonstanten bei einer linearen 3-Spinkette sind $J_{12} = J_{23} = J$ und $J_{13} = 0$, s. Abbildung 8.2(A). Der Drifthamiltonian schreibt sich als

$$H_{drift} = \pi J(2I_{1z}I_{2z} + 2I_{2z}I_{3z}).$$

Die Stärke der Kopplungen limitiert die Zeit, die benötigt wird, um das Quantengatter zu synthetisieren. Abbildung 8.2(B) zeigt das Energieniveaudiagramm und die Übergänge, die ein $(1,3)$ CNOT¹ zwischen dem ersten und dritten Qubit

¹Die Dauer des $(1,3)$ CNOT wird durch den Term $e^{-i\frac{\pi}{2}2I_{1z}I_{3z}}$ bestimmt, welcher lokal ähnlich

8.1 Indirekte Kopplung bzw. (1,3) CNOT auf der L_3 -Topologie

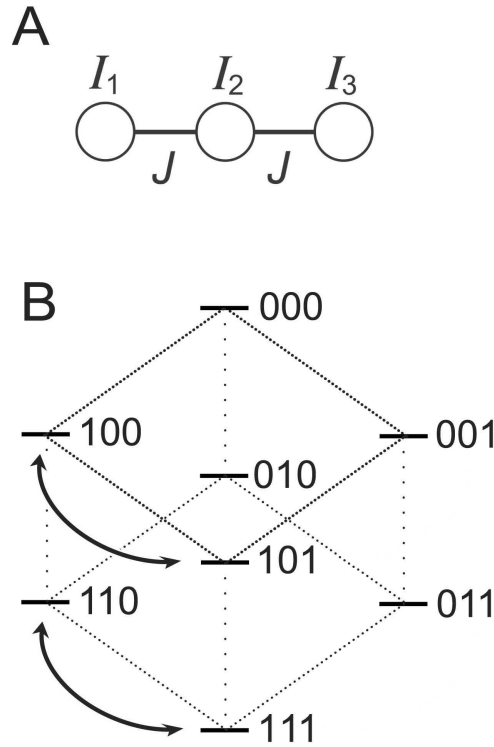


Abbildung 8.2: (A) zeigt die Kopplungstopologie des Spinsystems. (B) zeigt das Energieniveaudiagramm des Spinsystems in einem statischen Magnetfeld entlang der z -Achse. 1 und 0 sind hoch- und niederenergetische Eigenzustände des Drehimpulsoperators in z -Richtung. Der Effekt des (1,3) CNOT ist ebenfalls deutlich gemacht: Die durchgezogenen Pfeile symbolisieren die entsprechenden Übergänge.

mit sich brächte: Der Zustand von Qubit 3 wird invertiert, wenn Qubit 1 im niederenergetischen Zustand ist.

In der Literatur gibt es eine Reihe von Zerlegungen dieses Gatters. Sie benötigen Zeiten von maximal $3.5 J^{-1}$ bis zu $2.5 J^{-1}$ [220]. Das Hauptresultat dieses Abschnitts ist, dass das (1,3) CNOT in nur $\frac{2L}{\pi J}$ erreicht werden kann, wobei L die Länge der Geodäte unter g für $\phi = \frac{\pi}{4}$ ist. Dies ist doppelt so schnell wie die schnellste bekannte konventionelle Implementierung.

Die Hauptideen sind die Folgenden: Der unitäre Propagator eines CNOTs ist

$$(1,3) \text{ CNOT} = \exp\left\{-i\frac{\pi}{2} \left(2I_{1z}I_{3x} - I_{1z} - I_{3x} + \frac{1}{2}\mathbf{1}\right)\right\}. \quad (8.1)$$

Dieses Gatter ist lokal äquivalent, und somit im Limit unendlich schneller Pulse

zu $e^{-i\frac{\pi}{2}2I_{1z}I_{3z}}$ ist.

8 Analytische optimierte Implementierungen

auch zeitlich äquivalent zu

$$U_{13}^s = \exp\left\{-i\frac{\pi}{2}(I_{1z} + I_{3z} + 2I_{1z}I_{3z})\right\}.$$

Zudem ist es auch symmetrisch in Bezug auf die Permutation von Qubit 1 und 3. Um U_{13}^s zu synthetisieren, versuchen wir einen Hamiltonian zu designen, der alle Quantenzustände in der gleichen Art und Weise transformiert wie U_{13}^s . Das unitäre Gatter U_{13}^s transformiert die Produktoperatoren $I_{1\alpha}$ und $I_{3\alpha}$, mit $\alpha \in \{x, y\}$ zu $-2I_{1\alpha}I_{3z}$ und $-2I_{1z}I_{3\alpha}$.

Da $I_{1x,1y}$ und $I_{3x,3y}$ von U_{13}^s symmetrisch transformiert werden, versuchen wir den Propagator U_{13}^s durch Variation der Evolutionsdauer von H_{drift} und den Kontrollen auf dem mittleren Spin zu erhalten. Der Vorteil, sich nur auf zwei Kontrollparameter zu beschränken, liegt darin, dass diese bereits genügen, um I_{1x} auf seinen Zielzustand $-2I_{1x}I_{3z}$ zu transformieren. Andere Produktoperatoren aus $\{I_{1\alpha}, I_{3\beta}, 2I_{1\alpha}I_{3\beta}\}$ evolvieren dann automatisch zu ihren entsprechenden Zielzuständen. Der Ansatz kann in folgende Schritte zerteilt werden:

- I. Das ursprüngliche Problem eines effizienten Transfers von I_{1x} nach $-2I_{1x}I_{3z}$ im 63-dimensionalen Operatorraum der $\mathfrak{su}(2^3)$ kann auf ein Problem in einem 6-dimensionalen Unterraum \mathcal{S} reduziert werden. \mathcal{S} wird von den Operatoren I_{1x} , $2I_{1y}I_{2z}$, $2I_{1y}I_{2x}$, $4I_{1y}I_{2y}I_{3z}$, $4I_{1y}I_{2z}I_{3z}$, und $2I_{1x}I_{3z}$ aufgespannt. Der Unterraum \mathcal{S} ist der kleinste, in dem I_{1x} und $-2I_{1x}I_{3z}$ durch H_{drift} und lokale I_x - und I_y -Kontrollen auf dem zweiten Spin verknüpft sind, d.h. Propagatoren der Art $U = e^{-i\tau(u_a I_{2y} + u_b I_{2x} + \pi J(2I_{1z}I_{2z} + 2I_{2z}I_{3z}))}$ bilden diesen Vektorraum auf sich selber ab.
- II. Der 6-dimensionale Raum wird in zwei unabhängige, aber äquivalente, 4-dimensionale Räume zerlegt. In diesen werden dann zeitoptimierte Kontrollen für zwei, noch zu erläuternde, Teilprobleme gesucht.
- III. Schließlich wird gezeigt, dass die Lösung dieser zeitoptimierten Kontrollprobleme zu der Berechnung kürzester Pfade unter der Metrik g äquivalent ist.

In Schritt (I) wird jeder Operator im 6-dimensionalen Unterraum \mathcal{S} des 63-dimensionalen Operatorraumes als Vektor x im \mathbb{R}^6 mit den Koordinaten $x = (x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)$ dargestellt. Die x_k können als Erwartungswerte berechnet werden: $x_1 = \langle I_{1x} \rangle$, $x_2 = \langle 2I_{1y}I_{2z} \rangle$, $x_3 = \langle 2I_{1y}I_{2x} \rangle$, $x_4 = \langle 4I_{1y}I_{2y}I_{3z} \rangle$, $x_5 = \langle 4I_{1y}I_{2z}I_{3z} \rangle$, und $x_6 = -\langle 2I_{1x}I_{3z} \rangle$.

Durch eine Evolution unter dem Drifthamiltonian und konstanter Einstrahlung auf den mittleren Kern aus der y -Richtung ($H_a = u_a(t)\pi JI_{2y}$) werden die ersten vier Komponenten $x'_A = (x_1, x_2, x_3, x_4)$ des Vektors ineinander überführt.

8.1 Indirekte Kopplung bzw. (1,3) CNOT auf der L_3 -Topologie

Eine Evolution unter dem Driftheamiltonian und konstanter Einstrahlung auf den mittleren Kern aus der x -Richtung ($H_b = u_b(t)\pi J I_{2x}$) transformiert die letzten vier Komponenten $x'_B = (x_3, x_4, x_5, x_6)$ auf sich selber. Die Bewegungsgleichung von x_A und x_B nimmt bei konstanter Einstrahlung während einer Koppelungsevolution stets die folgende Form an:

$$\frac{dx_{A,B}}{dt} = \pi J \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -u_{A,B} & 0 \\ 0 & u_{A,B} & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} x_{A,B}. \quad (8.2)$$

Daraus motiviert sich eine Abfolge von Transformationen, die I_{1x} , was $x_A = (1, 0, 0, 0)$ entspricht, nach $-2I_{1x}I_{3z}$, was $x_B = (0, 0, 0, 1)$ entspricht, überführt:

- (a) Transformation von $(1, 0, 0, 0)$ nach $(0, x'_2, x'_3, \frac{1}{\sqrt{2}})$ in System A mit $\sqrt{x_2'^2 + x_3'^2} = \frac{1}{\sqrt{2}}$.
- (b) Transformation von $(0, x'_2, x'_3, \frac{1}{\sqrt{2}})$ nach $(0, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}})$ in System A, was $(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0, 0)$ in System B entspricht.
- (c) Transformation von $(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0, 0)$ nach $(\frac{1}{\sqrt{2}}, x'_3, x'_2, 0)$ in System B.
- (d) Transformation von $(\frac{1}{\sqrt{2}}, x'_3, x'_2, 0)$ nach $(0, 0, 0, 1)$ in System B.

Die Transformationen (b) und (c) werden durch lokale I_x - und I_y -Rotationen auf dem mittleren Spin dargestellt: Transformation (b) wird durch einen harten θ_y Puls erreicht, wobei $\tan \theta = x'_2/x'_3$. Ebenso wird Transformation (c) ausgeführt, nur diesmal wird um die lokale x -Achse des mittleren Spins gedreht. Aufgrund der Symmetrie der beiden Systeme A und B sind die beiden Transformationen (a) und (d) äquivalent und benötigen dieselbe Zeit. Das gesamte Problem lässt sich also auf die Frage reduzieren, welche Kontrollen in den 4-dimensionalen Unterräumen A und B zeitoptimiert sind: Welches $u_A(t)$ erreicht den maximalen Transfer in minimaler Zeit? Die ausführliche Analyse wird in [221] beschrieben. Festgehalten soll hier nur werden, dass $u_A(t) = u$ konstant sein muss.

Die beiden zu bestimmenden Parameter u und τ werden numerisch bestimmt. Es gibt mehr als eine Kombination, die den unter (a) beschriebenen Transfer vollführt. Diejenige mit dem kleinsten Wert für τ soll gewählt werden. Man erhält $\tau = 0.627J^{-1}$ und $u_A(t) = u_B(t) = u = 1.04$. Evolviert Gleichung (8.2) mit τ und $u = 1.04$, erhält man für $\theta(\tau) = \tan^{-1} \frac{x'_2}{x'_3} = 0.5476$. U_{13}^g baut sich somit wie folgt auf:

$$U_{13}^g = \Pi_x \exp\{-i\theta I_{2x}\} \exp\{-i\theta I_{2y}\} \Pi_y \quad (8.3)$$

mit $\Pi_{x,y} = \exp\{-i\pi J\tau [2I_{1z}I_{2z} + 2I_{2z}I_{3z} + uI_{2x,2y}]\}$.

8 Analytische optimierte Implementierungen

Die entsprechende Pulssequenz lässt sich leicht aus Gleichung (8.3) ablesen. Sie besteht aus einem konstanten I_y -Puls auf Spin 2 der Amplitude $\nu_a = uJ/2 = 0.52J$ für eine Dauer $\tau = 0.627J^{-1}$, gefolgt von einem I_y - und anschließend einem I_x -Puls mit einem Drehwinkel um jeweils $\theta = 0.5476$, was 31.4° entspricht. Zuletzt folgt ein weiteres konstantes Einstrahlen auf Spin 2, mit denselben Parametern wie zu Beginn. Die Gesamtdauer der Pulssequenz beträgt somit $T = 2\tau = 1.253J^{-1}$ und deckt sich perfekt mit den numerisch erhaltenen Resultaten. Zusammen mit den lokalen Transformationen U_a^{loc} , U_b^{loc} , und U_c^{loc} erhalten wir das CNOT als:

$$(1,3) \text{ CNOT} = U_c^{loc} U_b^{loc} U_{13}^g U_a^{loc}.$$

Die einzelnen Gatter sind

- $U_a^{loc} = \exp\{-i\frac{\pi}{2}I_{3y}\}$,
- $U_b^{loc} = \exp\{i(\pi - \theta)I_{2y}\} \exp\{i(\pi - \theta)I_{2x}\} \exp\{i\frac{\pi}{2}(I_{1z} + I_{3z})\}$ und
- $U_c^{loc} = \exp\{-i\frac{\pi}{2}(I_{1z} - I_{3z})\} \exp\{-i\frac{\pi}{2}I_{3x}\}$.

Weiter gilt:

$$U_{13} = \exp\{-i\frac{\pi}{2}(2I_{1z}I_{3z})\} = U_b^{loc} U_{13}^g. \quad (8.4)$$

8.1.3 Diskussion

Nun soll die vorgestellte Synthese des (1,3) CNOT mit konventionellen Zerlegungen verglichen werden. Der einfachste Weg (**C1**), ein indirektes CNOT zu konstruieren, besteht darin zunächst Spin 1 und 2, mittels eines (1,2) SWAP zu vertauschen, anschließend das (2,3) CNOT auszuführen und zurückzuswappen, also (1,3) CNOT = (1,2) SWAP (2,3) CNOT (1,2) SWAP. Dies benötigt, zweimal $1.5J^{-1}$ für die SWAP s und weitere $0.5J^{-1}$ [77] für das CNOT, in der Summe also $3.5J^{-1}$ [220].

Da angenommen wird, dass lokale Operationen ohne Zeitverlust ablaufen, ist die Konstruktion von $U_{13} = \exp\{-i\pi I_{1z}I_{3z}\}$ der zentrale Schritt auf dem Weg zum (1,3) CNOT. Die Standardmethode führt über den Weg des trilinearen Propagators $U_{zzy} = \exp\{-i\frac{\pi}{2} 4I_{1z}I_{2z}I_{3y}\}$ und benutzt folgende Identität:

$$U_{13} = \exp\{-iH_1\} U_{zzy} \exp\{iH_1\}, \text{ und}$$

$$U_{zzy} = \exp\{-iH_2\} \exp\{-i\frac{\pi}{2} 2I_{1z}I_{2y}\} \exp\{iH_2\},$$

wobei $H_1 = \frac{\pi}{2} 2I_{2z}I_{3x}$ und $H_2 = \frac{\pi}{2} 2I_{2x}I_{3y}$. In der Summe wäre diese Sequenz $2.5J^{-1}$ lang [220], was einer Verkürzung der Dauer auf 71.4% verglichen mit (**C1**) entspricht.

Diese Zeit kann weiter reduziert werden, wenn man eine bessere Implementierung für den trilinearen Term U_{zzy} benutzt [78]. Man betrachte hierzu

$$U_{zzy} = \exp\{i\frac{\pi}{2} I_{2z}\} \exp\{-iH_{3x}\} \exp\{-i2H_{3y}\} \exp\{iH_{3x}\},$$

8.1 Indirekte Kopplung bzw. (1,3) CNOT auf der L_3 -Topologie

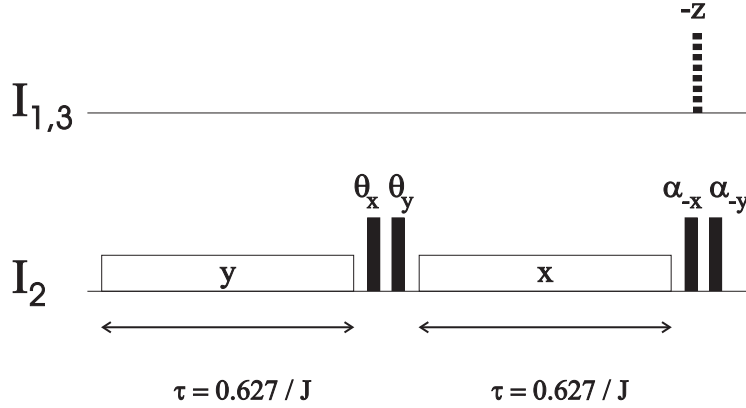


Abbildung 8.3: Effiziente Pulssequenz, basierend auf sub-Riemann'schen Geodäten für die Implementierung von $U_{13} = \exp\{-i\frac{\pi}{2} 2I_{1z}I_{3z}\}$. Dieser unitäre Propagator ist lokal äquivalent zum (1,3) CNOT. Die Gesamtdauer der Implementierung beträgt $T_C^* = 2\tau = 1.253 J^{-1}$. Die Amplituden der schwachen Pulse (dargestellt durch die Boxen) mit einer Dauer von $\tau = 0.627 J^{-1}$ ist $\nu_a = uJ/2 = 0.52 J$. Die Flipwinkel der harten Pulse sind $\theta = 31.4^\circ$ und $\alpha = 180^\circ - \theta = 148.6^\circ$.

wobei $H_{3\alpha} = \frac{\pi}{4}(2I_{1z}I_{2\alpha} + 2I_{2\alpha}I_{3y})$, mit $\alpha \in \{x, y, z\}$. Die Dauer reduziert sich somit auf $2J^{-1}$ (**C3**).

Selbst diese Zeit kann weiter unterboten werden, wenn nun zeitoptimierte Realisierungen benutzt werden: Für U_{zzy} erhalten wir eine minimale Zeit von $\sqrt{3}/(2J)$ [78]. Die entsprechende Zerlegung von U_{zzy} ergibt sich zu:

$$U_{zzy} = \exp\{i\frac{\pi}{2} I_{2z}\} \exp\{-i\frac{\sqrt{3}\pi}{2} (2I_{1z}I_{2x} + 2I_{2x}I_{3y} + \frac{2}{\sqrt{3}}I_{2z})\} \exp\{-i\frac{3\pi}{2} I_{2z}\}. \quad (8.5)$$

Tabelle 8.1: Dauer τ der verschiedenen Implementierungen von (1,3) CNOT

Pulssequenz	τ/J^{-1}	relative Dauer
Sequenz 1 (C1)	3.5	100%
Sequenz 2 (C2)	2.5	71.4%
Sequenz 3 (C3)	2.0	57.1 %
Sequenz 4 (C4)	1.866	53.3 %
Sequenz 5 (C5)	1.253	38.8 %

Diese Zerlegung benötigt nur noch $(2 + \sqrt{3})/(2J) = 1.866/J$ (C4) für das (1,3) CNOT.

All diese Zerlegungen sind aber immer noch langsamer als die erarbeitete (C5), s. Abbildung 8.3. Alle Zerlegungen sind in Tabelle 8.1 zusammengefasst.

8.2 Planare trilineare Wechselwirkung

Für einige Propagatoren kennt man über einen ganzen Bereich von Drehwinkeln analytische Resultate. Ein solches Beispiel ist $e^{-i\phi zzz}$ auf einer schwach gekoppelten linearen 3-Spinkette [78]. Ein weiteres Beispiel soll nun vorgestellt werden. Der untersuchte Propagator ist $e^{-i\phi(xzx+yzzy)}$, also die Summe zweier kommutierender trilinearere Propagatoren, wiederum implementiert auf einer linearen Topologie. Der Wertebereich sei $\phi = [0, \frac{\pi}{2}]$.

Eine Zerlegung des Propagators in zwei Komponenten würde nach [78] eine Zeitkomplexität von

$$\tau(\phi)/J = 2\sqrt{\phi(2-\phi)} \quad (8.6)$$

aufweisen. Es kann jedoch durch einen entsprechend gewählten Ansatz eine weitere Beschleunigung der Implementierung erreicht werden. Dieser soll nun vorgestellt werden. Die Synthese erfolgt in drei Schritten:

(1.) Zunächst schreiben wir einen effektiven Hamilton-Operator als

$$H_{eff} = \sin(\beta) \frac{1}{\sqrt{2}} (xx1 + 1xx + yy1 + 1yy) + 2 \cos(\beta) 1z1, \quad (8.7)$$

also eine Einstrahlung auf dem mittleren Spin aus der z -Richtung, während das System unter einer planaren Kopplung evolviert. Wir erhalten somit

$$U_1 = e^{-i\pi H_{eff}} = e^{-i\pi \left(\sin(\beta) \frac{1}{\sqrt{2}} (xx1 + 1xx + yy1 + 1yy) + 2 \cos(\beta) 1z1 \right)}. \quad (8.8)$$

(2.) Als nächstes wenden wir einen z -Puls auf alle Spins an. Der dafür erforderliche Propagator ergibt sich zu:

$$U_2 = e^{-i\frac{\pi}{2} \cos(\beta) (21z1 + z11 + 11z)}. \quad (8.9)$$

(3.) Der so erhaltene Propagator stimmt nun bis auf einen weiteren von ϕ unabhängigen Korrekturterm mit dem Zielpropagator überein. Der Korrekturterm ist:

$$U_3 = e^{-i\pi \left(zzz - \frac{1}{2} (z11 + 11z) \right)}. \quad (8.10)$$

Dieser Korrekturterm kann instantan implementiert werden, da die erforderliche trilineare Komponente keine Zeit kostet. Das lässt sich durch folgende Idnetitäten zeigen:

$$e^{-i\pi(zzz)} = ie^{-i\pi(1zz+11z)} = -e^{-i\pi(z11+1z1+11z)}. \quad (8.11)$$

8.2 Planare trilineare Wechselwirkung

Es treten also effektiv nur lokale Operationen und globale Phasen auf.

Setzen wir alle Teilpropagatoren zusammen, erhalten wir:

$$U_{total} = U_1 U_2 U_3 = e^{-i\frac{\pi(\cos(\beta)+1)}{2}(xx+yy)}, \quad (8.12)$$

wobei $\phi = \frac{\pi(\cos(\beta)+1)}{2}$. Im Falle einer schwach gekoppelten 3-Spintopologie muss der planare Drifthamiltonian simuliert werden. Dies kann über einen *Trotter*-Ansatz erreicht werden.

$$e^{-i\pi t(xx+yy)} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(e^{-i\pi \frac{t}{N}(xx)} e^{-i\pi \frac{t}{N}(yy)} \right)^N. \quad (8.13)$$

Die beiden Komponenten können nun jeweils aus dem Driftterm des Systems simuliert werden. Dadurch ergibt sich die Dauer der Pulssequenz zu:

$$\tau^*(\phi)/J = 2\frac{\sqrt{2}}{2} \sin(\beta) = \sqrt{2} \sin(\beta) = \sqrt{2} \sin(\arccos(\frac{2\phi}{\pi} - 1)). \quad (8.14)$$

Die erhaltene Implementierung ist schneller als die Zerlegung in eine Summe trilinearere Terme. Der Speed-up beläuft sich bei $\phi = \pi/2$ auf einen Faktor $\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} = 1.2247$. Die Ergebnisse sind in Abbildung 8.4 dargestellt.

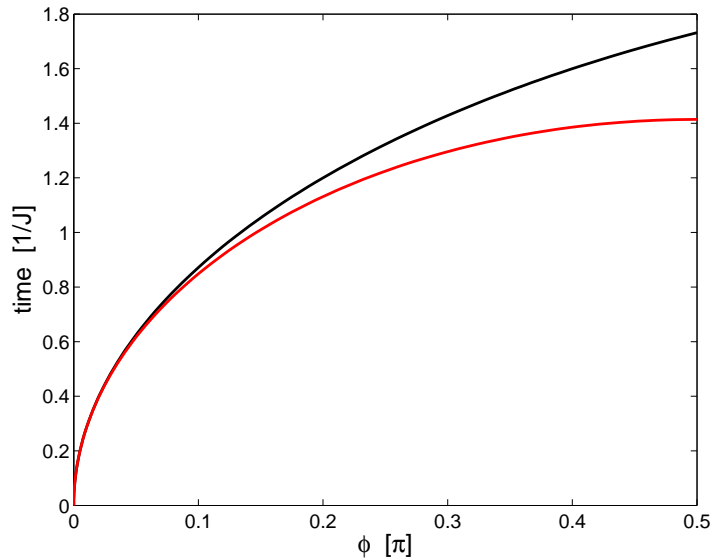


Abbildung 8.4: Vergleich der Implementierung des Propagators $e^{-i\phi(xx+yy)}$ auf einer linearen 3-Spinkette. In schwarz ist die Zeitkomplexität zweier sequentiell implementierter trilinearere Propagatoren dargestellt. Die rote Kurve zeigt die zeitoptimierte Implementierung.

8.3 Schlussfolgerungen

Es wurde gezeigt, dass sich die effiziente Synthese für Quantengatter auf geometrische Probleme zurückführen lässt und eine zeitoptimierte Pulssequenz für ein indirektes CNOT auf einer linearen Kette von drei Spins konstruiert. Die gefundenen Zeiten liegen weit unterhalb der konventionellen Zerlegungen. Mit Blick auf die Zeitersparnis stellt sich die Frage, ob sich für andere Quantengatter auch analytische Lösungen finden lassen. Ein weiteres Beispiel stellt die gefundene Lösung für den Propagator zweier trilinearere Terme dar. Die numerischen Resultate der vorherigen Paragraphen können hierzu als Leitlinien dienen, um die wirklichen Mechanismen zu enthüllen, die ein Quantensystem auf geodätischen Pfaden zum Ziel führen. Ein zusätzliches Beispiel stellt in diesem Zusammenhang die Lösung für den BIT-FLIP dar, bei der diese direkt aus den Pulssequenzen abgelesen werden konnte.

9 Lokale Inversion Hamiltonscher Dynamik auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

9.1 Einleitung

Richard Feynman's wegweisender Vorschlag, Quantensysteme zu benutzen, um effizientere Computer zu konstruieren und so das Verhalten von anderen Quantensystemen vorherzusagen, hat Computerwissenschaften und Physik in eine gänzlich neue Forschungsrichtung gelenkt: die Simulation von Hamiltonoperatoren [18–22].

Eine spezielle Frage ist nun, ob der Vorzeichen-invertierte Hamiltonian $-H$ aus den gegebenen Kontrollen simuliert werden kann. Die Arbeiten von Beth *et al.* beziehen sich auf dieses Problem für Paarinteraktionen und geben obere Grenzen für den Zeitüberschuss solcher Inversionen an [74, 222, 223].

Die vorliegende Arbeit geht über das Konzept von Paarinteraktionen hinaus, da auch Multi-Qubit-Wechselwirkungen untersucht werden. Es werden alle Hamiltonians untersucht, die durch lokale Kontrollen und einen Zeitüberschuss 1 invertiert werden können¹.

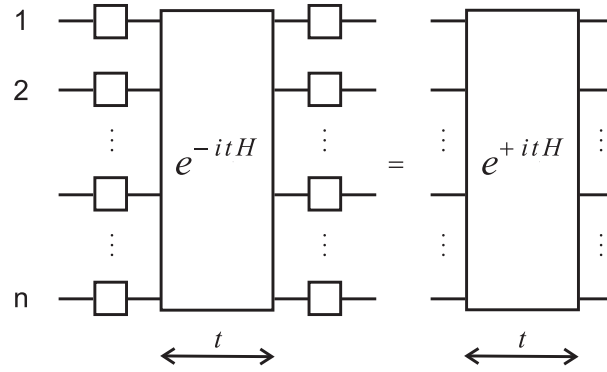
Die praktische Relevanz dieses Problems erklärt sich in folgendem Szenario: In einem Quantensystem sollen gewisse Kopplungen in einer Zeitspanne evolvieren, während andere Multi-Qubit-Wechselwirkungen unterdrückt werden sollen. Letzteres lässt sich durch Entkopplungssequenzen erreichen, doch meist genügt es, wenn sich die Wechselwirkungen zu einem bestimmten Zeitpunkt, meist am Ende des Experiments, gegeneinander aufheben. Solche Fälle treten z.B. bei der Unterdrückung von dissipativen Kopplungen eines Systems zu seiner Umgebung [189] auf. Lokale Inversionen treten weiter im Zusammenhang mit sogenannten LOCC-Operationen (local operations and classical communication) [224] auf.

Was nicht betrachtet werden soll, sind Inversionen, die neben lokalen Operationen auch nicht lokale Operationen verwenden. So ist z.B. ein isotroper Kopplungshamiltonian $xx + yy + zz$ invertierbar, wenn man mehr als eine Kopplungsevolution zulässt.

Sei $T(t)$ der Operator, der die Zeittranslation um t ausdrückt. Weiter sei Θ

¹Zeitüberschuss beschreibt die Anzahl von Kopplungsevolutionen, die notwendig sind, um einen bestimmten Hamiltonian durch einen gegebenen Drifthamiltonian zu simulieren. Die Simulation einer starken Kopplung zwischen zwei Spins, also $xx + yy + zz$, durch eine Ising-Interaktion, also zz , hätte Zeitüberschuss 3.

9 Lokale Inversion Hamiltonscher Dynamik auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen



$$\text{Type-I: } K \cdot U(t) \cdot K^{-1} = U(-t) = U(t)^{-1}$$

$$\text{Type-II: } K_1 \cdot U(\tau) \cdot K_2 = U(-\tau) = U(\tau)^{-1}$$

Abbildung 9.1: Es gibt zwei nicht-triviale Fälle von lokal invertierbaren Quantenevolutionen: **Typ-I**: die Wechselwirkung wird durch eine Konjugation mit einer lokalen Operation $K \in \mathbf{SU}(2^n)$ für alle Zeiten $t \in \mathbb{R}$ invertiert, oder **Typ-II**: die Interaktion wird nur für bestimmte Zeiten $\tau \in \mathbb{R}$ invertiert, da K_1 und K_2 nicht invers zu einander sind.

der Operator für die Zeitumkehr. Nach Wigner [225, 226] erhält man mit diesen allgemeinen Termen

$$T(t) \circ \Theta \circ T(t) \circ \Theta = \mathbf{1} \Leftrightarrow \Theta \circ T(t) \circ \Theta = T^{-1}(t) \equiv T(-t). \quad (9.1)$$

Die Zeittranslation werde nun durch die Evolution unter einem Hamiltonoperator H einer bestimmten Quantenwechselwirkung gemäß $U(t) = e^{-itH}$ für alle t dargestellt. Gleichung (9.1) lässt sich dann umformen zu

$$\Theta \circ U(t) \circ \Theta = U(-t) \quad . \quad (9.2)$$

Die Zeitumkehr stellt zwar klarerweise eine unphysikalische Operation dar, dennoch gibt es Manipulationen, die im Endeffekt eine solche Zeitumkehr gewisser Quanteninteraktionen bewirken. Ein prominentes Beispiel ist das Hahn'sche Spin-Echo [227].

Im Sinne einer Verallgemeinerung des Hahn'schen Spin-Echos soll nach nicht-trivialen unitären Evolutionen gefragt werden, für die sich eine effektive Zeitumkehr durch lokale Kontrollen erreichen lässt. Wie in Abbildung 9.1 dargestellt, bedeutet das im Falle von n Qubits: Ein unitärer Propagator $U := e^{-itH} \in \mathbf{SU}(2^n)$ (mit $t > 0$) ist allein durch lokale Operationen invertierbar, wenn

$$\exists K_1, K_2 \in \mathbf{SU}(2)^{\otimes n} : K_1 e^{-itH} K_2 = e^{+itH} \quad (9.3)$$

9.2 Typ-I: Lokal invertierbare unitäre 1-Parameter Gruppen

gilt. Ob K_1 und K_2 invers zueinander sind, hat Folgen für die Universalität der Inversion.

9.1.1 Fallunterscheidung

Wie in Abbildung 9.1 gezeigt, existieren zwei verschiedene Typen lokal invertierbarer Propagatoren:

Lemma 2 *Entweder ist e^{-itH} trivial und selbst-invers oder (i) **Typ-I** invertierbar im Sinne von $\exists K \in \mathbf{SU}(2)^{\otimes n} : KHK^{-1} = -H$, so dass $Ke^{-itH}K^{-1} = e^{+itH}$ gemeinsam für alle $t \in \mathbb{R}$, oder (ii) **Typ-II** invertierbar so dass für bestimmte (nicht alle) τ $K_1e^{-i\tau H}K_2 = e^{+i\tau H}$ mit $K_1, K_2 \in \mathbf{SU}(2)^{\otimes n}$ und $K_2 \neq K_1^{-1}$ gilt.*

Tabelle 9.1: Typen lokal invertierbarer Wechselwirkungen

lokale Invertierbarkeit	$K_2 = K_1^{-1}$	$K_2 \neq K_1^{-1}$
$\forall t \in \mathbb{R}$	Typ-I	$\{\}$
für punktweise $\tau \in \mathbb{R}$	selbst-invers	Typ-II

Da selbst-inverse Gatter, mit $U^2 = \mathbf{1}$ (z.B. CNOT-, SWAP- und TOFFOLI-Gatter), aus der Sicht der Inversion trivial sind, werden sie hier nicht weiter diskutiert. Lemma 2 wird im Appendix 12.5.1 bewiesen.

9.1.2 Notation

Im weiteren Verlauf werden folgende Notationen benutzt: $\mathbf{G} := \mathbf{SU}(2^n)$, $\mathbf{K} := \mathbf{SU}(2) \otimes \mathbf{SU}(2) \otimes \dots \otimes \mathbf{SU}(2) =: \mathbf{SU}(2)^{\otimes n}$ für die Lie-Gruppen speziell unitärer Matrizen und der lokalen Untergruppe davon, sowie \mathfrak{g} und \mathfrak{k} für die entsprechenden Lie-Algebren. Elemente von \mathbf{G} , \mathbf{K} , \mathfrak{g} und \mathfrak{k} werden als $G, K; g, k$ geschrieben, mit Ausnahme des Hamiltonians $iH \in \mathfrak{g}$.

9.2 Typ-I: Lokal invertierbare unitäre 1-Parameter Gruppen

9.2.1 Geometrie

Im 1-Qubit-Fall wird eine Spin- $\frac{1}{2}$ Rotation $U(\mathbf{n}, \phi)$ um einen Winkel ϕ und der Achse \mathbf{n} durch eine π -Rotation um eine der Achsen \mathbf{n}^\perp , die orthogonal zu \mathbf{n} ist,

9 Lokale Inversion Hamiltonscher Dynamik auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

invertiert:

$$U(\mathbf{n}, \phi)^{-1} = U(\mathbf{n}^\perp, \pi) U(\mathbf{n}, \phi) U(\mathbf{n}^\perp, \pi)^{-1} \quad . \quad (9.4)$$

Die Lie-Algebra $\mathfrak{su}(2^n)$ werde durch eine orthonormale Basis $\{a_j\}$ aufgespannt. Die Verallgemeinerung von Rotationen in höheren Dimensionen, z.B. n Qubits (Spins- $\frac{1}{2}$), ist offensichtlich: die Rotationsachse wird durch den Unterraum der Lie-Algebra ersetzt, welche invariant unter der Wirkung von H ist

$$I_H := \text{span}_{\mathbb{R}}\{a_j \in \mathfrak{su}(2^n) \mid [a_j, H] = 0\} \quad . \quad (9.5)$$

Das Orthokomplement wird wie folgt dargestellt:

$$I_H^\perp := \text{span}_{\mathbb{R}}\{a_j \in \mathfrak{su}(2^n) \mid a_j \notin I_H\} \quad . \quad (9.6)$$

Nun wird von der Hilbertraumstruktur [228] Gebrauch gemacht: Jedes H induziert eine spezifische Zerlegung²

$$\mathfrak{su}(2^n) = I_H \oplus I_H^\perp \quad . \quad (9.7)$$

Dieses Setting zeigt bereits eine vergleichsweise einfache und illustrative Charakterisierung von lokal invertierbaren unitären Matrizen, die jedoch keinesfalls vollständig ist:

Lemma 3 *Ein Propagator $U := e^{-itH}$, der für alle t lokal invertierbar sein soll, muss im Orthokomplement I_H^\perp zu seinem invarianten Teilraum in $\mathfrak{su}(2^n)$ mindestens einen lokal effektiven Hamiltonian k mit $K := e^{-ik} \in \mathbf{SU}(2)^{\otimes n}$ besitzen.*

Beweis: Angenommen, es gäbe keinen lokalen Hamiltonian $k \in I_H^\perp$: Dann sind alle lokal unitären $\mathbf{K} = \mathbf{SU}(2)^{\otimes n}$ im invarianten Teilraum unter der Wirkung der 1-Parameter Gruppe $\{U = e^{-itH} \mid t \in \mathbb{R}\}$. Dann gäbe es allerdings auch keine lokal Unitären, die $U = e^{-itH}$ für alle t invertieren, wie eingangs gefordert. ■

Lemma 4 *Damit $U = e^{-itH}$ für alle t lokal invertierbar ist, ist es hinreichend dass es einen lokalen Hamiltonian k im Orthokomplement I_H^\perp gibt, für den der Doppelkommutator von H und k H reproduziert, d.h. $[k, [k, H]] = H$.*

Beweis: Als erstes sei vermerkt, dass aus $\text{span}_{\mathbb{R}}\{H, k, i[H, k]\} \stackrel{\text{iso}}{=} \mathfrak{su}(2)$ zwingend $[k, [k, H]] = H$ folgt, jedoch nicht umgekehrt. Die Bedingung $[k, [k, H]] = H$ reicht jedoch aus, um folgende analytische Funktion zu definieren:

$$f(\phi) := e^{-i\phi k} H e^{i\phi k} \quad , \quad (9.8)$$

deren Ableitungen folgende Form annehmen:

$$\frac{df}{d\phi} = -e^{-i\phi k} i[k, H] e^{i\phi k} \quad (9.9)$$

$$\frac{d^2 f}{d\phi^2} = -e^{-i\phi k} [k, [k, H]] e^{i\phi k} = -f(\phi) \quad . \quad (9.10)$$

²für eine Unterscheidung mit Cartan-ähnlichen Zerlegungen siehe Kapitel 9.2.8

9.2 Typ-I: Lokal invertierbare unitäre 1-Parameter Gruppen

Zusammen mit den Randbedingungen $f(0) = H$ und $\frac{df}{d\phi}|_{\phi=0} = -i[k, H]$ kann $f(\phi)$ als

$$e^{-i\phi k} H e^{i\phi k} = H \cos \phi - i[k, H] \sin \phi \quad (9.11)$$

ausgedrückt werden.

Für $\phi = \pi$ und $K = e^{-i\pi k} \in \mathbf{SU}(2)^{\otimes n}$ erhält man $H \mapsto -H$, weswegen e^{-itH} lokal invertiert wird. ■

Um jedoch zu notwendigen und hinreichenden Bedingungen zu gelangen, scheint es unumgänglich, die anschauliche Einfachheit der Geometrie aufzugeben.

Lemma 5 *Damit $U = e^{-itH}$ lokal invertierbar für alle t ist, ist es zugleich notwendig und hinreichend, dass es einen lokalen Hamiltonian k im Orthokomplement $I_{\mathbb{H}}^{\perp}$ und ein passend gewähltes $\phi \in [0, 2\pi[$ gibt, für das*

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{\ell!} \text{ad}_{(-i\phi k)}^{\ell}(H) = -H \quad (9.12)$$

gilt.

Beweis: Gleichung (9.12) ist eine direkte Konsequenz der wohlbekannten Identität

$$e^X Y e^{-X} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{\ell!} \text{ad}_X^{\ell}(Y) \quad , \quad (9.13)$$

wobei $\text{ad}_X^{\ell}(Y)$ den ℓ -fachen Kommutator, also $[X, [X, \dots [X, Y] \dots]]$ bezeichnet. Für den Fall $\ell = 0$ definieren wir $\frac{1}{0!} \text{ad}_X^0 := \mathbf{1}$. Lemma 4 ist hier als ein Spezialfall enthalten. ■

Beispiel 1

Sei $H_1 := I_x + 2I_x S_z$. Der invariante Unterraum ist $I_1 = \text{span}_{\mathbb{R}}\{I_x, S_z; 2I_x S_z\}$ und das Orthokomplement ist

$I_1^{\perp} = \text{span}_{\mathbb{R}}\{I_y, I_z, S_x, S_y; 2I_x S_x, 2I_x S_y, 2I_y S_x, 2I_y S_y, 2I_y S_z, 2I_z S_x, 2I_z S_y, 2I_z S_z\}$. Für alle β gilt

$$i \text{span}_{\mathbb{R}}\{(I_y \cos \beta + I_z \sin \beta), H_1, i[H_1, (I_y \cos \beta + I_z \sin \beta)]\} \stackrel{\text{iso}}{=} \mathfrak{su}(2) \quad ,$$

so dass H_1 einen lokal invertierbaren Propagator generiert.

Beispiel 2

Sei $H_2 = H_{\text{iso}} = 2I_x S_x + 2I_y S_y + 2I_z S_z$. Der invariante Unterraum ist

$$\begin{aligned} I_{\text{iso}} = \text{span}_{\mathbb{R}}\{ & (I_x + S_x), (I_y + S_y), (I_z + S_z); \\ & 2I_x S_x, 2I_y S_y, 2I_z S_z; \\ & 2(I_x S_y + I_y S_x), 2(I_x S_z + I_z S_x), 2(I_y S_z + I_z S_y)\} \end{aligned} \quad (9.14)$$

und das Orthokomplement ist

$$I_{\text{iso}}^\perp = \text{span}_{\mathbb{R}}\{(I_x - S_x), (I_y - S_y), (I_z - S_z); 2(I_x S_y - I_y S_x), 2(I_x S_z - I_z S_x), 2(I_y S_z - I_z S_y)\}.$$

Für alle $H_\Delta := n_x(I_x - S_x) + n_y(I_y - S_y) + n_z(I_z - S_z)$ mit $\sum_{\nu=x,y,z} n_\nu^2 = 1$ gilt jedoch $[H_\Delta, [H_\Delta, H_{\text{iso}}]] \neq H_{\text{iso}}$. Eine notwendige Bedingung für lokale Invertierbarkeit ist somit nicht erfüllt.

Die Beispiele machen noch einmal deutlich, dass der geometrische Ansatz zwar intuitiv ist, aber dennoch nicht ausreicht, um einen vollständigen Satz von Kriterien zu liefern.

9.2.2 Algebra I: Eigenoperatoren

Zu Beginn sei auf die altbekannte Tatsache verwiesen, dass zwei ähnliche Matrizen A, B , d.h. $XAX^{-1} = B$ mit nicht-singulärem X , gleiche Eigenwerte besitzen. Demzufolge kann ein Hamiltonian H , der durch unitäre Konjugation invertiert werden soll, nur von Null verschiedene Eigenwerte besitzen, die in Paaren mit positivem und negativem Vorzeichen auftreten. Dies ist eine notwendige und hinreichende Bedingung für eine Inversion durch ein $U \in \mathbf{SU}(2^n)$. Für eine Inversion durch lokale Propagatoren $K \in \mathbf{SU}(2)^{\otimes n}$ stellt diese Bedingung lediglich ein notwendiges Kriterium dar.

Vollständige Basis für Lokal Invertierbare Hamiltonians

Obwohl die Zerlegung der Algebra $\mathfrak{su}(2)^{\oplus n}$ im invarianten Teilraum und Orthokomplement durchaus illustrativ ist, ist sie sehr schwierig für die verschiedenen Hamiltonians H auszuführen. Um dennoch konstruktive Parameter zu erhalten, kann man sich den Gruppen der lokalen Propagatoren $\mathbf{SU}(2)^{\otimes n}$ zuwenden. Im Eigenraum dieser Gruppe sollten sich alle (**Typ-I**) lokal invertierbaren Hamiltonians aufspannen lassen.

Aufgrund der Taylorreihenzerlegung gilt:

$$K e^{-itH} K^{-1} = e^{-it(KHK^{-1})} = e^{+itH} \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad (9.15)$$

$$\Leftrightarrow KHK^{-1} = \text{Ad}_K(H) = -H \quad , \quad (9.16)$$

wobei die letzte Gleichung äquivalent zur Reihenentwicklung von Ad_X in Lemma 5 und Gleichung (9.12) ist.

Lemma 6 (1) *Der Propagator e^{-itH} ist lokal invertierbar für alle $t \in \mathbb{R}$ dann und nur dann, wenn $\text{vec } H$ Eigenvektor von Ad_K (hier dargestellt durch $K^* \otimes K$) zum Eigenwert -1 ist:*

$$(K^* \otimes K) \text{vec } H = -\text{vec } H \quad . \quad (9.17)$$

9.2 Typ-I: Lokal invertierbare unitäre 1-Parameter Gruppen

(2) Der Eigenraum zum Eigenwert -1 spannt alle lokal invertierbaren Hamiltonians auf und kann algebraisch abgeschlossen durch ein rekursives Schema aus den Eigenvektoren von $\mathbf{SU}(2)$ aufgebaut werden.

Beweis: für (2) wird im Hinblick auf die explizite Anwendung ein konstruktiver Beweis angegeben.

Eigenvektoren vom Ad_K -Superoperator $K^* \otimes K$:

Für alle lokalen Propagatoren $K \in \mathbf{SU}(2)^{\otimes n}$ ist der Superoperator $K^* \otimes K$ einfach ein $2n$ -faches Tensorprodukt der unitären 2×2 Matrizen.

Benutzt man die Quaternionen-Parametrisierung

$$U := \cos \frac{\beta}{2} \mathbf{1} - i \sin \frac{\beta}{2} (n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z) \in \mathbf{SU}(2) \quad (9.18)$$

mit $\sum_{\nu=x,y,z} n_\nu^2 = 1$, ergeben sich die Eigenwerte $\lambda_\pm = e^{\pm i \frac{\beta}{2}}$ (sei $\beta \neq 0$) mit den dazugehörigen orthonormierten Eigenvektoren

$$v_+ := \frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}} \begin{pmatrix} -n_x + i n_y \\ 1 + n_z \end{pmatrix} \quad (9.19)$$

$$v_- := \frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}} \begin{pmatrix} 1 + n_z \\ n_x + i n_y \end{pmatrix}, \quad (9.20)$$

wobei der Grenzwert $n_z \rightarrow -1$ unkritisch ist: man erhält $v_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $v_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Ein Spin- $\frac{1}{2}$ Qubit

Der Ad_K -Superoperator ($K^* \otimes K$) für einzelne Spinqubits besitzt vier Eigenwerte $\lambda_\pm^* \lambda_\pm = e^{\mp i \frac{\beta}{2}} e^{\pm i \frac{\beta}{2}}$ (also entweder 1 oder $e^{\pm i \beta}$) mit den entsprechenden vier Eigenvektoren $v_\pm^* \otimes v_\pm$. Der Eigenraum zum Eigenwert $e^{\pm i \beta} = -1$ wird also durch folgende Basis aufgespannt

$$E^{(-)} := \{v_-^* \otimes v_+, v_+^* \otimes v_-\} \quad (9.21)$$

wohingegen der Eigenraum zum Eigenwert $+1$ aus

$$E^{(+)} := \{v_+^* \otimes v_+, v_-^* \otimes v_-\} \quad (9.22)$$

aufgebaut werden kann.

Bemerkung Für einen festen Satz von Parametern (n_x, n_y, n_z) sieht man sofort, dass $E^{(-)} \perp E^{(+)}$ gilt. Es gilt jedoch zu bemerken, dass jedes Element der $\mathfrak{su}(2)$ sowohl in $E^{(-)}$ als auch in $E^{(+)}$ aufgespannt werden kann: Z.B. wird $\text{vec}(\sigma_z)$ in $E^{(-)}$ aufgespannt durch $(n_x, n_y, n_z) = (\cos \theta, \sin \theta, 0)$, wohingegen für das Aufspannen in $E^{(+)}$, $(n_x, n_y, n_z) = (0, 0, 1)$ zu setzen ist. Beides sind unterschiedliche

9 Lokale Inversion Hamiltonscher Dynamik auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

Wege um auszudrücken, dass σ_z durch jede π -Rotation um eine Achse aus der xy -Ebene invertiert wird, jedoch invariant gegenüber z -Rotationen ist.

Der Vollständigkeit halber wird im Limes $\beta \rightarrow 0$ folgendes definiert:

$$E^{(0)} := \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \text{vec } \sigma_x, \text{vec } \sigma_y, \text{vec } \sigma_z \}.$$

Zwei Spin- $\frac{1}{2}$ Qubits

Für zwei Qubits setzt sich die Eigenbasis zum Eigenwert $\lambda_{1\pm}^* \lambda_{2\pm}^* \lambda_{1\pm} \lambda_{2\pm} = -1$ aus folgenden Subtypen zusammen:

Subtyp 0 Einbettung der zwei grenzwertigen Fälle mit nur einem Spin mit $|\beta_1| = \pi$ oder $|\beta_2| = \pi$

$$E_{\pi, \mathbf{1}} := \{ E_1^{(-)} \otimes \text{vec}(\mathbf{1})_2 \} \cup \{ \text{vec}(\mathbf{1})_1 \otimes E_2^{(-)} \}$$

Subtyp 1 Inversion auf einem Spin oder dem anderen mit $|\beta_1| = \pi, \beta_2 = 0$ oder $\beta_1 = 0, |\beta_2| = \pi$

$$E_{\pi, 0} := \{ E_1^{(-)} \otimes E_2^{(0)} \} \cup \{ E_1^{(0)} \otimes E_2^{(-)} \}$$

Subtyp 2 Rotationen auf beiden Spins $|\beta_1| + |\beta_2| = \pi \pmod{2\pi}$ und $\beta_1, \beta_2 \neq 0$

$$E_{\beta_1, \beta_2} := \{ E_1^{(-)} \otimes E_2^{(-)} \}$$

Subtyp 3 Rotation auf dem einen Spin, kommutierende Achsen auf dem anderen, wobei $|\beta_1| = \pi, \beta_2 \neq 0$, aber ansonsten willkürlich, oder andersherum

$$E_{\pi, \beta_{\parallel}} := \{ E_1^{(-)} \otimes E_2^{(+)} \} \cup \{ E_1^{(+)} \otimes E_2^{(-)} \}$$

n Spin- $\frac{1}{2}$ Qubits

Die Verallgemeinerung auf n Qubits mit

$$\lambda_{1\pm}^* \lambda_{1\pm} \lambda_{2\pm}^* \lambda_{2\pm} \cdots \lambda_{\ell\pm}^* \lambda_{\ell\pm} \cdots \lambda_{n\pm}^* \lambda_{n\pm} = -1 \quad (9.23)$$

liegt auf der Hand, da das Konstruktionsprinzip dem Muster der Indizes der Eigenräume folgt. Um von $n-1$ Spins zu n zu gelangen, wird zu jedem $n-1$ -Spin-Eigenvektor ein weiterer n -ter Eigenvektor aus der Menge $\{\mathbf{1}, 0, \beta, \beta_{\parallel}\}$ tensoriert. Entsprechend den einzelnen Subtypen wird aus E_{n-1} entweder $E_{n-1} \otimes \text{vec} \mathbf{1}$ (Subtyp 0), oder $E_{n-1} \otimes E^{(0)}$ (Subtyp 1), oder $E_{n-1} \otimes E^{(-)}$ (Subtyp 2), oder $E_{n-1} \otimes E^{(+)}$ (Subtyp 3).

In Hinblick auf konstruktive Resultate wurden die Subtypen bereits in Termen von Rotationsachsen $(n_x, n_y, n_z)_{\ell}$ und Drehwinkel β_{ℓ} auf den verschiedenen Spins ℓ ausgedrückt. Ein lokal invertierbarer Hamiltonian muss nun mindestens in einem Satz selbst-konsistenter Parameter aufgespannt werden. ■

9.2 Typ-I: Lokal invertierbare unitäre 1-Parameter Gruppen

Tabelle 9.2: **Typ-I** Invertierbarkeit von grundlegenden Paarwechselwirkungen

Paarinteraktion	Entwicklung im Subtyp	Typ-I Lokale Inversion durch	Symmetrie Klasse
zz	$E_{\pi,0}$	$\pi(\perp 1)$ oder: $\pi(1 \perp)$	●—○
XX	$E_{\pi,0}$	$\pi(z1)$ oder: $\pi(1z)$	●—○
	E_{β_1,β_2}	$\beta_1(z1) - \beta_2(1z)$ [z.B.: $\frac{\pi}{2}(z1 - 1z)$]	●—○
	$E_{\pi,\beta_{\parallel}}$	$\pi(\perp 1) - \pi(1 \dashv)$	●—○
XY	$E_{\pi,0}$	$\pi(z1)$ oder: $\pi(1z)$	●—○
	$E_{\pi,\beta_{\parallel}}$	$\pi(x1) \pm \pi(1y)$ oder: $\pi(y1) \pm \pi(1x)$	●—○
$X(-X)$	$E_{\pi,0}$	$\pi(z1)$ oder: $\pi(1z)$	●—○
	E_{β_1,β_2}	$\beta_1(z1) + \beta_2(1z)$ [speziell: $\frac{\pi}{2}(z1 + 1z)$]	●—○
	$E_{\pi,\beta_{\parallel}}$	$\pi(\perp 1) + \pi(1 \vdash)$	●—○
XXX	nein	—	—
XXY	nein	—	—
XYZ	nein	—	—

In größeren Spinsystemen wird das Auffinden solcher konsistenter Parametersätze zunehmend schwieriger. Physikalische Problemstellungen lassen sich jedoch oft auf gewisse spezielle Settings reduzieren: Wechselwirkungshamiltonians bestehen zumeist aus Paarinteraktionen. Des Weiteren lassen sich Kombinationen finden, die wie sphärische Tensoren transformieren. Für diese beiden wichtigen Beispiele werden noch weitere Methoden vorgestellt.

9.2.3 Ising- und Heisenberg-Paarwechselwirkungen

Ising- und Heisenberg-Interaktionen können auf einfache Weise mit dem Eigenraum zum Eigenwert -1 in Verbindung gebracht werden, wie in Tabelle 9.2 deutlich gemacht werden soll:

9 Lokale Inversion Hamiltonscher Dynamik auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

Während die Ising-Interaktion nur in Eigenräumen vom Subtyp 1, d.h. $E_{\pi,0}$, aufgespannt werden kann, sind Heisenberg- XX und $-XY$ Interaktionen zudem noch im Subtyp 2 (E_{β_1,β_2}) aufspannbar.

In der Tabelle werden folgende Abkürzungen benutzt: $(z1)$ für $\frac{1}{2}(\sigma_z \otimes \mathbf{1})$, und $(z1 \pm 1z)$ für $\frac{1}{2}(\sigma_z \otimes \mathbf{1} \pm \mathbf{1} \otimes \sigma_z)$, sowie $(\perp 1)$ für $\frac{1}{2}(\sigma_x \cos \phi + \sigma_y \sin \phi) \otimes \mathbf{1}$. Für ein gewähltes ϕ wird analog $(+)$ und $(-)$ für $\frac{1}{2}(\sigma_x \cos(\phi \pm \frac{\pi}{2}) + \sigma_y \sin(\phi \pm \frac{\pi}{2}))$ geschrieben.

Die Heisenberg- XX -Wechselwirkung z.B. kann natürlich durch einen π z -Puls auf dem einen oder anderen Qubit invertiert werden. Aber auch antisymmetrische z -Rotationen auf beiden Qubits invertieren diesen Hamiltonian, wenn die Drehwinkel β auf Qubit 1 und $\beta - \pi$ auf Qubit 2 gewählt werden können.

Um generische Ising-, XX -, und XY -Wechselwirkungen zu invertieren, wird man im Allgemeinen Pulse benötigen, die *nicht symmetrisch* bezüglich der Permutation der Qubits sind.

Um die Erweiterung auf größere Kopplungsnetzwerke einfach zu gestalten, schreiben wir $\bullet \text{---} \circ$ für eine Paarwechselwirkung auf zwei Qubits, die sich durch nicht symmetrische lokale Operationen invertieren lässt. Die einzig bisher bekannte Ausnahme ist die Heisenberg $X(-X)$ Wechselwirkung, die sich durch symmetrische $\frac{\pi}{2}$ z -Pulse invertieren lässt. In Kopplungsnetzwerken soll dies durch $\bullet \text{---} \bullet$ dargestellt werden.

Keine der Heisenberg- XXX , $-XXY$ - oder $-XYZ$ -Interaktionen ist **Typ-I** invertierbar, da sie bereits ein notwendiges Kriterium nicht erfüllen, um in der gesamten unitären Gruppe invertierbar zu sein: die Eigenwerte dieser Hamiltonians liegen nicht in Paaren vor. Die des XYZ -Hamiltonians z.B. berechnen sich wie folgt $H_{XYZ} := \alpha(\sigma_x \otimes \sigma_x) + \beta(\sigma_y \otimes \sigma_y) + \gamma(\sigma_z \otimes \sigma_z)$

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= +\alpha + \beta - \gamma \\ \lambda_2 &= -\alpha + \beta + \gamma \\ \lambda_3 &= +\alpha - \beta + \gamma \\ \lambda_4 &= -\alpha - \beta - \gamma\end{aligned}\tag{9.24}$$

mit $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}$.

Offensichtlich muss einer der Parameter $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ verschwinden, damit Paare von Eigenwerten entstehen können. Dies limitiert die Anzahl der **Typ-I** invertierbaren 2-Qubit-Interaktionen auf Ising- zz -, Heisenberg- XX - oder Heisenberg- XY -Wechselwirkung.

9.2.4 Kopplungsnetzwerke von Paarwechselwirkungen

Kopplungsnetzwerke, die aus elementaren Paarinteraktionen bestehen, können auf einfache Weise durch Graphen dargestellt werden: jedem Punkt entspricht dann ein Qubit, und einer Kante zwischen den Punkten k und l entspricht eine

9.2 Typ-I: Lokal invertierbare unitäre 1-Parameter Gruppen

Kopplung der Stärke J_{kl} . Die Kopplung soll entweder eine Ising- oder eine der genannten Heisenberginteraktionen sein. Die nun diskutierten Graphen sind zusammenhängend, aber nicht zwingend komplett.

Bipartite Graphen heben sich unter allen möglichen Graphen besonders hervor, was im Folgenden gezeigt werden soll.

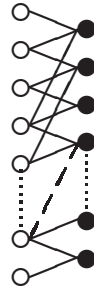


Abbildung 9.2: In bipartiten Kopplungsgraphen sind nur Ecken unterschiedlicher Farbe miteinander verbunden.

Lemma 7 (Variante zu Beth [74]) *Eine Evolution unter Ising-Wechselwirkung*

$$H_{zz} := \pi \sum_{k < l}^n J_{kl} \frac{1}{2} \sigma_{kz} \otimes \sigma_{lz} \quad (9.25)$$

ist **Typ-I** invertierbar dann und nur dann, wenn der Kopplungsgraph bipartit ist.

Beweis:

(i) Damit $H_{zz} \mapsto -H_{zz}$ genügt es, wenn jede der Kanten invertiert wird. D.h., dass jeder der Punkte vom Typ \bullet (oder \circ) durch lokale Operationen $2k + 1$ -mal invertiert wird, wohingegen Ecken vom Typ \circ (oder \bullet) invariant bleiben, da sie $2k$ invertiert werden, wobei $k \in \mathbb{N}_+^0$.

(ii) Diese Bedingung ist notwendig und zudem auch hinreichend: Angenommen eine der Kanten verbindet zwei Punkte vom selben Typ. Die Kopplung zwischen beiden würde nicht invertiert werden, da das Vorzeichen jeweils zweimal invertiert wird und somit invariant bleibt. ■

Lemma 8 *Eine Evolution unter der Heisenberg-XY-Wechselwirkung*

$$H_{XY} := \pi \sum_{k < l}^n J_{kl} \frac{1}{2} (\sigma_{kx} \otimes \sigma_{lx} + \kappa \sigma_{ky} \otimes \sigma_{ly}) , \quad (9.26)$$

9 Lokale Inversion Hamiltonscher Dynamik auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

wobei $\kappa \in [-1; +1]$, ist **Typ-I** invertierbar dann und nur dann, wenn (i) entweder die Kopplungen J_{kl} einen bipartiten Graphen bilden oder (ii) $\kappa = -1$, wobei in diesem Fall jede zusammenhängende Kopplungstopologie erlaubt ist.

Beweis:

Sei F_ν mit $\nu \in \{x, y, z\}$ die Summe über n Qubits mit der Paulimatrix $\sigma_\nu^{(\ell)}$ an der ℓ -ten Stelle

$$F_\nu := \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^n \mathbf{1}^{(1)} \otimes \mathbf{1}^{(2)} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}^{(\ell-1)} \otimes \sigma_\nu^{(\ell)} \otimes \mathbf{1}^{(\ell+1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}^{(n)} \quad . \quad (9.27)$$

Analog schreiben wir $F_z^{(\circ)}$ oder $F_z^{(\bullet)}$, wenn die Summe nur über die entsprechenden Qubits läuft.

(i) Für $\kappa \in]-1; +1]$ ist ein bipartiter Kopplungsgraph hinreichend für eine Inversion $H_{XY} \mapsto -H_{XY}$ durch eine Rotation $\pi F_z^{(\circ)}$ oder $\pi F_z^{(\bullet)}$. Eine bipartite Topologie ist auch notwendig, da im Allgemeinen keine permutations-symmetrische Inversion für H_{XY} existiert (siehe Tab. 9.2).

(ii) Natürlich genügt auch im Fall $\kappa = -1$ ein bipartiter Graph. Notwendig ist er jedoch nicht, da eine $\frac{\pi}{2}$ z -Rotation auf allen Qubits ($\frac{\pi}{2} F_z$) invariant unter Qubitpermutation ist und somit auf allen zusammenhängenden Graphen funktioniert, ohne dass diese bipartit sein müssen. ■

9.2.5 Erweiterung auf Multi-Qubit-Interaktionen

In effektiven Interaktionshamiltonians lassen sich einzelne Gruppen von Interaktionsordnungen ℓ bilden (z.B. $\ell = 3$ für $H_{\text{eff}} = \sigma_z \otimes \sigma_z \otimes \sigma_z/2$). Diese Gruppen können dann als Subgraph G_{m_ℓ} dargestellt werden.

Lemma 9 Sei H_{eff} der effektive Interaktionshamiltonian, der aus ℓ -Interaktionstermen auf dem m_ℓ -ten Subgraph wirkt,

$$H_{\text{eff}} = \sum_{\ell, m_\ell} H_{\ell, m_\ell} \quad (9.28)$$

wobei ℓ über alle Interaktionsordnungen läuft. Dann ist H_{eff} **Typ-I** lokal invertierbar dann und nur dann, wenn alle Teile von G_{m_ℓ} gleichzeitig Eigenoperatoren von Ad_K zum Eigenwert -1 sind.

Beweis:

Die Interaktionsordnungen, sowie die Zuordnung zu den Untergraphen, ist invariant unter Ad_K . ■

In einfacheren Fällen mag die Zuordnung zu Subgraphen helfen, Inversionen mit Bleistift und Papier zu finden. Kompliziertere Fälle lassen sich dann dadurch behandeln, dass man sich die Transformationseigenschaften von sphärischen Tensoren zu Nutze macht, was als nächstes gezeigt werden soll.

9.2.6 Sequenzen von Interaktionspropagatoren

Eine palindromische Sequenz von Propagatoren

$$U_s U_{s-1} \cdots U_2 U_1 U_1 U_2 \cdots U_{s-1} U_s \quad (9.29)$$

ist lokal invertierbar, falls jede Komponente U_k oder zumindest eine Einteilung der Sequenz lokal invertierbar ist. Ein Beispiel findet sich in Kapitel 4.

9.2.7 Multi-Qubit-Hamiltonian der Quantenordnung p

Wie bei der Behandlung von Drehimpulsen in der Spin- j Darstellung üblich (wobei $j = n \cdot j'$ die Spinquantenzahlen von n identischen, also permutationssymmetrischen, Einzelspins j' zum Gruppenspin j zusammenfasst) definiert man einen Rang- j sphärischen Tensor $T_{j,m}$ der Ordnung m durch die Transformationseigenschaften unter Rotation mit den Eulerwinkeln $\{\alpha, \beta, \gamma\}$

$$\begin{aligned} D^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) T_{j,m} D^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)^{-1} \\ = \sum_{m'=-j}^j D_{m',m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) T_{j,m'}, \end{aligned} \quad (9.30)$$

wobei die Elemente

$$\begin{aligned} D_{m',m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &:= \langle j, m' | e^{-i\frac{\alpha}{2} \sigma_z^{(j)}} e^{-i\frac{\beta}{2} \sigma_y^{(j)}} e^{-i\frac{\gamma}{2} \sigma_z^{(j)}} | j, m \rangle \\ &= e^{-im'\alpha} d_{m',m}^{(j)}(\beta) e^{-im\gamma} \end{aligned} \quad (9.31)$$

die volle Wigner-Rotationsmatrix bilden. Eine äquivalente Definition der sphärischen Tensoren in Spin- j Darstellung benutzt die Kommutatorrelation

$$\begin{aligned} [J_x \pm iJ_y, T_{j,m}] &\equiv [J^\pm, T_{j,m}] \\ &= \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} T_{j,m \pm 1} \\ [J_z, T_{j,m}] &= m T_{j,m} \end{aligned} \quad (9.32)$$

und stellt eine Verbindung zur Algebra $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C})$, dargestellt durch $\{J_+, J_-, J_z\}$, her, wie später gezeigt werden soll.

Vereinfachen wir nun $D^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)$ zu $D^{(j)}(0, 0, \phi)$, indem wir $\alpha = \beta = 0$ und $\gamma \equiv \phi$ setzen. Identifizieren wir weiter $m = m'$ mit der Quantenordnung p des Wechselwirkungshamiltonian $H \equiv T_{j,p}$, so erhalten wir die Eigenoperatorgleichung

$$D^{(j)}(0, 0, \phi) T_{j,p} D^{(j)}(0, 0, \phi)^{-1} = e^{-ip\phi} T_{j,p}. \quad (9.33)$$

Inversion durch globale z -Rotationen

Die Kommutatorrelationen der $\mathfrak{su}(2)$ oder $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C})$ ändern sich nicht, wenn wir J_ν , wobei $\nu \in \{x, y, z; +, -\}$, durch die symmetrische Summe

$$F_\nu := \sum_{\ell=1}^n \mathbf{1}^{(1)} \otimes \mathbf{1}^{(2)} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}^{(\ell-1)} \otimes J_\nu^{(\ell)} \otimes \mathbf{1}^{(\ell+1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}^{(n)}. \quad (9.34)$$

ersetzen.

Deshalb lässt sich $D^{(j)}(0, 0, \phi)$ als eine *lokale* z -Rotation um einen Winkel ϕ ansehen, welche gemeinsam auf alle n Qubits wirkt. Sie stellt somit ein Element der Untergruppe der lokalen Operationen dar, *d.h.* $D^{(j)}(0, 0, \phi) =: K(\phi, F_z) \in \mathbf{SU}(2)^{\otimes n}$.

Man kommt so zu zwei identischen Formulierungen

$$\begin{aligned} K(\phi, F_z) T_{j,p} K(\phi, F_z)^{-1} &= e^{-ip\phi} T_{j,p}, \\ \text{Ad}_{K(\phi, F_z)} T_{j,p} &= e^{-ip\phi} T_{j,p}. \end{aligned} \quad (9.35)$$

Um nun $T_{j,p}$ zu invertieren, benötigt man $e^{-ip\phi} = -1$. Durch die Fourierdualität von Quantenordnung p und der Phase ϕ erhält man sofort die Resultate aus Tabelle 9.3. Eine gemeinsame lokale z -Rotation um den Winkel π/r (mit einem festen $r = 1, 2, 3, \dots$) invertiert *simultan* alle Tensoren vom Rang j der verschiedenen Quantenordnungen. Deswegen ist auch jede Linearkombination von Wechselwirkungstensoren der Quantenordnung $\pm p = r(2q+1)$ gleichzeitig für alle $q = 1, 2, 3, \dots$ invertierbar. Offensichtlich können Interaktionshamiltonians, die durch sphärische Tensoren $T_{j,0}$ der Ordnung $p = 0$ dargestellt werden, nicht durch z -Rotationen $K(\phi, F_z)$ invertiert werden. Dennoch kann eine Inversion durch lokale Operationen mit Drehachsen ungleich der z -Achse möglich sein. Rang 0-Tensoren $T_{0,0}$, die wie pseudo-skalare transformieren, z.B. der Heisenberg- XXX -Wechselwirkungshamiltonian, welcher für zwei Spins proportional zu

$$T_{0,0} = \frac{-1}{2\sqrt{3}} (\sigma_x \otimes \sigma_x + \sigma_y \otimes \sigma_y + \sigma_z \otimes \sigma_z), \quad (9.36)$$

Tabelle 9.3: Inversion der sphärischen Tensoren durch gemeinsame z -Rotationen

Drehwinkel ϕ	invertiert Wechselwirkungen der Quantenordnung $\pm p$
π	$1, 3, 5, \dots, 2q + 1 \leq j$
$\pi/2$	$2, 6, 10, \dots, 4q + 2 \leq j$
$\pi/3$	$3, 9, 15, \dots, 6q + 3 \leq j$
\vdots	\vdots
π/r	$r, 3r, 5r, \dots, r(2q + 1) \leq j$

9.2 Typ-I: Lokal invertierbare unitäre 1-Parameter Gruppen

ist, können überhaupt nicht invertiert werden. Dies trifft nicht nur für lokale, sondern für alle Ähnlichkeitstransformationen $X \in \mathbf{GL}(2^n)$ zu, da die von Null verschiedenen Eigenwerte nicht in Paaren auftreten.

Inversion mit individuellen lokalen z -Rotationen

Da für einzelne Spinqubits $\text{Ad}_{\phi,z}$ folgende Eigenoperatoren $J_\nu \in \{\mathbf{1}, J_z, J_+, J_-\}$ mit den dazu assoziierten Eigenwerten $e^{-ip_\nu\phi} \in \{1, 1, e^{-ip_+\phi}, e^{-ip_-\phi}\}$ hat, ist es ein Leichtes die zuvor aufgeführten Argumente für z -Rotationen auf n Qubits zu verallgemeinern – diesmal jedoch mit individuell unterschiedlichen Rotationswinkeln $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_\ell, \dots, \phi_n$ auf jedem Qubit.

Der Hamiltonian \bar{H} nehme nun die spezielle Form eines Tensorproduktes von $\text{Ad}_{\phi,z}$ -Eigenoperatoren auf jedem Qubit $\ell = 1, \dots, n$ an, also

$$\bar{H} := J_{\nu_1}^{(1)} \otimes J_{\nu_2}^{(2)} \otimes \dots \otimes J_{\nu_\ell}^{(\ell)} \otimes \dots \otimes J_{\nu_n}^{(n)} \quad (9.37)$$

mit unabhängigem $\nu_\ell \in \{\mathbf{1}, z, +, -\}$ auf jedem Qubit. \bar{H} ist somit ein Eigenoperator zu $K(\phi_1, \dots, \phi_n, F_z) \in \mathbf{SU}(2)^{\otimes n}$. Es gilt also:

$$\text{Ad}_{K(\phi_1, \dots, \phi_n, F_z)}(\bar{H}) = e^{-i(p_1\phi_1 + \dots + p_n\phi_n)} \bar{H}. \quad (9.38)$$

Deshalb wird \bar{H} invertiert, wenn es einen Satz von Drehwinkeln $\{\phi_\ell\}$ gibt, der folgende Bedingung erfüllt:

$$\sum_{\ell=1}^n p_\ell \phi_\ell = \pm\pi \pmod{2\pi} \quad (9.39)$$

Dies ist der Fall, wenn mindestens ein Qubit ℓ ein Wechselwirkungsterm der Ordnung $p_\ell = \pm 1$ ist. Weiter ist jede Linearkombination solcher Hamiltonians $\bar{H}_\Sigma := \sum_{\lambda=1}^m c_\lambda \bar{H}_\lambda$ durch eine individuelle z -Rotation $K(\phi_1, \dots, \phi_n, F_z)$ invertierbar, wenn es mindestens einen konsistenten Satz von Drehwinkeln $\{\phi_\ell\}$ gibt, der simultan für alle Komponenten \bar{H}_λ

$$\sum_{\ell=1}^n p_{\lambda,\ell} \cdot \phi_\ell = \pm\pi \pmod{2\pi} \quad (9.40)$$

erfüllt. Diese Bedingung kann durch das Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & \cdots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & \cdots & p_{2n} \\ p_{31} & p_{32} & \cdots & p_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{m1} & p_{m2} & \cdots & p_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \pm\pi \pmod{2\pi} \\ \pm\pi \pmod{2\pi} \\ \pm\pi \pmod{2\pi} \\ \vdots \\ \pm\pi \pmod{2\pi} \end{pmatrix} \quad (9.41)$$

ausgedrückt werden.

Die Vorzeichen der rechten Seite können unabhängig voneinander aus 2^m möglichen Kombinationen gewählt werden, wobei mit jeder Wahl ein System aus m linearen Gleichungen mit n Variablen entsteht. Wenn also einer der Vektoren $\pi (\pm 1, \pm 1, \dots, \pm 1)^t$ durch eine reelle Superposition der Spaltenvektoren $P := (p_{\lambda, \ell})$ ausgedrückt werden kann, dann ist \bar{H}_Σ lokal invertierbar durch z -Rotationen.

Im speziellen Fall $m = n$ und nicht singulärem P gibt es immer eine Lösung des Gleichungssystems und somit auch einen konsistenten Satz von individuellen Rotationswinkeln um \bar{H}_Σ zu invertieren, und zwar für alle Wahlen von Vorzeichenkombinationen. Der Einfachheit halber wird der Index Σ in \bar{H}_Σ im weiteren Verlauf vernachlässigt und \bar{H} für Hamiltonians geschrieben, die durch lokale z -Rotationen invertierbar sind.

Korollar 1 Sei \bar{H} ein durch individuelle z -Rotationen auf jedem Spin lokal invertierbarer Hamiltonian. Dann gilt folgendes:

- (1) Jeder Hamiltonian H auf dem lokal unitärem Orbit $\text{Ad}_{\mathbf{K}}(\bar{H})$ generiert eine 1-Parameter-Gruppe, die lokal invertierbar vom **Typ-I** ist.
- (2) Umgekehrt liegt jeder invertierbare Hamiltonian auf dem unitären Orbit eines \bar{H} .

Beweis: (1) ist offensichtlich.

(2) folgt, da jedes lokale K lokal unitär ähnlich zu lokalen z -Rotationen K_z ist: $K = \bar{K} K_z \bar{K}^{-1} \Rightarrow K H K^{-1} = -H \Leftrightarrow K_z \bar{H} K_z^{-1} = -\bar{H}$ wobei $\bar{H} := \bar{K}^{-1} H \bar{K}$. ■

Die Invertierbarkeit durch z -Rotationen kann somit als Normalform des Problems angesehen werden. Um nun die Verbindung zur Wurzelraum-Zerlegung der halb-einfachen Lie-Algebren $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C})$ in Spin- j -Darstellung zu erkennen, bildet man die Ableitung von Gleichung (9.35)

$$\frac{\partial}{\partial \phi} \Big|_{\phi=0} \text{Ad}_{K(\phi, z)} T_{j, p} = \frac{\partial}{\partial \phi} \Big|_{\phi=0} e^{-ip\phi} T_{j, p} \quad (9.42)$$

$$\Leftrightarrow -i \text{ad}_{k_z}(T_{j, p}) = -ip T_{j, p} . \quad (9.43)$$

(Das Minuszeichen auf der linken Seite der letzten Gleichung stammt aus der Konvention $K(\phi, z) := e^{-i\phi k_z}$, analog zu $U := e^{-itH}$ der Schrödinger Gleichung.)

9.2.8 Algebra II: Wurzelraum-Zerlegung

Sei \mathfrak{g} eine komplexe halb-einfache Lie-Algebra, weiter \mathfrak{g}_0 eine Cartan-Unteralgebra von \mathfrak{g} , also eine maximal abel'sche Unteralgebra, sodass für alle $H \in \mathfrak{g}_0$ die Kommutatorsuperoperatoren ad_H simultan diagonalisierbar sind. In Einklang

9.2 Typ-I: Lokal invertierbare unitäre 1-Parameter Gruppen

mit der Standardliteratur über Lie-Algebren bezeichnet H in diesem Paragraphen Elemente $H \in \mathfrak{g}_0$ der Cartan-Unteralgebra, nicht Hamiltonoperatoren. Die Wurzelraum-Zerlegung von \mathfrak{g} bezüglich \mathfrak{g}_0 schreibt sich dann wie folgt:

$$\mathfrak{g} = \mathfrak{g}_0 \oplus \bigoplus_{\alpha \neq 0} \mathfrak{g}_\alpha \quad , \quad (9.44)$$

wobei die Wurzelräume \mathfrak{g}_α (mit $\alpha \neq 0$) die nicht-trivialen simultanen Eigenräume

$$\mathfrak{g}_\alpha := \{g \in \mathfrak{g} \mid \text{ad}_H(g) = \alpha(H)g\} \quad (9.45)$$

sind. Die entsprechenden nicht-trivialen α werden Wurzeln der Zerlegung genannt. Sie sind Element des dualen Raumes \mathfrak{g}_0^* der linearen Funktionale von \mathfrak{g}_0 . Im Folgenden betrachtet man die komplexe halb-einfache Lie-Algebra $\mathfrak{sl}(N, \mathbb{C})$ als die Komplexifikation der reellen Lie-Algebra $\mathfrak{su}(N)$.

E_{ij} wird definiert als die quadratische Matrix mit allen Einträgen gleich Null, bis auf das Element der j -ten Spalte und i -ten Zeile, welches Eins ist. Weiter sei \mathfrak{g}_0 die Menge aller Diagonalmatrizen in $\mathfrak{sl}(N, \mathbb{C})$ und $e_i(H) := H_{ii}$, also das i -te Diagonalelement, für alle $H \in \mathfrak{g}_0$. Die E_{ij} sind dann *simultane* Eigenoperatoren des Kommutatorsuperoperators ad_H mit Eigenwerten, die linear von $H \in \mathfrak{g}_0$ abhängen:

$$\begin{aligned} \text{ad}_H(E_{ij}) &= (H_{ii} - H_{jj})E_{ij} \\ &= (e_i(H) - e_j(H))E_{ij} =: \alpha_{ij}E_{ij} \quad . \end{aligned} \quad (9.46)$$

Die Wurzelraum-Zerlegung von $\mathfrak{sl}(N, \mathbb{C})$ kann somit wie folgt geschrieben werden:

$$\mathfrak{g} = \mathfrak{g}_0 \oplus \bigoplus_{i \neq j} \mathbb{C}E_{ij} \quad . \quad (9.47)$$

Wenn \mathfrak{g}' eine *kompakte* reelle halb-einfache Lie-Algebra mit maximaler Torus-Algebra \mathfrak{t}' ist, dann ergibt die Komplexifikation \mathfrak{t} von \mathfrak{t}' eine Cartan-Unteralgebra der Komplexifikation \mathfrak{g} von \mathfrak{g}' . Als Beispiel sei der Fall der $\mathfrak{su}(N)$ aufgeführt.

$$\mathfrak{t}' := \{i \text{ diag}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N) \mid \sum_{\ell} \theta_{\ell} = 0\} \quad (9.48)$$

werde als maximale Torus-Algebra gewählt. Dann ergibt

$$\mathfrak{t} := \mathfrak{t}' + i \mathfrak{t}' \quad , \quad (9.49)$$

also die Menge aller komplexen Diagonalmatrizen, eine Cartan-Unteralgebra der $\mathfrak{sl}(N, \mathbb{C})$.

Gleichung (9.46) zeigt nun, dass E_{ij} mit $i \neq j$ invertiert werden kann, wenn $(H_{ii} - H_{jj}) \neq 0$ erfüllt ist. Die Fälle gemeinsamer und individueller lokaler z -Rotationen werden als nächstes spezifiziert.

9 Lokale Inversion Hamiltonscher Dynamik auf Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen

Proposition 1 *In einem System von Spins- $\frac{1}{2}$ gilt für alle Matrizen E_{ij} mit $i \neq j$ das Folgende:*

- (1) *Zu jedem E_{ij} gibt es ein Element des Weyl-Torus $T = \exp(-i \operatorname{diag}(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N))$, sodass $\operatorname{Ad}_T(E_{ij}) = -E_{ij}$.*
- (2) *Jede Matrix E_{ij} kann also durch lokale z -Rotationen invertiert werden.*
- (3) *Im Gegensatz dazu können E_{ij} durch F_z -Rotationen nur dann invertiert werden, wenn die um 1 verminderten Binärdarstellungen der Zahlen i und j , $(i-1)_2$ und $(j-1)_2$, nicht die gleiche Anzahl von 0 und 1 haben (unabhängig von der Anordnung).*

Beweis: Obwohl $\mathfrak{sl}(2^n, \mathbb{C})$ die Generatoren *aller* speziell unitären Propagatoren umfasst, kann die maximal abel'sche Unteralgebra \mathfrak{g}_0 , ohne Beschränkung der Allgemeinheit, so gewählt werden, dass sie alle lokalen z -Rotationen beinhaltet. Es genügt, diese zu betrachten, da die E_{ij} simultane Eigenoperatoren zu allen Elementen in \mathfrak{g}_0 sind.

(1) Elemente der Weyl-Torus-Algebra \mathfrak{t} können offensichtlich so gewählt werden, dass $\theta_i - \theta_j \neq 0$ gilt.

(2) Jedes Außerdiagonalelement E_{ij} in den Boxen der Blockmatrix

$H := \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \square \\ \square & -\mathbf{1} \end{pmatrix}$ ist zu einer von Null verschiedenen Wurzel $(e_i - e_j)(H) = H_{ii} - H_{jj}$ assoziiert. Das gleiche gilt für $H \otimes \mathbf{1}$ and $\mathbf{1} \otimes H$. Des Weiteren ist jedes Außerdiagonalelement E_{ij} in einer der Boxen (\square) der folgenden eingebetteten σ_z -Matrizen

$$\tilde{\sigma}_{\ell z} := \mathbf{1}_2^{\otimes(\ell-1)} \otimes \begin{pmatrix} 1 & \square \\ \square & -1 \end{pmatrix}_{(\ell)} \otimes \mathbf{1}_2^{\otimes(n-\ell)},$$

wobei die Größe der Boxen $\mathbf{1}_2^{\otimes(n-\ell)}$ ist (setze $\mathbf{1}_2^{\otimes 0} = 1$). Der Index laufe nun über $\ell = 1, 2, \dots, n$. Man erkennt dann, dass wirklich jedes Außerdiagonalelement E_{ij} mit einem ℓ verknüpft ist. Dies impliziert, dass jedes E_{ij} durch mindestens eine lokale z -Rotation auf irgendeinem Qubit ℓ invertiert werden kann. (Durch die Permutationssymmetrie für $\ell < n$ gibt es Außerdiagonalelemente E_{ij} mit nicht verschwindenden Wurzeln außerhalb der Boxen; diese fügen weitere Möglichkeiten ein Qubit ℓ zu wählen, hinzu.)

(3) Für ein gegebenes E_{ij} sei $(i-1)_2 =: \sum_{k=0}^{n-1} 2^k b_k$ und $(j-1)_2 =: \sum_{k=0}^{n-1} 2^k b'_k$ die n -stellige Binärschreibweise der um 1 verminderten Indizes. Falls $(i-1)_2$ und $(j-1)_2$ die gleiche Anzahl von 0 und 1 hat, wird gezeigt, dass E_{ij} mit den Wurzeln zum Eigenwert 0 von F_z assoziiert ist, d.h. $\operatorname{ad}_{F_z}(E_{ij}) = 0$. In Appendix 12.5.2 wird

9.2 Typ-I: Lokal invertierbare unitäre 1-Parameter Gruppen

eine generelle Formel der Matrixelemente $(F_z)_{ii}$ angeben. Aus ihr folgt, dass

$$(F_z)_{ii} - (F_z)_{jj} = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^{b_k} - \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^{b'_k} \quad (9.50)$$

dann und nur dann verschwindet, wenn die Anzahl der Terme $(-1)^0$ und $(-1)^1$ in beiden Summen gleich ist. Daraus folgt $p = 0$, was eine Inversion mit F_z unmöglich macht. ■

Korollar 2 *Da die maximal abel'sche Unteralgebra \mathfrak{g}_0 sowohl von $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C})$ als auch $\mathfrak{su}(2)$ immer so gewählt werden kann, dass sie die Generatoren k_z von $K(\phi, F_z) \in \mathbf{SU}(2)^{\otimes n}$ enthält, lassen sich die Tensoren der Ordnung p mit den Wurzelraumelementen E_{ij} von $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C})$ assoziieren. Diese besitzen Eigenwerte p , weil $\text{ad}_{F_z}(E_{ij}) = (e_i(F_z) - e_j(F_z))E_{ij} = pE_{ij}$.*

Erlaubt man nun individuelle z -Rotationen auf jedem einzelnen Spin, erhält man:

$$\text{Ad}_{K(\phi_1, \dots, \phi_n, F_z)}(E_{ij}) = e^{-i(p_1\phi_1 + \dots + p_n\phi_n)} E_{ij}, \quad (9.51)$$

da jedes E_{ij} als Tensorprodukt von Ein-Element- 2×2 -Matrizen $\{J^\alpha, J^\beta, J_+, J_-\} := \{(\begin{smallmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{smallmatrix}), (\begin{smallmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{smallmatrix}), (\begin{smallmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{smallmatrix}), (\begin{smallmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{smallmatrix})\}$ geschrieben werden kann. Zusammen mit deren Eigenwerten $e^{-ip_\nu\phi}$ für $\nu \in \{\alpha, \beta, +, -\}$, wobei $p_\alpha = p_\beta = 0$ und $p_\pm = \pm 1$, erhält man schließlich Gleichung (9.51).

Beispiele:

(1) Die Ein-Element-Weyl-Matrix $E_{08,15}$ gehört zum Wurzelraum mit $p = 0$ ($(e_i - e_j)(F_z^n) = p = 0$), da die Binärdarstellungen von $(08 - 1)_2$ und $(15 - 1)_2$, für alle $n \geq 4$ mit $7_2 = 0111$ und $14_2 = 1110$ enden und somit die gleiche Anzahl von Nullen und Einsen aufweisen. $E_{08,15}$ lässt sich somit nicht durch lokale F_z -Rotationen invertieren, jedoch durch individuelle lokale z -Rotationen.

(2) Im Gegensatz dazu erhält man für $E_{47,11}$ die Binärdarstellungen $46_2 = 101110$ und $10_2 = 001010$. Dies bedeutet, dass $E_{47,11}$ durch lokale z -Rotationen invertierbar ist. Der Drehwinkel ist $\phi = \frac{\pi}{4}$ in Übereinstimmung mit Tabelle 9.3.

Werden die Beziehungen zu den Transformationseigenschaften als gegeben vorausgesetzt, ist es ein Leichtes die **Typ-I**-Invertierbarkeit von Linearkombinationen der Wurzelraumelemente E_{ij} unter F_z oder individuellen z -Rotationen zu untersuchen. Eine Einteilung aller E_{ij} , anhand ihrer Eigenwerte, findet sich in Abbildung 9.3.

Proposition 2 *In einem System von n Qubits ist eine Linearkombination von Ein-Element-Matrizen E_{ij}*

$$E_\Sigma := \sum_{\lambda=1}^m c_\lambda E_{ij}^{(\lambda)} \quad (9.52)$$

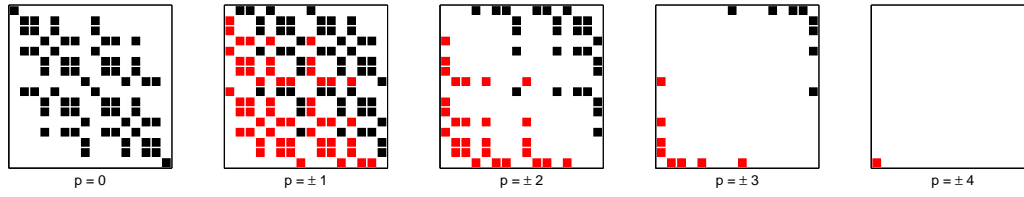


Abbildung 9.3: Die Matrizen E_{ij} , die die sphärischen Tensoren $T_{4,p}$ der Ordnung p aufbauen (hier in einem System von 4 Spins- $\frac{1}{2}$, $p \in [-4, +4]$). Die von Null verschiedenen Einträge sind für $p \geq 0$ durch \blacksquare und für $p < 0$ durch \blacksquare gekennzeichnet. Die $T_{4,p}$ sind Eigenoperatoren zum Weyl-Torus-Element $F_z \in \mathfrak{t}$, wegen $\text{ad}_{F_z}(T_{4,p}) = p T_{4,p}$ mit den Eigenwerten p , also den Quantenordnungen. Ein Blick auf Tabelle 9.3 zeigt, dass ein Hamiltonian, der aus Elementen besteht, die wie $T_{4,\pm p}$ transformieren, durch F_z -Rotationen mit Drehwinkel π/p invertiert werden kann.

mit $i \neq j$ und $c_\lambda \in \mathbb{C}$ durch individuelle lokale z -Rotationen $K(\phi_1, \dots, \phi_n, F_z)$ invertierbar, wenn es mindestens einen konsistenten Satz von Drehwinkeln $\{\phi_\ell \mid \ell = 1, 2, \dots, n\}$ gibt, der für alle Terme $E_{ij}^{(\lambda)}$ simultan folgende Gleichung erfüllt:

$$\sum_{\ell=1}^n p_{\lambda,\ell} \cdot \phi_\ell = \pm \pi \pmod{2\pi}, \quad (9.53)$$

was mit dem Gleichungssystem (9.41) übereinstimmt.

9.2.9 Beziehung der Zeitumkehr zur Cartan-Zerlegung

Sei \mathfrak{g} eine reelle kompakte halb-einfache Lie-Algebra und $\theta : \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}$ eine involutive ($\theta^2 = \mathbf{1}$) Abbildung der Lie-Algebra auf sich selbst. θ definiert dann eine Cartan-ähnliche Zerlegung $\mathfrak{g} = \mathfrak{k}_\theta \oplus \mathfrak{p}_\theta$ of \mathfrak{g} , wobei \mathfrak{k}_θ und \mathfrak{p}_θ die entsprechenden $+1$ und -1 Eigenräume von θ darstellt, d.h.

$$\theta(X) = X \quad \text{für alle } X \in \mathfrak{k}_\theta, \quad (9.54)$$

$$\theta(X) = -X \quad \text{für alle } X \in \mathfrak{p}_\theta, \quad (9.55)$$

was wiederum die Kommutatorrelationen

$$[\mathfrak{k}_\theta, \mathfrak{k}_\theta] \subseteq \mathfrak{k}_\theta, \quad (9.56)$$

$$[\mathfrak{k}_\theta, \mathfrak{p}_\theta] \subseteq \mathfrak{p}_\theta, \quad (9.57)$$

$$[\mathfrak{p}_\theta, \mathfrak{p}_\theta] \subseteq \mathfrak{k}_\theta \quad (9.58)$$

erfüllt.

9.2 Typ-I: Lokal invertierbare unitäre 1-Parameter Gruppen

Tabelle 9.4: Cartan-Zerlegungen für verschiedene Involutionen

$H_{\text{Interaktion}}$ (Anzahl der Qubits m)		Typ-I invertierbar	θ_{CC}	θ_{AI}	θ_{AII}	θ_{AIII}
Pauli Matrizen	$X1$	+	\mathfrak{k}	\mathfrak{p}	\mathfrak{k}	\mathfrak{p}
	$Y1$	+	\mathfrak{k}	\mathfrak{k}	\mathfrak{k}	\mathfrak{p}
	$Z1$	+	\mathfrak{k}	\mathfrak{p}	\mathfrak{p}	\mathfrak{k}
$m = 2$	H_{zz}	+	\mathfrak{p}	\mathfrak{p}	\mathfrak{p}	\mathfrak{k}
	H_{XX}	+	\mathfrak{p}	\mathfrak{p}	\mathfrak{k}	\mathfrak{p}
	H_{XY}	+	\mathfrak{p}	\mathfrak{p}	\mathfrak{k}	\mathfrak{p}
	H_{XXX}	−	\mathfrak{p}	\mathfrak{p}	$\mathfrak{k} \oplus \mathfrak{p}$	$\mathfrak{k} \oplus \mathfrak{p}$
	H_{XXY}	−	\mathfrak{p}	\mathfrak{p}	$\mathfrak{k} \oplus \mathfrak{p}$	$\mathfrak{k} \oplus \mathfrak{p}$
	H_{XYZ}	−	\mathfrak{p}	\mathfrak{p}	$\mathfrak{k} \oplus \mathfrak{p}$	$\mathfrak{k} \oplus \mathfrak{p}$
	H_{zzz}	+	\mathfrak{k}	\mathfrak{p}	\mathfrak{k}	\mathfrak{k}
$m = 3$	$H_{xxx \pm yyy}$	+	\mathfrak{k}	$\mathfrak{k} \oplus \mathfrak{p}$	\mathfrak{k}	\mathfrak{p}
	$H_{xxx+yyy+zzz}$	+	\mathfrak{k}	$\mathfrak{k} \oplus \mathfrak{p}$	\mathfrak{k}	$\mathfrak{k} \oplus \mathfrak{p}$

Anmerkung:

θ_{CC} und θ_{AII} sind äquivalent bis auf eine *nicht-lokale* Permutation;
das Gleiche gilt für θ_{AII} und θ_{AIII} mit $p = q$.

In $\mathfrak{su}(2^n)$ kann man zudem die so genannte „Concurrence“-Cartan-Involution [229, 230] wählen

$$\theta_{\text{CC}}(X) := (-i\sigma_y)^{\otimes n} X^* ((-i\sigma_y)^{\otimes n})^\dagger, \quad (9.59)$$

wobei θ_{CC} die Form eines Bitflipoperators annimmt und somit eine Beziehung zur Zeitumkehr herstellt.

Bullock *et al.* [229, 230] klassifizieren nun Hamiltonians $iH \in \mathfrak{p}_{\text{CC}}$ als symmetrisch bzw. anti-symmetrisch in Bezug auf die Zeitumkehr. Da $(-i\sigma_y)^{\otimes n} = e^{-i\pi F_y}$ gilt, ist diese Cartan-Involution äquivalent zu lokalen F_y -Rotationen, gefolgt von einer Komplexkonjugation. Aufgrund der Komplexkonjugation stellt die Cartan-Involution θ eine unphysikalische Operation dar (wie in [229, 230] gezeigt wurde) und ist somit von den hier untersuchten lokal-unitären Operationen zu unterscheiden.

In der $\mathfrak{su}(4)$ fällt \mathfrak{k}_{CC} mit der Algebra der lokalen Unitären $\mathbf{K} := \mathbf{SU}(2)^{\otimes 2}$ zusammen. Dies gilt in den Algebren $\mathfrak{su}(2^n)$ höherer Spinsysteme mit $n \geq 3$ nicht mehr, da hier \mathfrak{k}_{CC} $(2m - 1)$ -lineare Terme enthält. \mathfrak{p}_{CC} enthält die übriggebliebe-

nen $(2m)$ -linearen Terme.

Wie oben beschrieben, sind die Paarwechselwirkungen $(m = 2)$ $H_{zz}, H_{XY} \in \mathfrak{p}_{\text{CC}}$ für den Fall zweier Qubits, **Typ-I** lokal invertierbar, während $H_{XXX}, H_{XYZ} \in \mathfrak{p}_{\text{CC}}$ es nicht sind. Weiter sind bei zwei Qubits alle $\mathfrak{k}_{\text{CC}} = \mathfrak{k}$, und somit alle Elemente in \mathfrak{k}_{CC} per Definition **Typ-I** invertierbar. Bei 3 und mehr Qubits enthält \mathfrak{k}_{CC} neben **Typ-I** invertierbaren Wechselwirkungen (z.B. zzz) auch nicht-lokal invertierbare (z.B. $H_{xxx+2yyy+3zzz}$).

Die Zerlegung der Algebra durch die Cartan-Involution θ in zeitumkehrsymmetrische und -antisymmetrische Unterräume genügt also nicht, um eine vollständige Klassifizierung lokal invertierbarer Hamiltonians zu erreichen.

Für $\text{SU}(N)$ mit $N := 2^n$ sind auch andere Wahlen von Cartan-Involutionen, wie in [231] beschrieben, nicht geeignet, eine solche Klassifizierung zu erreichen, z.B.

$$\theta_{\text{AI}}(X) := X^* \quad (9.60)$$

$$\theta_{\text{AII}}(X) := J_N X^* J_N^{-1} \quad (9.61)$$

$$\theta_{\text{AIII}}(X) := I_{p,q} X I_{p,q} \quad (9.62)$$

mit $p = q = N/2$ und

$$J_N := \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1}_{N/2} \\ -\mathbf{1}_{N/2} & 0 \end{pmatrix} \quad (9.63)$$

$$I_{p,q} := \begin{pmatrix} \mathbf{1}_p & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_q \end{pmatrix}. \quad (9.64)$$

Die Zerlegung der Algebren in \mathfrak{k}_θ und \mathfrak{p}_θ stimmt niemals mit der Unterteilung in lokal invertierbare und nicht-invertierbare Hamiltonians $iH_{\text{int}} \in \mathfrak{su}(2^n)$ überein, wie in Tabelle 9.4 zu sehen ist.

9.2.10 Zusammenfassung der Typ-I Inversion

Korollar 3 (Lokale Zeitumkehr) Für einen Wechselwirkungshamiltonian $H = H^\dagger$ mit $\|H\|_2 = 1$ ist folgendes äquivalent:

1. H ist lokal **Typ-I** invertierbar.
2. Sein lokaler C -numerischer Wertebereich enthält -1 :
 $-1 \in W_{\text{loc}}(-H, H)$.
3. Sein lokaler C -numerischer Wertebereich ist $W_{\text{loc}}(-H, H) = [-1; +1]$.
4. $\exists K \in \text{SU}(2)^{\otimes n}$:
 $\|KHK^{-1} + H\|_2^2 = 0 \Leftrightarrow \text{Ad}_K(H) = -H$.

9.2 Typ-I: Lokal invertierbare unitäre 1-Parameter Gruppen

5. H ist lokal unitär ähnlich zu einem \bar{H} mit $\text{Ad}_{K_z}(\bar{H}) = -\bar{H}$.
6. Sei $\mathfrak{g} = \mathfrak{g}_0 \oplus \bigoplus_{i \neq j} \mathbb{C}E_{ij}$ die Wurzelraum-Zerlegung von $\mathfrak{sl}(N, \mathbb{C})$. H ist lokal unitär ähnlich zu einer Linearkombination von Wurzelraumelementen zu nicht verschwindenden Wurzeln

$$\bar{H} := \sum_{\lambda=1}^m c_\lambda E_{ij}^{(\lambda)}, \quad (9.65)$$

was ein Gleichungssystem

$$\sum_{\ell} p_{\lambda,\ell} \cdot \phi_{\ell} = \pm\pi \pmod{2\pi} \quad (9.66)$$

im Sinne von Gleichung (9.41) erfüllt, wobei $p_{\lambda,\ell}$ als Quantenordnung der sphärischen Tensoren interpretiert werden kann.

Beweis: Die Äquivalenz (1)=(2) und (6)=(1) ist in [232] bewiesen. Weiter erhält man (3) \Rightarrow (4): offensichtlich; (4) \Rightarrow (5): Korollar 1; (5) \Rightarrow (6): Korollar 1, (6) \Rightarrow (1): Proposition 2. ■

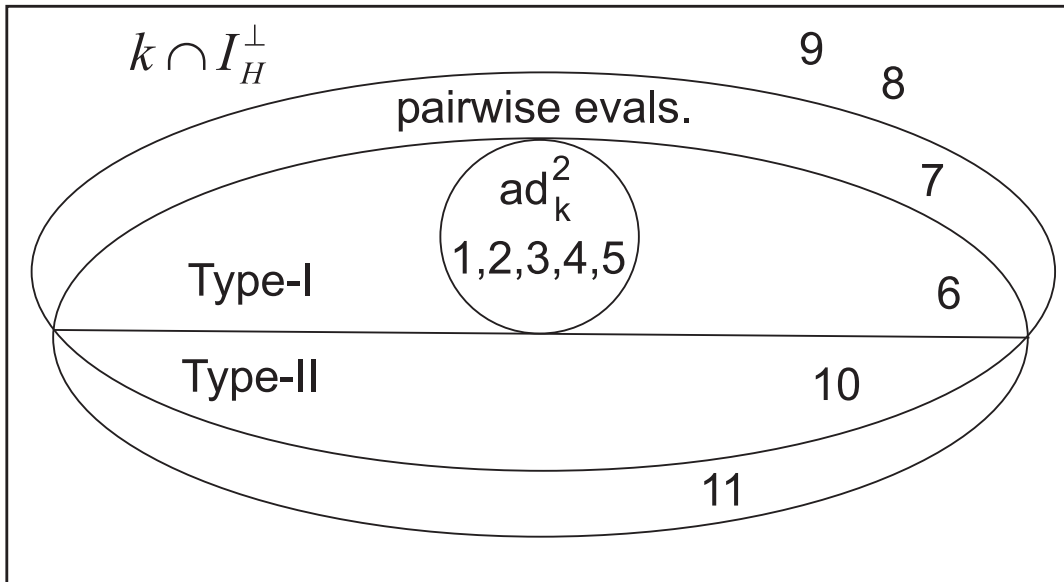


Abbildung 9.4: Im VENN-Diagramm ist dargestellt, dass einfache Kriterien wie $\text{ad}_k^2(H) = H$ und $I_H^\perp \cap \mathfrak{k} \neq \{\}$ nicht ausreichen, um die Klasse der **Typ-I** invertierbaren Hamiltonians zu beschreiben. Die Zahlen beziehen sich auf die Beispiele in Tabelle 9.5.

Tabelle 9.5: Beispiele für Hamiltonians von Paarwechselwirkungen und Multi-Qubit-Interaktionen, für die in Abbildung 9.4 eingeführte Einteilung.

Beispiel	Hamiltonian
1	zz
2	$xx + yy$
3	$xx1 - yy1 + x1x - y1y + 1xx - 1yy$
4	$xx11 - yy11 - 1xxx + 1yxy + 1yyx + 1xyy$ $-x1xx + y1xy + y1yx + x1yy$
5	$xx11 - yy11 + x111 - 1xxx + 1yxy + 1yyx + 1xyy$ $-x1xx + y1xy + y1yx + x1yy$
6	$z11 - xxx + xyy + yxy + yyx$
7	$xx1 + yy1 + zz1 - (1xx + 1yy + 1zz)$
8	$xx1 + yy1 + x1x + y1y + 1xx + 1yy$
9	$zz1 + z1z + 1zz$
10	$zz + z1 + 1x$
11	$zz + z1 + 1z$

Die einfachen Kriterien, wie (i) das paarweise Auftreten der Eigenwerte mit umgekehrtem Vorzeichen, (ii) der nicht-leere Schnitt der lokal unitären Generatoren mit dem Orthokomplement von H , also $I_H^\perp \cap \mathfrak{k} \neq \{\}$, sowie (iii) das notwendige Kriterium, dass H durch den Doppelkommutator von k mit H reproduziert wird, $\text{ad}_k^2(H) = H$, genügen nicht, um die **Typ-I**-Invertierbarkeit vollständig zu beschreiben, wie in Abbildung 9.4 zu sehen ist.

9.3 Typ-II: Punktweise lokal invertierbare Propagatoren

Propagatoren, die nicht für alle $t \in \mathbb{R}$ durch lokal Unitäre invertierbar sind (zusammen mit der gesamten Ein-Parametergruppe, die von deren Hamiltonian generiert wird), können trotzdem für gewisse Zeiten τ invertierbar sein. Im folgenden Abschnitt soll die Frage behandelt werden, ob für ein gegebenes $\tau > 0$, ein Paar $\{K_1, K_2 \neq K_1^{-1}\} \subset \mathbf{K} := \mathbf{SU}(2)^{\otimes n}$ existiert, so dass

$$\begin{aligned}
 & K_1 e^{-i\tau H} K_2 = e^{+i\tau H} \\
 \Leftrightarrow & (K_2^t \otimes K_1) \text{vec}(e^{-i\tau H}) = \text{vec}(e^{+i\tau H}).
 \end{aligned} \tag{9.67}$$

Bemerkung 2 Die Frage der **Typ-II**-Invertierbarkeit stellt sich nicht, wenn die gesamte unitäre Gruppe zur Verfügung steht. In diesem Fall gibt es zu jedem $U_0 \in \mathbf{SU}(N)$ ein triviales Paar $U_1, U_2 \in \mathbf{SU}(N)$ mit $U_1 U_0 U_2 = U_0^{-1}$ (z.B. $U_1 = U_0^{-2}, U_2 = \mathbf{1}$),

9.3 Typ-II: Punktweise lokal invertierbare Propagatoren

Korollar 4 Sei H der Generator einer Ein-Parametergruppe $\mathcal{U} := \{e^{-itH} \mid t \in \mathbb{R}, iH \in \mathfrak{su}(N, \mathbb{C})\}$, wobei H **Typ-I** invertierbar sei. Dann gilt:

1. Alle generischen Elemente der linken und rechten Nebenklasse \mathbf{KU} und \mathbf{UK} sind **Typ-II** lokal invertierbar;
2. Im Gegenzug sind alle Propagatoren von **Typ-II**-invertierbaren Hamiltonians Elemente der Nebenklasse \mathbf{KU} oder \mathbf{UK} , wobei \mathcal{U} wiederum eine Ein-Parametergruppe darstellt, die **Typ-I**-invertierbar ist.

Typ-II-invertierbare Propagatoren stellen somit eine natürliche Erweiterung der **Typ-I**-Invertierbarkeit dar. Das Entscheidungsproblem, ob ein Propagator **Typ-II**-invertierbar ist, ist im Allgemeinen schwierig zu beantworten. Es existiert ein numerisches Verfahren, basierend auf gekoppelten Gradientenflüssen [233, 234]. Für einige Fälle lassen sich dennoch algebraische Methoden anwenden, um diese Frage zu entscheiden. Es gilt also die Symmetrie der Matrixdarstellung der unitären Propagatoren zu analysieren.

Die Symmetrieüberlegungen gehen über die Darstellung der unitären Matrizen hinaus. Es stellt sich folgende Frage: Kann eine willkürliche Matrix durch den Superoperator $(K_2^t \otimes K_1)$ auf ihr Adjungiertes abgebildet werden (s. Gleichung (9.67))? Man muss hierzu den Überlapp zwischen $(K_2^t \otimes K_1)$ und dem Adjunktionssuperoperator $\widehat{\text{Adj}}$ maximieren. Klarerweise gibt es keinen lokal unitären Superoperator $(K_2^t \otimes K_1)$, der einen vollen Überlapp mit $\widehat{\text{Adj}}$ besitzt. Dieser wäre ein universeller Inversionsoperator. Es gibt jedoch Klassen von partiellem Überlapp. Das Ausbleiben von Übereinstimmungen stellt dann Symmetrieanforderungen an die zu adjungierende Matrix. Dies soll im Folgenden analysiert werden. Da $\widehat{\text{Adj}}$ keine Matrixdarstellung über dem Körper der komplexen Zahlen hat, ist eine rein reelle Darstellung notwendig. M_{Re} und M_{Im} sind jeweils der Real- oder Imaginärteil einer allgemeinen komplexen Matrix M . Eine treue Abbildung einer vektorisierten Matrix M erhält man durch

$$M \mapsto \text{vec}(M_{\text{Re}}) \oplus \text{vec}(M_{\text{Im}}) . \quad (9.68)$$

Diese Darstellung ist weniger redundant als $M \mapsto \begin{pmatrix} M_{\text{Re}} & -M_{\text{Im}} \\ M_{\text{Im}} & M_{\text{Re}} \end{pmatrix}$. In dieser Notation und der Definitionsgleichung

$$\widehat{\text{Adj}}_{\mathbb{R}}(\text{vec}(M_{\text{Re}}) \oplus \text{vec}(M_{\text{Im}})) = \text{vec}(M_{\text{Re}}^t) \oplus \text{vec}(-M_{\text{Im}}^t) \quad (9.69)$$

nimmt der Adjunktionssuperoperator folgende reelle Matrixdarstellung an

$$\widehat{\text{Adj}}_{\mathbb{R}} = \begin{pmatrix} \hat{T} & \hat{0} \\ \hat{0} & -\hat{T} \end{pmatrix} . \quad (9.70)$$

9.4 Schlussfolgerung

Im Sinne einer Verallgemeinerung des Hahn'schen Spin Echos wurden all die Multi-Qubit-Wechselwirkungen charakterisiert, die eine Zeitumkehr auch bei einer Beschränkung auf lokale Operationen erlauben. Solche Interaktionen können somit allein durch lokal unitäre Operationen invertiert und refokussiert werden. Eine Reihe von notwendigen Bedingungen in Termen der Geometrie, Eigenoperatoren, Kopplungsgraphen, Tensoranalysis und Wurzelraum-Zerlegungen wurde angegeben. Des Weiteren wurden zwei Klassen von lokal invertierbaren Evolutionen angegeben. **Typ-I** enthält die 1-Parametergruppen, die von den Hamiltonians generiert werden, die Eigenoperatoren der lokal unitären Konjugation mit Eigenwert -1 sind, d.h. $\text{Ad}_K(H) = -H$. Außerdem wurde gezeigt, wie die entsprechenden Eigenräume in einer geschlossenen algebraischen Form zu konstruieren sind. Hamiltonians, die **Typ-I** invertierbare Evolutionen generieren, sind lokal äquivalent zu solchen, die sich nur durch z -Rotationen invertieren lassen. Diese können somit als Normalform angesehen werden. Berechnet man deren Differential, wurde gezeigt, dass sich ihre Komponenten E_{ij} in Beziehung zu den nicht-verschwindenden Wurzeln der Wurzelraum-Zerlegung von $\mathfrak{sl}(N, \mathbb{C})$ setzen lassen: $\text{ad}_{k_z}(E_{ij}) = (e_i - e_j)(E_{ij})$, wobei k_z die Generatoren der lokalen z -Rotationen sind. Im Spezialfall äquivalenter z -Rotationen auf allen Spins, generiert durch F_z , lässt sich eine Beziehung zu den sphärischen Tensoren $T_{j,p}$ der Quantenordnung p herstellen.

Für Ising- zz - und Heisenberg- XY -Wechselwirkungen muss ein entsprechendes Kopplungsnetzwerk einen bipartiten Graphen bilden, um lokal invertierbar zu sein. Eine Ausnahme bildet die Heisenberg- $X(-X)$ -Wechselwirkung, welche für alle Kopplungstopologien **Typ-I** invertierbar ist. Heisenberg- XXX -, $-XXY$ -, und XYZ -Interaktionen sind niemals **Typ-I** invertierbar, da ihre Eigenwerte nie in Paaren unterschiedlicher Vorzeichen auftreten.

Punktweise invertierbare Quantenevolutionen vom **Typ-II** stellen eine Verallgemeinerung von **Typ-I** dar. Sie enthalten die folgenden Nebensklasselemente \mathbf{KU} und \mathbf{UK} , wobei \mathbf{U} **Typ-I** invertierbar ist. **Typ-II** invertierbare Propagatoren wurden anhand der Symmetrie ihrer Matrixdarstellung charakterisiert.

10 Thermisches Quantencomputing und der Jones-Algorithmus

10.1 Einleitung

Bereits in [8] wurde gezeigt, dass für bestimmte Probleme die Anforderungen an einen Quantencomputer drastisch reduziert werden können. Die vorherrschende Meinung, dass reine Quantenzustände notwendig seien, um einen Quantencomputer zu betreiben, findet im Deutsch-Josza-Algorithmus ihre erste Ausnahme. Dieser liefert dann, nach kleinen Modifikationen, auch mit einem Ausgangszustand, der weit von einem reinen Zustand entfernt ist, noch sinnvolle Ergebnisse. Damit wird die nicht-skalierbare Erzeugung pseudo-reiner Zustände [235–238] umgangen. Ein weiteres Beispiel stellt der Quantenalgorithmus zur Approximation des Jones-Polynoms [239], einer Knoteninvarianten, dar [29, 31, 240]. Inwieweit dieser Algorithmus skalierbar ist, soll im folgenden Kapitel behandelt werden. Im Anschluss wird gezeigt, dass sich die vorgestellten Resultate auch praktisch umsetzen lassen. Hierzu wurden für drei verschiedene Knoten bzw. Zöpfe mit 3 Strängen, Datensätze aufgenommen, aus denen sich die jeweiligen Jones-Polynome rekonstruieren lassen.

10.1.1 Knoten und Zöpfe

Definition und Deformation

Der folgende Abschnitt dient zur Einführung in die notwendigen Begriffe. Der interessierte Leser sei auf die weiterführende Literatur verwiesen [241–245]. Zunächst soll geklärt werden, was unter einem Knoten bzw. Zopf zu verstehen ist. Seien p und q zwei Punkte im \mathbb{R}^3 , dann bezeichne $[p, q]$ die Strecke, die die beiden verbindet. Weiter sei (p_1, \dots, p_n) die geordnete Menge voneinander verschiedener Punkte. Die Vereinigung aller Strecken $[p_1, p_2], [p_2, p_3], \dots, [p_{n-1}, p_n], [p_n, p_1]$ heißt geschlossener Polygonzug. Wenn jede Strecke zwei andere in ihren Endpunkten berührt, heißt der Polygonzug einfach. Ein Knoten kann zudem eine Orientierung aufweisen, die in der Regel durch Pfeile dargestellt wird.

Definition 1 *Als Knoten bezeichnen wir einen einfachen geschlossenen Polygonzug im \mathbb{R}^3 .*

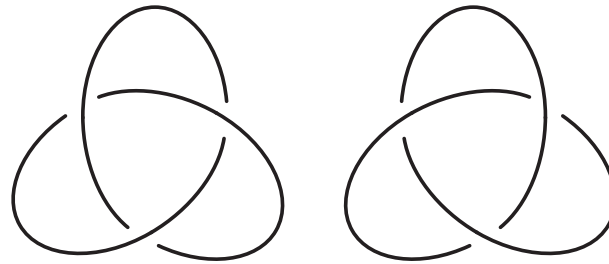


Abbildung 10.1: Nach dem trivialen Unknoten, der Kreislinie, stellt der Kleeblatt-Knoten den einfachsten Knoten dar. Er tritt in zwei spiegelsymmetrischen Varianten auf.

Betrachten wir eine endliche Menge von n polygonalen Knoten, dann nennen wir die disjunkte Vereinigung der n Knoten eine (polygonale) Verschlingung mit n Komponenten. Ein Knoten ist demnach eine Verschlingung mit einer Komponente. Ein einfaches Beispiel für einen Knoten stellt der Kleeblattknoten dar, siehe Abbildung 10.1. An einem Knoten können verschiedene Deformationen durchgeführt werden. Diese sind erlaubt, wenn während der Deformation kein Polygonzug durchtrennt werden muss. Zwei Knoten heißen äquivalent oder isotop, wenn sie aus einer Folge von Deformationen auseinander hervorgehen. Einen Knoten, der zu einem Kreis isotop ist, nennen wir Unknoten oder trivialen Knoten. Um eine bequeme Handhabung von Knoten zu ermöglichen, projizieren wir diese in die Ebene. Falls der Knoten nicht trivial ist, lässt es sich nicht vermeiden, dass sich Kreuzungen bilden. Dies geschieht, wenn zwei Punkte, die auf verschiedenen Polygonzügen des Knotens liegen, auf denselben Punkt projiziert werden. Da wichtig ist, welche der beiden Strecken an einer Kreuzung oben und welche unten liegt, müssen die Kreuzungen entsprechend markiert werden. Dies geschieht durch entsprechende Lücken in den Knotendiagrammen. Es lässt sich nun zeigen, dass alle Deformationen in drei grundlegende Deformationen zerlegt werden können, die drei Reidemeister-Bewegungen, siehe Abbildung 10.2.

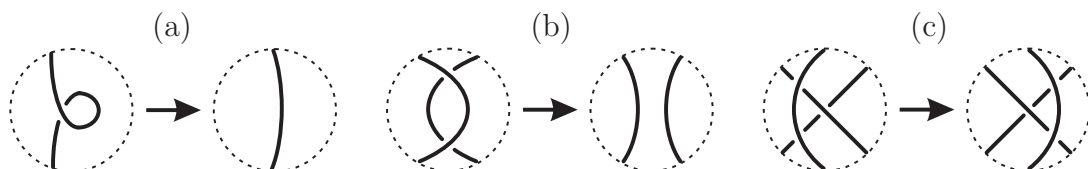


Abbildung 10.2: Die drei Reidemeister-Bewegungen. Alle möglichen Deformationen der Projektion eines Knotens lassen sich auf sie zurückführen.

Theorem 2 REIDEMEISTER-THEOREM [246, 247]

Zwei Knoten können genau dann durch Knotendeformationen ineinander überführt werden, sind also genau dann äquivalent, wenn ihre Knotenprojektionen durch wiederholte Anwendung der drei Reidemeister-Bewegungen, sowie deren Inversen ineinander übergeführt werden können.

Invarianten

Eine Umformung, die eine gegebene Darstellung eines Knotens in eine andere Darstellung überführt, ist, wenn sie überhaupt existiert, nicht immer leicht zu finden.

Deshalb wird oft auf Knoteninvarianten zurückgegriffen, um zwei Knoten zu unterscheiden. Knoteninvarianten zeichnen sich dadurch aus, dass sie unter allen stetigen Deformationen unverändert bleiben.

Besitzen zwei Knoten verschiedene Invarianten so sind sie zwingend verschieden. Der Umkehrschluss gilt leider nicht. Es gibt eine ganze Reihe von augenscheinlichen Knoteninvarianten:

- Kreuzungszahl (minimale Anzahl von Überkreuzungen)
- Etikettierungen (Färbungen der Kanten mit maximal p Farben)
- Entknotungszahl eines Knotens (minimale Anzahl von Kreuzungen, die geändert werden müssen, um aus einem bestehenden Diagramm einen Unknoten zu erzeugen; aus Überkreuzungen werden dabei Unterkreuzungen)¹

Neben diesen einfachen Invarianten, gibt es noch sogenannte Knotenpolynome. Dabei wird jedem Knoten ein Polynom zugeordnet, das sich aus den Knotenprojektionen errechnet. Aus je zwei Knotendiagrammen äquivalenter Knoten errechnet sich dasselbe Polynom. Der Umkehrschluss gilt nicht automatisch. Es treten immer wieder Beispiele von Knotenpaaren auf, die zwar das gleiche Polynom besitzen, aber dennoch unterschiedlich sind. Dennoch sind Polynome eine der stärksten Waffen zur Unterscheidung von Knotendiagrammen. Es gibt eine ganze Reihe von solchen polynomiellen Invarianten:

- Alexander-Polynom $A(z)$ [248]
- Kauffman-Polynom $K(z)$ [249]
- Jones-Polynom $J(z)$ [239, 250]

¹Ein Knoten hat die Entknotungszahl n , wenn es ein Diagramm des Knotens gibt, das durch die Änderung von n Überkreuzungen in Unterkreuzungen zu einem Diagramm des trivialen Knotens wird und wenn es kein anderes Knotendiagramm gibt, bei dem weniger als n Änderungen zu einem Diagramm des Unknotens führen.

Neben der Bedeutung als Invarianten haben Polynome noch andere Eigenschaften. Z.B lässt sich aus den Koeffizienten des Jones-Polynoms das Volumen des Knotens abschätzen [251]. Eine weitere Beziehung besteht zu aktuellen physikalischen Fragen: In der topologischen Quantenfeldtheorie stellt das Jones-Polynom eine Observable dar [252, 253]. Es existieren auch Knotenpolynome mit mehr als einer Variablen, z.B. das *HOMFLY*-Polynom [254].

Knoten als Zöpfe

Jeder Knoten lässt sich auch als Zopf darstellen [255, 256]. Ein Zopf besteht zunächst aus n Strängen. Diese verlaufen vertikal im \mathbb{R}^3 . Wie bei den Knoten gibt es hier Über- und Unterkreuzungen. Ein einfaches Beispiel ist in Abbildung 10.3 dargestellt.

Für Zöpfe existieren weitere einfache Invarianten:

- Zopf-Index: minimale Anzahl von Strängen, um einen Knoten als Zopf darzustellen [257]
- Zopf-Länge: minimale Anzahl von Überkreuzungen im Zopf [258]

Der Zopf-Index beim Kleeblatt-Knoten ist 2, die Zopf-Länge beträgt 3, s. Abb. 10.3. Ein Zopf besteht aus einer Anzahl von parallelen Strängen s und einer Abfolge von Über- und Unterkreuzungen benachbarter Stränge, den Elementartranspositionen. Zuletzt werden noch die entsprechenden Enden der Stränge miteinander

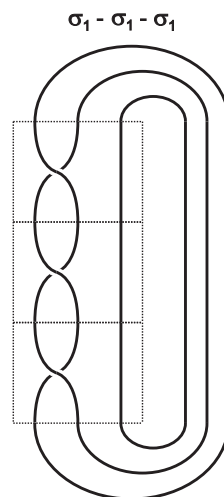


Abbildung 10.3: Der Kleeblatt-Knoten in der Zopfdarstellung. Die dreimalige Überkreuzung $\sigma_1 - \sigma_1 - \sigma_1$ von zwei der drei Stränge liefert die entsprechende Zopfdarstellung.

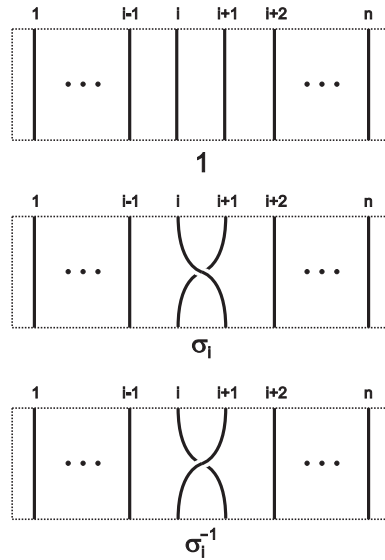


Abbildung 10.4: Die Generatoren der Zopfgruppe. Von oben nach unten sind das Eins-Element, eine Überkreuzung σ_k und eine Unterkreuzung σ_k^{-1} abgebildet.

verbunden².

Zopfgruppe

Eine in diesem Zusammenhang bedeutende Gruppe ist die Zopfgruppe. Sie wird durch folgende $(s - 1)$ Elemente σ_k generiert:

1. $\mathbb{1}$ entspricht dem Eins-Element der Gruppe, in dem alle Stränge gerade verlaufen;
2. σ_k ist das Gruppenelement, welches eine Kreuzung des k -ten Stranges über den $(k + 1)$ -ten darstellt;
3. σ_k^{-1} ist das Gruppenelement, welches eine Kreuzung des k -ten Stranges unter den $(k + 1)$ -ten darstellt;

Die Generatoren sind in Abbildung 10.4 bildlich dargestellt. Daneben gibt es noch zwei weitere Eigenschaften die alle Elemente zu erfüllen haben:

1. $\sigma_k \sigma_j = \sigma_j \sigma_k$, wenn $|j - k| > 1$, s. Abbildung 10.5;
2. $\sigma_k \sigma_{(k+1)} \sigma_k = \sigma_{(k+1)} \sigma_k \sigma_{(k+1)}$ (Artin- oder Flechtrelation), s. Abbildung 10.6

²In [29] tauchen zwei verschiedene Methoden zum Schließen eines Zopfes auf: Trace-Closure und Plat-Closure. Im Folgenden wird nur die erstere Methode behandelt, bei der jeder Anfang mit seinem Ende verbunden wird.

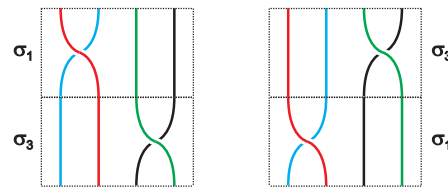


Abbildung 10.5: Voneinander getrennte Kreuzungen kommutieren.

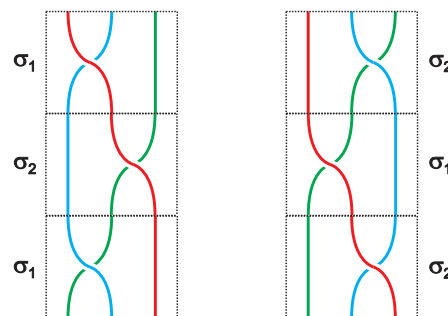


Abbildung 10.6: Die sogenannte Artin- oder Flechtrelation.

Eine Zopfgruppe mit $k < s$ Strängen ist eine Untergruppe der Zopfgruppe mit s Strängen.

10.1.2 Jones-Polynom

Das Jones-Polynom ist eine Invariante eines Knotens oder einer Verschlingung. Es ist ein Laurent-Polynom³ mit ganzzahligen Koeffizienten.

Um nun das Jones-Polynom zu bestimmen und an bestimmten Stellen z auszuwerten, gibt es mehrere Möglichkeiten. Das Polynom kann direkt aus dem Knotendiagramm berechnet werden [30]. Dies ist bei komplizierten Knoten mit vielen Kreuzungen ein langwieriger Prozess, da jede Kreuzung zu einer Aufspaltung in zwei neue Knotendiagramme führt. Beim Aufspalten wird eine Überkreuzungen des Knotens auf zwei verschiedene Weisen aufgespalten. Dies führt effektiv dazu, dass 2^k Knotendiagramme entstehen, wenn k die ursprüngliche Anzahl von Überkreuzungen war. Diese Vorgehensweise skaliert somit exponentiell. Daneben existiert ein weiterer Weg das Jones-Polynom zu berechnen. Dazu benötigen wir eine Darstellung des Knotens als geschlossener Zopf. Die Zopfdarstellung lässt sich leicht in elementare Zopfgruppenelemente zerlegen. Für diese Gruppenelemente lassen sich nun Matrixdarstellungen finden. Die Gruppenmultiplikation wird dann durch die Matrixmultiplikation ersetzt. Der Kleeblattknoten lässt sich als

³Ein Laurent-Polynom ist eine Laurent-Reihe $\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n z^n$ mit endlich vielen von Null verschiedenen Koeffizienten.

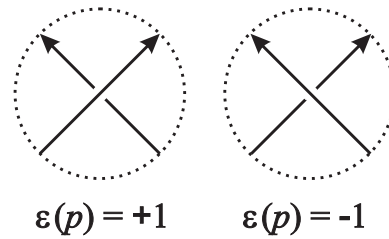


Abbildung 10.7: Zur Berechnung der Windungszahl eines Knotens

Produkt dreier Elementartranspositionen $\sigma_1(z)$ darstellen, die auf zwei Strängen operieren und alle in die gleiche Richtung zeigen, s. Abbildung 10.3. Es sind also alles entweder Über- oder Unterkreuzungen:

$$M_{Kleblatt}(z) = \sigma_1(z)\sigma_1(z)\sigma_1(z) . \tag{10.1}$$

Wie bereits in Kapitel 2.1.2 erwähnt, stellt der Charakter einer Darstellung eines Gruppenelements eine Invariante unter Ähnlichkeitstransformation dar. In diesem Fall hängen die Darstellungen Σ_1 von einem weiteren Parameter z ab, so dass die Spur von $M_{Kleblatt}$ auch von z abhängt: $\text{tr}(M_{Kleblatt}(z))$. Die erhaltene Spur ist ein Polynom und kann nun in das Jones-Polynom $J(z)$ umgerechnet werden. Zusammen mit $z = e^{i\varphi}$ lässt sich das Jones-Polynom aus der Spur wie folgt berechnen:

$$J(e^{i\varphi}) = \text{tr}(M(z)) + (\delta - 2) e^{i4\text{Writhe}(b)} . \tag{10.2}$$

Mit $\text{Writhe}(b)$, der Windungszahl, wird in einem orientierten Knoten die folgende Summe bezeichnet:

$$\sum_{\text{alle Kreuzungen } k} \epsilon(k) , \tag{10.3}$$

wobei $\epsilon(k) = \pm$ gemäß Abbildung 10.7.

10.1.3 Quantenmechanischer Algorithmus

Da die Dimension dieser Darstellung mit der Anzahl der Stränge exponentiell wächst, wird es für klassische Algorithmen zunehmend aufwendiger, die Produkte mehrerer Elementartranspositionen, sowie deren Spur zu berechnen. Durch einen Quantenalgorithmus kann diese Berechnung durch eine lineare Anzahl von Operationen und Messungen erledigt werden [29, 31, 240].

Das Jones-Polynom $J(z)$ lässt sich an bestimmten Werten für $z \in \mathbb{C}$, mit $|z| = 1$ und einer noch zu spezifizierenden Eigenschaft⁴, durch einen Quantencomputer bestimmen. Somit lässt sich ein Satz von Messwerten

$$\{(z_1, J(z_1)), (z_2, J(z_2)), \dots, (z_m, J(z_m))\} \tag{10.4}$$

⁴Es sind nur solche Werte für z zulässig, die eine unitäre Darstellung erlauben.

generieren. Durch eine Polynominterpolation lässt sich dann das Jones-Polynom bestimmen. Die Genauigkeit dieser Interpolation hängt stark vom erhaltenen Datensatz ab. Ideal wäre eine, auf dem Einheitskreis in der komplexen Ebene äquidistante, Anordnung der verschiedenen z_k . Da nicht alle Werte z zu unitären Darstellungen führen, ist das mit dem jetzigen Ansatz nicht möglich. Es wird gezeigt, dass, anders als in [29] verlangt, nicht nur diskrete Werte für z zugelassen sind, sondern ganze Definitionsbereiche erlaubt sind. Die Matrix, deren Spur es zu messen gilt, ist das Produkt unitärer Darstellungen von Elementartranspositionen. Um zu dieser Darstellung zu gelangen, wurden mehrere Wege in der Literatur vorgeschlagen. Diese sollen hier aufgrund ihrer Komplexität nicht wiederholt werden. Der interessierte Leser sei auf die einschlägige Literatur verwiesen [29, 62].

10.1.4 Thermische Quantenalgorithmen

Ausgangszustand

Unter thermischen Quantenalgorithmen versteht man die Klasse von Quantenalgorithmen, welche als Ausgangszustand einen hochgradig gemischten Zustand verwenden. In der Literatur sind bereits eine Reihe solcher thermischer Algorithmen bekannt [11, 31, 259].

Der Ausgangszustand eines thermischen Algorithmus ist der thermische Dichteoperator des Systems, welcher durch die Boltzmann-Verteilung beschrieben wird. Geht man von einem n -Spin- $\frac{1}{2}$ -System aus, so erhält man insgesamt 2^n mögliche Zustände. Die Wahrscheinlichkeit einen Zustand $|r\rangle$, mit $0 \leq r \leq 2^n - 1$, dort anzutreffen ist

$$p(|r\rangle) = \frac{\exp(-E_r/kT)}{\sum_{j=0}^{N-1} \exp(-E_j/kT)}. \quad (10.5)$$

E_r ist die Energie des r -ten Eigenzustands des Hamiltonoperators des Systems, k ist die Boltzmann-Konstante und T ist die absolute Temperatur.

Unter der Annahme fehlender Kohärenzen im thermischen Grundzustand [207], kann der Dichteoperator des Systems wie folgt beschrieben werden [207]

$$\rho_{th} \approx \frac{\exp(-H/kT)}{\text{Tr}(\exp(-H/kT))} \approx \frac{1}{N} \left(\mathbf{1} - \frac{H}{kT} \right)$$

für $\|H\| \ll kT$.

Im Hamiltonoperator treten neben lokalen z -Termen, den chemischen Shifts, auch bilineare Terme, die Kopplungen zwischen Paaren von Kernen auf. Ist die Stärke der Kopplungen zwischen den Kernen sehr viel kleiner als die Resonanzfrequenzen ω_l der einzelnen Kerne I_l , kann der Dichteoperator weiter vereinfacht werden [207].

$$\rho_{th} \approx \frac{1}{N} \left(\mathbf{1} - \sum_{l=1}^{n+1} \alpha_l I_{lz} \right) \quad (10.6)$$

mit $\alpha_l = \frac{\hbar \omega_l}{kT}$. Die hier gemachten Annahmen führen allerdings zu einer Reihe von Fehlerquellen in den experimentellen Resultaten. Aus dem thermischen Dichteoperator lässt sich der Dichteoperator I_{1x} auf einfache Weise herstellen⁵.

Gatter

Die unitären Gatter U eines Quantenalgorithmus auf reinen Zuständen müssen nun als kontrollierte U , kurz cU , implementiert werden: $cU := \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & U \end{pmatrix}$. Das Gesamtsystem besteht somit aus $n+1$ Qubits, was bei der Berechnung der Normierungskonstanten eine Rolle spielt.

Beginnend mit dem Zustand $I_{1x} = \frac{1}{2} \sigma_x \otimes \mathbf{1} \cdots \otimes \mathbf{1}$ wird die unitäre Evolution unter cU wie folgt beschrieben:

$$\begin{aligned} cU I_{1x} cU^\dagger &= \underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & U \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & U \end{pmatrix}^\dagger}_{(10.7)} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ U & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & U \end{pmatrix}^\dagger = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & U^\dagger \\ U & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Wird nun I_{1x} gemessen, erhalten wir als Ergebnis den Realteil von $\text{tr}(U)$:

$$\begin{aligned} \text{tr}\{I_x \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & U^\dagger \\ U & 0 \end{pmatrix}\} / N &= \text{tr}\{\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & U^\dagger \\ U & 0 \end{pmatrix}\} / N \\ &= \frac{1}{4} \text{tr}\{\begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & U^\dagger \end{pmatrix}\} / N = \frac{1}{4} \text{tr}\{U \oplus U^\dagger\} / N \\ &= \frac{1}{4} (\text{tr}\{U\} + \text{tr}\{U^\dagger\}) / N = \frac{1}{4} 2 \text{Re}(\text{tr}\{U\}) / N \\ &= \text{Re}(\text{tr}\{U\}) / 2N \quad , \end{aligned} \quad (10.8)$$

mit $-2^n \leq \text{Re}(\text{tr}\{U\}) \leq 2^n$ und $N = \text{tr}\{I_x I_x\} = \frac{1}{4} 2^{n+1} = \frac{1}{4} 2 \cdot 2^n$. Der Wertebereich ist somit $[-1, 1]$, unabhängig von der Anzahl der Qubits.

Auf ähnliche Weise lässt sich aus einer Messung von I_{1y} der Imaginärteil der Spur berechnen.

⁵Präparation von $\rho(0) = I_x$ am Beispiel eines Systems aus ¹H und ¹³C:

- 1) ¹H-Vorsättigung (10 s CW @ 50 db)
- 2) [90°(¹H)-Puls und Gradienten] wird mehrmals mit unterschiedlichen Gradienten angewendet
- 3) 90°(¹³C)y-Puls

Zusammenfassung: Ideale thermische Quantenalgorithmen

Die gesamte Prozedur eines thermischen Quantenalgorithmus zur Berechnung der Spur einer Matrix kann wie folgt zusammengefasst werden:

1. Präparation des Ausgangszustandes:

$$\rho_0 = S_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{1} \quad (10.9)$$

2. Initialisierung:

$$\rho_1 = R_y \rho_0 R_y^\dagger = S_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix} \quad (10.10)$$

3. Ausführen des Algorithmus durch kontrollierte Quantengatter:

$$\rho_f = cU_m \cdots cU_1 \rho_1 cU_1^\dagger \cdots cU_m^\dagger = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & U^\dagger \\ U & 0 \end{pmatrix} \quad (10.11)$$

4. Messung von S^- , um $\text{tr}(U^\dagger)$ zu erhalten:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \text{tr}\{(S^-)^\dagger \rho_f\} &= \frac{1}{N} \text{tr}\left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix}^\dagger \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & U^\dagger \\ U & 0 \end{pmatrix} \right\} \\ &= \frac{1}{N} \text{tr}\left\{ \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & U^\dagger \end{pmatrix} \right\} = \frac{1}{2N} \text{tr}\{U^\dagger\} \end{aligned} \quad (10.12)$$

Einen solchen Quantenalgorithmus kann man als eine Abbildung ϕ vom Raum der Dichteoperatoren auf die komplexen Zahlen

$$\begin{aligned} \phi : \rho &\rightarrow \mathbb{C} \\ \rho_1 &\mapsto a + ib \end{aligned} \quad (10.13)$$

auffassen. Diese Abbildung ist gegeben durch

$$\phi(\rho_1) = \frac{1}{N} \text{tr}\{(S^-)^\dagger cU \rho_1 cU^\dagger\}. \quad (10.14)$$

Die Frage nach dem Kern dieser Abbildung wird später durch Lemma 10 beantwortet.

10.2 Skalierbarkeitsaspekte

Um zu ermitteln, ob der beschriebene Algorithmus skalierbar ist, sind folgende Aspekte zu untersuchen:

1. Wie skaliert die Dimension der Matrixdarstellung der Zopfgruppenelemente für eine gegebene Anzahl von Strängen?
2. Wie skaliert der zulässige Definitionsbereich der unitären Darstellung der Zopfgruppenelemente für eine gegebene Anzahl von Strängen?
3. Wie skalieren experimentelle Ungenauigkeiten? Welche zusätzlichen Störterme beinhaltet der thermische Dichteoperator? Wovon hängen diese ab und wie beeinflussen sie das Resultat?
4. Wie skalieren die unteren Schranken für experimentelle Fehler, um zwei Knoten noch sinnvoll zu unterscheiden?

Eine weitere Frage ist die nach schnellen, besser noch zeit- oder/und relaxations-optimierten Implementierungen der entsprechenden benötigten Gatter.

10.2.1 Unitäre Darstellungen der Zopfgruppenelemente

Zunächst sollen kurz die Darstellungen der Elemente einer solchen Zopfgruppe vorgestellt werden. Dies geschieht exemplarisch an den 2 Elementen der 3-Strangzopfgruppe und den 3 Elementen der Zopfgruppe mit 4 Strängen. Um eine kompakte Schreibweise zu erhalten, verwendet man folgende Abkürzung: $s(\cdot) := \sin(\cdot)$. Für 3 Stränge:

$$U_1 := \begin{pmatrix} e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & -e^{i\theta} \frac{s(4\theta)}{s(2\theta)} + e^{-i\theta} \end{pmatrix}$$

$$U_2 := \begin{pmatrix} -e^{i\theta} \frac{s(6\theta)}{s(4\theta)} + e^{-i\theta} & -e^{i\theta} \frac{\sqrt{s(6\theta)s(2\theta)}}{s(4\theta)} \\ -e^{i\theta} \frac{\sqrt{s(6\theta)s(2\theta)}}{s(4\theta)} & -e^{i\theta} \frac{s(2\theta)}{s(4\theta)} + e^{-i\theta} \end{pmatrix}$$

und für 4 Stränge

$$U_1 := \begin{pmatrix} e^{-i\theta} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\theta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\theta} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -e^{i\theta} \frac{s(4\theta)}{s(2\theta)} + e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e^{i\theta} \frac{s(4\theta)}{s(2\theta)} + e^{-i\theta} \end{pmatrix}$$

$$U_2 := \begin{pmatrix} e^{-i\theta} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -e^{i\theta} \frac{s(6\theta)}{s(4\theta)} + e^{-i\theta} & 0 & -e^{i\theta} \frac{\sqrt{s(6\theta)s(2\theta)}}{s(4\theta)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -e^{i\theta} \frac{s(6\theta)}{s(4\theta)} + e^{-i\theta} & 0 & -e^{i\theta} \frac{\sqrt{s(6\theta)s(2\theta)}}{s(4\theta)} \\ 0 & 0 & -e^{i\theta} \frac{\sqrt{s(6\theta)s(2\theta)}}{s(4\theta)} & 0 & -e^{i\theta} \frac{s(2\theta)}{s(4\theta)} + e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -e^{i\theta} \frac{\sqrt{s(6\theta)s(2\theta)}}{s(4\theta)} & 0 & -e^{i\theta} \frac{s(2\theta)}{s(4\theta)} + e^{-i\theta} \end{pmatrix}$$

$$U_3 := \begin{pmatrix} e^{-i\theta} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -e^{i\theta} \frac{s(8\theta)}{s(6\theta)} + e^{-i\theta} & -e^{i\theta} \frac{\sqrt{s(8\theta)s(4\theta)}}{s(6\theta)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -e^{i\theta} \frac{\sqrt{s(8\theta)s(4\theta)}}{s(6\theta)} & -e^{i\theta} \frac{s(4\theta)}{s(6\theta)} + e^{-i\theta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\theta} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e^{i\theta} \frac{s(4\theta)}{s(2\theta)} + e^{-i\theta} \end{pmatrix}$$

Diese Zopfgruppenelemente erfüllen, unabhängig von θ , alle Zopfgruppenrelationen:

- Kommutativität nicht-benachbarter Elemente $U_1U_3 = U_3U_1$
- Artin- oder Flechtrelation $U_kU_{k+1}U_k = U_{k+1}U_kU_{k+1}$ mit $k \in \{1, 2\}$.

Wie bereits erwähnt, stellen die Zopfgruppen mit weniger Strängen Untergruppen dieser Gruppe dar. Die rot eingefärbten Matrixeinträge in U_1 und U_2 der 4-Strang-Zopfgruppe stellen eine 2-dimensionale Darstellung der Elemente der Zopfgruppe mit 3 Strängen dar.

Die Außerdiagonaleinträge (ab U_2) folgen dem Schema:

$$-e^{i\theta} \frac{\sqrt{\sin((k+2)\theta) \sin((k-2)\theta)}}{\sin(k\theta)},$$

wobei $k \in \{2, 4, \dots, 2(s-1)\}$, wenn s die Anzahl der Stränge ist.

Dimension der unitären Darstellungen

Die Anzahl der Pfade (s. [29]) bestimmt die Dimension der Darstellung. Sei s die Anzahl der Stränge, dann ergibt sich für die Dimension der Darstellung $\binom{s}{\lfloor \frac{s}{2} \rfloor}$. Diese Zahlen heißen, aufgrund ihrer Stellung im Pascal'schen Dreieck, auch zentrale Binomialkoeffizienten. Über die Stirling-Formel ⁶ lässt sich dieser Ausdruck für große s durch $\frac{2^s}{\sqrt{2\pi s}} \approx 2^s$ approximieren. Die Dimension der Darstellung wächst also exponentiell, die Anzahl der Qubits linear.

Wie am Beispiel der Elemente der Zopfgruppe mit 4 Strängen zu sehen, haben alle Darstellungen den gleichen Matrixeintrag $(U_m)_{1,1}$. Die Darstellung ist also reduzibel. Dieser Matrixeintrag kann somit vernachlässigt werden. Auf diese Weise kann die Dimension der Darstellung noch um eine Dimension erniedrigt werden. Wir benötigen also $\binom{s}{\lfloor \frac{s}{2} \rfloor} - 1$ Dimensionen, um die Zopfgruppe auf s Strängen darzustellen. Die Anzahl der benötigten Qubits ist in [29] höher, da dort die Länge des Pfades 2^s ([29] Kapitel 2.12.) über die Anzahl der Qubits

⁶ $n! \approx \sqrt{(2\pi n)n^n e^{-n}}$

entscheidet. Für 3 Stränge werden dort also 2^3 Dimensionen gebraucht, während in unserem Fall nur 2 benötigt werden. Auch die Anzahl der Qubits ist hier somit geringer.

Definitionsbereiche

Wie bereits erwähnt, ist der Definitionsbereich des Jones-Polynoms auf solche $z = e^{i\theta}$ beschränkt, die eine unitäre Darstellung aller Zopfgruppenelemente zulassen. Wie noch gezeigt wird, schrumpft dieser Bereich mit zunehmender Anzahl der Stränge. Eine Zusammenfassung ist der Tabelle 10.1 zu entnehmen. Die Beschränkung der Definitionsbereiche unitärer Darstellungen kann aus der Definitionsgleichung für unitäre Matrizen

$$U \times U^\dagger = \mathbf{1} \tag{10.15}$$

abgeleitet werden. Auf der rechten Seite von Gleichung (10.15) verschwinden die Außerdiagonalelemente dann, wenn $\sin((m + 2)\theta) \sin((m - 2)\theta) > 0$ ist, wobei $m = 2(s - 1)$ und s die Anzahl der Stränge ist, s. Abbildung 10.8. Der Definitionsbereich schrumpft somit mit wachsender Zahl der Stränge. Er schrumpft zwar nicht exponentiell, dennoch werden mit wachsender Zahl der Stränge immer höhere Genauigkeitsanforderungen an die einzelnen Quantengatter gestellt, um die Unterscheidung zweier Zopfdarstellungen noch zu gewährleisten. Die Bereiche werden dabei durch die neu hinzukommenden Zopfgruppenelemente immer weiter eingeschränkt. Z.B. ist der Definitionsbereich der Zopfgruppe mit zwei Strängen nicht beschränkt, da die verschiedenen Teilbereiche aneinander grenzen und die Ränder eingeschlossen sind. Dies gilt auch für Einbettungen dieser Zopfgruppe in höhere Zopfgruppen. Für $|\theta| > 2\pi$ zeigt das Jones-Polynom ein periodisches

Tabelle 10.1: Zusammenfassung der Definitionsbereiche unitärer Darstellungen der Zopfgruppen mit unterschiedlichen Anzahlen von Strängen. Es gilt $k \in \mathbb{N}$.

Anzahl der Stränge	Definitionsbereich θ
2	$\left[-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4}\right] + \frac{k\pi}{2}$
3	$\left[-\frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{6}\right] + \frac{k\pi}{2}$
4	$\left[-\frac{\pi}{8}, \frac{\pi}{8}\right] + \frac{k\pi}{2}$
5	$\left[-\frac{\pi}{10}, \frac{\pi}{10}\right] + \frac{k\pi}{2}$
⋮	⋮
s	$\left[-\frac{\pi}{2s}, \frac{\pi}{2s}\right] + \frac{k\pi}{2}$

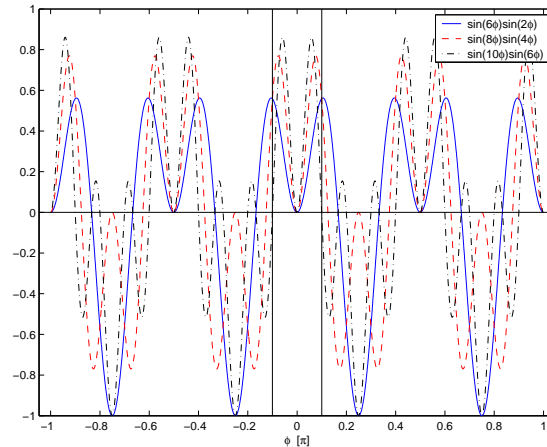


Abbildung 10.8: Argumente der Wurzelfunktionen in den Matrix-Darstellungen der Zopfgruppenelemente $U_{2,3,4}$. Die Darstellungen sind unitär, solange die Argumente positiv sind.

Verhalten. Die Zopfgruppenelemente $U(\theta + \frac{k\pi}{2})$ mit $k \in \mathbb{Z}$ unterscheiden sich nur in einem globalen Phasenfaktor $\{1, i, -1, -i\}$. Dieser kann einen Effekt auf die minimale Dauer der zeitoptimierten Implementierung haben, s. Kapitel 5.

Grenzwerte der Matrixeinträge

Einige der Matrizen weisen Einträge folgender Form auf:

$$\frac{\sin((m \pm 2)\theta)}{\sin(m\theta)} \text{ oder } \frac{\sqrt{\sin((m+2)\theta) \sin((m-2)\theta)}}{\sin(m\theta)}.$$

Im Limit $\theta \rightarrow 0$ erhalten wir $\frac{m \pm 2}{m}$ bzw. $\frac{\sqrt{(m+2)(m-2)}}{m}$, was sich durch Verwenden von $\sin(\alpha) \sin(\beta) = \frac{1}{2} [\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha + \beta)]$ und der Regel von l'Hôpital zeigen lässt.

Ähnlichkeit der Darstellung verschiedener Zopfgruppenelemente

Eine weitere Beobachtung betrifft die Eigenwerte der Darstellungen der Zopfgruppenelemente. Bei festem θ besitzen alle U_m dieselben Eigenwerte wie U_1 . Sie sind somit alle durch eine Ähnlichkeitstransformation in U_1 überführbar:

$$U_m(\theta) = V_m(\theta)U_1(\theta)V_m(\theta)^{-1}. \quad (10.16)$$

Da U_1 aber unitär für alle Werte von θ ist, muss die Nicht-Unitarität durch die Transformationsmatrizen V_m kommen. Ist ein gegebenes U_m unitär, so ist auch

das dazugehörige V_m unitär. Im anderen Fall ist V_m zwar nicht unitär, aber dennoch ein Element von $\mathbf{SL}(d)$.

10.2.2 Zeitabschätzungen für höhere Zopfgruppen

Ein Blick auf die unitären Darstellungen von Zopfgruppenelementen mit 4 zeigt, dass (i) nur wenige Einträge vorhanden sind, (ii) diese immer $\mathbf{U}(2)$ -Unterstrukturen besitzen und (iii) nicht selten in mehreren Kopien vorliegen. Nach der Einbettung der Zopfgruppenelemente in die nächst größere $\mathbf{SU}(2^n)$ werden sie als kontrollierte Operationen implementiert. Die Anzahl der Einträge steigt dennoch exponentiell⁷, s. Tabelle 10.2.

Als Beispiel sei die unitäre Darstellung des letzten Zopfgruppenelements bei 4 Strängen aufgeführt. Die Darstellung der Zopfgruppe mit der Dimension 6 wird zunächst in die $\mathbf{SU}(2^3)$ eingebettet.

Um eine kompakte Schreibweise zu erhalten schreiben wir $s(\phi)$ für $\sin(\phi)$. Dann wird wie folgt zerlegt:

$$\begin{aligned}
 U_3 &:= \begin{pmatrix} e^{-i\theta} \mathbf{1}_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -e^{i\theta} \frac{s(8\theta)}{s(6\theta)} + e^{-i\theta} & -e^{i\theta} \frac{\sqrt{s(8\theta)s(4\theta)}}{s(6\theta)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -e^{i\theta} \frac{\sqrt{s(8\theta)s(4\theta)}}{s(6\theta)} & -e^{i\theta} \frac{s(4\theta)}{s(6\theta)} + e^{-i\theta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\theta} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -e^{i\theta} \frac{s(4\theta)}{s(2\theta)} + e^{-i\theta} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} e^{-i\theta} \mathbf{1}_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -e^{i\theta} \frac{s(8\theta)}{s(6\theta)} + e^{-i\theta} & -e^{i\theta} \frac{\sqrt{s(8\theta)s(4\theta)}}{s(6\theta)} & 0 \\ 0 & -e^{i\theta} \frac{\sqrt{s(8\theta)s(4\theta)}}{s(6\theta)} & -e^{i\theta} \frac{s(4\theta)}{s(6\theta)} + e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\theta} \mathbf{1}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{1}_7 & 0 \\ 0 & -e^{2i\theta} \frac{s(4\theta)}{s(2\theta)} + 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Der zweite Faktor ist ein zweifach kontrollierter Phasenshift, ähnlich dem TOFFOLI-Gatter. Auch der erste Faktor ist unitär äquivalent zu einem zweifach kontrollierten Phasenshift. Beide operieren jeweils nur auf einem zweidimensionalen Unterraum des gesamten Hilbertraumes. Die Anzahl der Faktoren, die zu mehrfach kontrollierten Phasenshifts äquivalent sind, ergibt sich zu $\binom{s-2}{\lfloor \frac{s-2}{2} \rfloor}$. Diese Formel trat bereits bei der Berechnung der Dimension der Darstellungen auf. Somit steigt diese Anzahl exponentiell an. An eine sequentielle Implementierung ist somit nicht zu denken.

⁷Eventuell lässt sich jedoch noch ausnutzen, dass mehrere Kopien gleichzeitig bearbeitet werden können, was einen erheblichen Zeitvorteil bringen sollte.

Tabelle 10.2: Anzahl der zu mehrfach kontrollierten Phasenshifts äquivalenten Faktoren der unitären Darstellungen der Zopfgruppenelemente in Abhängigkeit der Anzahl der Stränge s .

s	3	4	5	6	7
# Faktoren	1	2	3	6	10

Treten jedoch mehrere Kopien ein und desselben 2-Level-Propagators auf, (wie im Beispiel des vierten Elements der 5-Strang-Zopfgruppe, bei der

$$\begin{pmatrix} -e^{i\theta} \frac{s(6\theta)}{s(4\theta)} + e^{-i\theta} & -e^{i\theta} \frac{\sqrt{s(6\theta)s(2\theta)}}{s(4\theta)} \\ -e^{i\theta} \frac{\sqrt{s(6\theta)s(2\theta)}}{s(4\theta)} & -e^{i\theta} \frac{s(2\theta)}{s(4\theta)} + e^{-i\theta} \end{pmatrix} \quad (10.17)$$

zweimal auftaucht) sind Vereinfachungen bei der Implementierung möglich. Solche Vereinfachungen sollen an einem einfachen Beispiel verdeutlicht werden:

Bei einem heteronuklearen 2-Spinsystem werden folgende unitäre Operationen implementiert: $\sqrt{i} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$. Dieses CNOT benötigt $T = \frac{1}{2J}$, wohingegen $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ als einfacher Puls implementiert werden kann. Im Fall unendlich schneller Pulse benötigen wir dann überhaupt keine Zeit.

Um nun kontrollierte U zu implementieren, benutzt man die Ergebnisse über lokal invertierbare U ($K_1 U K_1^\dagger = U^\dagger$). Daraus lässt sich folgendes allgemeine Schema skizzieren, s. oben. Die Zeitkomplexität des cU 's berechnet sich zu $O(cU^2) = 2 \times O(U) + 2 \times O(cK)$.

Sollte $U(\theta)$ eine ungerade Periodizität besitzen, d.h. $U^m = \mathbf{1}$, mit $m = 2k + 1$, $k \in \mathbb{N}$ sind auch kontrollierte U -Gatter zugänglich. Anstatt der U -Gatter in Abbildung 10.9, werden U^{k+1} -Gatter verwendet. Ist das Kontrollbit im 1-Zustand wirkt auf die Zielqubits effektiv $U^{2k+2} = U^{2k+1}U = \mathbf{1}U$.

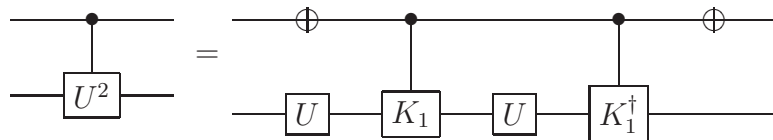


Abbildung 10.9: Allgemeines Schema für die Implementierung von cU -Gattern aus kontrollierten lokalen Operationen und U -Gattern [171].

10.2.3 Experimentelle Fehlerquellen

Eine Reihe experimenteller Fehlerquellen ist bekannt und quantifizierbar. Ihre Effekte auf das Messergebnis sollen nun im Einzelnen studiert werden:

- Der Ausgangszustand ist der thermische Dichteoperator, statt einem reinen Zustand
- Pulse haben eine endliche Dauer
- Relaxationseffekte
- B_1 -Feldinhomogenität

Die Effekte sind in Abbildung 10.10 für einen einzelnen Messwert dargestellt. In den Abbildungen 10.13-10.15 werden gemessene Werte mit theoretisch vorhergesagten verglichen.

Eine Fallstudie bezüglich der Fehlerquellen ist in Abbildung 10.10 zu sehen. Der Temperatureinfluss ist gering und zeigt nur im mK -Regime Auswirkungen.

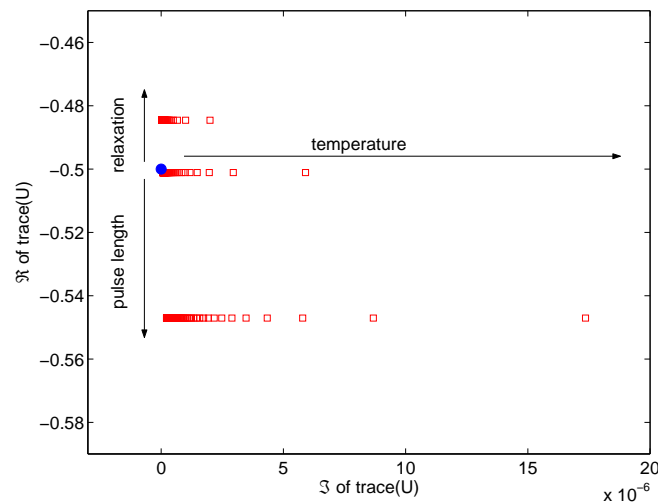


Abbildung 10.10: Die verschiedenen Fehler verschlechtern den idealen Messwert (●) auf verschiedene Weise. Die drei waagerechten Gruppen gehören zu jeweils einer bestimmten Pulsdauer. Die einzelnen Gruppen spalten sich weiter nach ihrer Temperatur auf. Relaxation bewirkt eine Skalierung des Absolutwertes von $\text{tr}(U)$, hin zum Nullpunkt in der komplexen Ebene.

Wohingegen Pulslänge und relaxative Effekte beim vorliegenden experimentellen Setup bereits einen messbaren Einfluss haben.

Thermischer Dichteoperator als Ausgangszustand

Wie bereits in Kapitel 10.1.4 erwähnt, wird als Ausgangsoperator S_z angenommen. Dieser Produktoperator stellt (i) den Teil des Dichteoperators dar, der für den Algorithmus wichtig ist, und ist (ii) nicht ohne andere Störterme zu erhalten. Der Einfluss dieser zusätzlichen Terme soll nun im folgenden Kapitel behandelt werden.

Dazu benötigen wir den thermischen Dichteoperator eines n Spinsystems. Ganz allgemein lässt sich dieser als $e^{-\frac{H}{kT}} / \text{tr}(e^{-\frac{H}{kT}})$ beschreiben. Da die Energieniveaus der Spins- $\frac{1}{2}$ verglichen mit kT sehr klein sind, kann die Taylorreihenentwicklung als gute Approximation (die sogenannte Hochtemperaturnäherung) angesehen werden. Aus $\rho = e^{-\frac{H}{kT}} / \text{tr}(e^{-\frac{H}{kT}})$ und $H = B_0 \sum_k \gamma_k I_{kz}$ folgt⁸ in erster Näherung $\rho_0 = \mathbf{1}/N + \sum_k c_k I_{kz}$ mit $c_k = \tanh(-\frac{\gamma_k B_0}{kT})$. Der Effekt höherer Terme ist zwar gering, soll aber später dennoch einer genaueren Untersuchung unterzogen werden. Setzen wir $I_{1z} = S_z$ stellt sich zunächst die Frage, welchen Effekt diese zusätzlichen Terme auf das Ergebnis haben.

Wie im Folgenden gezeigt wird, liegen diese im Kern der Abbildung ϕ , d.h. sie werden auf 0 abgebildet. Somit haben sie überhaupt keinen Effekt auf das Resultat:

Der Ausgangszustand sei also $\rho_0 = \mathbf{1}/N + \sum_{k=1}^n c_k I_{kz}$. ρ_0 nimmt somit Diagonalgestalt an:

$$\rho_0 = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_{2(n+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & D' \end{pmatrix} \quad (10.18)$$

Nach Anwendung eines 90° -Pulses aus der y -Richtung R_y auf den ersten Kernspin den S -Spin, erhalten wir:

$$\rho_1 = R_y \rho_0 R_y^\dagger = \begin{pmatrix} \tilde{D} & \frac{a}{2} \mathbf{1} \\ \frac{a}{2} \mathbf{1} & \tilde{D}' \end{pmatrix} \quad (10.19)$$

Auf der Diagonale dieses Dichteoperators sind alle Terme angesammelt, die durch den R_y -Puls nicht beeinflusst worden sind. Also $\tilde{D} \oplus \tilde{D}' = \sum_{k=2}^n c_k I_{kz}$.

Nachdem der gesamte Algorithmus, also alle cU_k s, implementiert ist, nimmt der Zieldichteoperator folgende Gestalt an:

$$\rho_f = \begin{pmatrix} \tilde{D} & \frac{a}{2} \mathbf{1} U^\dagger \\ \frac{a}{2} U \mathbf{1} & U \tilde{D}' U^\dagger \end{pmatrix}, \quad (10.20)$$

⁸Weitere Beiträge zum Hamiltonian stammen von Kopplungen zwischen Kernen. Sie sollen hier vernachlässigt werden, da ihre Beiträge zu gering sind.

mit $U = U_m \cdots U_2 U_1$. ρ_f wird nun gemessen und damit die Spur von U bestimmt. In der NMR-Spektroskopie entspricht das einer Projektion auf $S^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{1}_{2^{n-1}}$:

$$\phi(\rho_1) = \frac{1}{N} \operatorname{tr} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} \tilde{D} & \frac{a}{2} \mathbf{1} U^\dagger \\ \frac{a}{2} U \mathbf{1} & U \tilde{D}' U^\dagger \end{pmatrix} \right\} = \frac{1}{N} \operatorname{tr} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \tilde{D} & \frac{a}{2} \mathbf{1} U^\dagger \end{pmatrix} \right\} = \frac{a}{2N} \operatorname{tr} \{ U^\dagger \}. \quad (10.21)$$

Wie zu sehen ist, haben die zusätzlichen Diagonalterme keinen Einfluss auf das Resultat.

Lemma 10 *Diagonalmatrizen liegen somit im Kern der Abbildung ϕ .*

Beweis: Sei ρ_1 eine Diagonalmatrix, $\rho_1 = \tilde{D} \oplus \tilde{D}'$. Führen wir ϕ schrittweise aus, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} \phi(\rho_1) &= \frac{1}{N} \operatorname{tr} \left\{ (S^-)^\dagger cU \begin{pmatrix} D & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & D' \end{pmatrix} cU^\dagger \right\} \\ &= \frac{1}{N} \operatorname{tr} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{1} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} D & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & U D' U^\dagger \end{pmatrix} \right\} \\ &= \frac{1}{N} \operatorname{tr} \left\{ \begin{pmatrix} \mathbf{0} & U D' U^\dagger \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \right\} = 0 \end{aligned} \quad (10.22)$$

Somit werden alle Diagonalmatrizen auf 0 abgebildet. Diese liegen deshalb im Kern von ϕ . ■

Die Hochtemperaturnäherung stellt also keine Fehlerquelle dar. Dies ändert sich sobald wir ihren Gültigkeitsbereich verlassen. Die Effekte sind im NMR-Fall zwar gering, sollen aber dennoch diskutiert werden, da dies bei anderen Systemen nicht der Fall sein muss.

Der Dichteoperator ist nun $e^{-\frac{H}{kT}} / \operatorname{tr} e^{-\frac{H}{kT}}$. Dies ist zuerst einmal eine Diagonalmatrix. Er lässt sich schreiben als

$$\rho_0 = \underbrace{\mathbf{1}/N + \sum_{k=1}^n c_k I_{kz}}_{\text{Hochtemperaturnäherung}} + \sum_{k \neq m}^n d_{km} 2I_{kz} I_{mz} + \text{höhere Terme}. \quad (10.23)$$

Eine Reihe von Termen führt nun zu einer Abweichung der außerdiagonalen Blockmatrix von der Einheitsmatrix. Die entsprechenden bilinearen Terme sind $2S_z I_{kz}$ für $k \in \{2, n\}$. Höherlineare Terme führen natürlich ebenso zu einer Störung des Einheitsoperators. Nach dem R_y -Puls auf dem ersten Spin und vor dem Algorithmus ergibt sich folgender Dichteoperator:

$$\rho_1 = R_y \rho_0 R_y^\dagger = \begin{pmatrix} \tilde{D} & \frac{a}{2} B^\dagger \\ \frac{a}{2} B & \tilde{D}' \end{pmatrix}. \quad (10.24)$$

Wird am Schluss gemessen, erhalten wir:

$$\phi(\rho_1) = \frac{1}{N} \operatorname{tr} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \mathbf{1} & 0 \end{pmatrix}^\dagger \begin{pmatrix} \tilde{D} & \frac{a}{2} B^\dagger U^\dagger \\ \frac{a}{2} U B & U \tilde{D}' U^\dagger \end{pmatrix} \right\} = \frac{a}{2N} \operatorname{tr} \{ B^\dagger U^\dagger \} \quad (10.25)$$

Der Vorfaktor a ergibt sich zu $a \sim \tanh(-\frac{\gamma B_0}{kT})$. Zusammen mit der Tatsache, dass $|\text{tr}(U^\dagger)| \leq 2^n$ und $B(\gamma, B_0, T)^\dagger \approx \mathbb{1}$ erhalten wir $|\text{tr}(B^\dagger U^\dagger)| \leq 2^n$. Dividiert man nun noch durch den Skalierungsfaktor $N = \frac{2^n}{4}$, erhalten wir $|\phi(\rho_1)| \leq 1$ und zwar unabhängig von der Anzahl der Qubits. Der Algorithmus ist unter diesen Gesichtspunkten skalierbar.

10.3 Resultate auf einem 2-Qubit-NMR-Quantencomputer

10.3.1 Implementierung von Zopfgruppenelementen mit 3 Strängen

Eine allgemeine Anleitung zur Implementierung kontrollierter U -Operationen findet sich im Appendix 12.6.2. Bei 3 Strängen gibt es 2 Elementartranspositionen. In der Matrixdarstellung nehmen diese die Form

$$U_{1,2} = (A\mathbb{1} + A^{-1}u_{1,2})$$

an. Mit $u_1 := \begin{pmatrix} d & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ oder $u_2 := \begin{pmatrix} \frac{1}{d} & \sqrt{1-\frac{1}{d^2}} \\ \sqrt{1-\frac{1}{d^2}} & d-\frac{1}{d} \end{pmatrix}$. Weiter ist $A = e^{-i\theta_{rad}}$ und $d = -(A^2 + A^{-2}) = -2\cos(2\theta_{rad})$. U ist unitär, wenn $0 \leq |\theta_{rad}| \leq \frac{\pi}{6}$ ist, s. Tabelle 10.1. Die hier gewählte Darstellung weicht von der vorher gewählten Darstellung der Zopfgruppenelemente nur auf den ersten Blick ab. Im Appendix 12.6.1 wird die Äquivalenz beider Darstellungen bewiesen. Der Beweis beruht hauptsächlich auf elementaren trigonometrischen Umformungen. Es gilt nun, dieses U als kontrolliertes U , als cU , zu implementieren. Dies erfolgt mit Hilfe der im vorherigen Kapitel erarbeiteten Methoden. Eine Zerlegung des effektiven Hamiltonians zeigt, dass nur x - und z -Komponenten vorkommen. Dadurch lässt sich die Implementierung vereinfachen. Die ${}^2K_z(\mu)$ -Pulse (s. Appendix 12.6.2)

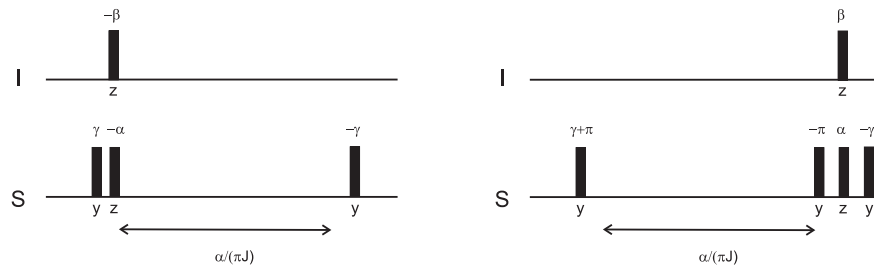


Abbildung 10.11: Pulssequenz, die die kontrollierten U_1 (links) bzw. deren inverse cU_1 (rechts) auf einem IS -Spinsystem implementiert. Der I -Spin ist in unseren Experimenten ein ${}^{13}\text{C}$ -Kernspin und der S -Spin ist ein ${}^1\text{H}$ -Kernspin. I wird detektiert. Bei cU_1 wird $\gamma = 0$ gesetzt.

10.3 Resultate auf einem 2-Qubit-NMR-Quantencomputer

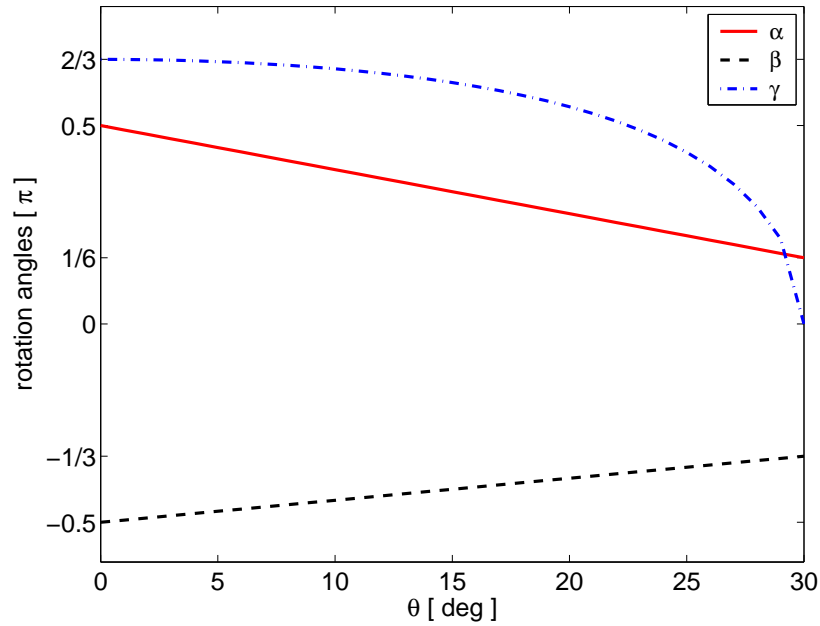


Abbildung 10.12: Die in Abbildung 10.11 vorkommenden Winkel in Abhängigkeit von θ . Sei $\theta_{rad} := \theta\pi/180$. $\alpha = 0.5\pi - 2\theta_{rad}$, $\beta = -0.5\pi + \theta_{rad}$ und $\gamma = \tan^{-1}\left(\frac{\cos(4\theta_{rad})}{\sqrt{4\cos^2(2\theta_{rad})-1}}\right) + \pi/2$. γ hat nur dann reelle Werte, wenn $0 \leq |\theta_{rad}| \leq \frac{\pi}{6}$, ansonsten gilt $4\cos^2(2\theta_{rad}) < 1$. $\gamma = 0$ für U_1 .

können dann vernachlässigt werden. Die Dauer der Pulssequenz wird, im Limit unendlich schneller Pulse, durch die Dauer der freien Evolution $\frac{\alpha}{J\pi}$ bestimmt. Die Pulssequenzen sind in Abbildung 10.11 abgebildet.

Um die theoretisch berechneten Pulssequenzen zu überprüfen, wurden diese an drei ausgewählten Knoten auf einem heteronuklearen Spinsystem implementiert.

10.3.2 Experimenteller Setup

Alle Experimente wurden an einem Bruker Avance DMX 750 NMR Spektrometer durchgeführt, ausgerüstet mit einem TXI 5mm Probenkopf mit XYZ-Gradienten. Die Probe war eine 9:1-Mischung von Chloroform und deuteriertem Aceton. Diese enthält natürlicher Weise ungefähr 1% ^{13}C - ^1H -Chloroform, welches die aktive Komponente der Hardware des NMR-Quantencomputers darstellt. Die Larmorfrequenzen des Spinsystems sind 188.6349005 MHz für ^{13}C und 750.1354275 MHz für ^1H . Die entsprechenden chemischen Shifts sind 77.2 ppm und 7.235 ppm. Die zwei Spin- $1/2$ -Kerne von ^{13}C - ^1H -Chloroform wechselwirken in Lösung durch eine skalare Ising-Interaktion. Die entsprechende Kopplungskonstante ist $J = 209.5\text{Hz}$. Die longitudinalen (T_1) und die transversalen Relaxationszeiten (T_2) der beiden Kerne sind: $T_1^{13\text{C}}: 21.8\text{ s}$, $T_2^{13\text{C}}: 0.19\text{ s}$, $T_1^{1\text{H}}: 6.1\text{ s}$, $T_2^{1\text{H}}: 0.48\text{ s}$. Ein

$90^\circ(^1\text{H})$ -Puls benötigt $9.9 \mu\text{s}$, ein $90^\circ(^{13}\text{C})$ -Puls $19.45 \mu\text{s}$. Die Temperatur beträgt 300 K . ^{13}C wurde schließlich detektiert. Es wurden 512 Datenpunkte während einer Zeit von 452ms aufgenommen. Um die Empfindlichkeit zu erhöhen, wurde während der Detektionszeit ^1H -Spin durch die DIPSI-2-Pulssequenz [260] entkoppelt.

10.3.3 Experimente

Alle Experimente zeigten eine gute bis sehr gute Übereinstimmung mit den theoretischen Vorhersagen, s. Abbildung 10.13-10.15. Selbst Effekte der Relaxation und B_1 -Feldinhomogenitäten stimmten mit den theoretischen Vorhersagen überein, s. Tabelle 10.3 und 10.4. Aufgrund der einfacheren Implementierung ist die Übereinstimmung beim Kleeblattknoten, Abbildung 10.13, am besten.

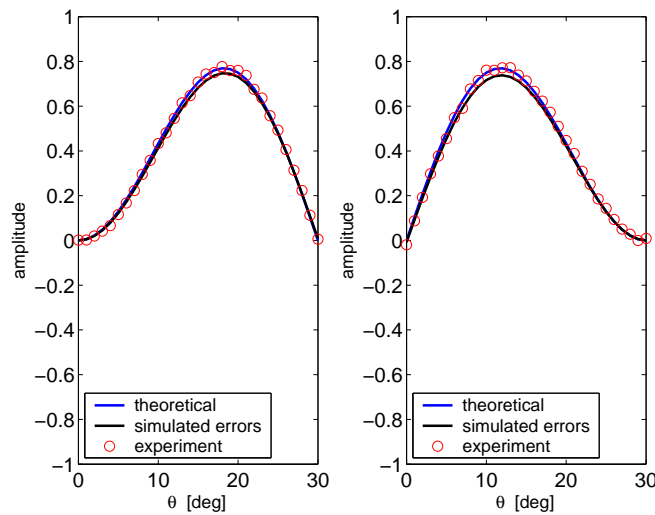


Abbildung 10.13: Real- (links) und Imaginärteil (rechts) der Spur des Kleeblattknotens in Abhängigkeit von θ . Vergleich von Experiment (\circ) mit theoretischen Werten, mit (blau) und ohne (schwarz) Fehlerquellen.

Tabelle 10.3: Die Summe der Fehlerquadrate ist $r = \sum_{\theta=0}^{30^\circ} (y_{theo}(\theta) - y(\theta))^2$. Der durchschnittliche Fehler berechnet sich zu $\bar{r} = r/31$. r stehe jeweils für den Fehler im Real- oder Imaginärteil, bzw. dem Fehler des Absolutwertes.

Knoten	$\overline{r_{\text{Re}}}$	$\overline{r_{\text{Im}}}$	$\overline{r_{\text{abs}}}$
T_1	$1.0770 \cdot 10^{-4}$	$1.7334 \cdot 10^{-4}$	$2.2031 \cdot 10^{-4}$
T_2	0.0127	$6.0888 \cdot 10^{-5}$	0.0125
T_3	0.0319	$8.7223e - 05$	0.0318

10.3 Resultate auf einem 2-Qubit-NMR-Quantencomputer

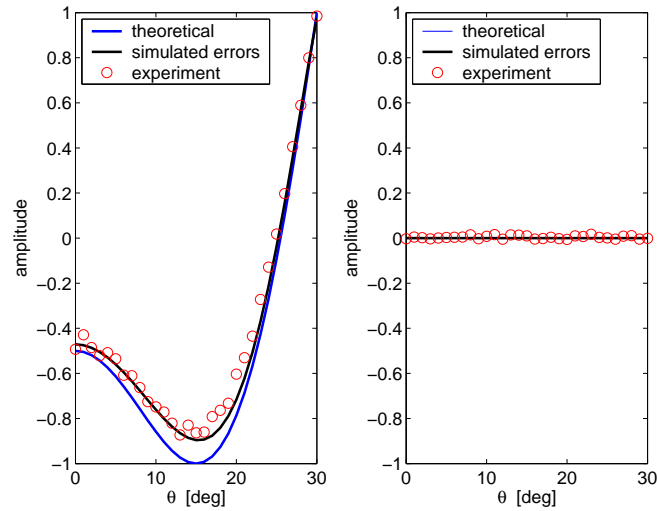


Abbildung 10.14: Real- (links) und Imaginärteil (rechts) der Spur des Figur-Acht-Knotens in Abhängigkeit von θ . Vergleich von Experiment (\circ) mit theoretischen Werten, mit (blau) und ohne (schwarz) Fehlerquellen.

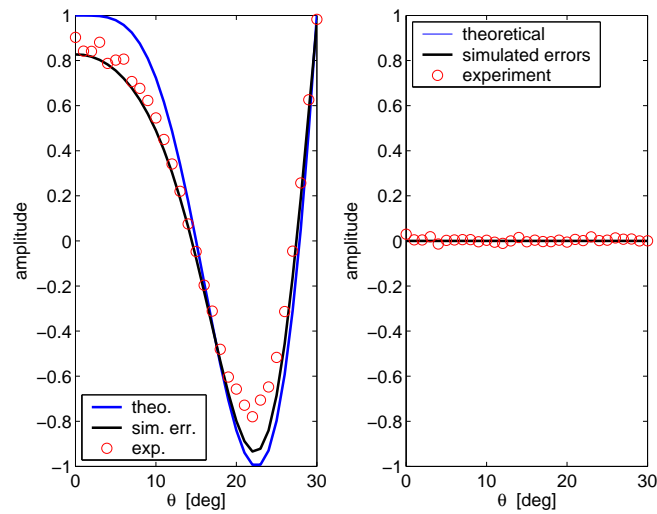


Abbildung 10.15: Real- (links) und Imaginärteil (rechts) der Spur der Borromäischen Ringe in Abhängigkeit von θ . Vergleich von Experiment (\circ) mit theoretischen Werten, mit (blau) und ohne (schwarz) Fehlerquellen.

Tabelle 10.4: Die Abweichung der experimentellen Werte von den Vorhergesagten ist δ , also im Mittel $\bar{\delta} = \delta/31$. δ stehe jeweils für die Abweichung im Real- oder Imaginärteil, bzw. der Abweichung des Absolutwertes.

Knoten	$\bar{\delta}_{\text{Re}}$	$\bar{\delta}_{\text{Im}}$	$\bar{\delta}_{\text{abs}}$
T_1	$2.3850 \cdot 10^{-4}$	$4.7884 \cdot 10^{-4}$	$6.5619 \cdot 10^{-4}$
T_2	0.0026	$6.0889 \cdot 10^{-5}$	0.0025
T_3	0.0089	$8.7232 \cdot 10^{-5}$	0.0088

10.4 Schlussfolgerung

Der Quantenalgorithmus zur Approximation des Jones-Polynoms ist ein weiterer Kandidat von Algorithmen, die neben der Implementierung für reine Zustände, eine thermische Implementierung erlauben. Inwieweit sich Flüssig-NMR-Systeme eignen, um diese skalierbar zu implementieren, ist noch nicht zur Gänze geklärt. Als gesichert kann die Skalierbarkeit der benötigten Anzahl der Qubits für höhere Zopfgruppen angesehen werden: Es besteht ein linearer Zusammenhang zwischen der Anzahl der Qubits und der Anzahl der Stränge. Es gilt im Fall thermischer Algorithmen die Effekte zu untersuchen, die zutage treten, wenn die Anzahl der Qubits und die daraus resultierende Anzahl der Zustände die Anzahl der Moleküle in der Probe übersteigt. Hier stellt sich die Frage, ob der übliche Dichteoperatoransatz noch gültig ist und, wenn nein, ob die daraus entstehenden Abweichungen den gesamten thermischen Algorithmus auf NMR-Systemen oder allgemeiner auf Ensemble-Systemen unmöglich machen.

Mit den vorliegenden experimentellen Resultaten wurde der Quantenalgorithmus zur Approximation des Jones-Polynoms zum ersten Mal realisiert. Da sich die gestellte Aufgabe auf die Bestimmung der Spur einer Matrix zurückführen lässt, war es möglich den Algorithmus so zu adaptieren, dass er auch auf dem nicht-reinen Zustand eines thermischen NMR-Systems funktioniert. Die Übereinstimmung der erhaltenen Ergebnisse mit den theoretisch vorhergesagten Werten ist auch bei komplizierteren Knoten bzw. Zöpfen noch sehr gut. Für die durchzuführenden Operationen ließen sich, im Fall von Zöpfen mit maximal 3 Strängen, analytische Lösungen für den gesamten Definitionsbereich der unitären Darstellungen finden. Zudem konnten die Definitionsbereiche unitärer Darstellungen der Zopfgruppe auch für höhere Zopfgruppen angegeben werden.

Es wurde festgestellt, dass diese mit zunehmender Zahl der Stränge schrumpfen. Es stellt sich hier jedoch die Frage, ob es möglich ist mit dem thermischen Ansatz auch nicht-unitäre Darstellungen zu implementieren.

Eine Tatsache, die bei der Analyse der experimentellen Daten bisher ungenutzt bleibt, ist die, dass Jones-Polynome stets Vielfache von Polynomen mit ganzzahligen Koeffizienten sind. Dies könnte bei der Umrechnung der Wertetabellen in

10.4 Schlussfolgerung

die Koeffizienten zu Hilfe gezogen werden und sich somit positiv auf die Anwendbarkeit des Algorithmus auswirken.

10 Thermisches Quantencomputing und der Jones-Algorithmus

11 Zusammenfassung und Ausblick

Mit dem Ausklang des 20. Jahrhunderts begann die Entwicklung eines neuartigen Wissenschaftszweiges, der Computerwissenschaften und Physik, auf eine vorher nicht dagewesene Art, vereinte: die Quanteninformationsverarbeitung. Es wurden Methoden entwickelt, die Probleme sehr viel effizienter lösten, als klassische Computer dazu jemals im Stande wären. Die Überlegenheit der meisten dieser Methoden ist jedoch nur theoretisch bekannt, da die Realisierung eines Quantencomputers wohl noch einige Jahre, wenn nicht Jahrzehnte, auf sich warten lassen wird. Dies liegt vor allem daran, dass die quantenmechanischen Zustände, die zur effizienten Berechnung benötigt werden, durch Störungen von außen vernichtet werden können. Je länger die Berechnung auf einem Quantencomputer dauert, desto wahrscheinlicher ist eine solche Störung.

Aufgrund dessen ist es notwendig, entweder die Berechnungen so schnell wie möglich durchzuführen, oder zu versuchen während der Berechnung die störenden Einflüsse vom Quantencomputer fern zu halten. Mit konventionellen Methoden ist es zwar möglich, die erforderlichen Quantengatter in leicht verständliche Abfolgen von Elementargattern zu zerlegen, diese benötigen jedoch weit mehr Zeit als notwendig.

In der vorliegenden Arbeit wurden Methoden und (klassische) Computerprogramme entwickelt und vorgestellt, die es erlauben die Dauer von Quantengattern auf ein Minimum zu reduzieren. Mittels klassischer (Parallel-)Computer ist es nun möglich, Bausteine der Quantenalgorithmen zeitoptimiert zu implementieren. Dies kann auf den verschiedensten Systemen passieren, solange einige grundlegende Voraussetzungen erfüllt sind. Eine endlich-dimensionale des Systems ist eine solche Voraussetzung. Als Beispiele wurden supraleitende Josephson-Elemente und NMR-Spinsysteme vorgestellt. Beim ersten wurden lediglich ein elementares 2-Qubit-Gatter und ein TOFFOLI-Gatter optimiert. Bei Spinsystemen wurden numerische Resultate für diverse Quantengatter (QFT, C^n NOT, SWAP, ...) mit bis zu 10 Spins vorgestellt.

Manche der Quantengatter besitzen eine rekursive Struktur, die es erlaubt noch größere Gatter aus kleineren aufzubauen. Ein einfaches Beispiel stellen die SWAP-Operationen dar, ein kompliziertes, die QFT. Bei beiden sind die rekursiv aufgebauten Gatter immer noch schneller als konventionelle Konstruktionen. Eine Verallgemeinerung dieses Prinzips könnte es sogar erlauben, größere Sätze von Elementargattern numerisch zu berechnen. Diese führen dann zwar nicht zu zeitoptimalen, aber jedoch zu schnelleren Implementierungen.

Weiter wurden Methoden vorgestellt, die es erlauben, einen gewissen Teilraum

11 Zusammenfassung und Ausblick

eines Quantensystems gegen relaxative Prozesse so gut wie möglich zu schützen. Zudem sind auch diese numerischen Resultate in ihrer Implementierung schneller als konventionelle Methoden. Zukünftige Projekte sollten hier, neben den betrachteten statischen oder auch Markov'schen Relaxationsprozessen, auch nicht-Markov'sche in Betracht ziehen. Außerdem steht die Frage im Raum, ob oder besser wie, sich der rekursive Ansatz mit relaxationsoptimierten Quantengattern kombinieren lässt. Es gilt zudem abzuwägen, wie viele Qubits des Gesamtsystems verwendet werden, um den Schutz gegen Relaxation zu erlangen.

Bei all diesen numerischen Resultaten zwingt sich stets die Frage nach analytischen Lösungen auf. Für einfache Quantengatter, wie z.B. indirekte Kopplungen auf linearen 3-Spinketten, ist dies möglich. Unter Ausnutzen der Lie-algebraischen Struktur konnte eine Lösung für einen ganz bestimmten Propagator erhalten werden. Die numerisch gefundenen minimalen Zeiten können als eine Leitlinie genutzt werden, um analytische Lösungen zu finden. Eines der weiteren Ziele sollte es sein, den Satz analytischer Lösungen auch um komplizierte Gatter, wie die QFT, zu erweitern.

Um Systeme mit mehr als 10 Qubits numerisch behandeln zu können, bedarf es weiterer Adaptionen des derzeitigen Computerprogramms. Schnellere Subroutinen für die Exponentialabbildungen oder Matrixmultiplikationen werden unablässig sein. Zudem gilt es auch ein wachsames Auge auf den Speicherbedarf der Probleme zu werfen. Zuletzt wird man die Hoffnung jedoch aufgeben müssen optimierte Pulssequenzen für Systeme mit mehr als 30 Qubits auf klassischen Computern zu finden. Vielleicht ist es jedoch möglich, diese Optimierung auf einem Quantencomputer durchzuführen.

Ein Quantensystem wird dann ein anderes simulieren. Interessante Resultate im Bereich der Quantensimulation sind bereits bei wesentlich kleineren Systemen als bei Quantenalgorithmen, zu erwarten. Eine Frage, die mit der vorliegenden Arbeit beantwortet wurde, ist die, ob eine bestimmte Quantenevolution auf einem System aus n Qubits durch lokale Operationen invertierbar ist. Nach einer grundsätzlichen Einteilung in Typ I und II invertierbare Unitäre stehen eine Reihe von Methoden, dies zu untersuchen, zur Verfügung: Für Typ I: paarweise Eigenwerte, Entwicklung in Eigenräumen des lokalen Superoperators zum Eigenwert $+1$, Einteilung von Kopplungsnetzwerken in bipartite und nicht bipartite Kopplungsgraphen, Beziehungen zu Wurzelraumzerlegungen und Charakterisierung anhand von Cartan-Involutionen; für Typ II: Überlapp der lokalen Superoperatoren mit dem Adjunktionssuperoperator und Analyse der Symmetrie der zu invertierenden Matrizen.

12 Appendix

12.1 Theorie

12.2 Bedienungsanleitung des PAROCT-Programms

Anhand des folgenden Kapitels soll eine Übersicht der möglichen Programmvarianten gegeben werden und wie sie durch passende Wahl der Parameter erzeugt werden können. Es besteht die Möglichkeit (i) über COMPILER-Optionen das Programm selbst zu verändern, und so für spezielle Aufgaben anzupassen, oder (ii) über EINGABE-Dateien ein lauffähiges Programm zu steuern.

Auf dem HLRB-II-Supercomputer wird das Programm mit Hilfe der folgenden Hilfsdatei in die Warteschleife gestellt. Von dort startet es automatisch.

```
#!/bin/bash

#PBS -o /home/$YOUR_PATH/output.out
#PBS -j oe
#PBS -S /bin/bash
#PBS -l select=<NUMBER_OF_CPUS>
#PBS -l walltime=<MAX_CPU_TIME_48:00:00 >
#PBS -N JOBNAME
#PBS -M yourmail@whereeveryouare.com
#PBS -m a

. /etc/profile
cd /home/$YOUR_PATH/
date

time mpiexec ./your_executable
```

Auf dem BODE-Cluster wird das Programm durch folgende Befehlszeile sofort gestartet

```
mpirun_rsh -np 64 -hostfile hostfile ./your_executable
```

12.2.1 Compiler-Optionen

Auf dem HLRB-II muss vor dem Kompilieren noch die MKL-Bibliothek geladen werden:

```
module load mkl
```

Der Befehl zum Kompilieren lautet:

```
make -f Makefile clean paroct
```

Im MAKEFILE hat man noch einige Optionen, die das Programm zu beeinflussen.

```
##### Compiler , tools and options

CC      = mpicc $(OPTS)
CXX     = mpiCC $(OPTS)
CFLAGS  = -Wall -W -O3
CXXFLAGS= -Wall -Wno-deprecated -O3

MACROS  = -D'TIMING=0' -D'DEBUG=0' -D'TESTING=0'\
          -D'METHOD=3' -D'SPARSE=0' \
          -D'EXPMNR=1' \

INCPATH = -I/home/hlrb2/h1051/h1051ad/local/include $(MKL_INC)\
          -I $YOUR_PATH/spblastk0.9b/include
LINK     = mpiCC $(OPTS)
LFLAGS  = -lm $(MKL_LIB)
LIBS    = $(SUBLIBS) -lm\
          -L $YOUR_PATH -lsparseblas
          -L $YOUR_PATH/ATLAS/Linux_HAMMER64_4 -llapack_AMD64
          -lf77blas -lg2c -llapack -lcblas -latlas\
MOC     = $(QTDIR)/bin/moc
UIC     = $(QTDIR)/bin/uic
```

Die interessanten Fälle sollen kurz erläutert werden:

1. 'TIMING=0/1' : Messung der Berechnungsgeschwindigkeit,
2. 'DEBUG=0/1/2' : Debuggen einzelner Funktionen
3. 'TESTING=0/1' : Testen der Exponentialabbildung
4. 'METHOD=0/1/2/3' : verschiedene Implementierung der Exponential-abbildung:
 - 0: Chebychev
 - 1: Pade
 - 2: QR
 - 3: Chebychev +

5. 'SPARSE=0/1' : Verwendung dünnbesetzter Matrixmethoden für die Exponentialabbildung
6. 'EXPMNMR=1' : Verwendung der Persymmetrie-Exponentialabbildung

12.2.2 Eingabe-Optionen

Das Programm lädt zu Beginn eine Reihe von Dateien. Diese enthalten Angaben zur Systemgröße und Systemart, sowie zur Pulssequenz. Alle zu ladenden Dateien sind im portablen ASCII-Format abzuspeichern.

Datei: PAROPT.ASC

Diese Datei enthält 8 Parameter, z.B.

```
6 512 14 15 .001 4200 2.1 1
```

Ihre Bedeutungen sind:

1. Anzahl der Qubits
2. Digitalisierung der Pulssequenz
3. Startzeit der Pulssequenz T_1
4. Endzeit der Pulssequenz T_2
5. Inkrement zwischen T_1 und T_2 (kann auch negativ sein)
6. Maximalzahl der Iteration
7. Startamplitude der Pulssequenz:
0 lade Pulssequenz aus PSEQ.ASC
 $k \in \mathbb{Z}$ konstante Amplituden k auf allen Kontrollen
 $k \in \mathbb{R}$ zufällige Pulssequenz mit maximaler Amplitude k
8. Gradientenberechnung am Anfang der Optimierung:
0 steepest-descent, 1 conjugate-gradients

Datei: DRT.ASC und HCs.ASC

DRT.ASC enthält die Information über den Drifthamiltonian des Systems. Es kann zwei Formate aufweisen: Ein erstes bei dem nur die Diagonaleinträge gespeichert sind. Die volle Matrix des Driftterms wird dann intern aufgebaut. Oder das zweite Format bei dem die gesamte Matrix in der Datei abgespeichert ist.

Hcs.ASC enthält Informationen über die Kontrollterme. Wird als System jedoch ein heteronukleares Spinsystem mit x - und y -Pulsen angenommen, ist Hcs.ASC nicht notwendig, da die Kontrollterme dann intern aufgebaut werden.

Datei: TARGET.ASC

TARGET.ASC enthält die zu optimierende Zielmatrix.

Datei: PSEQ.ASC

Enthält die aktuell optimierte Pulssequenz. Sie wird alle 10 Iterationen gespeichert und geladen, wenn in der PAROPT.ASC-Datei, der entsprechende Parameter gesetzt wird (s. oben).

Startsequenzen der Optimierung

In den meisten Fällen ist davon auszugehen, dass es nahezu unmöglich ist am Anfang der Optimierung eine gute Startsequenz zu wählen. Es bleiben dann folgende Möglichkeiten, die alle mit Vor- und Nachteilen verbunden sind:

- eine Pulssequenz mit konstanten Amplituden,
- eine leicht variierende Pulssequenz,
- und eine völlig zufällige Pulssequenz.

Um der Optimierung keine, durch die Startsequenz bedingten, Beschränkungen aufzuerlegen, liegt die Wahl einer zufälligen Pulssequenz nahe. Der Nachteil dabei ist, dass diese sich einer anschließenden Analyse oft entzieht. Dieser Nachteil tritt bei konstanten oder leicht variierenden Pulssequenzen nicht auf.

Ganz allgemein gilt noch zu beachten, dass die Pulsamplituden nicht zu hoch sein sollen. Dies soll mit dem folgenden Beispiel belegt werden:

Gegeben sei ein heteronukleares, schwach gekoppeltes 3-Spinsystem mit lokalen Kontrollen auf den einzelnen Spins. Sei $H_{Drift} = J(2I_{1z}I_{2z} + 2I_{2z}I_{3z})$ der Drift-Hamiltonian. Zusammen mit den Kontrolltermen nimmt H_{total} folgende Form an:

$$H_{total} = J(2I_{1z}I_{2z} + 2I_{2z}I_{3z}) + \sum_{k=1}^3 u_{kx}I_{kx} + u_{ky}I_{ky} . \quad (12.1)$$

Führen wir nun folgende lokale Transformation durch:

$$UH_{total}U^\dagger = J(2I_{1z}I_{2z} + 2I_{2z}I_{3z}) + \sum_{k=1}^3 a_k I_{kx} , \quad (12.2)$$

wobei $a_k = \sqrt{u_{kx}^2 + u_{ky}^2}$ und $U = e^{-i(\sum_{k=1}^3 \beta_k I_{kz})}$, mit $\beta_k = \arctan(\frac{u_{ky}}{u_{kx}})$. Sei Δt die Dauer eines Zeitintervalls der Pulssequenz. Betrachten wir für einen kurzen Moment nur den 3. Spin. Die Operatoren die auf ihn wirken sind

$$H_{3, \text{Spin}} = J2I_{2z}I_{3z} + a_3 I_{3x} . \quad (12.3)$$

12.2 Bedienungsanleitung des PAROCT-Programms

Ein Vergleich mit Gleichung (2.9) zeigt, dass $H_{3, \text{Spin}} \in \mathfrak{su}(2)$. Für den Propagator während dieses Zeitintervalls folgt also:

$$U_k = e^{-i\Delta t(J2I_{2z}I_{3z} + a_3I_{3x})}. \quad (12.4)$$

Sollte nun $\sqrt{(J\Delta t)^2 + (a_3\Delta t)^2} = 2\pi n$ mit $n \in \mathbb{N}$ erfüllt sein, ist $U_k = (-1)^n \mathbf{1}$. Nach einer weiteren Transformation ist dies leicht einzusehen:

$$VU_kV^\dagger = e^{-i\sqrt{(J\Delta t)^2 + (a_3\Delta t)^2}I_{3x}} = e^{-i2\pi n I_{3x}} = (-1)^n \mathbf{1}, \quad (12.5)$$

mit $V = e^{-i\arctan(\frac{J}{a_3})2I_{2z}I_{3y}}$. Das gesamte Zeitintervall steht somit für die Optimierung nicht zur Verfügung. Der 3. Spin wird außerdem auf diese Weise vom System entkoppelt. Ist z.B. $\sqrt{(J\Delta t)^2 + (a_3\Delta t)^2} > 2\pi$ so bleibt, neben der -1 -Operation, nur ein Teil der ursprünglichen Operation übrig, s. Abbildung 12.1. Man erhält dann eine reduzierte Kopplungskonstante:

$$J_{red} = (\sqrt{(J\Delta t)^2 + (a_3\Delta t)^2} - 2\pi) \cdot \sin(\arctan(J/a_3)) \quad (12.6)$$

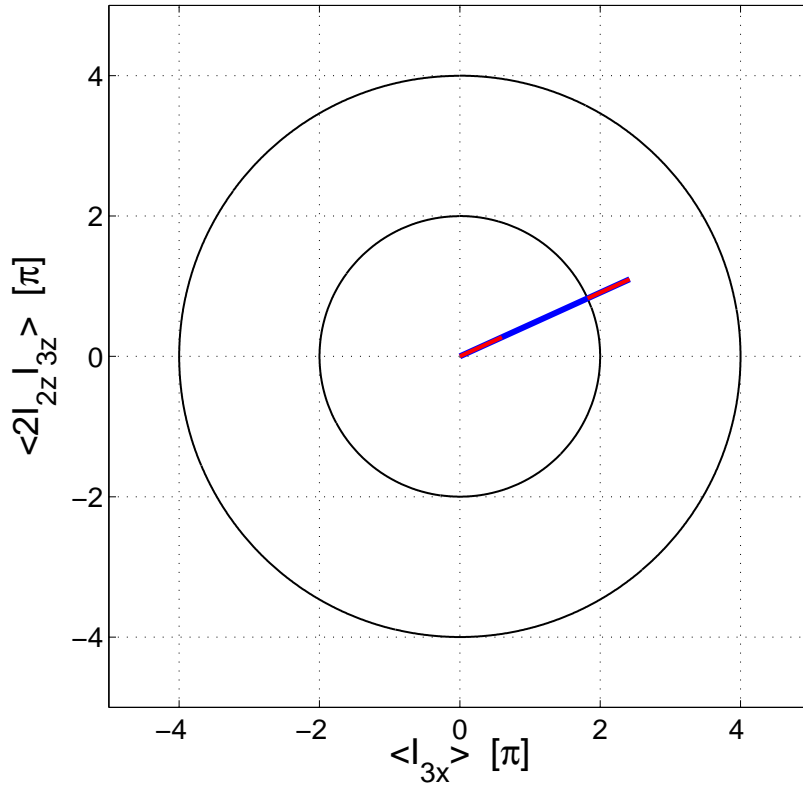


Abbildung 12.1: Sind die Kontrollamplituden im Verhältnis zur Kopplungskonstanten zu groß eingestellt, kann es dazu kommen, dass der effektive unitäre Propagator reduziert wird. Vom ursprünglich blauen Hamilton-Operator bleibt nur der rote Anteil erhalten.

und eine reduzierte Kontrollamplitude:

$$a_{3,red} = (\sqrt{(J\Delta t)^2 + (a_3\Delta t)^2} - 2\pi) \cdot \cos(\arctan(J/a_3)) \quad (12.7)$$

12.3 Rekursion

12.3.1 Fehlerfortpflanzung in Sequenzen unitärer Gatter

Da sich die Fehler in nichttrivialer Weise fortpflanzen, stellt sich die Frage, ob sich mittels Normungleichungen brauchbare Abschätzungen erhalten lassen. Dies wird zunächst für das Produkt zweier Matrizen untersucht. Sei $A, B, A_0, B_0 \in \text{Mat}_C(N)$, $\Sigma(X) = X + X_0$ und $\Delta(X) = X - X_0$, dann gilt

$$\begin{aligned} 2\|AB - A_0B_0\|_2 &= \|(A - A_0)(B + B_0) + (A + A_0)(B - B_0)\|_2 \\ &\leq \|\Delta(A)\Sigma(B)\|_2 + \|\Sigma(A)\Delta(B)\|_2 \\ &\leq \|\Delta(A)\|_2\|\Sigma(B)\|_2 + \|\Sigma(A)\|_2\|\Delta(B)\|_2. \end{aligned}$$

Dies folgt aus der Dreiecksungleichung $\|A+B\| \leq \|A\| + \|B\|$. Die letzten beiden Ungleichungen können rekursiv benutzt werden. Dies folgt aus der Dreiecksungleichung $\|A+B\|_2 \leq \|A\|_2 + \|B\|_2$. Weiter verwendet man die Parallelogramm-Identität $2\|A\|_2^2 + 2\|A_0\|_2^2 = \|\Delta(A)\|_2^2 + \|\Sigma(A)\|_2^2$.

$$\begin{aligned} 2\|AB - A_0B_0\|_2 &\leq \|\Delta(A)\|_2\sqrt{2\|B\|_2^2 + 2\|B_0\|_2^2 - \|\Delta(B)\|_2^2} \\ &\quad + \sqrt{2\|A\|_2^2 + 2\|A_0\|_2^2 - \|\Delta(A)\|_2^2}\|\Delta(B)\|_2 \end{aligned}$$

Später gilt $A, B, A_0, B_0 \in SU(N)$, was zusammen mit $\|X\|_2 = \sqrt{N}$, wenn $X \in U(N)$ die letzte Formel zu

$$\begin{aligned} 2\|AB - A_0B_0\|_2 &\leq \|\Delta(A)\|_2\sqrt{4N - \|\Delta(B)\|_2^2} \\ &\quad + \sqrt{4N - \|\Delta(A)\|_2^2}\|\Delta(B)\|_2 \end{aligned}$$

vereinfacht.

Für mehr als zwei Gatter treten Summanden auf, die jeweils eine ungerade Anzahl von Normdifferenzen $\|\Delta(X)\|_2$ aufweisen. Folgende Beispiele, für vier nacheinander ausgeführte Quantengatter, verdeutlicht dies:

Den idealen Gattern A_0, B_0, C_0, D_0 stehen die experimentell erreichbaren Gatter A_1, B_1, C_1, D_1 gegenüber. Um nun eine Abschätzung des Fehlers zu erhalten, der sich aus den Einzelfehlern $\|\Delta(\cdot)\|_2$ herleitet, gehen wir wie folgt vor:

Zunächst betrachten wir eine nützliche Identität für den Ausdruck des Gesamtfehlers:

$$\begin{aligned}
\|A_1B_1C_1D_1 - A_0B_0C_0D_0\|_2 = & \|(A_1 - A_0)(B_1 + B_0)(C_1 + C_0)(D_1 + D_0) \\
& + (A_1 + A_0)(B_1 - B_0)(C_1 + C_0)(D_1 + D_0) \\
& + (A_1 + A_0)(B_1 + B_0)(C_1 - C_0)(D_1 + D_0) \\
& + (A_1 + A_0)(B_1 + B_0)(C_1 + C_0)(D_1 - D_0) \\
& + (A_1 + A_0)(B_1 - B_0)(C_1 - C_0)(D_1 - D_0) \\
& + (A_1 - A_0)(B_1 + B_0)(C_1 - C_0)(D_1 - D_0) \\
& + (A_1 - A_0)(B_1 - B_0)(C_1 + C_0)(D_1 - D_0) \\
& + (A_1 - A_0)(B_1 - B_0)(C_1 - C_0)(D_1 + D_0)\|_2
\end{aligned} \tag{12.8}$$

Es fällt auf, dass nur Terme auftreten, die eine ungerade Anzahl von Differenzen besitzen. Interessanterweise lässt sich dies in der Sprache der Produktoperatoren umformulieren. Werden alle Produkte von Differenzen und Summen ausmultipliziert, erhalten wir zunächst eine Summe von allen möglichen Kombinationen $A_aB_bC_cD_d$, mit $a, b, c, d \in \{0, 1\}$. Da die Anordnung eindeutig ist, schreiben wir kürzer $abcd$, was mit einer binären Zahl gleichgesetzt werden kann, einem Index. Betrachten wir den Ausdruck $\|A_1B_1C_1D_1 - A_0B_0C_0D_0\|_2$ als Matrix M mit den Einträgen $+1$ an der Stelle $M_{16,16}$, was der um 1 addierten Binärzahl $(1111)_2$ entspricht, und -1 an der Stelle $M_{1,1}$, was der um 1 erhöhten Binärzahl $(0000)_2$ entspricht. Es stellt sich nun die Frage, ob sich für gewisse Kombinationen $abcd$ die Vorzeichen kompensieren oder aufsummieren, und damit die entsprechenden Einträge in der Matrix von 0 verschieden sind oder nicht.

Um das zu beantworten, betrachten wir nochmals die Produkte von Differenzen und Summen. Multiplizieren wir $(A_1 - A_0)(B_1 + B_0)(C_1 + C_0)(D_1 + D_0)$ aus, so

12 Appendix

erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 (A_1 - A_0)(B_1 + B_0)(C_1 + C_0)(D_1 + D_0) = & +A_1B_1C_1D_1 \\
 & +A_1B_1C_1D_0 \\
 & +A_1B_1C_0D_1 \\
 & +A_1B_1C_0D_0 \\
 & +A_1B_0C_1D_1 \\
 & +A_1B_0C_1D_0 \\
 & +A_1B_0C_0D_1 \\
 & +A_1B_0C_0D_0 \\
 & -A_0B_1C_1D_1 \\
 & -A_0B_1C_1D_0 \\
 & -A_0B_1C_0D_1 \\
 & -A_0B_1C_0D_0 \\
 & -A_0B_0C_1D_1 \\
 & -A_0B_0C_1D_0 \\
 & -A_0B_0C_0D_1 \\
 & -A_0B_0C_0D_0
 \end{aligned}$$

Die Abfolge der Vorzeichen ist mit der Diagonale von $\sigma_z \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1}$ identisch. Dies gilt auch für alle weiteren Produkte von Differenzen und Summen. Dadurch können wir Gleichung (12.8) auch als Summe von Produktoperatoren, sprich als Matrixgleichung, auffassen. Es ergibt sich dann:

$$N \begin{pmatrix} -1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & +1 \end{pmatrix} = 2(z111 + 1z11 + 11z1 + 111z + zzz1 + zz1z + z1zz + 1zzz) \quad (12.9)$$

N stellt einen Normierungsfaktor dar, der von der Anzahl der Summanden auf der rechten Seite von Gleichung (12.9) und somit auch von der Anzahl der Gatter abhängt. Im Falle von vier Gattern ist er 8. Die vorgestellte Vorgehensweise lässt sich sehr leicht auf m Gatter erweitern. Es genügt dann lediglich die 2^m -dimensionale Matrix

$$M = N \begin{pmatrix} -1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & +1 \end{pmatrix} \quad (12.10)$$

in Produktoperatoren zu zerlegen. Dort treten immer solche Terme auf, die eine ungerade Anzahl von z -Komponenten besitzen. Die rechte Seite von Gleichung (12.8) kann dann mittels Dreiecksungleichung weiter abgeschätzt werden. Um die Abschätzung für eine größere Anzahl von Gattern kompakt aufschreiben zu können, werden zunächst folgende Abkürzungen eingeführt:

Sei ${}_kM$ die Menge aller Teilmengen der Menge M der Ordnung k .

Für $M = \{1, 2, 3\}$ ist ${}_1M = \{\{1\}, \{2\}, \{3\}\}$, ${}_2M = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{2, 3\}\}$ und ${}_3M = \{\{1, 2, 3\}\}$. Nun sei $K = \{K_1, K_2, \dots, K_m\}$ eine Menge von Untermengen von M , also $K_k \subset M$. Als Beispiel dienen die gerade eingeführten ${}_kM$. Dann

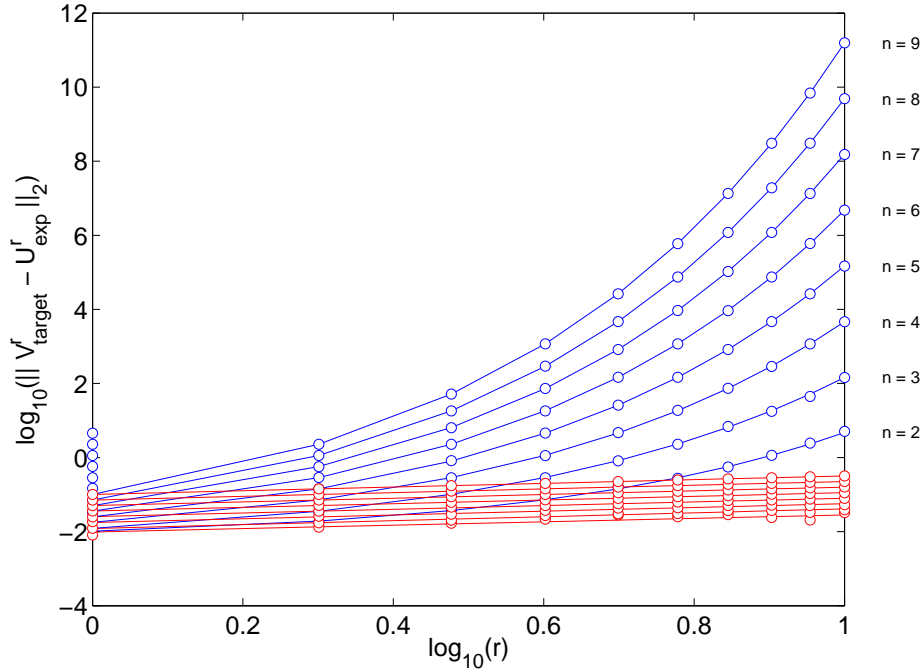


Abbildung 12.2: Vergleich der Abschätzung aus Gleichung (12.11) und dem wirklichen Fehler für eine zunehmende Anzahl von Gattern bei Anzahlen von Qubits im doppelt logarithmischen Maßstab. Die Abschätzung kann durch eine Exponentialfunktion $\|V_{Ziel}^r - U_{numerisch}^r\|_2 = p_1 + p_2 e^{p_3 \log_{10}(r)}$, der wahre Fehler durch eine lineare Funktion $p_1 + p_2 \log_{10}(r)$ approximiert werden. $\{p_1, p_2, p_3\}$ sind durch *fminsearch*-MATLAB-Funktionen optimiert und Abbildung 12.3 zu entnehmen. n ist die Anzahl der Qubits.

ist $\Pi(K)$ die Summe aller Produkte $(\Pi_{x \in K_\ell} \|\Delta(U_x)\|_2)(\Pi_{x \in \bar{K}_\ell} \|\Sigma(U_x)\|_2)$. Z.B. mit $M = \{1, 2, 3\}$ wie oben definiert ergibt sich

$$\begin{aligned} \Pi_1(M) &= \|\Delta(U_1)\|_2 \|\Sigma(U_2)\|_2 \|\Sigma(U_3)\|_2 \\ &\quad + \|\Sigma(U_1)\|_2 \|\Delta(U_2)\|_2 \|\Sigma(U_3)\|_2 \\ &\quad + \|\Sigma(U_1)\|_2 \|\Sigma(U_2)\|_2 \|\Delta(U_3)\|_2 \end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned} \Pi_2(M) &= \|\Delta(U_1)\|_2 \|\Delta(U_2)\|_2 \|\Sigma(U_3)\|_2 \\ &\quad + \|\Delta(U_1)\|_2 \|\Sigma(U_2)\|_2 \|\Delta(U_3)\|_2 \\ &\quad + \|\Sigma(U_1)\|_2 \|\Delta(U_2)\|_2 \|\Delta(U_3)\|_2 \end{aligned}$$

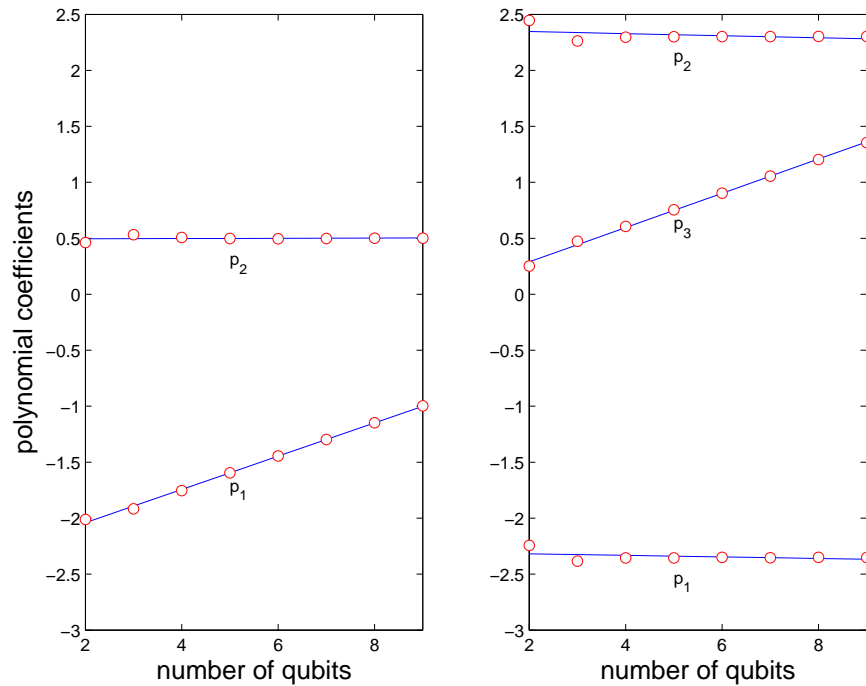


Abbildung 12.3: Das Verhalten der Koeffizienten der approximativen Fehlerfunktionen für verschiedene Anzahlen von Qubits.

oder

$$\Pi_{(3M)} = \|\Delta(U_1)\|_2 \|\Delta(U_2)\|_2 \|\Delta(U_3)\|_2 .$$

Im Folgenden sei V das exakte Gatter und U das experimentell erreichbare. Für $2n$ Gatter U_k, V_k mit $k \in \{1, \dots, 2n\}$ und $M = \{1, \dots, 2n\}$, nimmt die Abschätzung dann folgende Form an:

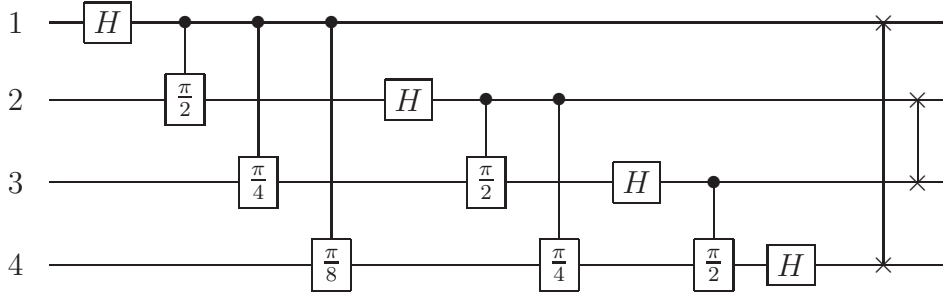
$$\|U_{2n} \cdots U_2 U_1 - V_{2n} \cdots V_2 V_1\|_2 \leq \sum_{k=0}^{n-1} \Pi_{(2k+1)M} \quad (12.11)$$

Ein numerischer Vergleich der verschiedenen Abschätzungen findet sich in Abbildung 12.2, welcher zu entnehmen ist, dass eine grobe Fehlerabschätzung sehr schnell zu sehr schlechten Qualitäten führen würde. Dies liegt daran, dass eine gewisse Fehlerkorrektur, bei der sich zufällige Fehler des einen Gatters mit zufälligen Fehlern des nächsten gegeneinander aufheben, nicht berücksichtigt wird.

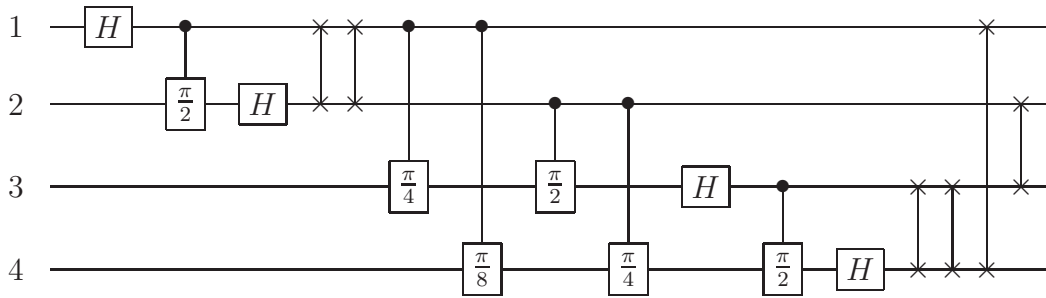
12.3.2 Rekursive Zerlegung der QFT auf L_n

Ziel des folgenden Abschnitts ist eine rekursive Zerlegung der QFT zu erhalten. Diese soll sukzessive aus einer Standardzerlegung hergeleitet werden. Um dies zu verdeutlichen, werden alle Schritte beispielhaft erläutert. Eine der einfachsten

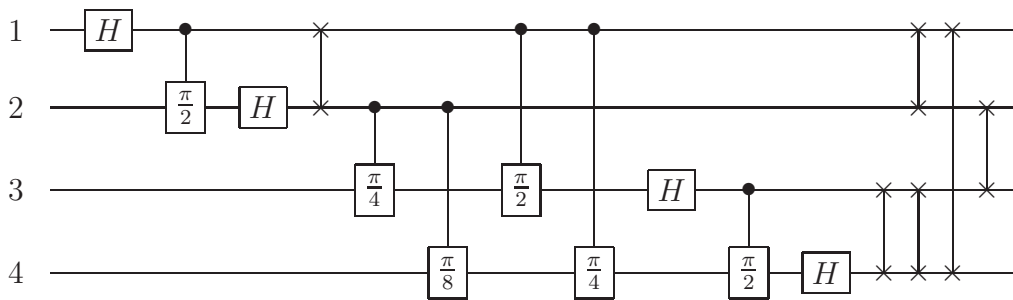
allgemeinen Zerlegungen findet sich in [111]. Für 4 Qubits erhalten wir:



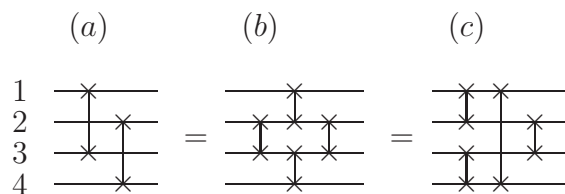
Zunächst ordnen wir das zweite und dritte kontrollierte Phasen-Gatter um. Dies ist erlaubt, da sie mit dem dazwischen liegenden Hadamard-Gatter kommutieren. Zudem fügen wir nach dem zweiten und dem letzten Hadamard-Gatter noch Paare von SWAP-Gattern ein. Wir erhalten nun:



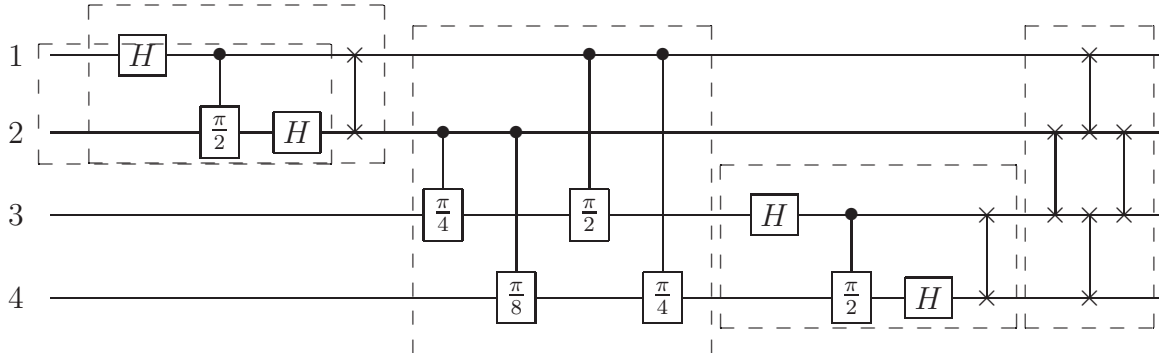
Das neue zweite SWAP-Gatter wird ans Ende, vor das große SWAP-Gatter geschoben. Dadurch ändern sich die Kontrollqubits der CPHASE-Gatter.



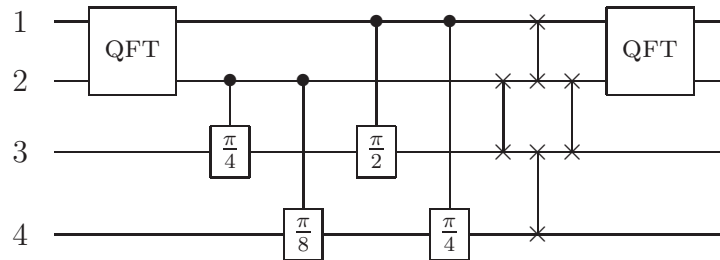
Der abschließende SWAP kann umgeformt werden:



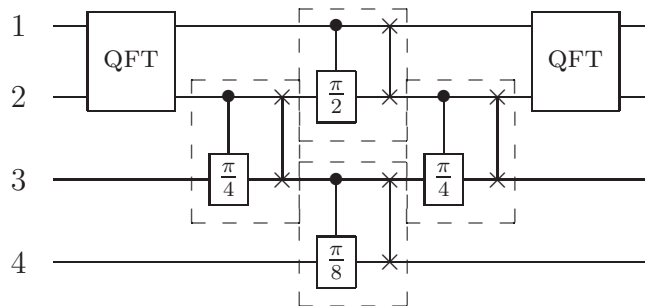
Jetzt lassen sich bereits die ersten vier Gatter zu einer 2-Qubit-QFT zusammenfassen. Eine weitere 2-Qubit-QFT erkennt man vor dem abschließenden SWAP.



Der abschließende SWAP wird nun in die Mitte der Zerlegung geschoben. Dadurch wird die zweite Hälfte der Qubits mit der ersten permutiert. Dies erkennt man am besten in Darstellung (a) des abschließenden SWAP (s.o.).



Nun benutzt man wieder Darstellung (b) des (abschließenden) SWAP s und kombiniert dann kontrollierte Phasen-Gatter mit dem SWAP.



Man erhält somit eine Zerlegung der QFT auf 4 Qubits in Gatter, oder besser Module, die nur auf 2 Qubits wirken. Bei der Standardzerlegung [111], sowie bei [167] treten immer noch Hadamard-Gatter auf, die nur auf einem Qubit wirken.

12.3.3 Variante II der skalierbaren Zerlegung der QFT

Bei dieser zweiten Variante werden QFT-Gatter derselben Größe, wie die cP-SWAP-Gatter benutzt, s. Abb. 12.4. Als Folge davon können die Zeiten freier Evolution zwischen den cP-SWAP-Gattern nicht genutzt werden. Die QFT-Gatter können jedoch in kleinere QFT-Gatter und weitere cP-SWAPs zerlegt werden, so dass dieses Manko beseitigt wird.

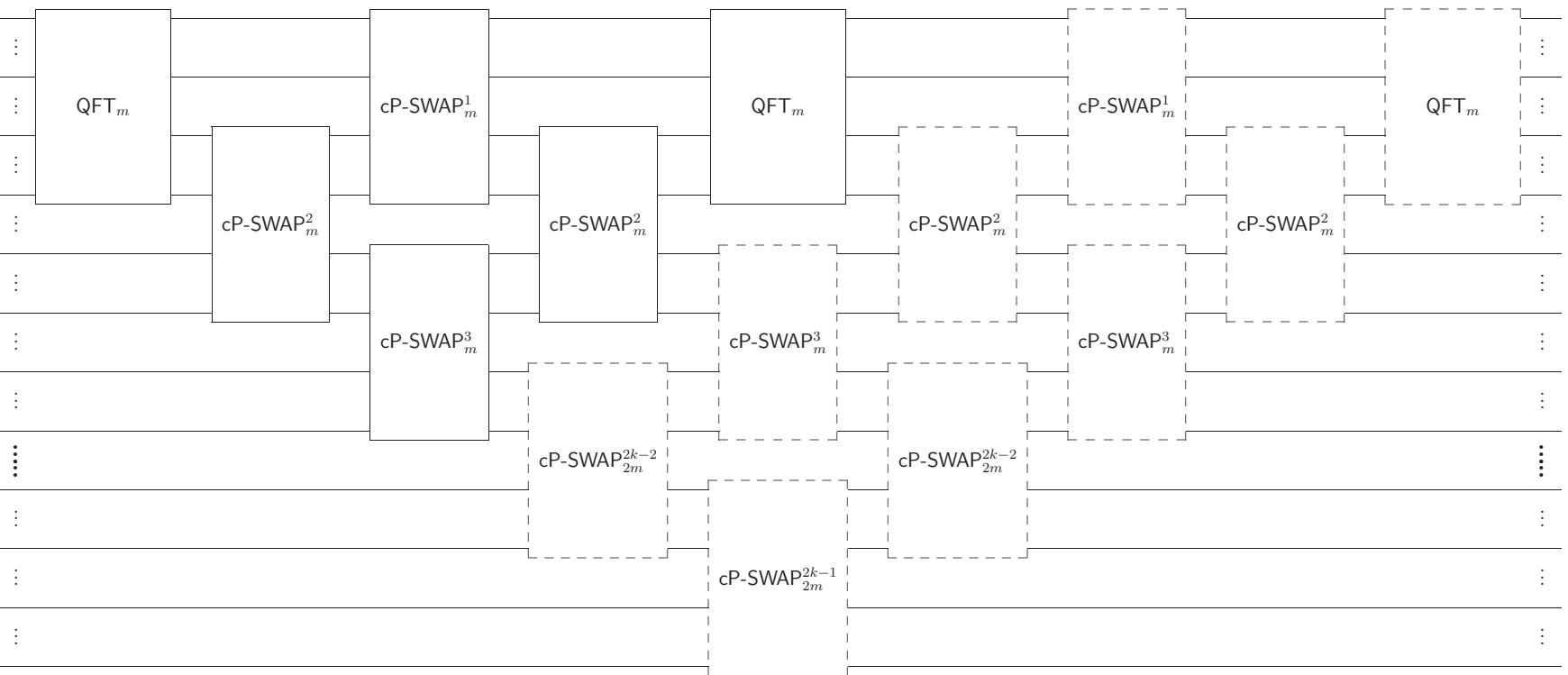


Abbildung 12.4: Für $k \geq 2$ und geradem m , kann eine (km) -Qubit QFT auch aus k Modulen einer m -Qubit QFT und $4 \binom{k}{2}$ cP-SWAP_m^j s zusammengesetzt werden, mit $j = 1, 2, \dots, 2k - 1$. Die gestrichelten Kästen entsprechen denen in Abbildung 6.7 und zeigen die Induktion $k \mapsto k + 1$.

12.3.4 cP-SWAP innerhalb der $k \cdot 10$ -Qubit QFT

Die in diversen Zerlegungen auftauchenden cP-SWAP-Gatter nehmen für 10 Qubits, die in Abb.12.5 dargestellte Form an.

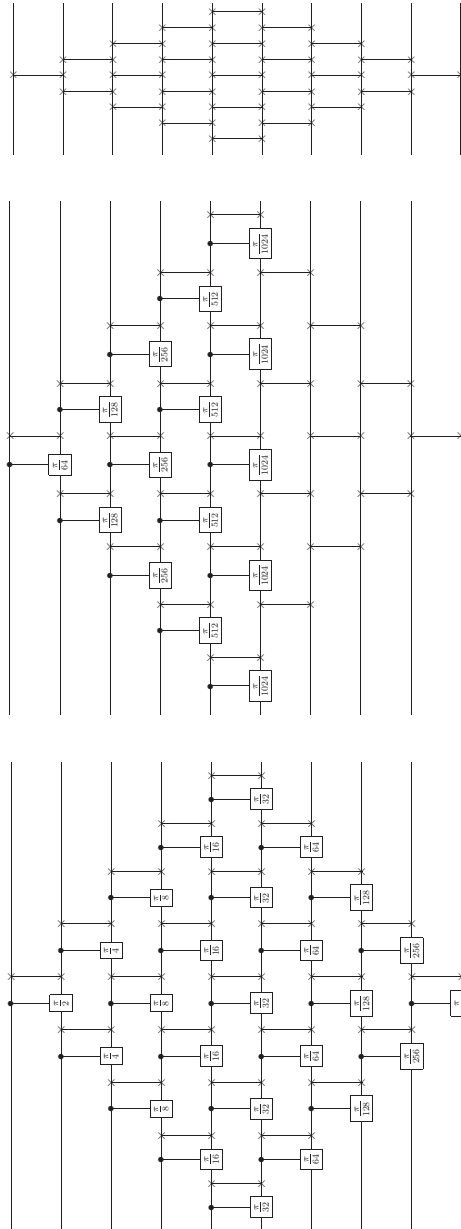


Abbildung 12.5: Für $n = 10$ gibt es 3 cP-SWAP-Gatter. cP-SWAP_{10}^1 (unten) mit Drehwinkeln $\frac{\pi}{21}$ bis $\frac{\pi}{210}$ und cP-SWAP_{10}^2 (Mitte) mit Drehwinkeln $\frac{\pi}{25}$ bis $\frac{\pi}{214}$. Die Drehwinkel beim cP-SWAP_{10}^3 (oben) sind kleiner als $\frac{\pi}{210}$ und werden deswegen vernachlässigt.

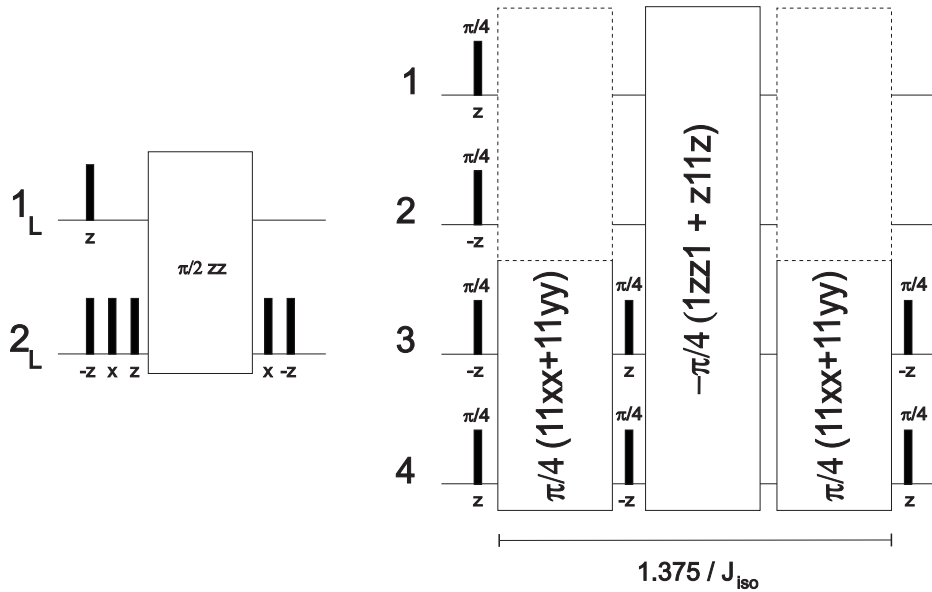


Abbildung 12.6: Zerlegung des CNOTs auf der Ebene der logischen Qubits. Wären alle Komponenten des Driftterms individuell vorhanden, wäre die Dauer der Pulssequenz $1.375/J_{iso}$ (s. Unterschrift der Abbildung 12.11 und Gleichung (12.25)-(12.26ff.)).

12.4 Relaxationsoptimierte Quantengatter

12.4.1 Ausführliche Trotter-Zerlegung

Im folgenden Abschnitt soll die in Kapitel 7.3.1 verwendete Zerlegung des kodierten CNOTs ausführlich vorgestellt werden. Dabei wird folgende Vorgehensweise verwendet:

1. Zerlegung des CNOTs auf der Ebene logischer Qubits (s. Abb. 12.6(links)),
2. Übersetzung logischer Gatter in kodierte Gatter (s. Abb. 12.6(rechts)),
3. Übersetzung kodierter Gatter in physikalische Operationen (s. Abb. 12.7 und Abb. 12.8),
4. Zusammenlegung von Gattern (s. Abb. 12.9) und
5. Vermeidung inverser Kopplungsevolutionen (s. Abb. 12.10 und Abb. 12.11).

zu (1).

Die hier vorgestellte Zerlegung des effektiven Hamiltonians erklärt sich wie folgt: Ziel ist es eine Zerlegung des CNOTs zu erhalten, die nur aus lokalen x - und z -Rotationen auf den einzelnen Spins, sowie Evolutionen unter schwacher Kopplung

12 Appendix

besteht. Zunächst betrachten wir den effektiven Hamiltonian des CNOTs:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = e^{-i\frac{\pi}{2}(-\frac{1}{2}\mathbf{1}+I_{1z}+I_{2x}-2I_{1z}I_{2x})} \quad (12.12)$$

Jetzt wird der $2I_{1z}I_{2x}$ -Term durch folgende Sequenz simuliert:

$$e^{i\frac{\pi}{2}2I_{1z}I_{2x}} = e^{i\frac{\pi}{2}I_{2y}} e^{-i\frac{\pi}{2}2I_{1z}I_{2z}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2y}} \quad (12.13)$$

Des Weiteren werden die nun eingeführten I_{2y} -Rotationen durch

$$e^{\pm i\frac{\pi}{2}I_{2y}} = e^{i\frac{\pi}{2}I_{2z}} e^{\mp i\frac{\pi}{2}I_{2x}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2z}} \quad (12.14)$$

ersetzt. Schließlich erhalten wir, unter Vernachlässigung des globalen Phasenfaktors,

$$\begin{aligned} & e^{-i\frac{\pi}{2}(I_{1z}+I_{2x}-2I_{1z}I_{2x})} \\ &= e^{-i\frac{\pi}{2}I_{1z}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2x}} e^{i\frac{\pi}{2}I_{2y}} e^{-i\frac{\pi}{2}2I_{1z}I_{2z}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2y}} \\ &= e^{-i\frac{\pi}{2}I_{1z}} \underbrace{e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2x}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2z}} e^{i\frac{\pi}{2}I_{2x}}}_{e^{i\frac{\pi}{2}I_{2y}} = e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2z}} e^{i\frac{\pi}{2}I_{2x}} e^{i\frac{\pi}{2}I_{2z}}} \underbrace{e^{i\frac{\pi}{2}I_{2z}} e^{-i\frac{\pi}{2}2I_{1z}I_{2z}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2z}}}_{e^{-i\frac{\pi}{2}2I_{1z}I_{2z}}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2x}} e^{i\frac{\pi}{2}I_{2z}} \\ &= e^{-i\frac{\pi}{2}I_{1z}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2z}} e^{i\frac{\pi}{2}I_{2x}} e^{i\frac{\pi}{2}I_{2z}} e^{-i\frac{\pi}{2}2I_{1z}I_{2z}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2x}} e^{i\frac{\pi}{2}I_{2z}} \end{aligned} \quad (12.15)$$

Zusammen mit

$$e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2z}} e^{\pm i\frac{\pi}{2}I_{2x}} e^{i\frac{\pi}{2}I_{2z}} = e^{i\frac{\pi}{2}I_{2z}} e^{\mp i\frac{\pi}{2}I_{2x}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2z}} \quad (12.16)$$

erhalten wir

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = e^{-i\frac{\pi}{2}I_{1z}} e^{i\frac{\pi}{2}I_{2z}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2x}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2z}} e^{-i\frac{\pi}{2}2I_{1z}I_{2z}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2x}} e^{i\frac{\pi}{2}I_{2z}} . \quad (12.17)$$

Nutzen wir nun noch die Tatsache, dass das CNOT, sowie alle Komponenten der Zerlegung, invariant unter Transposition sind (s. auch Gleichung (4.3)), so erhalten wir die vorherige Sequenz in umgekehrter Reihenfolge, was genau der Pulssequenz in Abbildung 12.6(links) entspricht:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = e^{i\frac{\pi}{2}I_{2z}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2x}} e^{-i\frac{\pi}{2}2I_{1z}I_{2z}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2z}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{2x}} e^{i\frac{\pi}{2}I_{2z}} e^{-i\frac{\pi}{2}I_{1z}} . \quad (12.18)$$

zu (2).

Die Übersetzung in kodierte Operationen benutzt den in Kapitel 2.1.4, Gleichung (2.10), vorgestellten Isomorphismus zwischen den verschiedenen Darstellungen der Algebren der $\mathbf{su}(2)$:

$$\left\{ \frac{1}{2}(xx + yy), \frac{1}{2}(yx - xy), \frac{1}{2}(z1 - 1z) \right\} \stackrel{iso}{=} \{I_x, I_y, I_z\} . \quad (12.19)$$

Zusammen mit $(11 - zz) \stackrel{iso}{=} \mathbf{1}$ erhalten wir folgende Darstellungen für die relevanten Elemente der $\mathbf{su}(4)$:

$$\begin{aligned} I_{1z} &\stackrel{iso}{=} \frac{1}{2}(z1 - 1z) \otimes (11 - zz) \\ I_{2z} &\stackrel{iso}{=} (11 - zz) \otimes \frac{1}{2}(z1 - 1z) \\ I_{2x} &\stackrel{iso}{=} (11 - zz) \otimes \frac{1}{2}(xx + yy) \\ 2I_{1z}I_{2z} &\stackrel{iso}{=} 2\frac{1}{2}(z1 - 1z) \otimes \frac{1}{2}(z1 - 1z) . \end{aligned} \quad (12.20)$$

zu (3).

Bei der physikalischen Implementierung der in Gleichung (12.20) vorgestellten Operationen benutzen wir folgenden Trick: Bei der I_{1z} -Operation werden lediglich folgende Komponenten implementiert $\frac{1}{2}(z1 - 1z) \otimes 11$. Dies genügt aber für den

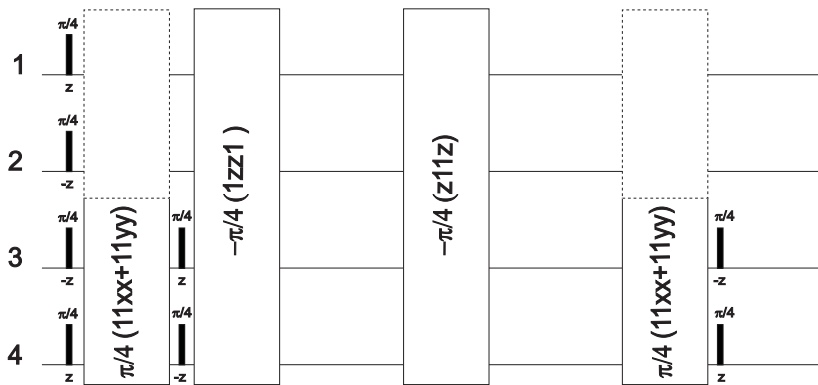


Abbildung 12.7: Die kodierte Ising-Interaktion $(-1zz1 - z11z)$ wird in zwei Teile zerlegt, da die $z11z$ -Operation noch in physikalische Operationen umgewandelt werden muss.

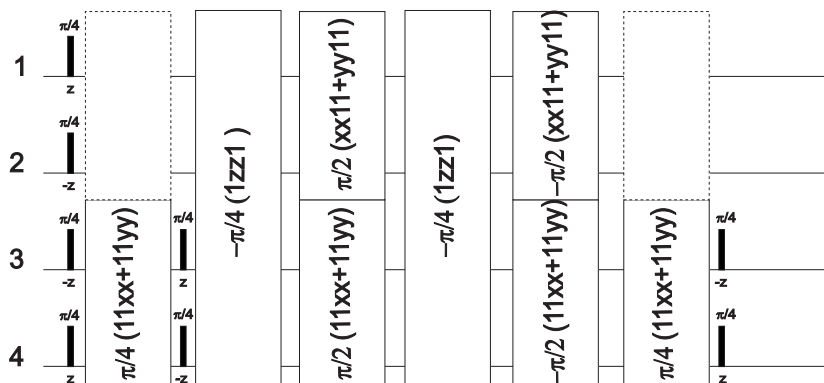


Abbildung 12.8: Durch eine Transformation bzw. Konjugation mit zwei planaren Mischoperationen auf beiden Paaren von Qubits wird die $z11z$ -Operation in eine physikalische $1zz1$ -Operation umgewandelt.

uns interessierenden Fall, da folgendes gilt:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2}(z1 - 1z) \otimes 11 &= \frac{1}{2}(z1 - 1z) \otimes \left(\frac{1}{2}(11 - zz) + \frac{1}{2}(11 + zz) \right) \\
 &= \underbrace{\frac{1}{2}(z1 - 1z) \otimes \frac{1}{2}(11 - zz)}_{\text{(I)}} + \underbrace{\frac{1}{2}(z1 - 1z) \otimes \frac{1}{2}(11 + zz)}_{\text{(II)}} .
 \end{aligned}
 \tag{12.21}$$

Wir erhalten also zum einen (I) die gewünschte Operation, und zum anderen (II) eine Operation, die auf den Hilbertraum der kodierten logischen Zustände keine Wirkung hat, s. Abbildung 12.7. Bei der zu implementierenden kodierten Kopplungsevolution genügt es, die symmetrischen $z11z$ - und $1zz1$ -Komponenten auszuführen. Betrachten wir hierzu folgende Identität:

$$\begin{aligned}
 -(z11z + 1zz1) &= \frac{1}{2}(z1z1 - z11z - 1zz1 + 1z1z) - \frac{1}{2}(z1z1 + z11z + 1zz1 + 1z1z) \\
 &= 2 \underbrace{\left(\frac{1}{2}(z1 - 1z) \otimes \frac{1}{2}(z1 - 1z) \right)}_{\stackrel{iso}{=} 2I_{1z}I_{2z}} - 2 \left(\frac{1}{2}(z1 + 1z) \otimes \frac{1}{2}(z1 + 1z) \right)
 \end{aligned}
 \tag{12.22}$$

Die Implementierung der symmetrischen Komponenten lässt sich also in eine erwünschte Kopplungsevolution und eine kommutierende Evolution zerlegen. Die $z11z$ -Evolution wird in einem weiteren Schritt durch planare Mischoperationen, in eine $1zz1$ -Evolution transformiert, s. Abbildung 12.8.

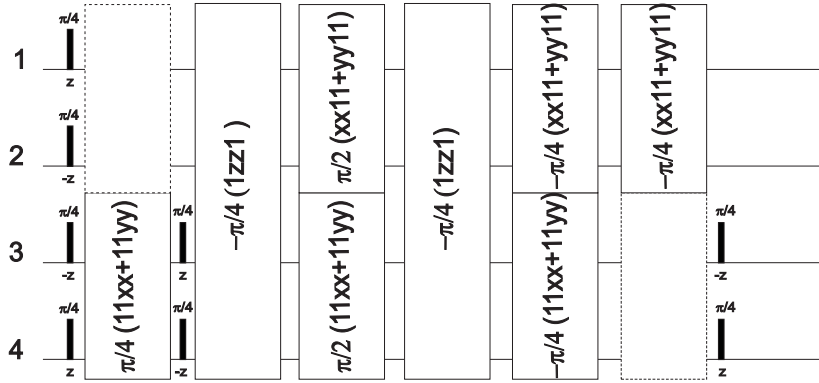


Abbildung 12.9: Die planaren Mischoperationen auf der rechten Seite wurden kombiniert, die Gesamtsumme der Winkel reduziert und die Implementierung dadurch beschleunigt.

zu (4).

Um eine schnellere Implementierung zu erhalten, werden die letzten beiden planaren Gatter in Abbildung 12.8 wie folgt kombiniert:

$$e^{i\frac{\pi}{2}((xx11+yy11)+(11xx+11yy))} e^{-i\frac{\pi}{4}(11xx+11yy)} = e^{i\frac{\pi}{4}((xx11+yy11)+(11xx+11yy))} e^{i\frac{\pi}{4}(xx11+yy11)} \quad (12.23)$$

Das Ergebnis dieser Transformation ist in Abbildung 12.9 zu sehen.

zu (5).

Da inverse Kopplungen in diesem Modellsystem nicht auf einfachem Wege zu erhalten sind, sollen Evolutionen unter diesen Hamiltonians vermieden werden. Dies geschieht dadurch, dass man sich zu Nutze macht, dass das CNOT adjunktionsinvariant, also selbst-invers ist. Es gilt also

$$U = U_m \cdots U_2 U_1 = (U_m \cdots U_2 U_1)^\dagger = U_1^\dagger U_2^\dagger \cdots U_m^\dagger = U^\dagger = U. \quad (12.24)$$

Das bedeutet, dass sich alle Drehwinkel, sowie die Reihenfolge der Gatter, umkehren. Somit verschwinden die Evolutionen mit negativen Vorzeichen, s. Abbildung 12.10. Um nun noch die inverse Evolution des letzten planaren Mischhamiltonians zu ersetzen, benutzen wir Gleichung (12.16) in der Darstellung der kodierten Algebra.

Alle in der abschließenden Zerlegung vorkommenden $1zz1$ -Terme müssen zudem noch durch einen weiteren *Trotter*-Ansatz aus der tatsächlich vorliegenden isotropen Kopplung der beiden mittleren Qubits simuliert werden. Dies geschieht für den Fall einer normalen, nicht inversen, Evolution ohne weiteren Zeitverlust, wenn man von der Dauer der dazu notwendigen Pulse für den Moment absieht. Aus der Zerlegung in Abbildung 12.11 folgt für die Zeitkomplexität dec CNOTs

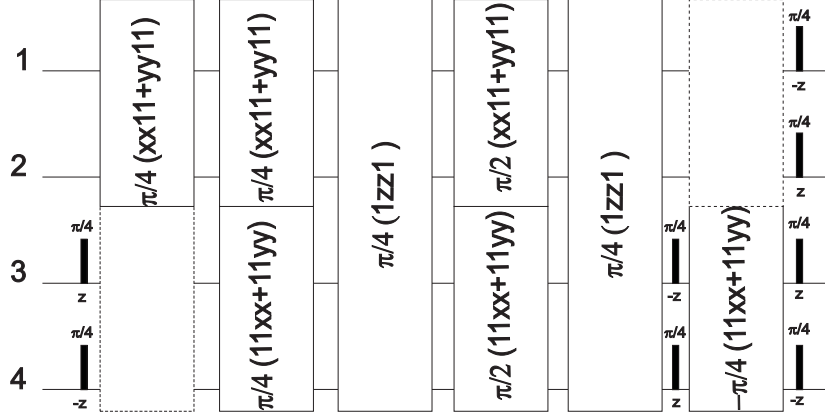


Abbildung 12.10: Da das CNOT selbst-invers ist, kann die ganze Pulssequenz invertiert werden. Auf diese Weise werden inverse Kopplungsevolutionen vermieden, welche ansonsten sehr zeitaufwendig zu simulieren sind. Die Vorzeichen der $\frac{1}{2}(xx11+yy11)$ -Blöcke werden deshalb nicht invertiert, weil sich diese Gatter abgesehen von einem globalen Phasenfaktor nicht von ihrem Inversem unterscheiden.

mittels *Trotter*-Ansatz:

$$\tau_{\text{Trotter-CNOT}} = \tau_{\frac{\pi}{4}I_{1x}} + \tau_{\frac{\pi}{4}(I_{1x}+I_{2x})} + \tau_{\frac{\pi}{4}2I_{1z}I_{2z}} + \tau_{\frac{\pi}{2}(I_{1x}+I_{2x})} + \tau_{\frac{\pi}{4}2I_{1z}I_{2z}} + \tau_{\frac{\pi}{4}I_{2x}} . \quad (12.25)$$

Sei $\tau_{\frac{\pi}{2}z}$ die Dauer eines lokalen z -Pulses. Die einzelnen Teilgatter besitzen dann folgende Zeitkomplexitäten:

$$\tau_{\frac{\pi}{4}I_{kx}} = n_1(4\tau_{\frac{\pi}{2}z} + 2\tau_{H_{\text{Drift},x}} + 2\tau_{-H_{\text{Drift},x}}) \quad (12.26)$$

$$\tau_{\frac{\pi}{4}2I_{1z}I_{2z}} = 2n_1(2\tau_{\frac{\pi}{2}z} + 2\tau_{H_{\text{Drift},zz}}) \quad (12.27)$$

$$\tau_{\frac{\pi}{4}(I_{1x}+I_{2x})} = n_1(2\tau_{\frac{\pi}{2}z} + \tau_{H_{\text{Drift},x}} + \tau_{-H_{\text{Drift},x}}) \quad (12.28)$$

$$\tau_{\frac{\pi}{2}(I_{1x}+I_{2x})} = 2\tau_{\frac{\pi}{4}(I_{1x}+I_{2x})} . \quad (12.29)$$

Für die Zeitkomplexitäten von $\tau_{H_{\text{Drift}}}$ und $\tau_{-H_{\text{Drift}}}$ erhalten wir:

$$\tau_{H_{\text{Drift},zz}} = n_2 \left(2\tau_{\frac{\pi}{2}z} + \frac{1}{4 \cdot 4 \cdot 2J_{\text{iso}}n_1n_2} + 2\tau_{\frac{\pi}{2}z} + \frac{1}{4 \cdot 4 \cdot 2J_{\text{iso}}n_1n_2} \right) \quad (12.30)$$

$$\tau_{H_{\text{Drift},x}} = n_2 \left(2\tau_{\frac{\pi}{2}z} + \frac{1}{4 \cdot 4 \cdot n_1n_2J_{xx}} + 2\tau_{\frac{\pi}{2}z} + \frac{1}{4 \cdot 4 \cdot n_1n_2J_{xx}} \right) \quad (12.31)$$

$$\tau_{-H_{\text{Drift},x}} = n_2 \left(2\tau_{\frac{\pi}{2}z} + \frac{p}{n_2J_{xx}} + 2\tau_{\frac{\pi}{2}z} + \frac{p}{n_2J_{xx}} \right) \quad (12.32)$$

An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass die Abhängigkeit von n_1 im Falle der inversen Kopplungsevolution *nicht* gegeben ist. Das führt dazu, dass bei höheren

Anforderungen an die Genauigkeit des Gatters, also bei einem größeren n_1 , sehr viel mehr Zeit in Anspruch genommen werden muss. Daraus folgt dann, im Falle dissipativer Prozesse, ein Abwägen zwischen den Verlusten durch eine schlechte Trotter-Zerlegung und den Verlusten durch zeitintensive Pulssequenzen.

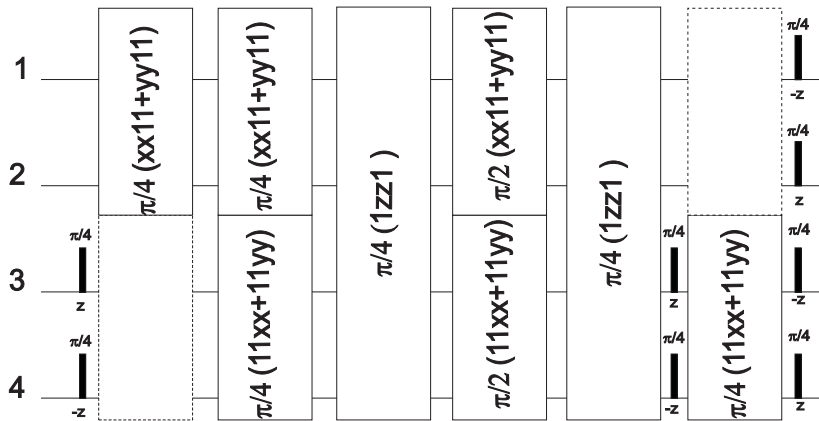


Abbildung 12.11: Durch eine weitere zulässige Inversionen werden weitere inverse Kopplungen vermieden. In dieser Darstellung lässt sich die Gesamtdauer von $1.375/J_{iso}$ bei vorhandener inverser Kopplung gut erklären: Die am Anfang und Ende auftretenden $xx + yy$ -Operation auf dem oberen bzw. unteren Qubitpaar dauern $\frac{1}{4J_{iso}}$. Die Entkopplung des zweiten Qubitpaares verdoppelt die Implementierungszeit. Die darauffolgenden gemeinsamen $xx + yy$ -Operationen mit Drehwinkel $\frac{\pi}{4}$ bzw. $\frac{\pi}{2}$ benötigt nur $\frac{1}{8J_{iso}}$ bzw. $\frac{1}{4J_{iso}}$, da die planare Kopplung zwischen den Qubitpaaren doppelt so groß ist, wie die zentrale isotropen Kopplung. Die zz -Operationen benötigen jeweils $\frac{1}{4J_{iso}}$. In der Summe ergibt sich:

$$\frac{5}{4J_{iso}} + \frac{1}{8J_{iso}} = \frac{11}{8J_{iso}} = \frac{1.375}{J_{iso}}$$

12.5 Inversion

12.5.1 Typeneinteilung

Zuerst soll **Lemma 2** aus Kapitel 9 bewiesen werden:

Entweder ist e^{-itH}

1. überhaupt nicht durch lokal Unitäre invertierbar, oder
2. selbst-invers und damit trivial, oder
3. Typ I invertierbar $\forall t \in \mathbb{R}$, im Sinne von $\exists K \in SU(2)^{\otimes n} : KHK^{-1} = -H$ so $Ke^{-itH}K^{-1} = e^{+itH}$, oder
4. Typ II invertierbar, so dass zu manchen, nicht allen, Zeiten τ die Gleichung $K_1e^{-i\tau H}K_2 = e^{+i\tau H}$ mit $K_1, K_2 \in SU(2)^{\otimes n}$ und $K_2 \neq K_1^{-1}$ gilt.

Beweis: Durch die Reihenentwicklung der Exponentialabbildung erhält man die Äquivalenz

$$\begin{aligned} KHK^{-1} &= -H \\ \Leftrightarrow \forall t \in \mathbb{R} : Ke^{-itH}K^{-1} &= e^{+itH}. \end{aligned} \tag{12.33}$$

Ihre logische Umkehrung

$$\begin{aligned} KHK^{-1} &\neq -H \\ \Leftrightarrow \exists t \in \mathbb{R} : Ke^{-itH}K^{-1} &\neq e^{+itH}, \end{aligned} \tag{12.34}$$

umfasst die folgenden trivialen Fälle

1. $\forall t \in \mathbb{R} : Ke^{-itH}K^{-1} \neq e^{+itH}$, so dass e^{-itH} entweder überhaupt nicht invertierbar ist, oder
2. $\exists \tau \neq 0 : Ke^{-i\tau H}K^{-1} = e^{+i\tau H}$, während für alle anderen $t \neq \tau$ (mit Ausnahme von Spezialfällen, wegen eventuellen Periodizitäten) $Ke^{-itH}K^{-1} \neq e^{+itH}$ während $(KHK^{-1}) \neq -H$. Dies trifft nur zu, wenn $K = \mathbf{1}$ und $e^{-i\tau H}$ selbst-invers ist¹.

Ist Gleichung (12.33) wahr, erhält man

$$3. \forall t \in \mathbb{R} : Ke^{-itH}K^{-1} = e^{+itH}.$$

Nun, gilt es noch zu zeigen, dass die beiden Typen unterschiedlich sind.

¹ K kann auch aus der lokalen Stabilisatorgruppe von H gewählt werden. Das sind alle lokalen Operationen die mit H vertauschen.

4. Angenommen $K_1 e^{-i\tau H} K_2 = e^{+i\tau H}$ mit $K_1 \neq K_2^{-1}$ ist wahr für einige Zeiten τ , aber nicht für alle $\tau \in \mathbb{R}$.

Der Beweis erfolgt durch Widerspruch: Kehren wir die Aussage um, so erhalten wir $\forall t \in \mathbb{R} K_1 e^{-itH} K_2 = e^{+itH}$ mit $K_1 \neq K_2^{-1}$. Definieren wir nun zwei kommutierende Elemente der 1-Parameter-Gruppe $U_1 := e^{-it_1 H}$ und $U_2 := e^{-it_2 H}$, so erhalten wir $U_{12} := e^{-i(t_1+t_2)H}$.

Dadurch erhält man

$$\begin{aligned} K_1 U_{12} K_2 &= U_{12}^{-1} \\ K_1 U_1 U_2 K_2 &= U_2^{-1} U_1^{-1} = U_1^{-1} U_2^{-1} \\ (K_1 U_1 K_2)(\underline{K_2^{-1}} U_2 K_2) &= (K_1 U_1 K_2)(\underline{K_1} U_2 K_2) \\ K_2^{-1} &= K_1 \quad , \end{aligned}$$

was der Annahme widerspricht.

Somit sind alle Fälle in Tabelle 9.1 bewiesen. ■

12.5.2 Allgemeine Darstellung von F_z

Der Generator äquivalenter z -Rotationen auf allen Spinqubits F_z , wird als die Diagonalmatrix

$$F_z := \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^n \mathbf{1}^{(1)} \otimes \mathbf{1}^{(2)} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}^{(\ell-1)} \otimes \sigma_z^{(\ell)} \otimes \mathbf{1}^{(\ell+1)} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}^{(n)} \quad (12.35)$$

definiert, die über alle Pauli-Matrizen $\sigma_z^{(\ell)}$ auf allen Qubits summiert. Falls es notwendig ist, die Gesamtzahl der Qubits zu vermerken, kann auch F_z^n geschrieben werden. Es soll nun eine explizite Formel für das i -te Diagonalelement bei allgemeinem n angegeben werden.

Lemma 11 *Um das Diagonalelement $(F_z^n)_{ii}$ mit $i \in \{1, 2, 3, \dots, 2^n\}$ zu berechnen, benötigen wir die n -stellige Binärdarstellung von $(i - 1)$, also $(i - 1)_2 =: \sum_{k=0}^{n-1} 2^k b_k$, mit $b_k \in \{0, 1\}$. Die Reduktion um 1 kommt von der Indexierung der Elemente. Würde man mit 0 und nicht mit 1 beginnen, wäre das nicht nötig. Das i -te Diagonalelement ist dann*

$$(F_z^n)_{ii} = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^{b_k} \quad . \quad (12.36)$$

Beweis (Induktion):

Für $n = 1$ erhält man: $(i - 1)_2 = 2^0 b_0 \in \{0, 1\}$, so dass $(F_z^1)_{ii} = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{(1-1)} (-1)^{b_k}$. Daraus erhält man $(F_z^1)_{11} = \frac{1}{2} = -(F_z^1)_{22}$.

$$M_{A-----} = \begin{pmatrix} M_{11}^{\text{Im}} & M_{12} & M_{13} & M_{14} \\ 0 & M_{22}^{\text{Im}} & M_{23} & M_{24} \\ 0 & 0 & M_{33}^{\text{Im}} & M_{34} \\ 0 & 0 & 0 & M_{44}^{\text{Im}} \end{pmatrix} \\ -(-1^{a \cdot b}) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1^a M_{12}^* & 0 & 0 & 0 \\ -1^b M_{13}^* & M_{23}^* & 0 & 0 \\ M_{14}^* & -1^b M_{24}^* & -1^a M_{34}^* & 0 \end{pmatrix}$$

$$M_{B++++} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12}^{\text{Re}} & M_{13} & M_{14} \\ M_{21}^{\text{Re}} & 0 & M_{23} & M_{24} \\ 0 & 0 & M_{33} & M_{34}^{\text{Re}} \\ 0 & 0 & M_{43}^{\text{Re}} & 0 \end{pmatrix} \\ +(-1^{a \cdot b}) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1^a M_{11}^* & 0 & 0 \\ M_{24}^* & -1^b M_{14}^* & 0 & 0 \\ -1^b M_{23}^* & M_{13}^* & 0 & -1^a M_{33}^* \end{pmatrix}$$

$$M_{B+---} = \begin{pmatrix} 0 & M_{12}^{\text{Im}} & M_{13} & 0 \\ M_{21}^{\text{Re}} & 0 & 0 & M_{24} \\ \pm M_{24}^* & 0 & 0 & M_{34}^{\text{Re}} \\ 0 & \mp M_{13}^* & M_{43}^{\text{Im}} & 0 \end{pmatrix}$$

$$M_{B-+-} = \begin{pmatrix} 0 & M_{12}^{\text{Re}} & M_{13} & 0 \\ M_{21}^{\text{Im}} & 0 & 0 & M_{24} \\ \pm M_{24}^* & 0 & 0 & M_{34}^{\text{Im}} \\ 0 & \mp M_{13}^* & M_{43}^{\text{Re}} & 0 \end{pmatrix}$$

$$M_{B-----} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12}^{\text{Im}} & M_{13} & M_{14} \\ M_{21}^{\text{Im}} & 0 & M_{23} & M_{24} \\ 0 & 0 & M_{33} & M_{34}^{\text{Im}} \\ 0 & 0 & M_{43}^{\text{Im}} & 0 \end{pmatrix} \\ -(-1^{a \cdot b}) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1^a M_{11}^* & 0 & 0 \\ M_{24}^* & -1^b M_{14}^* & 0 & 0 \\ -1^b M_{23}^* & M_{13}^* & 0 & -1^a M_{33}^* \end{pmatrix}$$

$$M_{C++++} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13}^{\text{Re}} & M_{14} \\ M_{21} & M_{22} & 0 & M_{24}^{\text{Re}} \\ M_{24}^{\text{Re}} & M_{32} & 0 & 0 \\ 0 & M_{13}^{\text{Re}} & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ +(-1^{a \cdot b}) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1^a M_{14}^* & 0 \\ 0 & 0 & -1^b M_{11}^* & M_{21}^* \\ -1^a M_{32}^* & 0 & M_{12}^* & -1^b M_{22}^* \end{pmatrix}$$

12 Appendix

$$M_{C_{+---+}} = \begin{pmatrix} 0 & M_{12} & M_{13}^{\text{Im}} & 0 \\ M_{21} & 0 & 0 & M_{24}^{\text{Re}} \\ M_{24}^{\text{Re}} & 0 & 0 & \pm M_{21}^* \\ 0 & M_{13}^{\text{Im}} & \mp M_{12}^* & 0 \end{pmatrix}$$

$$M_{C_{-+++}} = \begin{pmatrix} 0 & M_{12} & M_{13}^{\text{Re}} & 0 \\ M_{21} & 0 & 0 & M_{24}^{\text{Im}} \\ M_{24}^{\text{Im}} & 0 & 0 & \pm M_{21}^* \\ 0 & M_{13}^{\text{Re}} & \mp M_{12}^* & 0 \end{pmatrix}$$

$$M_{C_{----}} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13}^{\text{Im}} & M_{14} \\ M_{21} & M_{22} & 0 & M_{24}^{\text{Im}} \\ M_{24}^{\text{Im}} & M_{32} & 0 & 0 \\ 0 & M_{13}^{\text{Im}} & 0 & 0 \end{pmatrix} - (-1^{a \cdot b}) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1^a M_{14}^* & 0 \\ 0 & 0 & -1^b M_{11}^* & M_{21}^* \\ -1^a M_{32}^* & 0 & M_{12}^* & -1^b M_{22}^* \end{pmatrix}$$

$$M_{D_{++++}} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} & M_{14}^{\text{Re}} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23}^{\text{Re}} & 0 \\ M_{31} & M_{32}^{\text{Re}} & 0 & 0 \\ M_{41}^{\text{Re}} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + (-1^{a \cdot b}) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1^a M_{13}^* \\ 0 & 0 & M_{22}^* & -1^b M_{21}^* \\ 0 & -1^a M_{31}^* & -1^b M_{21}^* & M_{11}^* \end{pmatrix}$$

$$M_{D_{+---+}} = \begin{pmatrix} M_{11} & 0 & 0 & M_{14}^{\text{Re}} \\ 0 & M_{22} & M_{23}^{\text{Im}} & 0 \\ 0 & M_{32}^{\text{Im}} & \pm M_{22}^* & 0 \\ M_{41}^{\text{Re}} & 0 & 0 & \mp M_{11}^* \end{pmatrix}$$

$$M_{D_{-+++}} = \begin{pmatrix} M_{11} & 0 & 0 & M_{14}^{\text{Im}} \\ 0 & M_{22} & M_{23}^{\text{Re}} & 0 \\ 0 & M_{32}^{\text{Re}} & \pm M_{22}^* & 0 \\ M_{41}^{\text{Im}} & 0 & 0 & \mp M_{11}^* \end{pmatrix}$$

$$M_{D_{----}} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & M_{13} & M_{14}^{\text{Im}} \\ M_{21} & M_{22} & M_{23}^{\text{Im}} & 0 \\ M_{31} & M_{32}^{\text{Im}} & 0 & 0 \\ M_{41}^{\text{Im}} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - (-1^{a \cdot b}) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1^a M_{13}^* \\ 0 & 0 & M_{22}^* & -1^b M_{21}^* \\ 0 & -1^a M_{31}^* & -1^b M_{21}^* & M_{11}^* \end{pmatrix}$$

12.6 Thermisches Quantencomputing und Jones-Polynom

12.6.1 Äquivalente Zopfgruppendarst. in Kapitel 10 und [29]

Die Konstruktion in [29] ergibt folgende Darstellung der zwei Zopfgruppenelemente der Zopfgruppe mit drei Strängen. Sie sind alle der Form $\hat{U}_k := A\mathbf{1} - A^{-1}\Phi_k$, was äquivalent zu $U_k := A\mathbf{1} - A^{-1}u_k$ in unserer Schreibweise ist. Beschränken wir uns im Folgenden auf die Elemente der Temperley-Lieb Algebra Φ_k resp. u_k .

Sei $\delta = 2 \cos(2\phi)$. Es gilt also zu zeigen, dass

$$\Phi_1 := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sin(4\theta)}{\sin(2\theta)} \end{pmatrix} \Leftrightarrow u_1 := \begin{pmatrix} \delta & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

ist und

$$\Phi_2 := \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sin(6\theta)}{\sin(4\theta)} & \frac{\sqrt{\sin(6\theta)\sin(2\theta)}}{\sin(4\theta)} \\ 0 & \frac{\sqrt{\sin(6\theta)\sin(2\theta)}}{\sin(4\theta)} & \frac{\sin(2\theta)}{\sin(4\theta)} \end{pmatrix} \Leftrightarrow u_2 := \begin{pmatrix} \delta^{-1} & \sqrt{1-\delta^{-2}} \\ \sqrt{1-\delta^{-2}} & \delta - \delta^{-1} \end{pmatrix}$$

ist. Das Matrixelement oben links stellt eine redundante Dimension dar, was bereits in Kapitel 10.2.1 Erwähnung fand. Wir konzentrieren uns im Folgenden auf die unteren 2×2 Matrizen. Nach dem Einsetzen von $2 \cos(\alpha) \sin(\alpha) = \sin(2\alpha)$, erhalten wir $\frac{\sin(2\alpha)}{\sin(\alpha)} = 2 \cos(\alpha)$. Ersetzen wir nun α mit 2ϕ in Φ_1 , so erkennen wir, dass Φ_1 bereits isomorph zu u_1 ist, abgesehen von einer Permutation der Elemente.

Φ_2 soll elementweise betrachtet werden. Substituieren wir α mit 2ϕ und führen einige trigonometrische Transformationen durch so erhalten wir:

- $\Phi_2(1, 1)$: Zeige $\frac{\sin(3\alpha)}{\sin(2\alpha)} = 2 \cos(\alpha) - (2 \cos(\alpha))^{-1}$.

$$\begin{aligned} \frac{\sin(3\alpha)}{\sin(2\alpha)} &= \frac{3 \sin(\alpha) - 4 \sin(\alpha)^3}{2 \sin(\alpha) \cos(\alpha)} \\ &= \frac{3}{2 \cos(\alpha)} - \frac{2 \sin(\alpha)^2}{\cos(\alpha)} \\ &= \frac{3}{2 \cos(\alpha)} - \frac{2(1 - \cos(\alpha)^2)}{\cos(\alpha)} \\ &= -\frac{1}{2 \cos(\alpha)} + 2 \cos(\alpha) \end{aligned} \tag{12.40}$$

12 Appendix

- $\Phi_2(2, 1) = \Phi_2(1, 2)$: Zeige $\frac{\sin(3\alpha)\sin(\alpha)}{\sin(2\alpha)^2} = 1 - (2\cos(\alpha))^{-2}$ unter Vernachlässigung der Wurzelfunktion.

$$\begin{aligned}
 \frac{\sin(3\alpha)\sin(\alpha)}{\sin(2\alpha)^2} &= \frac{1/2(\cos(2\alpha) - \cos(4\alpha) + \overbrace{(1-1)}^{=0})}{1/2(1 - \cos(4\alpha))} \\
 &= \frac{-1 + \cos(2\alpha) + 1 - \cos(4\alpha)}{1 - \cos(4\alpha)} \\
 &= \frac{-1 + \cos(2\alpha)}{1 - \cos(4\alpha)} + \frac{1 - \cos(4\alpha)}{1 - \cos(4\alpha)} \\
 &= -\frac{1 - \cos(2\alpha)}{1 - \cos(4\alpha)} + 1 \\
 &= -\frac{\sin(\alpha)^2}{\sin(2\alpha)^2} + 1 \\
 &= 1 - \frac{1}{(2\cos(2\alpha))^2}
 \end{aligned} \tag{12.41}$$

- $\Phi_2(2, 2)$: Eine einfache Substitution $\frac{\sin(\alpha)}{\sin(2\alpha)} = (2\cos(\alpha))^{-1}$ genügt.

Nach einer Permutation der Elemente ist die Isomorphie offensichtlich.

12.6.2 Implementierung von $U(2)$ -Operationen als cU - Gatter

Die folgenden Abschnitte behandeln die Herleitung der Pulssequenzen für kontrollierte Zopfgruppenelemente auf heteronuklearen Spin- $\frac{1}{2}$ -Systemen. Die ersten beiden Abschnitte spezialisieren sich auf die Implementierung von Gruppenelementen der Zopfgruppe mit 3 Strängen. Im dritten Abschnitt werden eine Zeitabschätzung und einige Ideen für die Implementierung von höheren Zopfgruppenelementen vorgestellt. Gegeben sei ein bestimmtes Element der $U(2)$

$$U = e^{-i\pi(n_0\mathbf{1} + n_x I_x + n_y I_y + n_z I_z)} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ u_{21} & u_{22} \end{pmatrix}. \tag{12.42}$$

Dieses kann wie folgt zerlegt werden,

$$e^{-i\pi(n_0\mathbf{1} + n_x I_x + n_y I_y + n_z I_z)} = e^{-i\pi n_0\mathbf{1}} K_z(\phi) K_y(\phi) e^{-i\pi\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} I_z} K_y(\phi)^\dagger K_z(\phi)^\dagger, \tag{12.43}$$

mit $K_z(\phi) = e^{-i\phi I_z}$, $\phi = \tan^{-1}(\frac{n_y}{n_x})$ und $\phi = \pi/2$ wenn $n_x = 0$; $K_y(\mu) = e^{-i\mu I_y}$, $\mu = \tan^{-1}(\frac{\sqrt{n_x^2 + n_y^2}}{n_z})$ und $\mu = \pi/2$ wenn $n_z = 0$. Die Zerlegung ist in Abbildung 12.12 dargestellt.

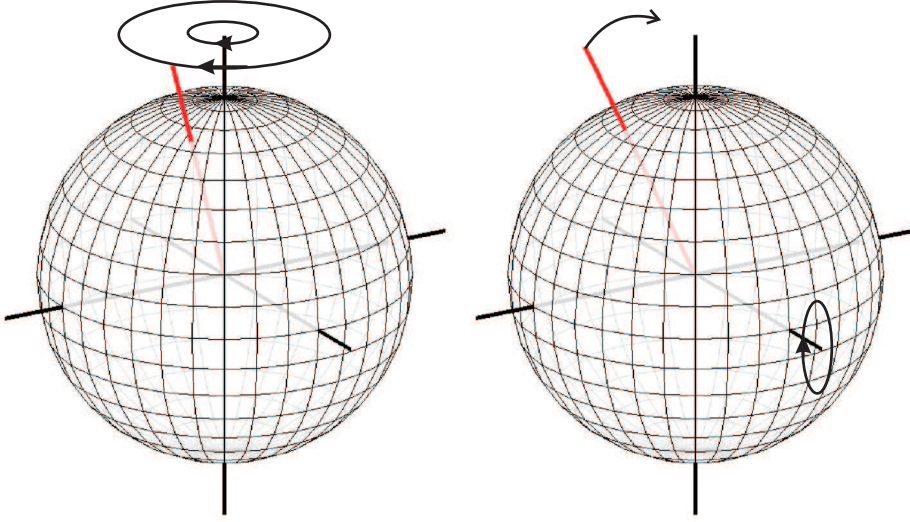


Abbildung 12.12: Eine Rotation um eine beliebige Raumachse mit beliebigem Drehwinkel (siehe Gleichung (12.42) unter Vernachlässigung des globalen Phasenfaktors) kann durch eine einfache Abfolge von z-Rotationen (links) und y-Rotationen (rechts), dargestellt durch schwarze Kreise, auf eine Rotation entlang der z-Achse transformiert werden.

Des Weiteren existieren eine Euler-Zerlegung

$$U = e^{-i\alpha' I_z} e^{-i\beta' I_y} e^{-i\gamma' I_z} \quad (12.44)$$

und eine durch Quaternionen motivierte Zerlegung

$$U = e^{-i\beta''(\cos(\phi'')I_x + \sin(\phi'')I_y)} e^{-i\gamma'' I_z} . \quad (12.45)$$

Beide stehen in einer engen Beziehung, wie sich leicht durch Einsetzen von $e^{i\alpha' I_z} e^{-i\alpha' I_z}$ in Gleichung (12.44) zeigen lässt:

$$\begin{aligned} & e^{-i\alpha' I_z} e^{-i\beta' I_y} e^{-i\gamma' I_z} \\ &= e^{-i\alpha' I_z} e^{-i\beta' I_y} e^{i\alpha' I_z} e^{-i\alpha' I_z} e^{-i\gamma' I_z} \\ &= e^{-i\beta''(\cos(\phi'')I_x + \sin(\phi'')I_y)} e^{-i\gamma'' I_z} , \end{aligned} \quad (12.46)$$

mit $\beta'' = \beta'$, $\gamma'' = \alpha' + \gamma'$ und $2\phi'' = \alpha'$.

Um nun kontrollierte Operationen zu implementieren, benötigen wir deren effektiven Hamiltonian. Ein Blick auf die Matrixdarstellung enthüllt dessen Struktur:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & U \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_{11} & u_{12} \\ 0 & 0 & u_{21} & u_{22} \end{pmatrix} = e^{-i\pi \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes (n_0 \mathbf{1} + n_x I_x + n_y I_y + n_z I_z)}$$

12 Appendix

mit $\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} - I_z$ und der Zerlegung der $U(2)$ -Operation, erhält letzten Endes

$$GP(\eta) {}^2K_z(\mu) {}^2K_y(\phi) D(-\alpha) {}^2K_z(\alpha) {}^2K_y^\dagger(\phi) {}^2K_z^\dagger(\mu) {}^1K_z(-\eta),$$

wobei ${}^2K_\nu(\xi) = \mathbf{1} \otimes K_\nu(\xi)$, ${}^1K_\nu(\xi) = K_\nu(\xi) \otimes \mathbf{1}$ mit den oben definierten K_ν 's. Weiter ist $D(\xi) = e^{-i\pi\xi 2I_z S_z}$ und $GP(\xi) = e^{-i\pi\xi \mathbf{1}}$, wobei letzteres nur einen globalen Phasenfaktor darstellt. Weiter gilt $\alpha = \frac{\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}}{2}$ und $\eta = \frac{n_0}{2}$. Um negative Evolutionsperioden zu vermeiden, wird die Kopplungsevolution durch ${}^2K_y(\pi)$ -Pulse invertiert. Dadurch werden auch die 2K_z -Pulse invertiert.

$$GP(\eta) {}^2K_z(\mu) {}^2K_y(\phi') D(\alpha) {}^2K_z(-\alpha) {}^2K_y^\dagger(\phi') {}^2K_z^\dagger(\mu) {}^1K_z(-\eta),$$

mit $\phi' = \phi \pm \pi$, wobei beide Möglichkeiten zulässig sind. Bevorzugt ist die Kombination zu wählen bei der $|\phi'|$ minimal ist.

Literaturverzeichnis

- [1] <http://de.wikipedia.org/wiki/Rechenmaschine>.
- [2] ZUSE, K.: *The Computer - My Life*. Springer-Verlag, Berlin, 1993.
- [3] ROJAS, R.: *Konrad Zuse's Legacy: The Architecture of the Z1 and Z3*. IEEE Annals of the History of Computing, 19(2):5–16, 1997.
- [4] RECK, M., ZEILINGER, A., BERNSTEIN, H. J. und BERTANI, P.: *Experimental realization of any discrete unitary operator*. Phys. Rev. Lett., 73:58–61, 1994.
- [5] MOORE, G. E.: *Cramming more components onto integrated circuits*. Electronics, 38:114–117, 1965.
- [6] KEYES, R. P.: *Miniaturization of Electronics and Its Limits*. IBM JOURNAL of Research and Development, 32:24–28, 1988.
- [7] FEYNMAN, R. P.: *Simulating Physics with Computers*. Int. J. Theo. Phys., 21:467–488, 1982.
- [8] MARX, R., FAHMY, A. F., MYERS, J. M., BERMEL, W. und GLASER, S. J.: *Approaching Five-Bit NMR Quantum Computing*. Phys. Rev. A, 62:012310, 2000.
- [9] MARX, R., FAHMY, A. F., MYERS, J. M., BERMEL, W. und GLASER, S. J.: *Chemical Enigneering of an NMR Quantum Computer*. In: *Quantum Computing, Eds.: E. Donkor und A. R. Pirich, Proc. of SPIE Vol. 4047*, Seiten 131–138, 2000.
- [10] GLASER, S. J., MARX, R., REISS, T., SCHULTE-HERBRÜGGEN, T., KHANEJA, N., MYERS, J. M. und FAHMY, A. F.: *Quantum Information Processing : Increasing the Size of NMR Quantum Computers*, Seiten 53–65. Eds. : G. Leuchs, T. Beth , Wiley-VCH, 2003.
- [11] FAHMY, A. F., MARX, R., BERMEL, W. und GLASER, S. J.: *Thermal Equilibrium as an Initial State for Quantum Computation by NMR*. e-print: <http://arXiv.org/pdf/0705.1676>, 2007.
- [12] CIRAC, J. I. und ZOLLER, P.: *Quantum-Computing with Cold Trapped Ions*. Phys. Rev. Lett, 74:4091–4094, 1995.

Literaturverzeichnis

- [13] YAMAMOTO, T., PASHKIN, Y. A., ASTAFIEV, O., NAKAMURA, Y. und TSAI, J. S.: *Demonstration of Conditional Gate Operation Using Superconducting Charge Qubits*. Nature (London), 425:941–944, 2003.
- [14] KANE, B. E.: *A Silicon-Based Nuclear Spin Quantum Computer*. Nature (London), 393:133–137, 1998.
- [15] CHUANG, I. L. und YAMAMOTO, Y.: *Simple Quantum Computer*. Phys. Rev. Lett., 52:3489–3496, 1995. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/9503005>.
- [16] IMAMOGLU, A., AWSCHALOM, D. D., BURKHARD, G., DIVINCENZO, D. P., LOSS, D., SHERWIN, M. und SMALL, A.: *Quantum Information Processing using Quantum Dot Spins and Cavity QED*. Phys. Rev. Lett., 83(20):4204–4207, 1999.
- [17] MOOIJ, J. E., ORLANDO, T. P., LEVITOV, L., TIAN, L., WAAL, C. H. VAN DER und LLOYD, S.: *Josephson Persistent-Current Qubit*. Science, 285:1036–1039, 1999.
- [18] LLOYD, S.: *Universal Quantum Simulators*. Science, 273:1073–1078, 1996.
- [19] ABRAMS, D.S. und LLOYD, S.: *Simulation of Many-Body Fermi Systems on a Quantum Computer*. Phys. Rev. Lett., 79:2586–2589, 1997.
- [20] ZALKA, C.: *Simulating Quantum Systems on a Quantum Computer*. Proc. R. Soc. London A, 454:313–322, 1998.
- [21] MASANES, L.I., VIDAL, G. und LATORRE, J. I.: *Time-Optimal Hamiltonian Simulation and Gate Synthesis Using Homogeneous Local Unitaries*. Quant. Inf. & Comput., 2:285–296, 2002.
- [22] JANÉ, E., VIDAL, G., DÜR, W., ZOLLER, P. und CIRAC, J. I.: *Simulation of Quantum Dynamics with Quantum Optical Systems*. Quant. Inf. Computation, 3:15–37, 2003.
- [23] BENNETT, C. H., CIRAC, I., LEIFER, M. S., LEUNG, D. W., LINDEN, N., POPESCU, S. und VIDAL, G.: *Optimal Simulation of Two-Qubit Hamiltonians Using General Local Operations*. Phys. Rev. A, 66:012305, 2002.
- [24] KASSAL, I., JORDAN, S. P., LOVE, P. J., MOHSENI, M. und ASPURUGUZI, A.: *Quantum algorithms for the simulation of chemical dynamics*. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0801.2986>, 2008.
- [25] DEUTSCH, D.: *Quantum Theory, the Church-Turing Principle, and the Universal Quantum Computer*. Proc. Royal Soc. London A, 400:97–117, 1985.

- [26] SHOR, P. W.: *Algorithms for Quantum Computation: Discrete Logarithms and Factoring*. In: *Proc. of the Symposium on the Foundations of Computer Science, 1994, Los Alamitos, California*, Seiten 124–134. IEEE Computer Society Press, New York, 1994.
- [27] GROVER, L. K.: *A Fast Quantum Mechanical Algorithm for Database Search*. In: *Proc. of the 28th Annual Symposium on the Theory of Computing, 1996, Philadelphia, Pennsylvania*, Seiten 212–219. ACM Press, New York, 1996.
- [28] GROVER, L. K.: *Quantum Mechanics Helps in Searching for a Needle in a Haystack*. *Phys. Rev. Lett.*, 79:325–328, 1997.
- [29] AHARONOV, D., JONES, V. und LANDAU, Z.: *A polynomial quantum algorithm for approximating the Jones polynomial*. In: KLEINBERG, J. M. (Herausgeber): *STOC*, Seiten 427–436. ACM, 2006.
- [30] KAUFFMAN, L. H. und LOMONACO, S. J.: *A 3-Stranded Quantum Algorithm for the Jones Polynomial*. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0706.0020>, 2007.
- [31] SHOR, P. W. und JORDAN, S. P.: *Estimating Jones polynomials is a complete problem for one clean qubit*. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0707.2831>, 2007.
- [32] RÖTTELER, M.: *Quantum algorithms: A survey of some recent results*. *Inform., Forsch. Entwickl.*, 21(1-2):3–20, 2006.
- [33] BRASSARD, G.: *Modern Cryptology: A Tutorial, Lecture Notes in Computer Science*. Springer-Verlag, 1988.
- [34] BENNETT, C. H., BRASSARD, G. und EKERT, A. K.: *Quantum Cryptography*. *Scientific American*, October:50–57, 1992.
- [35] GOLDENBERG, L. und VAIDMAN, L.: *Quantum Cryptography Based on Orthogonal States*. *Phys. Rev. Lett.*, 75:1239–1243, 1995.
- [36] BENNETT, C. H. und BRASSARD, G.: *Quantum public key distribution*. *IBM Technical Disclosure Bulletin*, 28:3153–3163, 1985.
- [37] BENNETT, C. H. und BRASSARD, G.: *Quantum cryptography: Public-key distribution and coin tossing*. In: *Proc. of IEEE International Conference on Computers, Systems and Signal Processing, Bangalore, India, 1984*, Seiten 175–179. IEEE Press, 1984.
- [38] EKERT, A.: *Quantum Cryptography based on Bell's Theorem*. *Phys. Rev. Lett.*, 67(6):661–663, 1991.

Literaturverzeichnis

- [39] MÜLLER-QUADE, J.: *Quantum cryptography beyond key exchange*. Inform., Forsch. Entwickl., 21(1-2):39–54, 2006.
- [40] BENNETT, C., BRASSARD, G., CREPEAU, C., JOZSA, R., PERES, A. und WOOTTERS, W.: *Teleporting an unknown quantum state via dual classical and EPR channels*. Phys. Rev. Lett., 70:1895–1899, 1993.
- [41] BRASSARD, G.: *Teleportation as a quantum computation*. Physica D, 120:43–47, 1998.
- [42] BOSCHI, D., BRANCA, S., MARTINI, F. DE, HARDY, L. und POPESCU, S.: *Experimental Realization of Teleporting an Unknown Pure Quantum State via Dual Classical and Einstein-Podolski-Rosen Channels*. Phys. Rev. Lett., 80:1121–1125, 1998.
- [43] EISERT, J., WILKENS, M. und LEWENSTEIN, M.: *Quantum Games and Quantum Strategies*. Phys. Rev. Lett., 83:3077, 1999. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/9806088>.
- [44] EISERT, J. und WILKENS, M.: *Quantum Games*. J. Mod. Opt., 47:2543, 2000. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0004076>.
- [45] BENJAMIN, SIMON C. und HAYDEN, PATRICK M.: *Comment on ‘Quantum Games and Quantum Strategies’*. Phys. Rev. Lett., 87:069801, 2001. doi:10.1103/PhysRevLett.87.069801.
- [46] FLITNEY, ADRIAN P. und ABBOTT, DEREK: *An introduction to quantum game theory*. Fluct. Noise Lett., 2:R175, 2002. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0208069>.
- [47] FLITNEY, ADRIAN P., NG, JOSEPH und ABBOTT, DEREK: *Quantum Parrondo’s Games*. PHYSICA A, 314:35, 2002. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0201037>.
- [48] LEE, CHIU FAN und JOHNSON, NEIL: *Quantum Game Theory*. Phys. Rev. A, 67:022311, 2003. doi:10.1103/PhysRevA.67.022311.
- [49] LLOYD, SETH: *Universe as quantum computer*. Complexity, 3:32, 1997. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/9912088>.
- [50] LLOYD, SETH: *Computational capacity of the universe*. Phys. Rev. Lett., 88:237901, 2002. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0110141>.
- [51] ADAMS, D.: *The Hitchhiker’s Guide to the Galaxy*. Harmony Books, 1979–1992.

- [52] ARVIND und COLLINS, D.: *Scaling issues in ensemble implementations of the Deutsch-Jozsa algorithm*. Phys. Rev. A, 68:052301, 2003.
- [53] BERTHIAUME, A. und BRASSARD, G.: *Oracle quantum computing*. In: *Proc. of the Workshop on Physics and Computation — PhysComp'92, October*, Seiten 195–199. IEEE Press, 1992.
- [54] SIMON, D. R.: *On the Power of Quantum Computation*. In: *Proc. of the 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, Seiten 116–123, Los Alamitos, CA, 1994. Institute of Electrical and Electronic Engineers Computer Society Press. citeseer.ist.psu.edu/simon94power.html.
- [55] BERNSTEIN, E. und VAZIRANI, U.: *Quantum complexity theory*. In: *Proc. of the 25th Annual ACM Symposium on Theory of Computing, (ACM Press, New York)*, Seiten 11–20, 1993.
- [56] RIVEST, R., SHAMIR, A. und ADLEMAN, L.: *A Method for Obtaining Digital Signatures and Public-Key Cryptosystems*. Comm. ACM, 21(2):120–126, 1978.
- [57] ETTINGER, M., HØYER, P. und KNILL, E.: *The Quantum Query Complexity of the Hidden Subgroup Problem is Polynomial*. Inf. Process. Lett., 91:43–48, 2004.
- [58] SHOR, P. W.: *Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorisation and Discrete Logarithm on a Quantum Computer*. SIAM J. Comput., 26:1484–1509, 1997.
- [59] COOLEY, J. W. und TUKEY, J. W.: *An Algorithm for the Machine Calculation of Complex Fourier Series*. Math. Comput., 19:297–301, 1965.
- [60] BETH, T.: *Verfahren der schnellen Fourier-Transformation*. Teubner, Stuttgart, 1984.
- [61] LOMONACO, S. J. und KAUFFMAN, L.H.: *Spin Networks and Anyonic Topological Computing II*. In: *Proc. of the SPIE, Quantum Information and Computation V*, Band 6573, Seiten 64730U1–13, 2007.
- [62] LOMONACO, S. J. und KAUFFMAN, L.H.: *Topological quantum computing and the Jones polynomial*. In: *Proc. of the SPIE, Quantum Information and Computation*, Seite 62440Z, 2006.
- [63] DIVINCENZO, D. P.: *Two-Qubit gates are universal*. Phys. Rev. A, 51(2):1015–1022, 1995.
- [64] DEUTSCH, D., BARENCO, A. und EKERT, A.: *Universality in Quantum Computation*. Proc. R. Soc. London A, 449:669–677, 1995.

- [65] LLOYD, S.: *Almost any quantum logic gate is universal*. Phys. Rev. Lett., 75(2):346–349, 1995.
- [66] PRESKILL, J.: *Lecture Notes for Physics 219/Computer Science 219 - Quantum Computation*. CalTech, 2000.
- [67] FREDKIN, E. und TOFFOLI, T.: *Conservative Logic*. Internat. J. Theoret. Phys., 21:219–253, 1982.
- [68] SHENDE, V. V., MARKOV, I. L. und BULLOCK, S. S.: *Minimal Universal Two-qubit Quantum Circuits*. Phys. Rev. A, 69:062321, 2004. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0308033>.
- [69] BULLOCK, S. S. und MARKOV, I. L.: *Smaller Circuits for Arbitrary n-qubit Diagonal Computations*. Quantum Inf. & Comp., 4:27–47, 2004. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0303039>.
- [70] BULLOCK, S. S. und MARKOV, I. L.: *An Arbitrary Two-qubit Computation In 23 Elementary Gates*. Phys. Rev. A, 2003:012318, 2003. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0211002>.
- [71] VIDAL, G., HAMMERER, K. und CIRAC, J. I.: *Interaction Cost of Nonlocal Gates*. Phys. Rev. Lett., 88:237902, 2002.
- [72] CHILDS, A. M., HASELGROVE, H. L. und NIELSEN, M. A.: *Lower Bounds on the Complexity of Simulating Quantum Gates*. Phys. Rev. A, 68:052311, 2003.
- [73] ZEIER, R., GRASSL, M. und BETH, T.: *Gate Simulation and Lower Bounds on the Simulation Time*. Phys. Rev. A, 70:032319, 2004.
- [74] WOCJAN, P., JANZING, D. und BETH, T.: *Simulating Arbitrary Pair-Interactions by a Given Hamiltonian: Graph-Theoretical Bounds on the Time-Complexity*. Quant. Inf. & Comput., 2:117–132, 2002.
- [75] NIELSEN, M. A.: *A geometric approach to quantum circuit lower bounds*. Quantum Inf. & Comp., 6(3):213–262, 2006. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0502070>.
- [76] KHANEJA, N. und GLASER, S. J.: *Cartan Decomposition of $SU(2^n)$ and Control of Spin Systems*. Chem. Phys., 267:11–23, 2001.
- [77] KHANEJA, N., BROCKETT, R. und GLASER, S. J.: *Time Optimal Control in Spin Systems*. Phys. Rev. A, 63:032308, 2001.
- [78] KHANEJA, N., GLASER, S. J. und BROCKETT, R.: *Sub-Riemannian Geometry and Time-Optimal Control of Three-Spin Systems: Quantum Gates and Coherence Transfer*. Phys. Rev. A, 65:032301, 2002.

- [79] SÁ-EARP, H. N. und PACHOS, J. K.: *A constructive algorithm for the Cartan decomposition of $SU(2^N)$* . J. Math. Phys., 46:1, 2005. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0505128>.
- [80] BULLOCK, S. S.: *NOTE on the Khaneja Glaser Decomposition*. Quantum Inf. & Comp., 4:396–400, 2004. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0403141>.
- [81] ZEIER, ROBERT, YUAN, HAIDONG und KHANEJA, NAVIN: *Time-optimal synthesis of unitary transformations in coupled fast and slow qubit system*, 2007. e-print: <http://arXiv.org/pdf/0709.4484>.
- [82] YUAN, H., ZEIER, R. und KHANEJA, N.: *Elliptic functions and efficient control of Ising spin chains with unequal couplings*, 2007. e-print: <http://arXiv.org/pdf/0710.0075>.
- [83] SCHULTE-HERBRÜGGEN, T., SPÖRL, A. K., KHANEJA, N. und GLASER, S. J.: *From Network Complexity to Time Complexity via Optimal Control*. NATO Science Series,III: Computer and System Sciences, 199:353–357, 2006.
- [84] SCHULTE-HERBRÜGGEN, T., SPÖRL, A. K., KHANEJA, N. und GLASER, S. J.: *Optimal Control-Based Efficient Synthesis of Building Blocks of Quantum Algorithms: A Perspective from Network Complexity towards Time Complexity*. Phys. Rev. A, 72:042331, 2005.
- [85] <http://www.top500.org/lists/2007/11>.
- [86] RAEDT, K. DE, MICHIENSEN, K., RAEDT, H. DE, TRIEU, B., ARNOLD, G., RICHTER, M., LIPPERT, TH., WATANABE, H. und ITO, N.: *Massive Parallel Quantum Computer Simulator*. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0608239>, to appear in Comp. Phys. Comm.
- [87] CORNWELL, J. F.: *Group Theory in Physics*, Band 2. Academic Press, London, 1984.
- [88] VAN DER WAERDEN, B. L.: *Algebra I*. Springer-Verlag, Berlin, 1971.
- [89] PICKERT, G.: *Einführung in die Höhere Algebra*. Vandenhoeck & Ruprecht, Göttingen, 1951.
- [90] CHEVALLEY, C.: *Fundamental Concepts of Algebra*. Academic Press, New York, 1956.
- [91] VAN DER WAERDEN, B. L.: *Algebra II*. Springer-Verlag, Berlin, 1971.

Literaturverzeichnis

- [92] BISHOP, D. M.: *Group Theory and Chemistry*. Dover Publications, New York, 1973.
- [93] HILGERT, J. und NEEB, K. H.: *Lie-Gruppen und Lie-Algebren*. Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [94] NAKAHARA, M.: *Geometry, Topology and Physics*, Kapitel 5, Manifolds. Taylor & Francis Group, Boca Raton, 2003.
- [95] BAKER, H.: *On the integration of linear differential equations*. Proc. Lond. Math. Soc. (1), 34:347–360, 1902.
- [96] BAKER, H.: . Proc. Lond. Math. Soc. (1), 35:333–374, 1903.
- [97] BAKER, H.: *Alternants and Continuous Groups*. Proc. Lond. Math. Soc. (Ser 2), 3:24–47, 1905.
- [98] CAMPBELL, J.: *On a law of combination of operators bearing on the theory of continuous transformation groups*. Proc. Lond. Math. Soc., 28:381–390, 1897.
- [99] CAMPBELL, J.: *On a law of combination of operators*. Proc. Lond. Math. Soc., 29:14–32, 1898.
- [100] BANWELL, N. C. und PRIMAS, H.: *On the Analysis of High-Resolution Nuclear Magnetic resonance Spectra*. Molec. Phys., 6:225–256, 1963.
- [101] STEGER, A.: *Diskrete Strukturen 1*, Kapitel 2, Graphentheorie. Springer-Verlag, Berlin, 2001.
- [102] FRITSCH, R. und FRITSCH, G.: *Der Vierfarbensatz*. BI Wissenschaftsverlag, 1994.
- [103] DIRAC, P. A. M.: *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford, 1958.
- [104] DAVIES, E. B.: *Quantum Theory of Open Systems*. Academic Press, London, 1976.
- [105] LANDAU, L.: *Das Dämpfungsproblem in der Wellenmechanik*. Z. Phys., 45:430–441, 1927.
- [106] SKINNER, T. E. und GLASER, S. J.: *Representation of a quantum ensemble as a minimal set of pure states*. Phys. Rev. A, 66(3):032112, Sep 2002.
- [107] REBENTROST, P., SERBAN, I., SCHULTE-HERBRÜGGEN, T. und WILHELM, F. K.: *Optimal Control of a Qubit Coupled to a Two-Level Fluctuator*. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0612165>, 2006.

- [108] WILLIAMS, C. P. und CLEARWATER, S. H.: *Ultimate Zero and One, Computing at the Quantum Frontier*. Copernicus, Springer-Verlag, New York, 2000.
- [109] EINSTEIN, A., PODOLSKY, B. und ROSEN, N.: *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?* Phys. Rev., 47(10):777–780, May 1935.
- [110] BOHM, D. und AHARONOV, Y.: *Discussion of Experimental Proof for the Paradox of Einstein, Rosen and Podolsky*. Phys. Rev., 108:1070–1076, 1957.
- [111] NIELSEN, M. A. und CHUANG, I. L.: *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, Cambridge (UK), 2000.
- [112] WOOTTERS, W.K. und ZUREK, W.H.: *W.K. Wootters and W.H. Zurek, Nature 299, 802 (1982)*. Nature, 299:802–803, 1982.
- [113] CAPPELLARO, P., EMERSON, J., BOULANT, N., RAMANATHAN, C., LLOYD, S. und CORY, D. G.: *Entanglement Assisted Metrology*. Phys. Rev. Lett., 94:020502, 2005.
- [114] GIOVANNETTI, V., LLOYD, S. und MACCONE, L.: *Quantum Metrology*. Phys. Rev. Lett., 96:010401, 2006.
- [115] ROOS, C. F., CHWALLA, M., KIM, K., RIEBE, M. und BLATT, R.: *'Designer atoms' for quantum metrology*. Nature, 443:316–319, 2006.
- [116] DALVIT, D. A. R., MATOS FILHO, R. L. DE und TOSCANO, F.: *Quantum metrology at the Heisenberg limit with ion traps*. New JOURNAL of Physics, 8:276, 2006. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0608082>.
- [117] LEE, H., KOK, P. und DOWLING, J. P.: *Quantum Imaging and Metrology*. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0306113>, 2003.
- [118] BRIDA, G., M.GENOVESE und NOVERO, C.: *An application of two photon entangled states to quantum metrology*. J. Mod. Opt., 47 (12):2099–2104, 2000. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/9911032>.
- [119] NEMOTO, K., MUNRO, W. J., MILBURN, G. J. und BRAUNSTEIN, S. L.: *Quantum Metrology: Detection of weak forces using Schrodinger Cat resources*. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0312063>, 2003.
- [120] BYRD, M. S. und KHANEJA, N.: *Characterization of the Positivity of the Density Matrix in Terms of the Coherence Vector Representation*. Phys. Rev. A, 68:062322, 2003. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0302024>.

Literaturverzeichnis

- [121] ALBERTINI, F. und D'ALESSANDRO, D.: *Notions of Controllability for Bilinear Multilevel Quantum Systems*. IEEE Trans. Automat. Control, 48:1399–1403, 2003.
- [122] LLOYD, SETH: *Programming Pulse Driven Quantum Computers*, 1999. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/9912086>.
- [123] LLOYD, SETH: *A Potentially Realizable Quantum Computer*. Science, 261(5128):1569–1571, September 1993.
- [124] KHANEJA, N., REISS, T., KEHLET, C., SCHULTE-HERBRÜGGEN, T. und GLASER, S. J.: *Optimal Control of Coupled Spin Dynamics: Design of NMR Pulse Sequences by Gradient Ascent Algorithms*. J. Magn. Reson., 172:296–305, 2005.
- [125] OHTSUKI, Y., TURINICI, G. und RABITZ, H.: *Quantum Mechanical Optimal Control of Physical Observables in Microsystems*. J. Chem. Phys., 120:5509–5517, 2004.
- [126] TANNOR, D. J. und RICE, S. A.: *Control of Selectivity of Chemical Reaction via Control of Wavepacket Evolution*. J. Chem. Phys., 83:5013–5018, 1985.
- [127] SHI, S. und RABITZ, H.: *Quantum Mechanical Optimal Control of Physical Observables in Microsystems*. J. Chem. Phys., 92:364–376, 1989.
- [128] SOMLÓI, J., KAZAKOV, V.A. und TANNOR, D.J.: *Controlled dissociation of I₂ via optical transitions between the X and B electronic states*. Chem. Phys., 172:85–98, 1993.
- [129] BROCKETT, R. W.: *Dynamical Systems that Sort Lists, Diagonalise Matrices, and Solve Linear Programming Problems*. In: *Proc. of the IEEE Conference on Decision and Control, 1988, Austin, Texas*, Seiten 779–803, 1988.
- [130] BROCKETT, R. W.: *Dynamical Systems that Sort Lists, Diagonalise Matrices, and Solve Linear Programming Problems*. Lin. Alg. Appl., 146:79–91, 1991.
- [131] HELMKE, U. und MOORE, J. B.: *Optimisation and Dynamical Systems*. Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [132] GLASER, S. J., SCHULTE-HERBRÜGGEN, T., SIEVEKING, M., SCHEDLETZKY, O., NIELSEN, N. C., SØRENSEN, O. W. und GRIESINGER, C.: *Unitary Control in Quantum Ensembles: Maximising Signal Intensity in Coherent Spectroscopy*. Science, 280:421–424, 1998.

- [133] SCHULTE-HERBRÜGGEN, T.: *Aspects and Prospects of High-Resolution NMR*. PhD Thesis, Diss-ETH 12752, Zürich, 1998.
- [134] HELMKE, U., HÜPER, K., MOORE, J. B. und SCHULTE-HERBRÜGGEN, T.: *Gradient Flows Computing the C-Numerical Range with Applications in NMR Spectroscopy*. J. Global Optim., 23:283–308, 2002.
- [135] BUTKOVSKIY, A. G. und SAMOILENKO, Y. I.: *Control of Quantum-Mechanical Processes and Systems*. Kluwer, Dordrecht, 1990.
- [136] GOLLUB, CAROLINE, KOWALEWSKI, MARKUS und DE VIVIE-RIEDLE, REGINA: *Monotonic convergent optimal control theory to modulate bandwidth limited laser pulses in linear and non-linear optical processes*. e-print: <http://arXiv.org/pdf/0801.3935>, 2008.
- [137] TESCH, CARMEN M. und DE VIVIE-RIEDLE, REGINA: *Quantum Computation with Vibrationally Excited Molecules*. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0208025>, 2002.
- [138] PONTRYAGIN, L. S., BOL'TANSKII, V. G., GAMKRELIDZE, R. S. und MISCHENKO, E. F.: *The Mathematical Theory of Optimal Processes*. Pergamon Press, New York, 1964.
- [139] HUPPERT, B.: *Endliche Gruppen, Vol. I*. Springer-Verlag, Berlin, 1979. besonders Seite 177 ff. und 233 ff.
- [140] WESENBERG, J.: *Designing Robust Gate Implementations for Quantum Information Processing*. Phys. Rev. A, 69:042323, 2004. v.a. Gleichung 14 in e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0312076>.
- [141] DOWLING, J. P. und MILBURN, G.: *Quantum Technology: The Second Quantum Revolution*. Phil. Trans. R. Soc. Lond. A, 361:1655–1674, 2003.
- [142] GRADL, T., SPÖRL, A. K., HUCKLE, T., GLASER, S. J. und SCHULTE-HERBRÜGGEN, T.: *Parallelising Matrix Operations on Clusters for an Optimal-Control-Based Quantum Compiler*. Lect. Notes Comput. Sci., 4128:751–762, 2006. Proc. of the EURO-PAR 2006.
- [143] SCHULTE-HERBRÜGGEN, T., SPÖRL, A. K., WALDHERR, K., GRADL, T., GLASER, S. J. und HUCKLE, T.: *Using the HLRB Cluster as Quantum CISC Compiler: Matrix Methods and Applications Parallel Clusters*. In: *High-Performance Computing in Science and Engineering, Garching 2007*. Springer-Verlag, Berlin, to appear, 2008.
- [144] GOLUB, G. H. und LOAN, CH. F. VAN: *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press, Baltimore, 1989.

Literaturverzeichnis

- [145] HIGHAM, N. J.: *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*. SIAM, 1996.
- [146] DEMMEL, J., HEATH, M. und VORST, H. VAN DER: *Parallel Numerical Linear Algebra*. Acta Numerica, 2:111–198, 1993.
- [147] MATHIAS, R.: *The Instability of Parallel Prefix Matrix Multiplication*. SIAM J. Sci. Comput., 16:956–973, 1995.
- [148] MOLER, C. und LOAN, C. VAN: *Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix*. SIAM Rev., 20:801–836, 1978.
- [149] MOLER, C. und LOAN, C. VAN: *Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five YEARS Later*. SIAM Rev., 45:3–49, 2003.
- [150] CANTONI, A. und BUTLER, P.: *Properties of the Eigenvectors of Persymmetric Matrices with Applications to Communication Theory*. IEEE Trans. Commun., 24:804–809, 1976.
- [151] PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T. und FLANERY, B. P.: *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, 1988.
- [152] WALDHERR, K.: *Die Matrix-Exponentialabbildung: Eigenschaften und Algorithmen*. Diploma Thesis, Technical University Munich, 2007.
- [153] STRASSEN, V.: *Gaussian Elimination is not Optimal*. Numer. Math., 13:354–356, 1969.
- [154] KNUTH, DONALD: *The art of computer programming, Fundamental Algorithms*, Band 1, Kapitel 2.3., Seiten 318–348. Addison-Wesley, 3rd Auflage, 1997.
- [155] SCHULTE-HERBRÜGGEN, T., SPÖRL, A., MARX, R., KHANEJA, N., MYERS, J. M., FAHMY, A. F. und GLASER, S. J.: *Lectures on Quantum Information : Quantum Computing Implemented via Optimal Control: Theory and Application to Spin- and Pseudo-Spin Systems*, Seiten 481–501. Eds.: D. Bruß und G. Leuchs, Wiley-VCH, 2006.
- [156] MAKHLIN, Y.: *Nonlocal Properties of Two-Qubit Gates and Mixed States, and the Optimisation of Quantum Computations*. Quant. Inf. Process., 1:243–252, 2003.
- [157] DIVINCENZO, D. P.: *Quantum Computation*. Science, 270:255–261, 1995.
- [158] SUSSMANN, H. und JURDJEVIC, V.: *Controllability of Nonlinear Systems*. J. Diff. Equat., 12:95–116, 1972.

- [159] BROCKETT, R. W.: *System Theory on Group Manifolds and Coset Spaces*. SIAM J. Control, 10:265–284, 1972.
- [160] BROCKETT, R. W.: *Lie Theory and Control Systems Defined on Spheres*. SIAM J. Appl. Math., 25:213–225, 1973.
- [161] BOOTHBY, W. M. und WILSON, E. N.: *Determination of the Transitivity of Bilinear Systems*. SIAM J. Control Optim., 17:212–221, 1979.
- [162] ALBER, G., BETH, T., HORODECKI, M., HORODECKI, P., HORODECKI, R., RÖTTELER, M., WEINFURTER, H., WERNER, R. und ZEILINGER, A.: *Quantum Information: an Introduction to Basic Concepts and Experiments (Springer Tracts in Modern Physics Vol. 173)*. Springer-Verlag, Heidelberg, 2000.
- [163] ROSU, H. C., PLANAT, M. und SANIGA, M.: *MUBs: From finite projective geometry to quantum phase enciphering*. AIP Conf. Proc., 734:315–318, 2004. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0409096>.
- [164] BENGTTSSON, I.: *Three ways to look at mutually unbiased bases*. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0610216>, 2006.
- [165] BENGTTSSON, I., BRUZDA, W., ERICSSON, A., LARSSON, J.-A., TADEJ, W. und ZYCZKOWSKI, K.: *Mubs and Hadamards of Order Six*. JOURNAL of Mathematical Physics, 48:052106, 2007. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0610161>.
- [166] SAITO, A., KIOI, K., AKAGI, Y., HASHIZUME, N. und OHTA, K.: *Actual Computational Time-Cost of the Quantum Fourier Transform in a Quantum Computer using Nuclear Spins*. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0001113>, 2000.
- [167] BLAIS, A.: *Quantum Network Optimisation*. Phys. Rev. A, 64:022312, 2001.
- [168] PRICE, M. D., HAVEL, T. F. und CORY, D. J.: *Multiqubit Logic Gates in NMR Quantum Computing*. New J. Phys., 2:10.1–10.9, 2000. <http://www.iop.org/EJ/article/1367-2630/2/1/10/nj0110.html>.
- [169] DORAI, K. und SUTER, D.: *Efficient Implementations of the Quantum Fourier Transform: An Experimental Perspective*. Int. J. Quant. Inf., 3:413–424, 2005. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0211030>.
- [170] FOWLER, A. G., DEVITT, S. J. und HOLLENBERG, L. C. L.: *Implementation of Shor's Algorithm on a Linear Nearest Neighbour Qubit Array*. Quant. Inf. & Comput., 4:237–251, 2004.

Literaturverzeichnis

- [171] BARENCO, A., BENNETT, C. H., CLEVE, R., DIVINCENZO, D. P., MARGOLUS, N., SHOR, P. W., SLEATOR, T., SMOLIN, J. A. und WEINFURTER, H.: *Elementary Gates for Quantum Computation*. Phys. Rev. A, 52:3457–3467, 1995.
- [172] BRAUNSTEIN, S. L.: *Quantum Computing*, Kapitel „Quantum Hamming and Hexacodes“ von T. Beth und M. Grassl, Seiten 153–184. Wiley-VCH, 1999.
- [173] BRASSARD, G., HØYER, P., MOSCA, M. und TAPP, A.: *Quantum amplitude amplification and estimation*. Cont. Math., 305:53–74, 2002. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0005055>.
- [174] <http://en.wikipedia.org/wiki/Jordannormalform>.
- [175] LUCAS, E.: *Sur les rapports qui existent entre le triangle arithmétique de Pascal et les nombres de Bernoulli*. Nouv. Ann. Math., 2(15):497–499, 1876.
- [176] SIERPINSKI, W.: *Sur une courbe dont tout point est un point de ramification*. C. R. Acad. Sci. Paris, 160:302–305, 1915.
- [177] YUAN, H., GLASER, S. J. und KHANEJA, N.: *Geodesics for efficient creation and propagation of order along Ising spin chains*. Phys. Rev. A, 76(1):012316, 2007. <http://link.aps.org/abstract/PRA/v76/e012316>.
- [178] FITZSIMONS, JOSEPH und TWAMLEY, JASON: *Globally controlled quantum wires for perfect qubit transport, mirroring and computing*. Phys. Rev. Lett., 97:090502, 2006. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0601120>.
- [179] KHANEJA, N. und GLASER, S. J.: *Efficient transfer of coherence through Ising spin chains*. Phys. Rev. A, 66(6):060301, Dec 2002.
- [180] BERGHOLM, V., VARTIAINEN, J. J., MÖTTÖNEN, M. und SALOMAA, M. M.: *Quantum Circuits with Uniformly Controlled One-Qubit Gates*. Phys. Rev. A, 71:052330, 2005.
- [181] MÖTTÖNEN, M., VARTIAINEN, J. J., BERGHOLM, V. und SALOMAA, M. M.: *Transformation of Quantum States Using Uniformly Controlled Rotations*. Quant. Inf. Comp., 5:467–473, 2005.
- [182] MÖTTÖNEN, M., VARTIAINEN, J. J., BERGHOLM, V. und SALOMAA, M. M.: *Quantum Circuits for General Multiqubit Gates*. Phys. Rev. Lett., 93:130502, 2004.
- [183] VARTIAINEN, J. J., MÖTTÖNEN, M. und SALOMAA, M. M.: *Efficient Decomposition of Quantum Gates*. Phys. Rev. Lett., 92:177902, 2004.

- [184] MOTTONEN, M. und VARTIAINEN, J. J.: *Quantum Computing: New Research*, Kapitel 7, Decompositions of general quantum gates. NOVA PUBLISHERS, New York, 2006.
- [185] MEZZADRI, F.: *How to Generate Random Matrices from the Classical Compact Groups*. Notices Amer. Math. Soc., 54:592–604, 2007.
- [186] FEYNMAN, R. P.: *Feynman Lectures on Computation*. Perseus Books, Reading, MA., 1996.
- [187] UNRUH, W. G.: *Maintaining coherence in quantum computers*. Phys. Rev. A, 51:992–997, 1995.
- [188] ZANARDI, P. und RASETTI, M.: *Noiseless Quantum Codes*. Phys. Rev. Lett., 79:3306–3309, 1997.
- [189] VIOLA, L., KNILL, E. und LLOYD, S.: *Dynamical Decoupling of Open Quantum Systems*. Phys. Rev. Lett., 82:2417–2421, 1999.
- [190] VIOLA, L., KNILL, E. und LLOYD, S.: *Universal Control of Decoupled Quantum Systems*. Phys. Rev. Lett., 83:4888–4891, 1999.
- [191] VIOLA, L., KNILL, E. und LLOYD, S.: *Dynamical Generation of Noiseless Quantum Subsystems*. Phys. Rev. Lett., 85:3520–3523, 2000.
- [192] MISRA, B. und SUDARSHAN, E.C.G.: *The Zeno's paradox in quantum theory*. J. Math. Phys., 18:756–763, 1977.
- [193] FACCHI, P. und PASCAZIO, S.: *Quantum Zeno Subspaces*. Phys. Rev. Lett., 89:080401, 2001.
- [194] LIDAR, D. und WHALEY, B.: *Irreversible Quantum Dynamics, Lect. Notes Phys.*, Band 622, Kapitel Decoherence-Free Subspaces and Subsystems, Seiten 83–120. Springer-Verlag, Berlin, 2003.
- [195] FACCHI, P., TASAKI, S., PASCAZIO, S., NAKAZATO, H., TOKUSE, A. und LIDAR, D.: *Control of Decoherence: Analysis and Comparison of Three Different Strategies*. Phys. Rev. A, 71:022302, 2005.
- [196] CAPPELLARO, P., HODGES, J. S., HAVEL, T. F. und CORY, D. G.: *Principles of Control for Decoherence-Free Subsystems*. J. Chem. Phys., 125:044514, 2006. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0604203>.
- [197] KHANEJA, N., LUY, B. und GLASER, S. J.: *Boundary of Quantum Evolution under Decoherence*. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 100:13162–13166, 2003.

Literaturverzeichnis

- [198] KHANEJA, N., REISS, T., LUY, B. und GLASER, S. J.: *Optimal Control of Spin Dynamics in the Presence of Relaxation*. J. Magn. Reson., 162:311–319, 2003.
- [199] STEFANATOS, D., KHANEJA, N. und GLASER, S. J.: *Optimal control of coupled spins in presence of longitudinal and transverse relaxation*. In: *PHYCON '03: Proc. of the 2003 International Conference on Physics and Control*, Seiten 736–745, Washington, DC, USA, 2003. IEEE Computer Society.
- [200] LLOYD, S.: *Coherent Quantum Feedback*. Phys. Rev. A, 62:022108, 2000.
- [201] PALAO, J. P. und KOSLOFF, R.: *Quantum Computing by an Optimal Control Algorithm for Unitary Transformations*. Phys. Rev. Lett., 89:188301, 2002.
- [202] GARCÍA-RIPOLL, J. J., ZOLLER, P. und CIRAC, J. I.: *Speed-Optimized Two-Qubit Gates with Laser Coherent Control Techniques for Ion Trap Quantum Computing*. Phys. Rev. Lett., 91:157901, 2003.
- [203] SKLARZ, S. E. und TANNOR, D. J.: *Local Control Theory for Unitary Transformations: Application to Quantum Computing without Leakage*. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0404081>, 2004.
- [204] KHANEJA, N., REISS, T., KEHLET, C., SCHULTE-HERBRÜGGEN, T. und GLASER, S. J.: *Optimal Control of Coupled Spin Dynamics: Design of NMR Pulse Sequences by Gradient Ascent Algorithms*. J. Magn. Reson., 172:296–305, 2005.
- [205] SKLARZ, S. E. und TANNOR, D. J.: *Quantum Computation via Local Control Theory: Direct Sum vs. Direct Product Hilbert Spaces*. Chem. Phys., 322:87–97, 2006.
- [206] JURDJEVIC, V. und SUSSMANN, H.: *Control Systems on Lie Groups*. J. Diff. Equat., 12:313–329, 1972.
- [207] ERNST, R. R., BODENHAUSEN, G. und WOKAUN, A.: *Principles of Nuclear Magnetic Resonance in One and Two Dimensions*. Clarendon Press, Oxford, 1987.
- [208] LIDAR, D. und WU, L. A.: *Reducing Constraints on Quantum Computer Design by Encoded Selective Recoupling*. Phys. Rev. Lett., 88:017905, 2002.
- [209] WU, L. A. und LIDAR, D.: *Creating Decoherence-Free Subspaces Using Strong and Fast Pulses*. Phys. Rev. Lett., 88:207902, 2002.

- [210] ZANARDI, P. und LLOYD, S.: *Universal control of quantum subspaces and subsystems*. Phys. Rev. A, 69:022313, 2004.
- [211] STORCZ, M. J., VALA, J., BROWN, K. R., KEMPE, J., WILHELM, F. K. und WHALEY, K. B.: *Full protection of superconducting qubit systems from coupling errors*. Phys. Rev. B, 72:064511, 2005. e-print: <http://arXiv.org/pdf/cond-mat/0407780>.
- [212] REISS, T. O., KHANEJA, N. und GLASER, S. J.: *Time-Optimal Coherence-Order-Selective Transfer of In-Phase Coherence in Heteronuclear IS Spin Systems*. J. Magn. Reson., 154:192–195, 2002.
- [213] YUAN, H. und KHANEJA, N.: *Time optimal control of coupled qubits under nonstationary interactions*. Phys. Rev. A, 72:040301(R), 2005.
- [214] NIELSEN, M. A., DOWLING, M. R., GU, M. und DOHERTY, A. C.: *Quantum Computation as Geometry*. Science, 311:1133–1135, 2006.
- [215] BROCKETT, R. W.: *New Directions in Applied Mathematics*, Kapitel Control Theory and Singular Riemannian Geometry, Seiten 11–27. Springer-Verlag, New York, 1981.
- [216] BAILLIEUL, J.: . Ph.D. thesis, Harvard Univ., Applied Math., 1975.
- [217] MONTGOMERY, R.: *A Tour of Subriemannian Geometries, their Geodesics and Applications*. American Mathematical Society, 2002.
- [218] F. YAMAGUCHI, Y. YAMAMOTO: *Crystal lattice quantum computer*. Appl. Phys. A, 68:1–8, 1999.
- [219] MEHRING, M., MENDE, J. und SCHERER, W.: *Entanglement between an Electron and a Nuclear Spin 1/2*. Phys. Rev. Lett., 90:153001, 2003.
- [220] COLLINS, D., KIM, K. W., HOLTON, W. C., SIERZPUTOWSKA-GRACZ, H. und STEJSKAL, E. O.: *NMR quantum computation with indirectly coupled gates*. Phys. Rev. A, 62:022304, 2000.
- [221] KHANEJA, N., HEITMANN, B., SPÖRL, A., YUAN, H., SCHULTE-HERBRÜGGEN, T. und GLASER, S. J.: *Shortest Paths for Efficient Control of Indirectly Coupled Qubits*. Phys. Rev. A, 75:012322, 2007.
- [222] WOCJAN, P., RÖTTELER, M., JANZING, D. und BETH, T.: *Universal Simulation of Hamiltonians Using a Finite Set Control Operations*. Quant. Inf. & Comput., 2:133–150, 2002.
- [223] JANZING, D., WOCJAN, P. und BETH, T.: *Complexity of Decoupling and Time Reversal for n Spins with Interactions: Arrow of Time in Quantum Control*. Phys. Rev. A, 66:042311, 2002.

Literaturverzeichnis

- [224] VIDAL, G. und CIRAC, J. I.: *Optimal Simulation of Nonlocal Hamiltonians Using Local Operations and Classical Communication*. Phys. Rev. A, 66:022315, 2002.
- [225] WIGNER, E.: *Über die Operation der Zeitumkehr in der Quantenmechanik*. Nachr. Wiss. Ges. Göttingen, Math. Phys. Kl., 1932:546–559, 1932.
- [226] WIGNER, E.: *Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra*. Academic Press, London, 1959.
- [227] HAHN, E.: *Spin Echoes*. Phys. Rev., 80:580–601, 1950.
- [228] ACHIEZER, N.I. und GLASMAN, I.M.: *Theory of Linear Operators in Hilbert Space*. Pitman, Boston, 1981.
- [229] BULLOCK, S.S., BRENNEN, G.K. und O’LEARY, D.P.: *Time Reversal and n -Qubit Canonical Decompositions*. J. Math. Phys., 46:062104, 2005.
- [230] BULLOCK, S.S. und BRENNEN, G.K.: *Canonical Decompositions of n -qubit Quantum Computations and Concurrence*. J. Math. Phys., 45:2447–2467, 2004. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0309104>.
- [231] HELGASON, S.: *Differential Geometry, Lie Groups, and Symmetric Spaces*. Academic Press, New York, 1978.
- [232] SCHULTE-HERBRÜGGEN, T. und SPÖRL, A.: *Which Quantum Evolutions Can Be Reversed by Local Unitary Operations? Algebraic Classification and Gradient-Flow-Based Numerical Checks*. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0610061>, 2006.
- [233] DIRR, G., HELMKE, U., KLEINSTEUBER, M., GLASER, S. und SCHULTE-HERBRÜGGEN, T.: *The Local C -Numerical Range: Examples, Conjectures, and Numerical Algorithms*. In: *Proc. MTNS 2006*, 2006.
- [234] SCHULTE-HERBRUEGGEN, T., DIRR, G., HELMKE, U. und GLASER, S. J.: *The Significance of the C -Numerical Range and the Local C -Numerical Range in Quantum Control and Quantum Information*. math-ph/0701035, 2007.
- [235] CORY, DAVID G., PRICE, MARK D. und HAVEL, TIMOTHY F.: *Nuclear magnetic resonance spectroscopy: An experimentally accessible paradigm for quantum computing*, 1997. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/9709001>.
- [236] SHARF, YEHUDA, HAVEL, TIMOTHY F. und CORY, DAVID G.: *Spatially Encoded Pseudo-Pure States for NMR Quantum Information Processing*. Phys. Rev. A, 62:052314, 2000.

- [237] DORAI, KAVITA und KUMAR, ANIL: *Implementing quantum logic operations, pseudo-pure states and the Deutsch-Jozsa algorithm using non-commuting selective pulses in NMR*. Phys. Rev. A, 61:042306, 2000. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/9906027>.
- [238] HAVEL, T. F., SOMAROO, S. S., TSENG, C. H. und CORY, D. G.: *Principles and Demonstrations of Quantum Information Processing by NMR Spectroscopy*. AAEECC, 10:339, 2000. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/9812086>.
- [239] JONES, V. F. R.: *A new knot polynomial and von Neumann algebras*. Bull. Amer. Math. Soc, 33:219–225, 1986.
- [240] WOCJAN, P. und YARD, J.: *The Jones polynomial: quantum algorithms and applications in quantum complexity theory*. Quantum Inf. & Comp., 8(1& 2):0147–0180, 2008. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0603069>.
- [241] CROWELL, R. H. und FOX, R. H.: *Introduction to Knot Theory*. Graduate TExtS in Mathematics Vol. 57, Springer-Verlag New York- Heidelberg Berlin, 1977.
- [242] FOX, R. H.: *A quick Trip through knot theory*, Kapitel Topology of 3-Manifolds. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1962.
- [243] ROLFSEN, D.: *Knots and Links*. Publish or Perish Inc., Berkeley, 1976.
- [244] KAUFFMAN, L. H.: *Knoten*. Spektrum, 1996.
- [245] ADAMS, C.: *Das Knotenbuch: Einführung in die mathematische Theorie der Knoten*. Spektrum, 1995.
- [246] REIDEMEISTER, K.: *Knotten und Gruppen*. Abh. Math. Sem. Univ. Hamburg, 5:7–23, 1927.
- [247] PRASOLOV, V. V.: *Knots, links, braids and 3-manifolds: an introduction to the new invariants in low-dimensional topology*, Seite 11ff. American Mathematical Society, 1997.
- [248] ALEXANDER, J. W.: *Topological invariants of knots and links*. Trans. Amer. Math. Soc., 30(2):275–306, 1928.
- [249] KAUFFMAN, L. H.: *Knots and Physics*. Singapore: World Scientific, 1991.
- [250] KAUFFMAN, L. H.: *State models and the Jones polynomial*. Topology, 26:395–407, 1987.
- [251] FUTER, D., KALFAGIANNI, E. und PURCELL, J. S.: *Dehn filling, volume, and the Jones polynomial*. J. Diff. Geom., 78:429–464, 2008. math/0612138.

Literaturverzeichnis

- [252] WITTEN, E.: *Edward Quantum field theory and the Jones polynomial*. Comm. Math. Phys., 121:351–299, 1989.
- [253] FREEDMAN, M. H., KITAEV, A. und WANG, Z.: *Simulation of topological field theories by quantum computers*. Communications in Mathematical Physics, 227:587–603, 2002. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0001071>.
- [254] FREYD, P., YETTER, D., HOSTE, J., LICKORISH, W. B. R., MILLETT, K. und OCEANU, A.: *A New Polynomial Invariant of Knots and Links*. Bull. Amer. Math. Soc., 12:239–246, 1985.
- [255] ALEXANDER, J. W.: *A Lemma on a System of Knotted Curves*. Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 9:93–95, 1923.
- [256] BRUNN, H. K.: *Über verknottete Kurven*. In: *Verh. Math. Kongr. Zürich*, Seiten 256–259, 1897.
- [257] JONES, V. F. R.: *Hecke algebra representations for braid groups and link polynomials*. Ann. of Math., 126:335–388, 1987.
- [258] VOGEL, P.: *Representation of links by braids: a new algorithm*. Comment. Math. Helv., 65:104–113, 1990.
- [259] SHEPHERD, D.: *Computation with Unitaries and One Pure Qubit*. e-print: <http://arXiv.org/pdf/quant-ph/0608132>, 2006.
- [260] SHAKA, A. J., LEE, C. J. und PINES, A.: *Iterative schemes for bilinear operators; application to spin decoupling*. J. Magn. Reson., 77:274–293, 1988.

Danksagung

Ich danke Prof. Steffen Glaser für die alle Zeit gewährte fachliche und finanzielle Unterstützung. Ich danke weiter Prof. Thomas Huckle für die Ideen und Hilfestellungen wissenschaftlicher, sowie verhandlungstechnischer Natur. Ein großer Dank gilt meinem Betreuer Thomas Schulte-Herbrüggen, der mit mir während meiner gesamten Zeit durch einige Höhen und Tiefen gegangen ist.

Dank sei auch allen Kooperationspartner, während der diversen Projekte: Raimund Marx (NMR-Experimente), Navin Khaneja (analytische Lösungen), Markus Storcz, Ville Bergholm, Frank Wilhelm (Josephson-Elemente), Michael Riss, Tobias Gradl, Konrad Waldherr, Alex Kallischko, Tobias Weinzierl (alles was mit Informatik zusammenhing).

Ein dickes Danke geht auch an Nikolas Pomplum, Uwe Sander, Robert Fisher, Grit Kummerlöwe, Manoj Nimbalkar, Jorge Neves, Xiaodong Yang und Klaus Sonnleitner, die das alltägliche Leben ein gutes Stück lustiger gemacht haben.

Nicht zu vergessen Frau Fill, die sich immer darum gekümmert hat, dass auch alle Verträge zum richtigen Zeitpunkt verlängert wurden.

Danke auch an meine Eltern, die mich immer unterstützt haben und mir ihr Vertrauen geschenkt haben, ohne groß nachzufragen.

Und ein Riesendank gilt meiner Frau Sarah, ohne die ich all dies wahrscheinlich nie geschafft hätte.