

Bachelorarbeit in Physik

von

Simon Hans Hille

Implementierung der Zeitentwicklung eines durch das Quanten-Ising-Modell beschriebenen Spin-Systems auf einer Quantencomputersimulation

Angefertigt am

Physikalischen Institut der Universität Bonn

vorgelegt der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der

Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

August 2021

1. Gutachter Prof. Carsten Urbach

2. Gutachter Dr. Bernard Metsch

1. Zusammenfassung

In dieser Bachelorarbeit wird die Zeitentwicklung eines durch das Quanten-Ising-Modell beschriebenen Spin-Systems mithilfe zweier unterschiedlicher Methoden auf einer Quantencomputersimulation implementiert. Es wird gezeigt, dass aus beiden Methoden dieselbe Zeitentwicklung resultiert. Die erste Methode basiert hierbei auf der Suzuki-Trotter-Näherung, während die Zweite eine analytische Lösung des Quanten-Ising-Modell implementiert und somit einer exakten Zeitentwicklung entspricht. Für die Implementierung basierend auf der Suzuki-Trotter-Näherung wird die Abhängigkeit des entstehenden Trotter-Fehlers von der Kopplungsstärke J , der Zeit t und der Anzahl an Trotter-Steps N_{Trott} untersucht. Die Zeitentwicklung wird für verschiedene Randbedingungen und Kopplungsstärken simuliert. Für beide Methoden wird die je nach betrachtetem System und entwickelter Zeit benötigte Anzahl an Quantengattern verglichen.

Inhaltsverzeichnis

1. Zusammenfassung	3
2. Einleitung	6
2.1. Hamiltonian	6
2.2. Zeitentwicklung	7
2.2.1. Suzuki-Trotter-Näherung	7
2.2.2. Exakte Zeitentwicklung	10
3. Simulationen	16
3.1. Zeitentwicklung mithilfe der Suzuki-Trotter-Näherung	16
3.2. Zeitentwicklung mithilfe der analytischen Lösung	22
3.3. Vergleich der beiden Methoden	24
4. Fazit	26
A. Konstruktion des Quantenschaltkreises für einen Trotter-Step	27
B. Analytische Lösung des Quanten-Ising-Modells	31
B.1. Jordan-Wigner-Transformation	31
B.2. Fourier-Transformation	33
B.3. Bogoliubov-Transformation	35

2. Einleitung

Nach Richard Feynman ist eine effiziente Simulation von quantenmechanischen Systemen aufgrund der durch die Superposition entstehenden Vielzahl an Variablen nur auf Quantencomputern möglich [5]. Anlässlich dieser Aussage wird im Folgenden beispielhaft die Implementierung des Quanten-Ising-Modell (QIM) auf einem Quantencomputer betrachtet. Hierbei wird mithilfe zweier unterschiedlicher Methoden die Zeitentwicklung eines durch das QIM beschriebene Spin-System auf einer Quantencomputersimulation¹ simuliert. Grundkenntnisse über die Funktionsweise von Quantencomputern werden in dieser Arbeit vorausgesetzt und sind ggf. in [3, Kap. 1] nachzulesen. Hierzu zählen die grundlegenden Eigenschaften von Qubits und Quantengattern², sowie das Konzept des Quantenschaltkreises. Es ist zu beachten, dass in der gesamten Arbeit das auf realen Quantencomputern vorhandene Rauschen und die damit einhergehende limitierte Anzahl an Gates [7, Abschn. 2.2] nicht berücksichtigt wird. Des Weiteren werden mögliche Komplikationen basierend auf unterschiedlicher Konnektivität von Qubits auf realen Quantencomputern vernachlässigt und damit eine ideale Konnektivität aller Qubits angenommen³. Für die Implementierung der beiden in dieser Arbeit verwendeten Methoden auf verschiedenen realen Quantencomputern und die damit einhergehende Berücksichtigung unterschiedlicher Konnektivität der Qubits, sowie des Rauschens siehe [7] und [2]. Als Basiszustände der Qubits werden im Folgenden die Zustände

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

bezeichnet. In der gesamten Arbeiten wird $\hbar = 1$ und $c = 1$ gesetzt. Es folgt eine kurze Beschreibung des QIM und der beiden hier verwendeten Methoden. In Abschnitt 3 werden dann verschiedene Simulationen der Zeitentwicklung auf Basis der beiden Modelle dargestellt⁴.

2.1. Hamiltonian

Der in dieser Arbeit betrachtete Hamiltonian des QIM ist gegeben durch:

$$\mathcal{H}_{\text{OBC}} = -J \sum_i^{L-1} \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - \Gamma \sum_i^L \sigma_i^z \quad (2)$$

$$\mathcal{H}_{\text{PBC}} = \mathcal{H}_{\text{OBC}} - J \sigma_1^x \sigma_L^x \quad (3)$$

$$\mathcal{H}_{\text{ABC}} = \mathcal{H}_{\text{OBC}} + J \sigma_1^x \sigma_L^x \quad (4)$$

¹ Die in dieser Arbeit verwendete Quantencomputersimulation *qsimulatR* von Prof. Carsten Urbach ist unter <https://github.com/HISKP-LQCD/qsimulatR> zu finden (besucht am 27.07.2021).

² Im Folgenden werden diese als (Qubit-)Gates bezeichnet

³ Bei einer idealen Konnektivität sind alle Qubits untereinander verbunden.

⁴ Alle Programme für die Erstellung dieser Simulationen werden unter <https://github.com/StiStaStokes> bereitgestellt (Stand: August 2021).

Hierbei unterscheidet man zwischen dem Hamiltonian ohne Randbedingungen (OBC) und mit periodischen (PBC) und antiperiodischen (ABC) Randbedingungen⁵, wobei L der Anzahl an Gitteratome entspricht [6, Gl. 3-5]. Das QIM ist ein Spezialfall des Heisenberg-Modells [8]

$$\mathcal{H}_{\text{Hb}} = - \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta} J_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta - \sum_i \vec{\Gamma} \cdot \vec{S}_i \quad \text{mit} \quad \alpha, \beta = x, y, z \quad (5)$$

mit dem externen Magnetfeld $\vec{\Gamma}$ und der Kopplungsstärke $J_{ij}^{\alpha\beta}$ der Spins untereinander. Es ergibt sich aus den folgenden Annahmen:

$$J_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} J \cdot \delta_{j,i+1} \cdot \delta_{\alpha,\beta} \cdot \delta_{\alpha,x} \quad (6)$$

$$\vec{\Gamma} = \Gamma \cdot \hat{e}_z \quad (7)$$

$$S_i^\alpha = \frac{1}{2} \sigma_i^\alpha \quad (8)$$

Folglich wird ein eindimensionales Spin-1/2-System angenommen, bei welchem die x -Komponenten der Spins an ihren nächsten Nachbarn mit der Stärke J koppeln und ein Magnetfeld der Feldstärke Γ parallel zur z -Achse angelegt ist, an welchem die z -Komponenten der Spins koppeln. Das Heisenberg-Modell und somit auch das QIM dient zur Beschreibung des Ferromagnetismus basierend auf der Weisschen Theorie [8] [17]. Aus der Zeitentwicklung eines durch das QIM beschriebene Spin-Systems (im Folgenden u.a. bezeichnet als Zeitentwicklung des QIM) ist es z.B. möglich, die zeitliche Entwicklung des Erwartungswertes der transversalen Magnetisierung

$$M_z = \frac{1}{2} \langle \sigma_z \rangle(t) \quad (9)$$

zu bestimmen [2, Abschn.3].

2.2. Zeitentwicklung

Es werden im Folgenden die zwei unterschiedliche Methoden beschrieben, welche die Zeitentwicklung des QIM auf einem Quantencomputer implementieren. Die erste Methode ist hierbei eine Approximation durch die Suzuki-Trotter-Näherung und die Zweite implementiert eine analytische Lösung, basierend auf der Beschreibung des Spin-Systems durch spinlose Fermionen.

2.2.1. Suzuki-Trotter-Näherung

Die exakte Zeitentwicklung des betrachteten Systems wird mithilfe des Zeitentwicklungsoperators [9, §13]

$$\hat{U}(t) = e^{-it\mathcal{H}} \quad (10)$$

⁵ Die verwendeten Abkürzungen stammen aus dem Englischen: open boundary conditions (OBC), periodic boundary conditions (PBC), anti periodic boundary conditions (ABC)

durchgeföhrt. Da die einzelnen Spin-Komponenten nicht kommutieren, kommutieren die einzelnen Summanden des betrachteten Hamiltonians \mathcal{H}_{QIM} ebenfalls nicht. Der Zeitentwicklungsoperator lässt sich daher nicht als Produkt zweier einzelner Zeitentwicklungsoperatoren darstellen (vgl. Baker–Campbell–Hausdorff-Formel [1]) und ist aufgrund seiner komplexen Matrizendarstellung nicht direkt auf einem Quantencomputer implementierbar. Analog zu [6, Abschn. IV] wird der Zeitentwicklungsoperator daher mithilfe der Suzuki-Trotter-Näherung (STN) auf einem Quantencomputer implementiert. Nach der STN lässt sich ein exponentieller Operator

$$e^{t(A+B)} \quad \text{mit} \quad [A, B] \neq 0 \quad (11)$$

durch die Aufspaltung von t in n diskrete Zeitintervalle $\Delta t = t/n$ nähern durch⁶ [14]:

$$e^{t(A+B)} = e^{A\Delta t} e^{B\Delta t} + \mathcal{O}(t^2/n) \quad (12)$$

$$e^{t(A+B)} = e^{A(\Delta t/2)} e^{B\Delta t} e^{A(\Delta t/2)} + \mathcal{O}(t^3/n^2) \quad (13)$$

Aus dem Hamiltonian des QIM und der STN folgt somit für den Zeitentwicklungsoperator $U(t, m)$, wobei $m \in \mathbb{N}$ die Ordnung der STN ist:

$$U(t, 1) = [e^{iJ\Delta t \sum_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x} e^{i\Gamma\Delta t \sum_i \sigma_i^z}]^n + \mathcal{O}(t^2/n) \quad (14)$$

$$U(t, 2) = [e^{iJ\frac{\Delta t}{2} \sum_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x} e^{i\Gamma\Delta t \sum_i \sigma_i^z} e^{iJ\frac{\Delta t}{2} \sum_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x}]^n + \mathcal{O}(t^3/n^2) \quad (15)$$

Im Folgenden wird die Anzahl der Intervalle n als Trotter-Steps N_{Trott} bezeichnet und nur die erste Näherung $U(t, 1)$ betrachtet. Ein Trotter-Step

$$U_{\text{step}}(\Delta t) = e^{iJ\Delta t \sum_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x} \cdot e^{i\Gamma\Delta t \sum_i \sigma_i^z} =: U_1(\Delta t) \cdot U_2(\Delta t) \quad (16)$$

wird auf einem Quantencomputer durch den Quantenschaltkreis in Abb. 1 (hier beispielhaft für 4 Qubits) implementiert. Hierbei ist zu beachten, dass die beiden Terme

$$U_1 = e^{Ji\Delta t \sum_{i=1,3}^L \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x} \cdot e^{Ji\Delta t \sum_{i=2,4}^L \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x} \quad (17)$$

auf diese Art nicht gleichzeitig implementiert werden können, wodurch ein weiterer Trotter-Fehler entsteht [6, Abschn. IV]. Die komplette Zeitentwicklung ergibt sich durch N_{Trott} -fache Wiederholung dieses Schaltkreises. Die Konstruktion des Quantenschaltkreises ist im Anhang A zu finden. Es ist zu beachten, dass abhängig von der Konnektivität der Qubits bei realen Quantencomputern für $\mathcal{H}_{\text{P/A-BC}}$ zusätzliche SWAP-Gates benötigt werden.

⁶ Es sind hier nur die ersten zwei Ordnungen der STN angegeben.

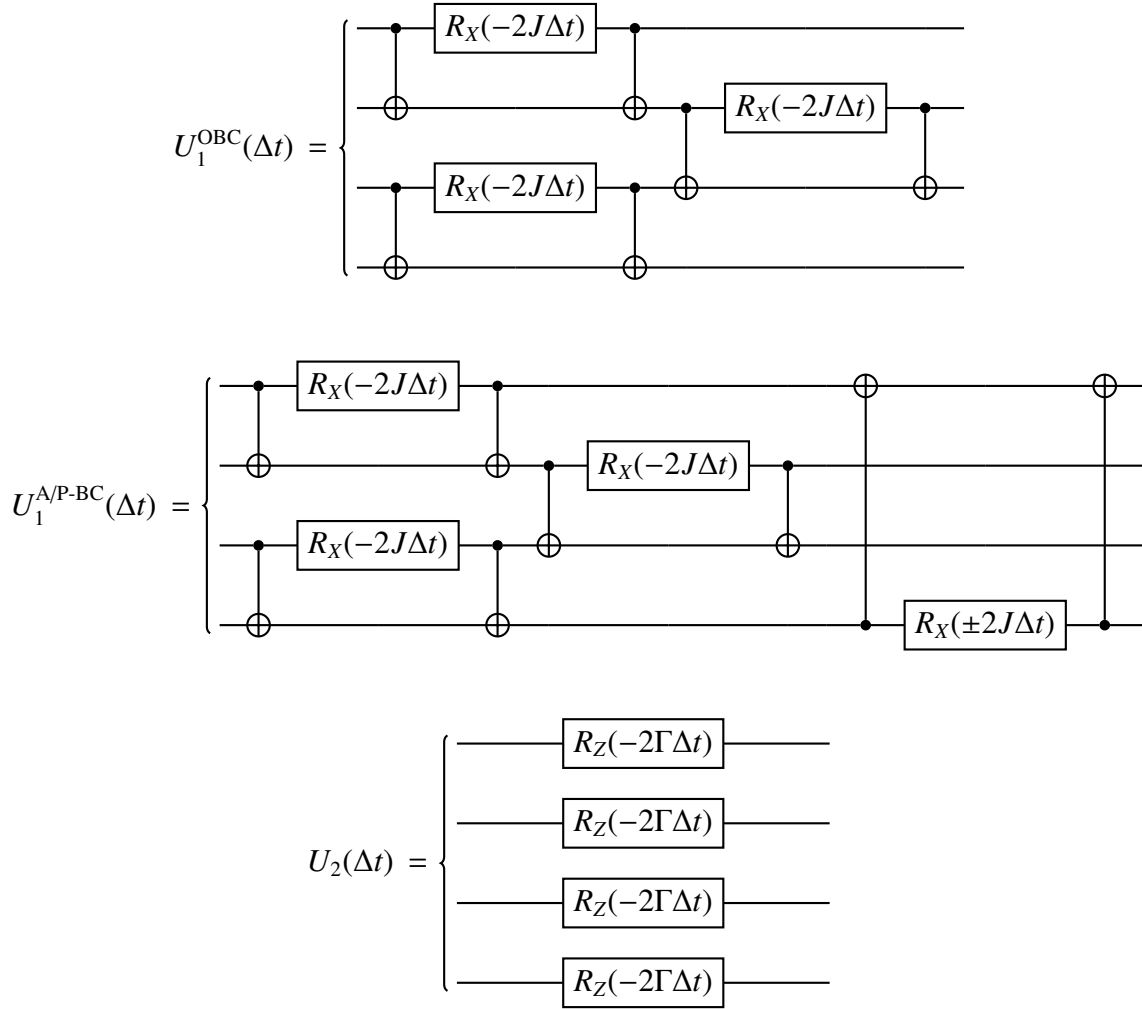


Abbildung 1: Quantenschaltkreis für U_1 und U_2 (vgl. Gl. 16) bei beispielhaft 4 Qubits. U_1 ist für die verschiedenen Randbedingungen dargestellt. PBC entsprechen einem negativen Winkel im letzten R_X -Gate.

2.2.2. Exakte Zeitentwicklung

Analog zu [2] wird eine Transformation implementiert, welche den Hamiltonian diagonalisiert,

$$\tilde{\mathcal{H}} = U_{\text{dis}}^\dagger \mathcal{H} U_{\text{dis}} \quad (18)$$

wobei der diagonalisierte Hamiltonian $\tilde{\mathcal{H}}$ von der Form

$$\tilde{\mathcal{H}} = \sum_i \epsilon_i \sigma_i^z \quad (19)$$

ist und seine Eigenzustände somit den Basiszuständen der Qubits entsprechen. U_{dis} basiert dabei auf der folgenden analytischen Lösung (siehe z.B. [10]) des QIM:

Zunächst wird das Spin-System mithilfe der Jordan-Wigner-Transformation auf ein System spinloser Fermionen abgebildet. Die Fermionen müssen hierbei spinlos sein, da die Spins im QIM auf einen Freiheitsgrad eingeschränkt sind [15, Abschn. 4]. Daraufhin werden das Fermionen-System durch eine Fourier-Transformation in den Impulsraum abgebildet und Fermionen mit unterschiedlichem Momentum schlussendlich durch eine Bogoliubov-Transformation entkoppelt. Die Transformationsmatrix U_{dis} lässt sich daher schreiben als:

$$U_{\text{dis}} = U_{\text{JW}} U_{\text{FT}} U_{\text{Bog}} \quad (20)$$

Die vollständige Diagonalisierung ist im Anhang B zu finden.

Mithilfe des diagonalisierten Hamiltonian $\tilde{\mathcal{H}}$ und dessen Eigenwert ϵ_i lässt sich dann das Spin-System exakt zeitentwickeln:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-it\tilde{\mathcal{H}}} |\psi(0)\rangle = \sum_i U_{\text{dis}} e^{-it\epsilon_i} U_{\text{dis}}^\dagger |\psi(0)\rangle \quad (21)$$

Im Folgenden werden die einzelnen Transformationen kurz dargestellt und deren Implementierung auf einem Quantencomputer beschrieben.

Jordan-Wigner-Transformation

Durch die Jordan-Wigner-Transformation (JWT) wird $\mathcal{H}_{\text{P/A-BC}}$ umgeformt in (siehe Gl. 68):

$$\mathcal{H}_{\text{P/A-BC}} = -J \sum_{i=1}^{L-1} (c_i^\dagger c_{i+1} + c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger + \text{H.c.}) \pm J(-1)^{\hat{N}} (c_L^\dagger c_1 + c_L^\dagger c_1^\dagger + \text{H.c.}) + \Gamma \sum_{i=1}^L (2n_i - 1) \quad (22)$$

wobei c_i^\dagger und c_i fermionische Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren sind. $\hat{N} = \sum_i n_i$ entspricht der Anzahl von Fermionen. Die Wellenfunktion wird folgendermaßen transformiert [2, Gl. 6]:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{i_1, i_2, \dots, i_L=0,1} \psi_{i_1, i_2, \dots, i_L} |i_1, i_2, \dots, i_L\rangle \\ &= \sum_{i_1, i_2, \dots, i_L=0,1} \psi_{i_1, i_2, \dots, i_L} (c_1^\dagger)^{i_1} \dots (c_L^\dagger)^{i_L} |0\rangle \end{aligned} \quad (23)$$

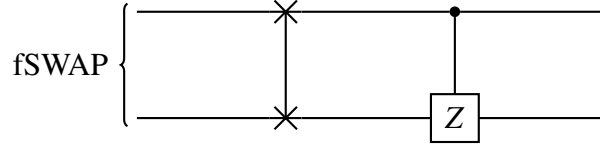


Abbildung 2: Quantenschaltkreis des fSWAP-Gates (vgl. [2, Abb. 7]).

Da sich die Koeffizienten $\psi_{i_1, i_2, \dots, i_L}$ durch die Transformation nicht ändern, benötigt man zur Implementierung der Jordan-Wigner-Transformation keine Qubit-Gates. Jedoch sind die nun geltenden Kommutatorrelationen für Fermionen (vgl. Gl. 52) zu beachten. Werden zwei benachbarte besetzte Qubits getauscht, so ändert sich das Vorzeichen der Wellenfunktion. Auf einem Quantencomputer wird dies durch das fermionic-SWAP-Gate (fSWAP) berücksichtigt [2, Gl. 7]:

$$\text{fSWAP} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (24)$$

Der Quantenschaltkreis für die Implementierung des Gates ist in Abb. 2 zu finden.

Fourier-Transformation

Durch einen Wechsel in den Impulsraum, wobei

$$b_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=1}^L e^{ikj} c_j \quad b_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=1}^L e^{-ikj} c_j \quad (25)$$

die jeweiligen fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren sind, ergibt sich der Hamiltonian (siehe Gl. 76)

$$\mathcal{H}_{\text{P/A-BC}} = \sum_k \left[2(\Gamma - J \cos k) b_k^\dagger b_k - iJ \sin k (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_k b_{-k}) - \Gamma \right] \quad (26)$$

wobei k abhängig von der Anzahl der Fermionen \hat{N} und den ursprünglichen Randbedingungen (P/A-BC) ist⁷ [10, Gl. 34, 35]:

$$\pm(-1)^{\hat{N}} = -1 \quad \rightarrow \quad k = \frac{2n\pi}{L} \quad \text{mit} \quad n = -\frac{L}{2}+1, \dots, \frac{L}{2} \quad (27)$$

$$\pm(-1)^{\hat{N}} = 1 \quad \rightarrow \quad k = \pm \frac{(2n-1)\pi}{L} \quad \text{mit} \quad n = 1, \dots, \frac{L}{2} \quad (28)$$

Die Anzahl der Fermionen \hat{N} oder die ursprünglichen Randbedingungen werden im Folgenden analog zu [2, Abschn. 2.2] immer so gewählt, dass die Randbedingungen aus

⁷ Es ist zu beachten, dass hier L als gerade angenommen wird.

Sicht der Fermionen PBC entsprechen (dies entspricht k in Gl. 27). Zusätzlich wird ebenfalls analog zu [2, Abschn. 2.2] $L = 2^m$, $m \in \mathbb{N}$ vorausgesetzt. Die Fourier-Transformation wird mithilfe der Quantum-Fast-Fourier-Transformation (QFFT) implementiert. Hierbei wird genau wie bei der klassischen FFT, die diskrete Fourier-Transformation über L Indizes in zwei diskrete Fourier-Transformation über die jeweiligen geraden, bzw. ungeraden Indizes aufgespalten.

$$\sum_{j=0}^{L-1} e^{\frac{2i\pi n}{L}} c_j^\dagger = \sum_{j=0}^{\frac{L}{2}-1} e^{\frac{2i\pi n}{L/2}} c_{2j}^\dagger + e^{\frac{2i\pi n}{L}} \sum_{j=0}^{\frac{L}{2}-1} e^{\frac{2i\pi n}{L/2}} c_{2j+1}^\dagger \quad \text{mit } n = 1, \dots, L-1 \quad (29)$$

Durch m -fache Iteration dieser Aufspaltung, kann die komplette Fourier-Transformation mit folgenden zwei Gates implementiert werden [2, Gl. 10]:

$$F_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad w_L^n = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{\frac{2i\pi n}{L}} \end{pmatrix} \quad (30)$$

Die Struktur des Schaltkreises, beispielhaft für 8 Qubits und idealer Konnektivität in Abb. 3, ist dabei identisch zu der klassischen Butterfly-Struktur. Die beiden Gates F_2 und w_L^n

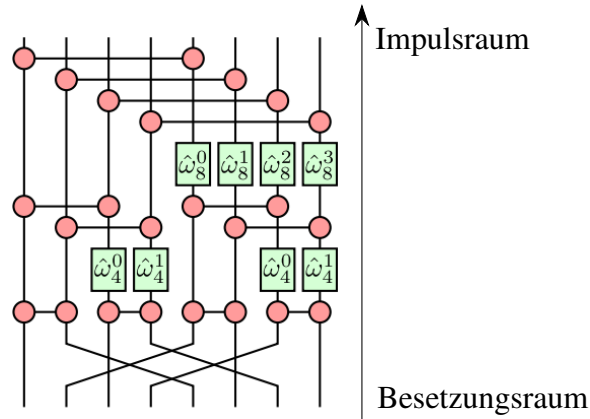


Abbildung 3: Struktur des Quantenschaltkreises der QFFT [4, Fig. 1]. Die verbundenen roten Punkte entsprechen F_2 .

lassen sich zusammenfassen in ein 2 Qubit-Gate [2, Gl. 11]:

$$F_n^L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{e^{\frac{2i\pi n}{L}}}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{e^{\frac{2i\pi n}{L}}}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -e^{\frac{2i\pi n}{L}} \end{pmatrix} \quad (31)$$

Der Quantenschaltkreis für die Implementierung dieses Gates ist in Abb. 4 zu finden.

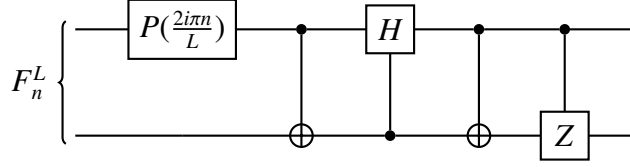


Abbildung 4: Quantenschaltkreis für die Implementierung des 2 Qubit-Gates F_k^L der QFFT (vgl. [2, Abb. 8]). Das $P(\phi)$ -Gate entspricht dem Phase-Gate in Qiskit [11].

Bogoliubov-Transformation

Durch die Transformation:

$$a_k = u_k b_k - i v_k b_{-k}^\dagger \quad (32)$$

$$a_k^\dagger = u_k b_k^\dagger + i v_k b_{-k} \quad (33)$$

mit

$$u_k = \cos \frac{\theta_k}{2} \quad v_k = \sin \frac{\theta_k}{2} \quad (34)$$

werden im finalen Schritt positive und negative Momenta (z.B. $b_k b_{-k}$) entkoppelt und hierdurch der gewünschte diagonalisierte Hamiltonian erreicht (siehe Gl. 93):

$$\mathcal{H}_{\text{P/A-BC}} = \sum_k \epsilon_k (a_k^\dagger a_k - \frac{1}{2}) \quad (35)$$

Aus der Bedingung der Entkoppelung ergibt sich:

$$\epsilon_n = 2 \sqrt{\left(\Gamma - J \cos\left(\frac{2\pi n}{L}\right)\right)^2 + J^2 \sin^2\left(\frac{2\pi n}{L}\right)} \quad (36)$$

$$\cos \theta_n = \frac{\Gamma - J \cos\left(\frac{2\pi n}{L}\right)}{\sqrt{\left(\Gamma - J \cos\left(\frac{2\pi n}{L}\right)\right)^2 + J^2 \sin^2\left(\frac{2\pi n}{L}\right)}} \quad (37)$$

Implementiert wird die Bogoliubov-Transformation mithilfe des folgenden 2 Qubit-Gates [2, Gl. 14]:

$$B_n^L = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta_n}{2}\right) & 0 & 0 & i \sin\left(\frac{\theta_n}{2}\right) \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ i \sin\left(\frac{\theta_n}{2}\right) & 0 & 0 & \cos\left(\frac{\theta_n}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (38)$$

Der Quantenschaltkreis für die Implementierung dieses Gates ist in Abb. 5 zu finden:

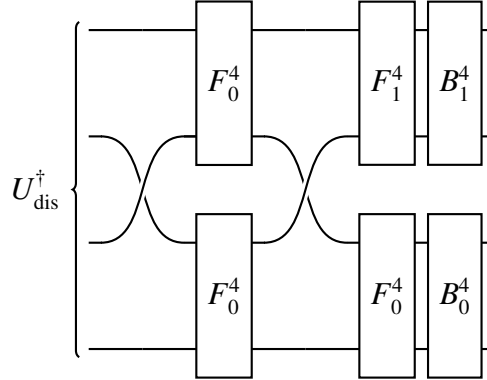


Abbildung 6: Quantenschaltkreis für die Implementierung von U_{dis}^\dagger . Die überkreuzten Linien entsprechen fSWAP-Gates. Die Quantenschaltkreise der einzelnen 2 Qubit-Gates sind in Abb. 2, 4, 5 zu finden. Die Randbedingungen entsprechen aus Sicht der Fermionen immer PBC.

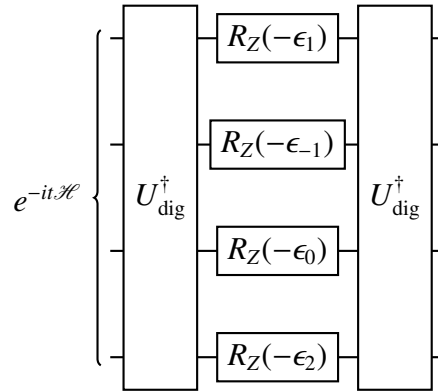


Abbildung 7: Quantenschaltkreis für die Implementierung der exakten Zeitentwicklung mithilfe des Zeitentwicklungsoperators $e^{-it\mathcal{H}}$ des QIM. Die Randbedingungen entsprechen aus Sicht der Fermionen immer PBC.

3. Simulationen

Im Folgenden wird die Zeitentwicklung eines 4 Qubit-Systems mithilfe der beider Methoden auf der Quantencomputersimulation implementiert. Hierbei entsprechen die betrachteten Zustände der Basis, in welchem die Kopplung an das äußere Magnetfeld $\Gamma \sum_i \sigma_i^z$ diagonal ist. Als Input-States werden wie in [2, Abschn. 2.4] die Grundzustände des diagonalisierten Hamiltonians $\tilde{\mathcal{H}}$ betrachtet:

$$|\Omega\rangle = \begin{cases} |0000\rangle & \text{für } \Gamma = 1.1 \quad \text{i.A. } \Gamma > 1 \\ |0001\rangle & \text{für } \Gamma = 0.9 \quad \text{i.A. } \Gamma < 1 \end{cases} \quad (39)$$

wobei immer $J < \Gamma$ gewählt wird, damit der dominierende Teil des Hamiltonians diagonal ist. Als Observable wird analog zu [7, Gl. 8] der Besetzungsoperator

$$\hat{n}_i = (1 - \sigma_i^z)/2 \quad (40)$$

definiert, welcher dem Zustand des i-ten Qubits nach einer Messung entspricht. Die mittlere Besetzungszahl $\langle n_i \rangle(t)$ des i-ten Qubits ergibt sich dann aus 5000-facher Simulation einer Messung dieses Qubits zum Zeitpunkt t . Die Anzahl der simulierten Messungen ist hier so groß gewählt, um den statistischen Fehler so weit wie möglich zu minimieren. Ein Beispiel: Der durchschnittliche Standardfehler bei der Simulation in Abb. 12 beträgt 0.006 und ist damit vernachlässigbar klein. Im Folgenden wird daher auf eine Darstellung und Diskussion dieser statistischen Fehler verzichtet.

3.1. Zeitentwicklung mithilfe der Suzuki-Trotter-Näherung

Zuerst wird die Anzahl der benötigten Trotter-Steps N_{Trott} in Abhängigkeit von J und t untersucht. Dabei wird der Wert $\langle n_i \rangle(t)$ nach $t = 15$ in Abhängigkeit von

$$\delta t = \frac{Jt}{N} = \Delta t \cdot J \quad (41)$$

bestimmt. Hierzu wurde $J = 0.8$ gesetzt und N_{Trott} zwischen 1 und 200 variiert. Als Input-State wurde $|0001\rangle$ und PBC gewählt. Aus den resultierenden Plots in Abb. 8 ist zu erkennen, dass ab einem Wert von ca. $\delta t = 0.1$ die Werte $\langle n_i \rangle(15)$ nur noch leicht variieren. Im Folgenden werden daher die benötigten Trotter-Steps aus

$$N_{\text{Trott}} = J \cdot t / 0.1 \quad (42)$$

bestimmt. Als nächstes wird die zeitliche Entwicklung der Besetzungsoperatoren $\langle n_i \rangle(t)$ für die beiden Input-States in Gl. 39 über $t = 15$ und mit $J = 0.8$ für die unterschiedlichen Randbedingungen simuliert. Nach Gl. 42 ergibt sich für die Anzahl der benötigten Trotter-Steps $N_{\text{Trott}} = 120$. Die resultierenden Verläufe sind in Abb. 9 und 10 zu finden. Hierbei ist auffällig, dass die zeitlichen Verläufe der Besetzungszahlen für unterschiedliche Randbedingungen deutlich voneinander abweichen. Dies resultiert aus der geringen

Anzahl an Qubits. Erst im Grenzfall $L \gg 1$ wäre der Einfluss von Randbedingungen vernachlässigbar. In diesem Fall entspräche der Verlauf in allen drei Fällen dem von OBCs. Um den Einfluss der Kopplungskonstante J auf den zeitlichen Verlauf der Besetzungszahl zu untersuchen, wird die Zeitentwicklung für drei verschiedene Kopplungsstärken simuliert. Hierbei werden PBCs angenommen, als Input-State $|0001\rangle$ gewählt und das 4te Qubit betrachtet. Die resultierenden Zeitentwicklungen für $J = 0.02, 0.1, 0.4, 0.7$ sind in Abb. 11 zu finden. Hierbei ist deutlich zu erkennen, dass mit steigendem J die zeitliche Variation der Besetzungszahl zunimmt. Im Grenzfall $J \rightarrow 0$ ist $\langle n_i \rangle(t)$ konstant. Die zeitliche Variation wird in der hier gewählten Basis folglich von dem Kopplungsterm $J \sum_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x$ getrieben.

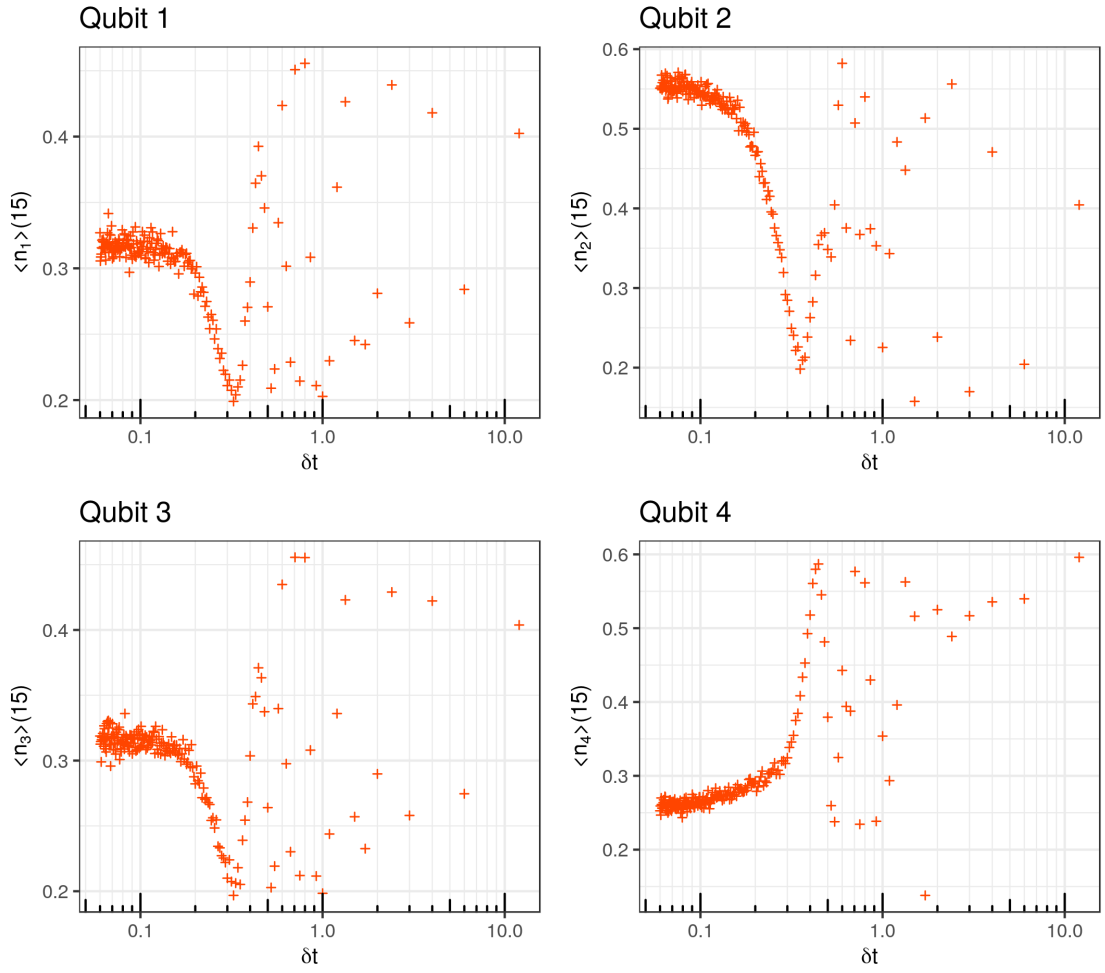


Abbildung 8: Einfluss der Größe $\delta t = \frac{Jt}{N} = \Delta t \cdot J$ auf den Wert $\langle n_i \rangle(t)$ nach $t = 15$. Hierbei wurde $J = 0.8$ gesetzt und N_{Trot} variiert. Als Input-State wurde $|1000\rangle$ gewählt.

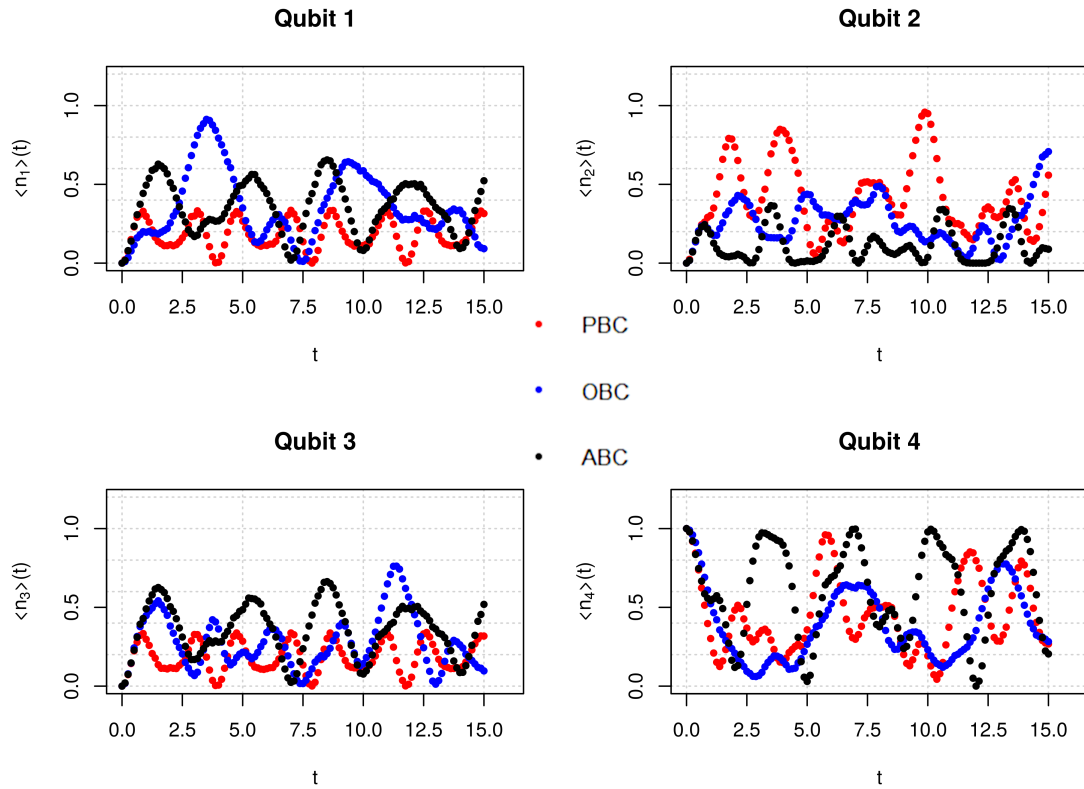


Abbildung 9: Zeitentwicklung der Besetzungszahlen für den Input-State $|0001\rangle$ und $J = 0.8$ basierend auf der STN für unterschiedliche Randbedingungen. Die Anzahl der Trotter-Steps beträgt $N_{\text{Trott}} = 120$.

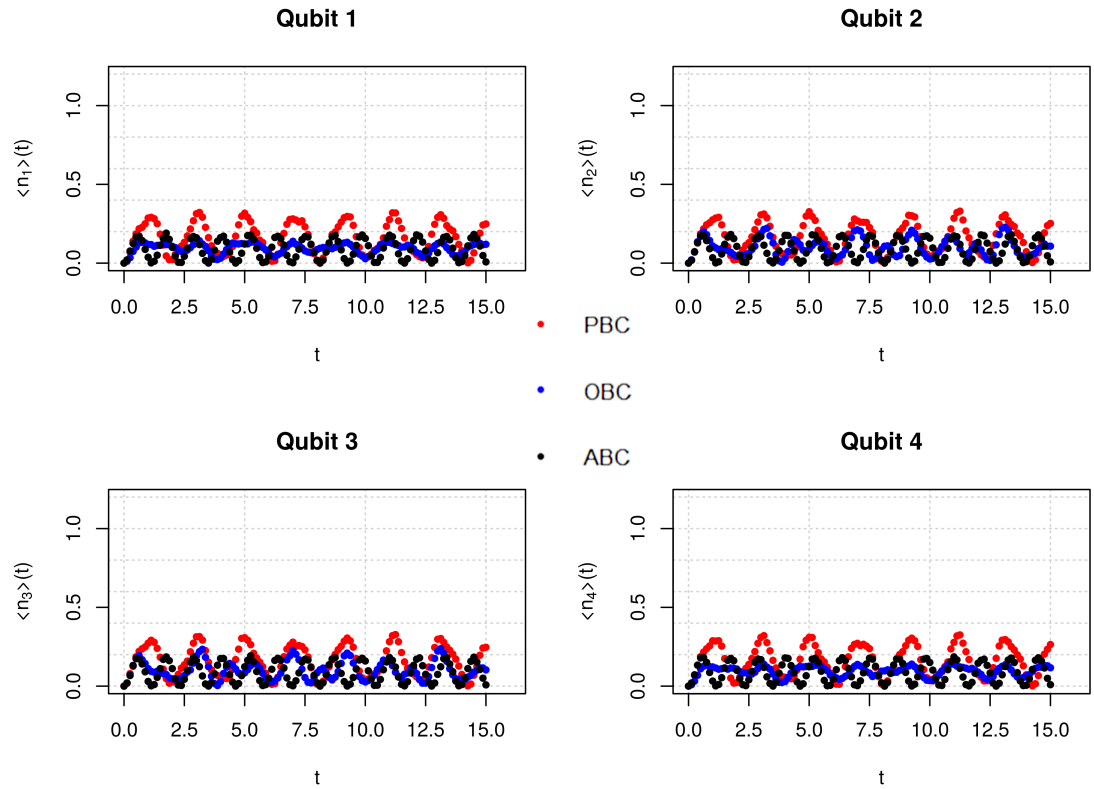


Abbildung 10: Zeitentwicklung der Besetzungszahlen für den Input-State $|0000\rangle$ und $J = 0.8$ basierend auf der STN für unterschiedliche Randbedingungen. Die Anzahl der Trotter-Steps beträgt $N_{\text{Trot}} = 120$.

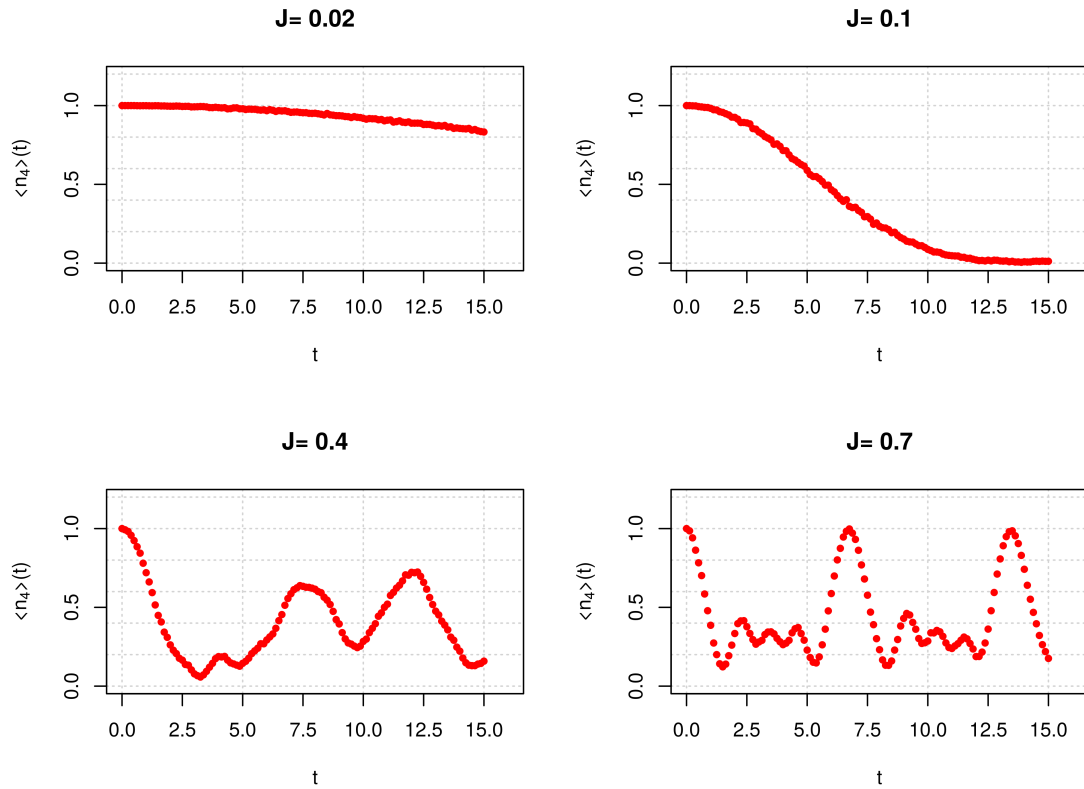


Abbildung 11: Einfluss der Kopplungsstärke J auf die Zeitentwicklung. Betrachtet wurde die Zeitentwicklung des 4ten Qubits des Input-State $|0001\rangle$. Die Anzahl der Trotter-Steps betragt $N_{\text{Trot}} = 120$.

3.2. Zeitentwicklung mithilfe der analytischen Lösung

Die Kopplungsstärke wird auf $J = 0.8$ gesetzt und die Zeitentwicklung über $t = 15$ simuliert. Die Randbedingungen des durch den Quantenschaltkreis in Abb. 7 entwickelten Spin-Systems sind abhängig vom Input-State (vgl. Abschn. 2.2.2). Der Input-State $|0000\rangle$ wird durch die JWT auf eine gerade Anzahl von Fermionen abgebildet. Der Quantenschaltkreis in Abb. 7 entspricht daher der Zeitentwicklung eines Systems mit ABC. Bei dem Input-State $|0001\rangle$ wird hingegen auf eine ungerade Anzahl von Fermionen abgebildet. Hier entspricht der Quantenschaltkreis einer Zeitentwicklung eines Systems mit PBC. In Abb. 12 und 13 sind die beiden simulierten Zeitentwicklungen zu finden. Vergleicht man diese mit den jeweiligen auf der STN basierenden Zeitentwicklungen, so sind die Verläufe identisch. Die Methoden wurden somit erfolgreich untereinander verifiziert.

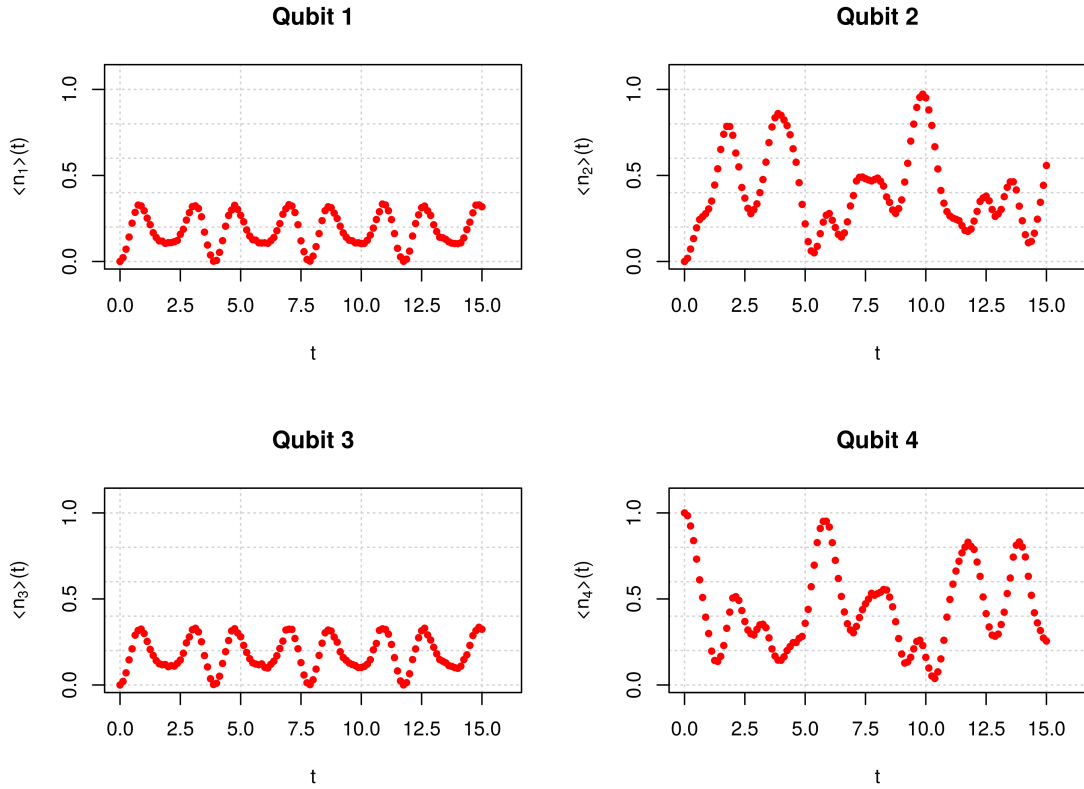


Abbildung 12: Zeitentwicklung der Besetzungszahlen für den Input-State $|0001\rangle$ und $J = 0.8$ basierend auf der analytischen Lösung. Die Randbedingungen des zeitentwickelten Spin-Systems entsprechen PBC. Es wurden die gleichen Zeitpunkte wie bei der Simulation basierend auf der STN in Abb. 9 gewählt.

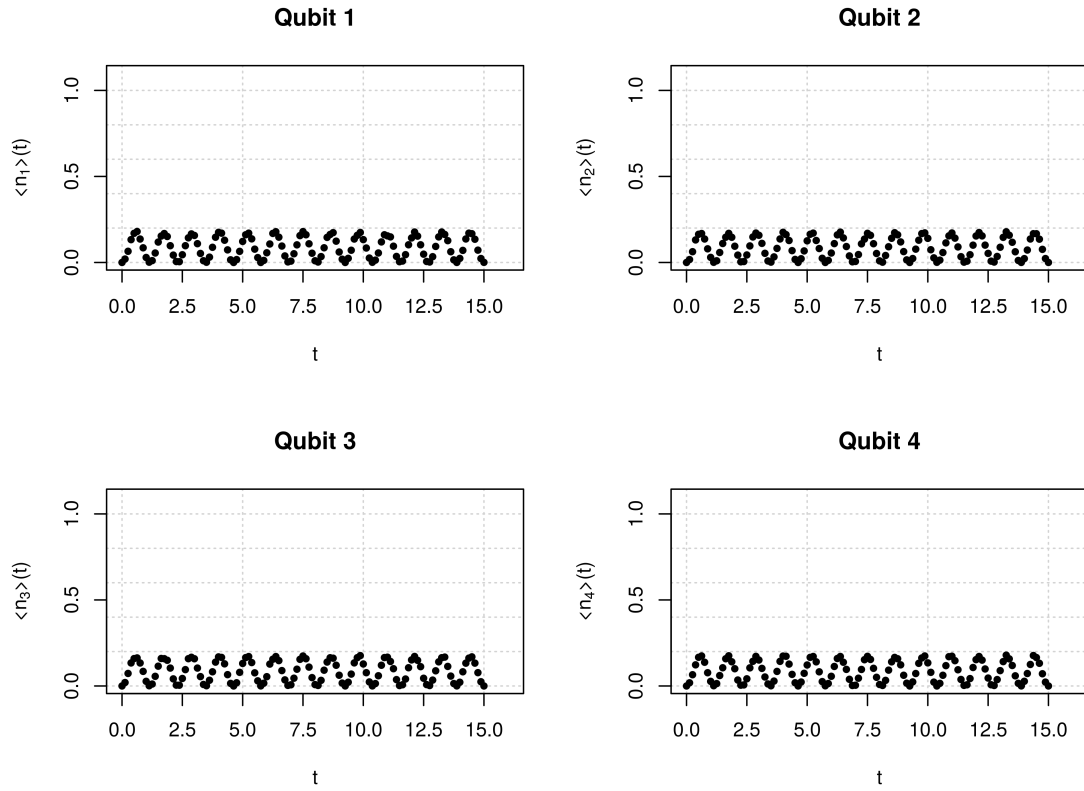


Abbildung 13: Zeitentwicklung der Besetzungszahlen für den Input-State $|0000\rangle$ und $J = 0.8$ basierend auf der analytischen Lösung. Die Randbedingungen des zeitentwickelten Spin-Systems entsprechen ABC. Es wurden die gleichen Zeitpunkte wie bei der Simulation basierend auf der STN in Abb. 10 gewählt.

3.3. Vergleich der beiden Methoden

Erlaubt der zu untersuchende Hamiltonian (P-A/BC) und das betrachtete Qubit System ($L = 2^m$, $m \in \mathbb{N}$) die Verwendung beider Modelle, so muss abgewägt werden, welche der beiden Implementierungen verwendet werden sollte. Da die zeitliche Entwicklung basierend auf der analytischen Lösung eine exakte ist, sollte die Zeitentwicklung mithilfe der STN nur dann verwendet werden, wenn bei hinreichender Übereinstimmung mit der exakten Zeitentwicklung eine geringere Anzahl an Gates⁸ benötigt wird. Zusätzlich zu der Laufzeit beeinflusst die Anzahl der Gates auch maßgeblich das nicht vermeidbare Rauschen auf realen Quantencomputern. Sie ist somit eine wichtige Größe bei der Entscheidung, welche Methode verwendet werden sollte. Für ein 4 Qubit-System benötigt die hier verwendete Implementierung der exakten Zeitentwicklung 72 Gates⁹. Der hier verwendete Quantenschaltkreis eines Trotter-Steps für P/A-BC benötigt für 4 Qubits 16 Gates¹⁰. Sei $\langle n_i \rangle(J, t)_{\text{Trott}}$ die mittlere Besetzungszahl des i -ten Qubits basierend auf der STN und $\langle n_i \rangle(J, t)_{\text{exakt}}$ die mittlere Besetzungszahl des i -ten Qubits basierend auf der exakten Zeitentwicklung, dann wird die durchschnittliche Abweichung der mittleren Besetzungszahlen beider Methoden definiert als:

$$\Delta \langle n \rangle(J, t, N_{\text{Trott}}) = \frac{1}{4} \left[\sum_{i=1}^4 \frac{1}{N_{\text{Trott}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{Trott}}} (|\langle n_i \rangle(J, \Delta t \cdot j)_{\text{Trott}} - \langle n_i \rangle(J, \Delta t \cdot j)_{\text{exakt}}|) \right] \quad (43)$$

Im Folgenden wird die Anzahl an Trotter-Steps variiert und $\Delta \langle n \rangle(J, t, N_{\text{Trott}})$ für verschiedene Zeiträume und Kopplungskonstanten bestimmt. Als Input-State wird $|0001\rangle$ verwendet. Aus den resultierenden Plots in Abb. 14 ist zu erkennen, dass für ein 4 Qubit-System die auf der STN basierende Methode nur für kleine $J \cdot t$ effizienter bei hinreichender Genauigkeit (als hinreichend wird hier $\Delta \langle n \rangle(J, t, N_{\text{Trott}}) < 0.05$ angenommen) ist. Es ist zu beachten, dass die Anzahl der benötigten Gates für beide Methoden unterschiedlich mit der Anzahl an Qubits ansteigt. Für die auf der STN basierende Implementierung steigt die Anzahl der benötigten Gates linear mit der Anzahl N der Qubits [6, Abschn. IV]. Bei der Implementierung basierend auf der analytischen Lösung ist der Zusammenhang abhängig von der Konnektivität der Qubits. Werden keine fSWAP-Gates benötigt, so steigt die Anzahl der benötigten Gates mit $N \log N$. Wird die maximale Anzahl an fSWAP-Gates benötigt, so ist die Abhängigkeit quadratisch N^2 [16]. Bei größer werdenden betrachteten System wird daher die Implementierung basierend auf der STN im Vergleich immer effizienter.

⁸ Es wird hier die Anzahl der in Qiskit verfügbaren Gates gezählt. Da alle hier verwendeten Gates in Qiskit verfügbar sind (vgl. [12]), ist keine weitere Aufspaltung notwendig.

⁹ Es ist zu beachten, dass die Anzahl der benötigten Gates je nach Quantencomputer abweicht, da die Anzahl und Position der benötigten fSWAP-Gates abhängig vom Quantencomputer ist.

¹⁰ Es ist zu beachten, dass eine Konnektivität der Qubits angenommen wurde, bei der keine zusätzlichen SWAP-Gates benötigt werden

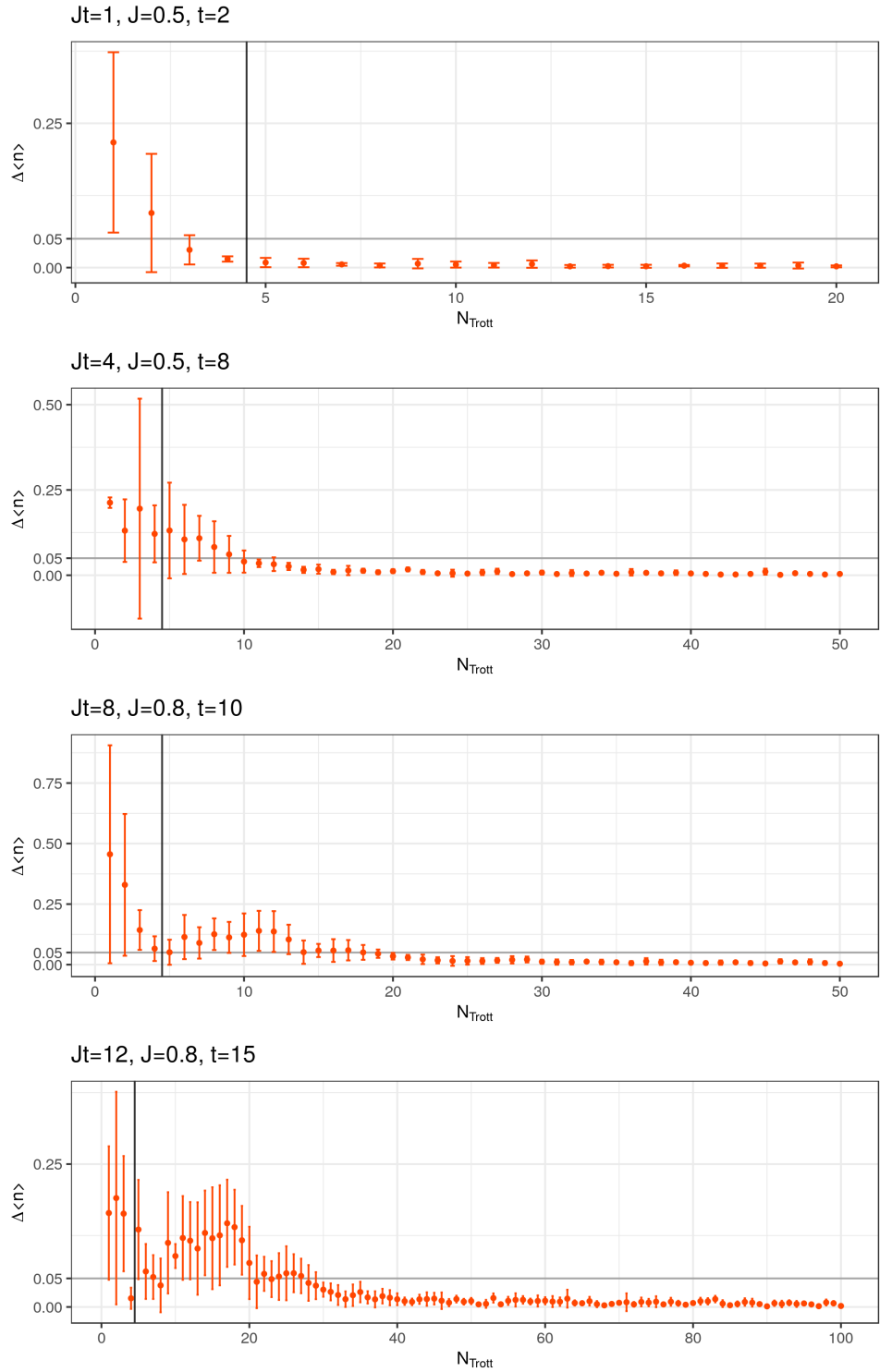


Abbildung 14: Abweichung der beiden Implementierung in Abhängigkeit von N_{Trott} für verschiedene $J \cdot t$. Nach dem vertikalen schwarzen Strich sind die Anzahl der benötigten Gates für die Implementierung basierend auf der STN größer.

4. Fazit

Für die Implementierung der Zeitentwicklung des QIM wurden zwei unterschiedliche Methoden verwendet. Deren Äquivalenz konnte aufgrund der resultierenden identischen Zeitverläufe der mittleren Besetzungszahl erfolgreich gezeigt werden. Für kleine Systeme ist im Falle von P/A-BC für so gut wie alle Zeitentwicklungen die Implementierung basierend auf der analytischen Lösung zu empfehlen. Die Zeitentwicklung mithilfe der Suzuki-Trotter-Näherung ist für große Systeme oder für kleine $t \cdot J$ geeignet. Für unterschiedliche Randbedingungen weichen die simulierten Zeitentwicklungen deutlich voneinander ab. Dies zeigt den bei kleinen Systemen großen Einfluss der Randbedingungen. Die Zeitentwicklung der mittleren Besetzungszahl wurde für verschiedene Kopplungsstärke J der Spins untereinander simuliert. Hiermit konnte gezeigt werden, dass die zeitliche Entwicklung der Besetzungszahl und damit des Input-States in der hier gewählten Basis durch die Kopplung der Spins untereinander getrieben wird.

A. Konstruktion des Quantenschaltkreises für einen Trotter-Step

Im Folgenden wird der Quantenschaltkreis für einen Trotter-Step

$$U_{\text{step}}(\Delta t) = e^{-iJ\Delta t \sum_i \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x} e^{-i\Gamma\Delta t \sum_i \sigma_i^z} = U_1(\Delta t) \cdot U_2(\Delta t)$$

konstruiert. Die Implementierung von $U_2(\Delta t)$ ist hierbei trivial und wird durch R_Z -Gates realisiert. Für die Implementierung von $U_1(\Delta t)$ wird zunächst die Quantenschaltkreis eines Zeitentwicklungsoperator der Form

$$\hat{U} = e^{-i\Delta t [Z_1 \otimes Z_2 \dots \otimes Z_L]} \quad (44)$$

betrachtet. Die Wirkung dieses Zeitentwicklungsoperator auf das Systems wird allein durch die Parität der L-Bits festgelegt [3, Abschn. 4.7.3]. Bei positiver Parität (gerade Anzahl an $|1\rangle$ Zuständen), entspricht der Zeitentwicklungsoperator einer Phasenverschiebung von $e^{-i\Delta t}$, bei negativer Parität (ungerade Anzahl an $|1\rangle$ Zuständen) einer Phasenverschiebung von $e^{i\Delta t}$. Dies folgt aus dem Einsetzen der Eigenwerten der einzelnen σ_i^z Matrizen:

$$\sigma_z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (45)$$

$$\sigma_z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (46)$$

Der Quantenschaltkreis für den Spezialfall $L = 2$ ist in Abb. 15 dargestellt. Mit dem wohlbekannten Hadamard-Gate H und den folgenden Relationen

$$HH = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \mathbb{1} \quad (47)$$

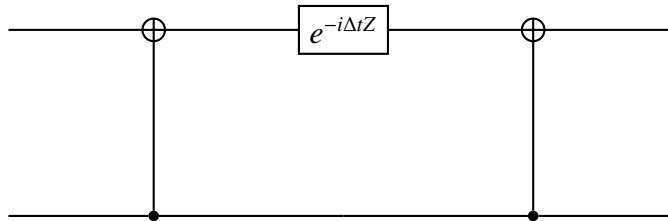


Abbildung 15: Quantenschaltkreis für die Implementierung des Zeitentwicklungsoperators $\hat{U} = e^{-i\Delta t [Z_1 \otimes Z_2]}$.

$$\begin{aligned}
HZH &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} = X
\end{aligned} \tag{48}$$

ergibt sich:

$$\begin{aligned}
e^{X_i \otimes X_{i+1}} &= e^{[H_i Z_i H_i] \otimes [H_{i+1} Z_{i+1} H_{i+1}]} \\
&= \mathbb{1} + [H_i Z_i H_i] \otimes [H_{i+1} Z_{i+1} H_{i+1}] + \frac{1}{2} ([H_i Z_i H_i] \otimes [H_{i+1} Z_{i+1} H_{i+1}])^2 \\
&\quad + \frac{1}{4} ([H_i Z_i H_i] \otimes [H_{i+1} Z_{i+1} H_{i+1}])^3 + \dots \\
&= \mathbb{1} + [H_i Z_i H_i] \otimes [H_{i+1} Z_{i+1} H_{i+1}] \\
&\quad + \frac{1}{2} ([H_i Z_i H_i H_i Z_i H_i] \otimes [H_{i+1} Z_{i+1} H_{i+1} H_{i+1} Z_{i+1} H_{i+1}]) \\
&\quad + \frac{1}{4} ([H_i Z_i H_i H_i Z_i H_i H_i Z_i H_i] \otimes [H_{i+1} Z_{i+1} H_{i+1} H_{i+1} Z_{i+1} H_{i+1} H_{i+1} Z_{i+1} H_{i+1}]) \\
&\quad + \dots \\
&= \mathbb{1} + [H_i Z_i H_i] \otimes [H_{i+1} Z_{i+1} H_{i+1}] \\
&\quad + \frac{1}{2} ([H_i Z_i Z_i H_i] \otimes [H_{i+1} Z_{i+1} Z_{i+1} H_{i+1}]) \\
&\quad + \frac{1}{4} ([H_i Z_i Z_i Z_i H_i] \otimes [H_{i+1} Z_{i+1} Z_{i+1} Z_{i+1} H_{i+1}]) + \dots \\
&= H_i \otimes H_{i+1} \left[\mathbb{1} + Z_i \otimes Z_{i+1} + \frac{1}{2} ([Z_i Z_i] \otimes [Z_{i+1} Z_{i+1}]) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{4} ([Z_i Z_i Z_i] \otimes [Z_{i+1} Z_{i+1} Z_{i+1}]) + \dots \right] H_i \otimes H_{i+1} \\
&= H_i \otimes H_{i+1} e^{Z_i \otimes Z_{i+1}} H_i \otimes H_{i+1}
\end{aligned} \tag{49}$$

Unter Verwendung der zuvor hergeleiteten Implementierung von $e^{-i\Delta t [Z_1 \otimes Z_2]}$ folgt hieraus der in Abb. 16 dargestellte Quantenschaltkreis für $e^{-i\Delta t [X_1 \otimes X_2]}$. Die Anzahl der benötigten Gates kann jedoch noch weiter reduziert werden. Sei $[H_i \otimes H_{i+1}] \cdot C_{\text{NOT}}(c, t) \cdot [H_i \otimes H_{i+1}] =$

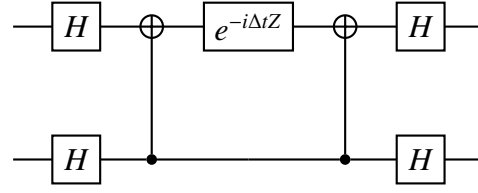


Abbildung 16: Ineffizienter Quantenschaltkreis für die Implementierung des Zeitentwicklungsoptors $\hat{U} = e^{-i\Delta t [X_1 \otimes X_2]}$.

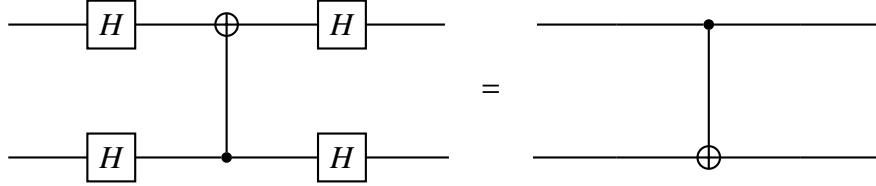


Abbildung 17: Flip des CNOT Gates mithilfe von 4 Hadamard Gates.

$H_{4 \times 4} C_{\text{NOT}}^{c,t} H_{4 \times 4}$, dann gilt:

$$\begin{aligned}
 H_{4 \times 4} C_{\text{NOT}}^{i+1,i} H_{4 \times 4} &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \\
 &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \end{pmatrix} = C_{\text{NOT}}^{i,i+1} \tag{50}
 \end{aligned}$$

Hieraus folgt die in Abb. 17 dargestellte Äquivalenz. Ausgehend von dem in Abb. 16 dargestellten Quantenschaltkreis ergibt sich hiermit die in Abb. 18 dargestellte Implementierung von $e^{-i\Delta t [X_1 \otimes X_2]}$ und damit der Quantenschaltkreis für $U_1(\Delta t)$.

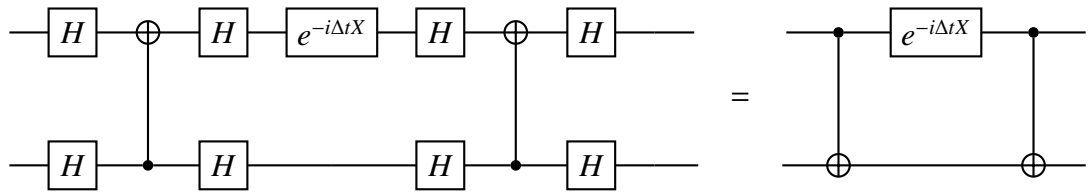


Abbildung 18: Effizienter Quantenschaltkreis für die Implementierung des Zeitentwicklungsoperators $\hat{U} = e^{-i\Delta t [X_1 \otimes X_2]}$.

B. Analytische Lösung des Quanten-Ising-Modells

Die im Folgenden dargestellte analytische Lösung basiert auf [10].

B.1. Jordan-Wigner-Transformation

Sei σ_j^α mit $\alpha = x, y, z$ die Pauli-Matrix des Gitterplatzes α eines Spin-1/2 -Systems. Dann gilt [9, §55]:

$$\begin{aligned} [\sigma_i^\alpha, \sigma_j^{\alpha'}] &= 0 \quad \text{für } i \neq j \\ [\sigma_i^\alpha, \sigma_i^{\alpha'}] &= 2i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{\alpha\alpha'k} \sigma_i^k \\ \{\sigma_i^\alpha, \sigma_i^{\alpha'}\} &= 2\delta_{\alpha\alpha'} \mathbb{1} \end{aligned} \quad (51)$$

Vergleicht man diese mit den Kommutatorrelationen der zweiten Quantelung von Fermionen (i und j charakterisieren hier die Zustände des Systems) [9, §65]

$$\begin{aligned} \{a_i, a_j\} &= \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0 \\ \{a_i, a_j^\dagger\} &= \delta_{ij} \end{aligned} \quad (52)$$

und Bosonen [9, §64]

$$\begin{aligned} [a_i, a_j] &= [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \\ [a_i, a_j^\dagger] &= \delta_{ij} \end{aligned} \quad (53)$$

so erkennt man, dass Spin-Systeme weder Bosonen noch Fermionen sind. Ziel der Jordan-Wigner-Transformation (JWT) ist es, das eindimensionale vorhandene Spin-System so zu transformieren, dass es durch Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für Fermionen und deren Algebra beschrieben werden kann.

Seien $|0\rangle = |\uparrow\rangle_i$ und $|1\rangle = |\downarrow\rangle$ die Eigenfunktionen der σ_i^z Matrix. Für die Spin Auf- und Absteigeoperatoren

$$\sigma_i^\pm = \frac{1}{2}(\sigma_i^x \pm i\sigma_i^y) \quad (54)$$

mit $\sigma_i^+ |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$ und $\sigma_i^- |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle$ folgen aus den Kommutatorrelationen in Gl. 51:

$$\begin{aligned} \{\sigma_i^+, \sigma_i^-\} &= 1 \\ \{\sigma_i^+, \sigma_i^+\} &= \{\sigma_i^-, \sigma_i^-\} = 0 \\ [\sigma_i^+, \sigma_j^-] &= [\sigma_i^+, \sigma_j^+] = [\sigma_i^-, \sigma_j^-] = 0 \quad i \neq j \end{aligned} \quad (55)$$

Allein die Kommutatorrelationen für verschiedene Gitterplätze entsprechen nicht denen von Fermionen. Seien c_i^\dagger, c_i die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für spinlose

Fermionen (erfüllen Gl. 52). Dann gelten nach Jordan und Wigner durch Einführung des Faktors

$$K_i = e^{i\pi \sum_{j=1}^{i-1} n_j} = \prod_{j=1}^{i-1} (1 - 2n_j) \quad \text{mit} \quad n_i = c_i^\dagger c_i \quad (56)$$

im eindimensionalen Fall die folgenden Relationen [10, Gl. 5]:

$$\sigma_i^+ = K_i c_i \quad \sigma_i^- = c_i^\dagger K_i^\dagger \quad (57)$$

K_i bestimmt dabei die Parität des Spin-Systems (gerade / ungerade Anzahl $|\uparrow\rangle$) vor dem Gitterplatz i (vgl. Abb. 19). Aus $[n_i, c_j] = -\delta_{ij} a_i$ und $[n_i, c_j^\dagger] = \delta_{ij} a_i^\dagger$ folgt:

$$[c_i, K_i] = [c_i^\dagger, K_i] = 0 \quad (58)$$

Ebenso gilt offensichtlich:

$$K_i = K_i^\dagger \quad (59)$$

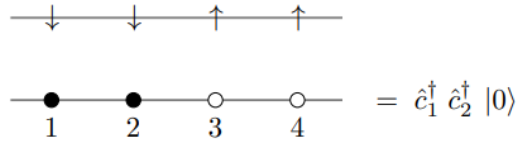


Abbildung 19: Beispielhafte JWT eines $N = 4$ Spin-System in ein System spinloser Fermionen [10, Abb. 1].

Jordan-Wigner-Transformation (1-D)

Aus

$$\sigma_i^\pm = \frac{1}{2}(\sigma_i^x \pm i\sigma_i^y), \quad \sigma_i^+ = K_i c_i \quad \sigma_i^- = K_i^\dagger c_i^\dagger, \quad |\uparrow\rangle = |0\rangle \quad |\downarrow\rangle = |1\rangle$$

und mithilfe der Relationen in Gl. 58, 59 ergibt sich:

$$\begin{aligned} \sigma_i^x &= K_i(c_i^\dagger + c_i) \\ \sigma_i^y &= K_i(c_i^\dagger - c_i) \quad \text{mit} \quad K_i = \prod_{j=1}^{i-1} (1 - 2n_j) \\ \sigma_i^z &= 1 - 2n_i \end{aligned} \quad (60)$$

Mithilfe der JWT und nach den folgenden Rechenschritten (es ist zu beachten, dass

$[c_i, K_{i+1}] \neq 0, [c_i^\dagger, K_{i+1}] \neq 0$:

$$\begin{aligned} K_i^2 &= \prod_{j=1}^{i-1} (1 - 2n_j) \cdot \prod_{k=1}^{i-1} (1 - 2n_k) = \prod_{j=1}^{i-1} (1 - 2n_j)^2 \\ &= \prod_{j=1}^{i-1} (4n_j^2 - 4n_j + 1) = \prod_{j=1}^{i-1} 1 = 1 \end{aligned} \quad (61)$$

$$\begin{aligned} K_i K_{i+1} &= \prod_{j=1}^{i-1} (1 - 2n_j) \cdot \prod_{k=1}^i (1 - 2n_k) \\ &= \prod_{j=1}^{i-1} (1 - 2n_j)^2 \cdot (1 - 2n_i) = (1 - 2n_i) \end{aligned} \quad (62)$$

$$\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x = (c_i^\dagger + c_i)(1 - 2n_i)(c_{i+1}^\dagger + c_{i+1}) \quad (63)$$

$$c_i^\dagger (1 - 2n_i) c_{i+1}^\dagger = c_i^\dagger (1 - c_i^\dagger c_i) c_{i+1}^\dagger = c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger \quad (64)$$

$$c_i^\dagger (1 - 2n_i) c_{i+1} = c_i^\dagger (1 - c_i^\dagger c_i) c_{i+1} = c_i^\dagger c_{i+1} \quad (65)$$

$$c_i (1 - 2n_i) c_{i+1} = -c_i (1 - c_i c_i^\dagger) c_{i+1} = -c_i c_{i+1} = c_{i+1} c_i \quad (66)$$

$$c_i (1 - 2n_i) c_{i+1}^\dagger = -c_i (1 - c_i c_i^\dagger) c_{i+1}^\dagger = c_{i+1}^\dagger c_i \quad (67)$$

lässt sich nun der Hamiltonian des 1-Dimensionalen QIM (P/A-BC) umformen in

$$\mathcal{H}_{\text{P/A-BC}} = -J \sum_{i=1}^{L-1} (c_i^\dagger c_{i+1} + c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger + \text{H.c.}) \pm J(-1)^{\hat{N}} (c_L^\dagger c_1 + c_L^\dagger c_1^\dagger + \text{H.c.}) + \Gamma \sum_{i=1}^L (2n_i - 1) \quad (68)$$

Hierbei ist zu beachten, dass die auf das System von Fermionen wirkenden Randbedingungen abhängig von der Anzahl \hat{N} der Fermionen sind [10, Abschn. 2].

B.2. Fourier-Transformation

Der nächste Schritt ist es, in den Impulsraum zu wechseln. Hierzu werden die fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren mithilfe der wohlbekannten Fourier-Transformation transformiert:

$$b_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=1}^L e^{-ikj} c_j \quad (69)$$

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikj} b_k \quad (70)$$

Im Folgenden wird die Anzahl der Fermionen \hat{N} analog zu [2, Abschn. 2.2] immer so angenommen, dass die Randbedingungen aus Sicht der Fermionen PBC entsprechen. Ebenso wird analog zu [10, Abschn. 3] L als gerade angenommen. Für den eindimensionalen

Wellenvektor k gilt deshalb [10, Gl. 34]:

$$k = \frac{2n\pi}{L} \quad \text{mit} \quad n = -\frac{L}{2} + 1, \dots, \frac{L}{2} \quad (71)$$

Hiermit folgt für den Hamiltonian:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{P/A-BC}} = & -J \sum_{j=1}^L \left[\frac{1}{L} \sum_k e^{-ikj} b_k^\dagger \sum_{k'} e^{ik'(j+1)} b_{k'} + \frac{1}{L} \sum_k e^{-ikj} b_k^\dagger \sum_{k'} e^{-ik'(j+1)} b_{k'}^\dagger \right. \\ & + \frac{1}{L} \sum_k e^{-ik(j+1)} b_k^\dagger \sum_{k'} e^{ik'j} b_{k'} + \frac{1}{L} \sum_k e^{ik(j+1)} b_k \sum_{k'} e^{ik'j} b_{k'} \left. \right] \\ & + \Gamma \sum_{j=1}^L \left[\frac{2}{L} \sum_k e^{-ikj} b_k^\dagger \sum_{k'} e^{ik'j} b_{k'} - 1 \right] \end{aligned} \quad (72)$$

Unter Anwendung der Reihendarstellung des Kronecker-Delta [13, Abschn. 7.1]

$$\frac{1}{L} \sum_{j=1}^L e^{-i(k-k')j} = \delta_{k,k'} \quad \text{für} \quad k = \frac{2\pi}{L}n, n \in \mathbb{N} \quad (73)$$

lässt sich dies vereinfachen zu:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{P/A-BC}} = & -J \sum_k \left[b_k^\dagger e^{ik} b_k + b_k^\dagger e^{ik} b_{-k}^\dagger + e^{-ik} b_k^\dagger b_k + e^{ik} b_k b_{-k} \right] + \Gamma \sum_k \left[2b_k^\dagger b_k - 1 \right] \\ = & \sum_k \left[2(\Gamma - J \cos k) b_k^\dagger b_k - J e^{ik} (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_k b_{-k}) - \Gamma \right] \end{aligned} \quad (74)$$

Mit

$$\begin{aligned} \sum_k (b_k b_{-k} + b_k^\dagger b_{-k}^\dagger) e^{ik} &= \frac{1}{L} \sum_{n=-L/2+1}^{L/2} \left[\sum_{j=1}^L e^{-i\frac{2\pi}{L}j} c_j \sum_{t=1}^L e^{i\frac{2\pi}{L}t} c_t \right] e^{-i\frac{2\pi}{L}n} \\ &= \frac{1}{L} \sum_{n=-L/2}^{L/2-1} \left[\sum_{j=1}^L e^{i\frac{2\pi}{L}j} c_j \sum_{t=1}^L e^{-i\frac{2\pi}{L}t} c_t \right] e^{-i\frac{2\pi}{L}n} \\ &= \frac{1}{L} \sum_{n=-L/2+1}^{L/2} \left[\sum_{j=1}^L e^{i\frac{2\pi}{L}j} c_j \sum_{t=1}^L e^{-i\frac{2\pi}{L}t} c_t \right] e^{-i\frac{2\pi}{L}n} \\ &\quad + \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L e^{-ij\pi} c_j \sum_{t=1}^L e^{it\pi} c_t - \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L e^{ij\pi} c_j \sum_{t=1}^L e^{-it\pi} c_t \\ &= \frac{1}{L} \sum_{n=-L/2+1}^{L/2} \left[\sum_{j=1}^L e^{i\frac{2\pi}{L}j} c_j \sum_{t=1}^L e^{-i\frac{2\pi}{L}t} c_t \right] e^{-i\frac{2\pi}{L}n} \\ &= \sum_k (b_{-k} b_k + b_{-k}^\dagger b_k^\dagger) e^{-ik} = - \sum_k (b_k b_{-k} + b_k^\dagger b_{-k}^\dagger) e^{-ik} \end{aligned} \quad (75)$$

lässt sich der Hamiltonian weiter umformen in:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{P/A-BC}} &= \sum_k \left[2(\Gamma - J \cos k) b_k^\dagger b_k - J e^{ik} (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_k b_{-k}) - \Gamma \right] \\
&= \sum_k \left[2(\Gamma - J \cos k) b_k^\dagger b_k - \frac{1}{2} J (e^{ik} - e^{-ik}) (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_k b_{-k}) - \Gamma \right] \\
&= \sum_k \left[2(\Gamma - J \cos k) b_k^\dagger b_k - iJ \sin k (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_k b_{-k}) - \Gamma \right] \quad (76)
\end{aligned}$$

B.3. Bogoliubov-Transformation

Der letzte Schritt der Diagonalisierung ist das Entkoppeln negativer und positiver Momenta. Dies wird durch eine sogenannte Bogoliubov-Transformation erreicht. Analog zu [16, Gl. 14] werden hierzu die folgenden Operatoren definiert:

$$a_k = u_k b_k - i v_k b_{-k}^\dagger \quad (77)$$

$$a_k^\dagger = u_k b_k^\dagger + i v_k b_{-k} \quad (78)$$

Damit die in Gl. 77 und 78 definierten Operatoren weiterhin die Kommutatorrelationen für Fermionen (siehe Gl. 52) erfüllen, werden u_k und v_k definiert als¹¹ (vgl. [10, Gl. 58]):

$$u_k = \cos \frac{\theta_k}{2} \quad v_k = \sin \frac{\theta_k}{2} \quad (80)$$

wobei für den Parameter $\theta_k \in \mathbb{R}$ in Gl. 80 gilt:

$$\theta_{-k} = -\theta_k \quad (81)$$

Die inverse Transformation ergibt sich aus:

$$a_k = u_k b_k - i v_k b_{-k}^\dagger \quad a_{-k}^\dagger = u_k b_{-k}^\dagger - i v_k b_k \quad (82)$$

$$\Leftrightarrow u_k a_k = u_k^2 b_k - i u_k v_k b_{-k}^\dagger \quad i v_k a_{-k}^\dagger = i v_k u_k b_{-k}^\dagger + v_k^2 b_k \quad (83)$$

$$\Leftrightarrow u_k a_k + i v_k a_{-k}^\dagger = (u_k^2 + v_k^2) b_k = b_k \quad (84)$$

$$\Leftrightarrow u_k a_{-k} - i v_k a_k^\dagger = b_{-k} \quad (85)$$

¹¹ Aus der Definition ergeben sich die Relationen:

$$u_k^2 - v_k^2 = \cos \theta_k \quad 2u_k v_k = \sin \theta_k \quad v_k^2 = \frac{1}{2}(1 - \cos \theta_k) \quad (79)$$

welche im Folgenden benutzt werden.

Damit ergibt sich für den Hamiltonian:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{PBC}} = & \sum_k \left\{ 2(\Gamma - J \cos k) [iv_k u_k (a_k^\dagger a_{-k}^\dagger - a_{-k} a_k)] \right. \\
& - iJ \sin k (u_k^2 a_k^\dagger a_{-k}^\dagger + u_k^2 a_k a_{-k} + v_k^2 a_{-k} a_k + v_k^2 a_{-k}^\dagger a_k^\dagger) \Big\} \\
& + \sum_k \left\{ 2(\Gamma - J \cos k) (u_k^2 a_k^\dagger a_k + v_k^2 a_{-k} a_{-k}^\dagger) \right. \\
& \left. - iJ \sin k [iv_k u_k (a_k^\dagger a_k - a_{-k} a_{-k}^\dagger + a_{-k}^\dagger a_{-k} - a_k a_k^\dagger)] - \Gamma \right\} \quad (86)
\end{aligned}$$

Analog zu der Umformung in Gl. 76 gelten wegen der symmetrischen Verteilung der k-Werte die folgenden Relationen:

$$\sum_k a_{-k} a_{-k}^\dagger = \sum_k a_k a_k^\dagger \quad (87)$$

$$\sum_k a_{-k}^\dagger a_{-k}^\dagger = \sum_k a_k^\dagger a_k^\dagger \quad (88)$$

Mit den Umformungen in Gl. 87, 88 und den Kommutatorrelationen in Gl. 52 ergibt sich für den Hamiltonian:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{PBC}} = & i \sum_k \left\{ [2(\Gamma - J \cos k) v_k u_k - J \sin k (u_k^2 - v_k^2)] a_k^\dagger a_{-k}^\dagger \right\} - \text{H.c.} \\
& + \sum_k \left\{ [2(\Gamma - J \cos k) (u_k^2 - v_k^2) + 4J u_k v_k \sin k] a_k^\dagger a_k \right. \\
& \left. - 2J u_k v_k \sin k + 2(\Gamma - J \cos k) v_k^2 - \Gamma \right\} \quad (89)
\end{aligned}$$

Damit der Hamiltonian in Gl. 89 eine diagonale Form annimmt, müssen die Terme, in denen positives und negatives Momenta gekoppelt sind, verschwinden. Dies ist gegeben, wenn θ_k folgende Bedingung erfüllt (hierfür werden die Relationen in Gl. 79 benutzt):

$$2(\Gamma - J \cos k) v_k u_k = J \sin k (u_k^2 - v_k^2) \quad (90)$$

$$\Leftrightarrow \tan \theta_k = \frac{J \sin k}{\Gamma - J \cos k} \quad (91)$$

$$\Leftrightarrow \cos \theta_k = \frac{\Gamma - J \cos k}{\sqrt{(\Gamma - J \cos k)^2 + J^2 \sin^2 k}} \quad (92)$$

Hieraus folgt:

$$\mathcal{H}_{\text{PBC}} = \sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k + C \quad (93)$$

Wobei unter Berücksichtigung der Relationen in Gl. 79 für ϵ_k und C gilt:

$$\epsilon_k = 2[(\Gamma - J \cos k) \cos \theta_k + J \sin \theta_k \sin k] \quad (94)$$

$$C = \sum_k [(\Gamma - \cos k)(1 - \cos \theta_k) - J \sin k \sin \theta_k - \Gamma] \quad (95)$$

Mit der Relation:

$$\begin{aligned}
\sum_{n=-L/2+1}^{L/2} \cos\left(\frac{2\pi}{L}n\right) &= \sum_{n=-L/2+1}^0 \cos\left(\frac{2\pi}{L}n\right) + \sum_{n=1}^{L/2} \cos\left(\frac{2\pi}{L}n\right) \\
&= \sum_{n=1}^{L/2-1} \cos\left(\frac{2\pi}{L}n\right) + \sum_{n=1}^{L/2-1} \cos\left(\frac{2\pi}{L}n\right) \\
&= \sum_{n=1}^{L/2-1} \cos\left(\frac{2\pi}{L}n\right) - \sum_{n=1}^{L/2-1} \cos\left(\frac{2\pi}{L}n - 2\pi\frac{L}{2L}\right) \\
&= \sum_{n=1}^{L/2-1} \cos\left(\frac{2\pi}{L}n\right) - \sum_{n=1}^{L/2-1} \cos\left(\frac{2\pi}{L}\left(\frac{L}{2} - n\right)\right) \\
&= \sum_{n=1}^{L/2-1} \cos\left(\frac{2\pi}{L}n\right) - \sum_{m=1}^{L/2-1} \cos\left(\frac{2\pi}{L}m\right) \quad \text{mit } m = L/2 - n \\
&= 0
\end{aligned} \tag{96}$$

lässt die Konstante C umformen in:

$$C = - \sum_k [(\Gamma - J \cos k) \cos \theta_k + J \sin k \sin \theta_k + \cos k] = -\frac{1}{2} \sum_k \epsilon_k \tag{97}$$

Hieraus folgt der finale Hamiltonian:

$$\mathcal{H}_{\text{P/A-BC}} = \sum_k \epsilon_k (a_k^\dagger a_k - \frac{1}{2}) \tag{98}$$

wobei für ϵ_k mit den Umformungen in Gl. 91 und 92 gilt:

$$\epsilon_k = 2 \sqrt{(\Gamma - J \cos k)^2 + J^2 \sin^2 k} \tag{99}$$

Literatur

- [1] Rüdiger Achilles und Andrea Bonfiglioli. „The early proofs of the theorem of Campbell, Baker, Hausdorff, and Dynkin“. In: *Archive for History of Exact Sciences* 66.3 (Mai 2012), S. 295–358. ISSN: 1432-0657. DOI: 10.1007/s00407-012-0095-8. URL: <https://doi.org/10.1007/s00407-012-0095-8>.
- [2] Alba Cervera-Lierta. „Exact Ising model simulation on a quantum computer“. In: *Quantum* 2 (Dez. 2018), S. 114. ISSN: 2521-327X. DOI: 10.22331/q-2018-12-21-114. URL: <https://doi.org/10.22331/q-2018-12-21-114>.
- [3] Michael A. Nielsen & Isaac L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information*. 10th Anniversary Edition. Cambridge University Press. ISBN: ISBN 978-1-107-00217-3.
- [4] Andrew J. Ferris. „Fourier Transform for Fermionic Systems and the Spectral Tensor Network“. In: *Physical Review Letters* 113.1 (Juli 2014). ISSN: 1079-7114. DOI: 10.1103/physrevlett.113.010401. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.010401>.
- [5] Richard P. Feynman. „Simulating physics with computers“. In: *International Journal of Theoretical Physics* 21.6 (Juni 1982), S. 467–488. ISSN: 1572-9575. DOI: 10.1007/BF02650179. URL: <https://doi.org/10.1007/BF02650179>.
- [6] Erik Gustafson, Y. Meurice und Judah Unmuth-Yockey. „Quantum simulation of scattering in the quantum Ising model“. In: *Physical Review D* 99.9 (Mai 2019). ISSN: 2470-0029. DOI: 10.1103/physrevd.99.094503. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevD.99.094503>.
- [7] Erik Gustafson u. a. *Benchmarking quantum computers for real-time evolution of a $(1+1)$ field theory with error mitigation*. 2021. arXiv: 1910.09478 [hep-lat].
- [8] W. Heisenberg. „Zur Theorie des Ferromagnetismus“. In: *Zeitschrift für Physik* 49.9 (Sep. 1928), S. 619–636. ISSN: 0044-3328. DOI: 10.1007/BF01328601. URL: <https://doi.org/10.1007/BF01328601>.
- [9] L.D.Landau. *Lehrbuch der theoretischen Physik 3: Quantenmechanik*. 7. Aufl. Harri Deutsch. ISBN: 978-3-8171-1327-9.
- [10] Glen Bigan Mbeng, Angelo Russomanno und Giuseppe E. Santoro. *The quantum Ising chain for beginners*. 2020. arXiv: 2009.09208v1 [quant-ph].
- [11] Qiskit. *Single Qubit Gates*. URL: <https://qiskit.org/textbook/ch-states/single-qubit-gates.html#5.-The-P-gate--> (besucht am 14.07.2021).
- [12] Qiskit. *Summary of Quantum Operations*. URL: https://qiskit.org/documentation/tutorials/circuits/3_summary_of_quantum_operations.html (besucht am 14.07.2021).

- [13] Prof. Dr. Friederike Schmid. *Mathematische Rechenmethoden*. 2010. URL: https://www.staff.uni-mainz.de/schmidfr/Lehre/MRM2_WS10/mrmtotal.pdf (besucht am 05.07.2021).
- [14] Masuo Suzuki. „General theory of fractal path integrals with applications to many-body theories and statistical physics“. In: *Journal of Mathematical Physics* 32.2 (1991), S. 400–407. DOI: 10.1063/1.529425. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.529425>. URL: <https://doi.org/10.1063/1.529425>.
- [15] Jens Teiser. *Jordan-Wigner-Lösung der XX-Spinkette*. 2005. URL: <https://perso.u-cergy.fr/~ahonecker/bs/semstat/ausarb/teiser.pdf> (besucht am 05.07.2021).
- [16] Frank Verstraete, J. Ignacio Cirac und José I. Latorre. „Quantum circuits for strongly correlated quantum systems“. In: *Physical Review A* 79.3 (März 2009). ISSN: 1094-1622. DOI: 10.1103/physreva.79.032316. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.79.032316>.
- [17] R. H. de Waard. „Bemerkungen über die Weissste Theorie des Ferromagnetismus“. In: *Zeitschrift für Physik* 32.1 (Dez. 1925), S. 789–793. ISSN: 0044-3328. DOI: 10.1007/BF01331714. URL: <https://doi.org/10.1007/BF01331714>.

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt, sowie die Zitate kenntlich gemacht habe.

Bonn, den
Datum

.....
Unterschrift