Inhaltsverzeichnis

1 Vorbereitung **1**

2 IISER Mohali und Umgebung **3**

3 Land und Leute **4**

4 Fachliche Arbeit **7**

5 Bibliografie **14**

1 Vorbereitung

Ende Februar erhielt ich die Zusage vom DAAD für mein Praktikum im Bereich des Quantum Computings mittels Kernmagnetresonanz (nuclear magnetic resonance – NMR). Meine Betreuerin war Dr. Kavita Dorai, die als Professorin am Indian Institute of Science Education and Research (IISER) Mohali in Indien arbeitet. Dort fand auch das Praktikum statt.

Die Reise- und Sicherheitshinweise für Indien des Auswärtigen Amtes gaben mir einen hilfreichen ersten Überblick für Reisevorbereitungen und auch darüber hinaus lieferten sie detaillierte Informationen für viele weitere Fragen, die im Laufe meiner Planung auftraten. Hilfreich war auch der Newsletter des Auswärtigen Amtes für Indien.
Der erste Schritt meiner Reisevorbereitungen bestand darin, einen Reisepass zu beantragen und nach einige Wochen erhielt ich ihn vom zuständigen Gemeindeamt.
Auch machte ich mir rechtzeitig einen gründlichen Überblick über die Visums-Formalitäten auf der Website der indischen Botschaft in Berlin. Diese hat einen Teil der Visumsbeantragung ausgelagert: das Sammeln der Unterlagen übernimmt eine Firma (International Visa Service Europe GmbH), welche dann die vollständigen Papiere an das Konsulat weiterleitet. Mir wurde mitgeteilt, dass ein Visums-Antrag erst circa zwei Monate vor der geplanten Einreise sinnvoll ist, da Visa nicht zu weit im Voraus vergeben werde. Nichtsdestotrotz kann man die notwendigen Dokumente schon zusammensammeln, welche eingereicht werden müssen. Allerdings war es zunächst etwas schwierig herauszufinden, welchen Visumstyp ich überhaupt beantragen sollte. Doch nach einigen Telefonaten wurde klar, dass ich ein Student Visa brauchte. Obwohl ich mit meiner Planung zeitlich weit voraus war, hatte ich nicht mit dem bürokratischen Aufwand gerechnet, welcher mein Visumsantrag in Indien auslösen sollte. So wartete ich mehrere Monate auf ein Dokument des Direktors des IISER Mohali aus Indien. Nur sechs Tage vor meiner geplanten Abreise erhielt ich mein Visum. Ob das mit mehr Druck von außen schneller gegangen wäre, kann ich nicht beurteilen.
Weiterhin kümmerte ich mich um eine Kreditkarte, die ich bei meiner Bank beantragte. Sie stellte sich als unabdingbar während meiner gesamten Zeit in Indien heraus. Vorort in Indien zeigte sich, dass kleinere Läden oft nur Bargeld nehmen, während es dagegen in Shopping Malls keine Probleme gibt, mit Karte zu bezahlen - manchmal ist es sogar die einzige Zahloption. Geldautomaten (ATMs) waren gut verfügbar, einer befand sich auch auf dem Gelände von IISER. Man zahlt jedoch extra Gebühren, um Geld abzuheben.
Ein weiterer Punkt auf meiner Liste war der Gang zu einem Tropenmediziner, welcher medizinische Beratung und Impfungen für das Reiseland durchführen kann. Geprüfte Anlaufstellen konnte ich online auf der Website des Robert-Koch-Instituts einsehen.
An dieser Stelle sei auch an die Zusammenstellung einer Reiseapotheke erinnert. Ich habe mich dabei von meiner Hausärztin beraten lassen, da einige notwendigen Medikamente nur mit ärztlicher Verschreibung erhältlich sind. Neben den „normalen“ Notfallmedikamenten habe ich auch Insektensprays für Haut und Kleidung, Desinfektionsmittel für

Haut und Oberflächen und Desinfektionstücher sowie einige Packungen Taschentücher (nicht sehr üblich in Indien) mitgenommen. Ein Moskitonetz gehörte ebenso zu meinem Reisegepäck, wurde aber in Indien nicht benötigt. Das Zimmer, in dem ich schlief, besaß eine Klimaanlage und Mückengitter vor den Fenstern. Dort ist es üblich, Duftzerstäuber für die Nacht zu benutzen (ein kleines Gerät, welches man in die Steckdose steckt). Insgesamt hatte ich auf diese Weise keine Probleme mit Mosquitos in meinem Zimmer.
Da das DAAD-Stipendium auch eine Kranken-, Haft- und Unfallversicherung für die Zeit im Ausland umschließt, welche mit Zusage zum Stipendium abgeschlossen werden, war ich versicherungstechnisch während des Praktikums abgesichert. Meine eigene deutsche Krankenversicherung blieb während des Auslandsaufenthalts bestehen.
In den Monaten Juni bis September ist Regenzeit in Indien, es ist sehr heiß und feucht- im Süden des Landes noch mehr als im Norden, wie in Mohali beispielweise. Meine Kleidung passte ich also daran an. Ich habe vorallem helle, dünne und weite Kleidung aus Baumwolle mitgenommen, einige Kleidungsstücke jedoch auch Vorort gekauft. Dies hat den Vorteil, dass man erstens weniger mitnehmen muss, zweitens die Preise in Indien niedriger sind und vor allem drittens, die Kleidungsstücke dann auch meist geeigneter für das indische Klima sind, als wenn man Sachen aus Deutschland mitbringt. Da in Indien in Innenräumen oft auf $16-20°C$ heruntergekühlt wird, es draußen während der Regenzeit jedoch stets über 30°C warm ist, sollte man definitiv auch mindestens eine Jacke mitnehmen. Langärmelige Baumwollhemden/-blusen sind sehr empfehlenswert, weil sie nicht nur dünn und damit luftig sind, sondern auch vor Sonne und Mosquitos schützen.
Alle Studierende und Doktoranden des IISER Mohali wohnen in Hostels auf dem Campus. Ich hatte über meine Betreuerin ein Zimmer mit angrenzendem Bad und Dusche im „visitor's hostel“ für etwa 10 Euro pro Tag organisiert. Dies ist zwar vergleichsweise teuer, war aber die einzige Möglichkeit, auf dem Campus zu wohnen. Außerdem war es zuzeiten angenehm, ein Zimmer für sich zu haben, besonders wenn man krank ist oder für sich sein möchte. Waschmaschinen waren in den Hostels auch verfügbar.
Den Flug buchte ich eine Woche davor - aufgrund der Schwierigkeiten mit dem Visum. Je nach Flugunternehmen und Buchungszeitpunkt variieren die Preise für Flüge. Ich hatte Glück und konnte mit der Fluggesellschaft Air India mit nur einem Zwischenstopp in Delhi von Frankfurt aus relativ günstig nach Chandigarh fliegen. Mohali ist Teil einer „tricity area“ - zusammen mit Chandigarh und Panchkula. Vom Flughafen Chandigarh aus dauert es nur etwa eine halbe Stunde mit dem Auto bis zum Campus des IISER. Den Rückflug organisierte ich in Indien, da ich mir noch zeitlichen Spielraum für zusätzliches Sightseeing, Reisen im Land etc. lassen wollte. Für den Flug zurück nach Deutschland konnte ich eine ähnliche Flugverbindung wie für den Hinflug buchen.
Außerdem habe ich mich auch in die Datenbank deutscher Staatsangehöriger im Ausland (ELEFAND) eingetragen, ein Angebot des Auswärtigen Amtes.

Campus des IISER Mohali: Student Hostels und Community Centre. Fotografiert vom visitors hostel

2 IISER Mohali und Umgebung

Das Indian Institute of Science Education and Research (IISER) Mohali hat einen circa 50 ha großen, sehr grünen und gepflegten Campus. Dort finden sich neben den Unterkünften der Studenten, Bibliothek, Vorlesungs- und Forschungsgebäuden mit Laboren auch zwei kleine Läden, ein Friseur, einige Cafeterien sowie ein Restaurant. Alltägliche Besorgungen, wie Schreibwaren, Seife oder Kekse, lassen sich dort erledigen.
Jedes der vier Student Hostels besitzt seine eigene Kantine - in Indien wird sie „mess“ genannt. Dort bezahlt man für 40 Rupees pro Mahlzeit, welche immer aus Reis, Roti/Chapati, Dal, Curd (eine Art flüssiger Joghurt), einer anderen Soße, die täglich wechselt, sowie Salat besteht. Dabei sei an dieser Stelle angemerkt, dass Inder unter Salat meist Gurke, Zwiebeln und, je nach Saison, rohe rote Beete verstehen. Das Essen ist immer vegetarisch, und wird auch ohne Eier zubereitet, die von vielen Vegetariern auch nicht gegessen werden. Am Sonntag und Freitag gibt es daher auch immer ein extra Ei- bzw. Fleischgericht. Durch die Linsen und anderen Hülsenfrüchte ist das Essen jedoch auch ohne Fleischzulage ausgewogen. Allein frisches Obst und Gemüse habe ich manchmal vermisst. Obst lässt sich aber in den Campus-Läden, als Fruchtsaft zum Beispiel, oder auf dem Fruchtmarkt in Chandigarh kaufen.
Daneben gibt es im IISER Mohali mehrere Clubs, die Kulturveranstaltungen oder Exkursionen organisieren. So gibt es Literatur- und verschiedene Science Clubs. Am Ende meiner Zeit im IISER Mohali konnte ich durch Unterstützung des hiesigen Physics Clubs auch einen Vortrag über das Studium in Deutschland und das DAAD Programm halten. Außerdem gibt es Angebote zum gemeinsamen Musizieren oder zu traditionell indischen

Tänzen. Auch einige Sportarten werden angeboten und angeleitet, wie etwa Taekwondo oder Yoga. Da IISER die Kosten übernimmt, bezahlt man keine Teilnahmegebühren. Einige Studenten treffen sich regelmäßig, um Fußball, Cricket, Badminton, Tischtennis oder Basketball auf den Sportanlagen auf dem Campus zu spielen, vorwiegend abends - was auch durch die Temperaturen tagsüber bedingt ist. Ich selbst habe das tägliche Yoga-Angebot wahrgenommen und freue mich, dass ich die Möglichkeit hatte, einen Einblick in diesen traditionell indischen, meditativen Sport zu erhalten. Ich hatte vor meiner Ankunft in Mohali keine Informationen über die Sportangebote eingeholt und so blieben mein Badmintonschläger sowie meine Sportschuhe leider zuhause.
Etwa zwei Kilometer vom IISER Campus entfernt gibt es eine neu gebaute (2018 eröffnete) Shopping Mall, die bequem zu Fuß oder mit der Rikscha erreichbar ist. Ansonsten sind in Chandigarh einige Shoppingplätze, d.h. ein Parkplatz mit darum gebauten Läden, in der Stadt verteilt und man erreicht sie leicht mit Taxi oder dem institutseigenen Bus, welcher die Studenten mehrmals täglich zu solchen „markets“ fährt und wieder abholt. An den indischen und hinduistischen Feiertagen (denn auch christliche und muslimische Feiertage gelten im multi-religiösen Indien als offizielle Feiertage) gab es zum Teil Feierlichkeiten auf dem Campus, an denen ich auch teilnahm. Während ich auf dem IISER Mohali Campus lebte, wurden zum Beispiel der Independence Day mit einem von Studenten organisierten Abendprogramm gewürdigt oder Ganeshotsav, das Ganesha-Festival, für drei Tage Mitte September gefeiert.

3 Land und Leute

Einer meiner ersten Eindrücke in Indien war die Hilfsbereitschaft meiner Kollegen, die mir bei anfänglichen, alltäglichen Problemen zur Seite standen. Aber sie kümmerten sich auch um mich, als ich zu Beginn meiner Zeit in Indien eine Woche krank im Bett lag.
Ohne ihre Hilfe wäre es auch schwer möglich gewesen, den Registrierungsprozess bei der indischen Behörde erfolgreich zu bewältigen. Da auf meinem Visum von der indischen Botschaft vermerkt worden war, dass ich mich registrieren müsste, habe ich in den ersten zwei Wochen in Indien dem Foreigners Office in Mohali mehrere Besuche abgestattet. Da die Informationen der Website sich nicht mit denen des Officers vor Ort deckten, fühlten sich die geforderten Unterlagen willkürlich an. Aber auch eine Nachfrage bei der deutschen Botschaft in Delhi konnte die Ungewissheit über die tatsächlich benötigten Dokumente und eventuelle Registrierungskosten nicht beseitigen. So blieb mir denn der Eindruck von sehr undurchsichtiger Bürokratie, an die sich der einzelne anpassen muss. Die Kollegen, die mich während dieser Behördengänge begleiteten, waren jedoch viel entspannter als ich in Bezug auf die unnötig vielen Fahrten zum Foreigners Office und die teils widersprüchlichen Aussagen der Beamten und Behördenmeldungen.
Die großen sozialen und kulturellen Unterschiede in Indien fielen mir ebenso auf. In Chandigarh selbst finden sich verschiedene Religionen nebeneinander: Hinduismus, Sikhismus, Islam und Christentum. Kirchen habe ich dort nicht besucht, aber Hindu-Tempel

Geschmückter Hindu-Tempel in Chandigarh zum Festtag Janmashtami, der Geburt Krishnas, am 3.9.2018.

und Gurudwaras, die Tempel der Sikhs. Meist haben mich indische Freunde begleitet, die selber Sikhs oder Hindus sind. So habe ich auch einiges über diese Religionen lernen können. Am Feiertag der Geburt Krishnas (Janmashtami) ist oberes Bild entstanden.
Aber auch soziale Unterschiede sind offensichtlich, verlässt man den Campus des IISER Mohali. So habe ich durch Gespräche mit Doktoranden auch viele persönliche Geschichten erfahren, die zeigen, dass Ausbildung, und insbesondere Hochschulausbildung, keine Selbstverständlichkeit für alle sozialen Klassen in Indien ist. Die Herkunft, Familie und Religion spielen in Indien eine viel größere Rolle in der eigenen Selbstwahrnehmung und -verwirklichung als in Deutschland.
Ich habe gut Anschluss an meine Arbeitsgruppe gefunden, die vorwiegend aus Doktoranden bestand. Die Arbeitskultur dort ist eine andere als ich aus Deutschland gewohnt war. Es wird weniger von morgens bis abends, von Montag bis Freitag gearbeitet, sondern eher unregelmäßig, auch nachts und an den Wochenenden. Das machte es etwas schwierig für mich, die Umgebung (Chandigarh und nahe Orte) wirklich kennenzulernen, da ich mich über Begleitung gefreut hätte.
Glücklicherweise konnte ich nach Ablauf meines Praktikums noch mit einer anderen deutschen Praktikantin Delhi, Agra und Jaipur besuchen. Auf dieser einwöchigen Reise ist auch das untere Foto von der Pilgerstätte Galtaji in der Nähe von Jaipur entstanden. Die Reise hat bei mir bleibende Eindrücke hinterlassen, aber am Ende war ich froh, wieder auf dem IISER Mohali Campus zu sein, auf dem ich mich frei bewegen konnte, Freunde hatte und mich auskannte. Ohne die Begleitung durch Ortskundige oder Inder muss man etwas vorsichtig sein als europäischer Tourist, denn man wird ständig angesprochen und bedrängt. Tatsächlich hatte ich damit in Chandigarh überhaupt keine

Probleme, was sehr angenehm war. Und auch bezüglich der Infrastruktur ist Chandigarh wohl eine der modernsten Städte Indiens, wie mir von vielen Indern versichert wurde, als sie erfuhren, dass ich dort arbeitete.

Galtaji, eine Pilgerstätte in der Nähe Jaipurs mit mehreren Tempeln und heiligen Wasserbecken am Hügel gebaut, die von einer natürlichen Quelle gespeist werden. Dort leben auch Affen, weshalb die Tempelanlage ebenso unter dem Namen „monkey temple“ bekannt ist.

4 Fachliche Arbeit

Ich möchte auf den nächsten Seiten einen kurzen Überblick über das Forschungsthema meines Praktikums und meine Arbeit geben. Die Ausführungen sind weder detailliert noch gehe ich auf Herleitungen etc. ein. So habe ich mich bemüht, im nachfolgenden Text anschauliche Erklärungen zu verwenden.
In meinem Projekt ging es um Quantum State Tomography (kurz QST), also die Rekonstruktion erzeugter Quantenzustände im Experiment. Generell kann man Quantensysteme verschieden realisieren, durch Photonen zum Beispiel oder, wie in der NMR (nuclear magnetic resonance) Arbeitsgruppe meiner Betreuerin Dr. Kavita Dorai, durch Spins von Atomkernen. Diese können miteinander wechselwirken und durch äußere Magnetfelder beeinflusst werden - man kann sozusagen „mit ihnen rechnen“. Dies ist der zentrale Schnittpunkt mit dem sogenannten quantum computing.
Beim quantum computing wird unter anderem mit sogenannten Qubits gerechnet. Das heißt, dass die Atomkerne eine Spinquantenzahl von $1/2$ besitzen. Sind sie einem äußeren Magnetfeld ausgesetzt, können sie sich darum entweder parallel (up) oder antiparallel (down) zum äußeren Magnetfeld einstellen. Diese beiden Zustände können nun mit den bekannten binären Recheneinheiten 0 und 1 identifiziert werden. Darüber hinaus ist es den Spins jedoch möglich, auch Superpositionen der up- und down-Zustände einzunehmen. Darin und in der Möglichkeit, auch mit verschränkten Zuständen - im Falle von Mehr-Qubit-Systemen - rechnen zu können, liegt gerade die Stärke des Quantencomputers gegenüber bisherigen Rechnern. [QIP, S. 26f.]

Da im Experiment jedoch nie nur einzelne Kernspins angeregt und vermessen werden können, sondern immer ein Ensemble an Quantenobjekten, ist es sinnvoll, das gesamte Quantensystem mittels einer Dichtematrix zu beschreiben. Diese gibt, grob gesagt, an, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein zufällig ausgewählter Spin aus dem Ensemble sich in einem bestimmten Zustand befindet. Somit ist die Dichtematrix hilfreich, um die relative Verteilung von Quantenzuständen im Ensemble auszudrücken. An dieser Stelle ist es sinnvoll, die Begriffe des gemischten und puren Ensembles einzuführen. Ein pures Ensemble zeichnet sich dadurch aus, dass 100% der Ensemblemitglieder im selben Quantenzustand, bezeichnet durch Ket $|k\rangle$, sind. In einem gemischten Ensemble dagegen findet sich ein relativer Anteil w_1 im Zustand $|k_1\rangle$, ein anderer relativer Anteil w_2 im Zustand $|k_2\rangle$ usw. [MQM, S. 182ff] Die Dichtematrix besteht aus diagonalen Einträgen, welche auch *populations* genannt werden, und Einträgen auf den Nebendiagonalen, den sogenannten *coherences*. Anschaulich lässt sich sagen, dass das Absolutquadrat eines Diagonaleintrages $|w_i|^2$ der Dichtematrix, bezüglich der Basisdarstellung $\{|\psi_i\rangle\}_i$, die Wahrscheinlichkeit angibt, mit welcher sich ein zufällig ausgewählter Spin aus diesem Ensemble tatsächlich in diesem Zustand $|\psi_i\rangle$ befindet. Ein von Null verschiedener Nebendiagonal-Eintrag gibt Auskunft darüber, dass es im Ensemble Spins gibt, welche als eine Superposition der $|\psi_i\rangle$ ausgedrückt werden müssen. [SD, S. 261ff]
Dies kann nun auf das NMR Experiment übertragen werden. Im Kernspinresonanz-

Spektrometer selbst ist ein statisches Magnetfeld - von Stärken im Bereich von etwa 14 Tesla - angelegt. Der Einfachheit halber definiert man seine Ausrichtung als die z-Richtung. Der (Zeeman) Hamiltonian dieses Systems kann leicht aus der klassischen Elektrodynamik hergeleitet werden:

$$H = -\mu B = -\hbar\omega_L I_z. \tag{1}$$

Hierbei gibt B das Magnetfeld, μ das magnetische Moment, welches mit diesem wechselwirkt, ω_L die sog. Larmorfrequenz, welche vom äußeren Magnetfeld B abhängt, und I_z die magnetische Quantenzahl (in z-Richtung) des betrachteten Kernspins an. Die Spins werden also, dem äußeren, statisches Magnetfeld ausgesetzt, sich entweder nach oben (parallel bzgl. B) oder nach unten (antiparallel bzgl. B) ausrichten. Sie befinden sich in den Eigenzuständen des Hamiltonians H. [QIP, S. 36f.] Die Dichtematrix würde in diesem Fall nur populations, also Diagonaleinträge, aufweisen. In diesem thermischen Gleichgewicht werden die einzelnen Einträge durch die statistische Boltzmann-Verteilung festgelegt. [QIP, S. 45f.]
Nun kann im Spektrometer zusätzlich ein magnetisches Wechselfeld, im Radiofrequenz-Bereich, in der x-y-Ebene angelegt werden. Dadurch verändert sich der Hamiltonian H des Systems zu

$$H \approx -\hbar\omega_L I_x, \tag{2}$$

wählt man ein mit der Frequenz des magnetischen Wechselfeldes rotierendes Bezugssystem [QIP, S. 48]. I_x bezeichnet die magnetische Quantenzahl des Kernspins in x-Richtung. An diesem Punkt ist es wesentlich, die Zeitentwicklung der Dichtematrix zu betrachten. Da die einzelnen Spins der Schrödinger-Gleichung gehorchen müssen, so lässt sich für die Dichtematrix herleiten [MQM, S. 187]:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t} = -[\rho, H] \qquad (\text{Liouville} - \text{von Neumann Gleichung}). \tag{3}$$

Da der Hamiltonian in Gleichung (2) zeitunabhängig ist, kann die Zeitentwicklung der Dichtematrix durch

$$\rho(t) = \exp(-\mathrm{i}Ht/\hbar)\rho(t=0)\exp(\mathrm{i}Ht/\hbar)$$

beschrieben werden [QIP, S. 45]. Damit findet man, nach einer kurzen Rechnung, dass erstens, der Zeitentwicklungsoperator einer Drehung (Drehmatrix) um die x- bzw. y-Achse entspricht und zweitens, dadurch aus der ursprünglichen Dichtematrix $\rho(t=0)$, mit ausschließlich diagonalen Einträgen, eine Dichtematrix mit Einträgen ungleich Null auf den Nebendiagonalen geworden ist. Anschaulich bedeutet dies, dass es nun eine Netto-Magnetisierung des Ensembles gibt, die x- oder y- Komponenten hat. [QIP, S. 48f.] Im experimentellen Aufbau sind Spulen im Spektrometer derart befestigt, dass sie diese sogenannte *in-plane*-Magnetisierung messen können. Die Amplitude dieser x- bzw. y-Magnetisierung verklingt exponentiell nach Ausschalten des Wechselfeldes aufgrund

der sogenannten *spin-lattice-relaxation*, also der elektromagnetischen Wechselwirkung der Spins mit ihrer Umwelt. [QIP, S. 43]

Während meines Projektes habe ich solche Abklingkurven für ein 1-Qubit System, das Proton des Wasserstoff-Atoms, aufgenommen. Diese Kurven werden zunächst fouriertransformiert und so erhält man die typischen, sogenannten *Lorentzian peaks* des Abklingspektrums, welche Abb. 1 zeigt [SD, S. 97f.]. Die Amplituden dieser Peaks können mit bestimmten Einträgen der Dichtematrix in Verbindung gebracht werden, da sie Informationen über die „Übergangswahrscheinlichkeit“ zwischen Eigenzuständen, welche wiederum als Basis der Dichtematrix-Darstellung gewählt wurden, enthalten. [SD, S. 287f.]
Die Quantum State Tomography hat nun das Ziel, alle Einträge der Dichtematrix zu rekonstruieren. Dafür muss das Quantenensemble - und damit verbunden auch die Dichtematrix - verändert werden, um alle möglichen Übergänge zwischen Eigenzuständen durch die Magnetspulen im Experiment messbar zu machen. Man kann sich vorstellen, dass die einzelnen Einträge der Dichtematrix immer wieder neu durchgewürfelt werden, damit alle zu bestimmenden Variablen mindestens einmal an bestimmten Stellen der Matrix auftauchen, die experimentell detektierbar sind. Dies ist die Idee der Standard Quantum State Tomography. Protokolle dafür, wie [NMRQIP], sind bekannt, erfordern aber viele, zeitaufwändige Messungen. Besonders bei Systemen mit mehreren Qubits - hier sei beispielsweise ^{13}C Chloroform, welches als 2-Qubit-System oder ^{13}C Dimethylfluormalonat, das als 3-Qubit-System dient, genannt - wächst die Anzahl nötiger Messungen exponentiell [NMRQIP, S. 8].
Die aufgenommenen Daten dieser Standard Quantum State Tomography Messungen müssen noch ausgewertet werden, um schließlich die Dichtematrix bestimmen zu können. Dies erfordert Programmierarbeit. Während meiner ersten Woche des Forschungspro-

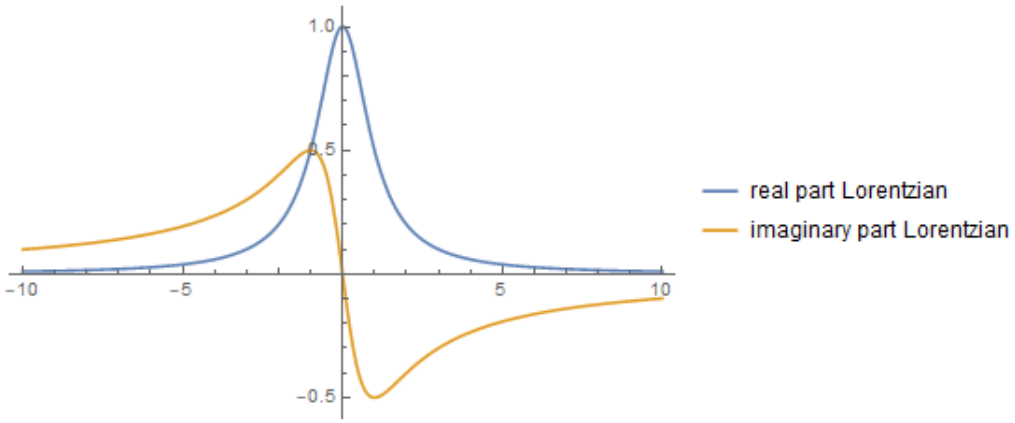


Abbildung 1: Qualitativer Plot eines Lorentzian Peak (reeller und imaginärer Teil), dem fouriertransformierten Signal des NMR-Spektrometers zur Rekonstruktion des Quantenzustands bzw. der Dichtematrix.

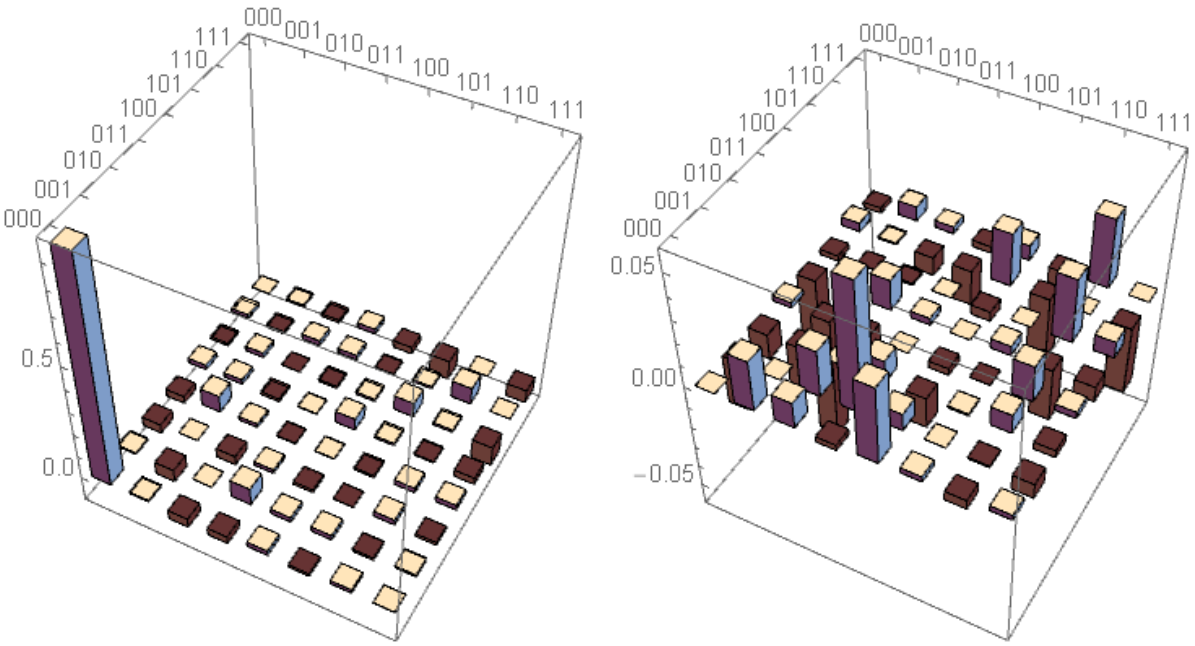
jektes habe ich mich mit den bekannten Protokollen der Standard QST beschäftigt und selbst Programme für 1-, 2- sowie 3-Qubit-Systeme von puren Ensemblen mit Mathematica 11 implementiert und an experimentell aufgenommenen Daten getestet. Ein Ergebnis eines 3-Qubit-Systems zeigt Abb. 2. Dabei werden explizit Eigenschaften der Dichtematrix ausgenutzt, um Mess- und Rechenverfahren zu simplifizieren [MQM, S. 184][QIP, S. 105]:

(1) Hermitizität

(2) Normalisierungseigenschaft $\mathrm{Tr}(\rho) = 1$ (und im Falle von puren Ensemblen auch $\mathrm{Tr}(\rho^2) = 1$)

(3) Positivität, d.h. alle Eigenwerte der Matrix sind reell und nichtnegativ

Ich habe bei der Umsetzung der Standard QST Programme die ersten beiden Eigenschaften benutzt. Da der so ermittelten Dichtematrix oft die dritte, oben angeführte, Eigenschaft fehlt, wird das Verfahren der sogenannten *maximum likelihood estimation* implementiert, welches die berechnete Dichtematrix derart variiert, sodass sie positiv



(a) Realteil der 3-Qubit-Dichtematrix (b) Imaginärteil der 3-Qubit-Dichtematrix

Abbildung 2: Rekonstruierte Dichtematrix eines 3-Qubit-Systems (^{13}C Dimethylfluormalonat), Real- und Imaginärteil. Die zugehörigen Daten wurden nur verwendet, um das Mathematica-Programm zu testen. Die dargestellte Dichtematrix beschreibt ein pures Ensemble im Zustand $\rho = |000\rangle\langle 000|$. Es ist zu beachten, dass die Matrix nicht positiv semidefinit ist.

semidefinit- und damit physikalisch überhaupt sinnvoll- ist [CVD].

In den letzten Jahren haben sich weitere Methoden der Quantum State Tomography entwickelt, die zum Beispiel „Adaptives Lernen“ ausnutzen (siehe z.B. [AQT]) oder selbstlernend sind [SLT] sowie sogenannte „Self-Guided Tomography“ [EXSG, TSG]. Das Ziel neuer Methoden ist vor allem, die nötige Anzahl experimenteller Messungen zu minimieren und die Stabilität gegenüber Messfehlern zu erhöhen. Mit dem „self-guided“ Ansatz habe ich mich in der zweiten Hälfte meines Praktikums beschäftigt, mich in Paper eingelesen und die self-guided QST in Mathematica simuliert. Dabei habe ich mich auf ein 1-Qubit-System eines puren Ensembles beschränkt, auf dessen mathematische Darstellung ich an dieser Stelle kurz eingehen werde.
Die Dichtematrix eines 1-Qubit-Systems ist eine normalisierte, selbstadjungierte 2×2 Matrix mit nichtnegativen Eigenwerten, wie aus ihren allgemeinen Eigenschaften, siehe oben, hervorgeht. Jede Matrix mit diesen Charakteristiken kann als Superposition der Paulimatrizen σ_i und der Einheitsmatrix $\mathbb{1}$ mit reellen Koeffizienten $\mathrm{Tr}(\rho\sigma_i)/2$ geschrieben werden [QIP, S. 105]:

$$\rho = \frac{\mathbb{1} + \mathrm{Tr}(\rho\sigma_x)\sigma_x + \mathrm{Tr}(\rho\sigma_y)\sigma_y + \mathrm{Tr}(\rho\sigma_z)\sigma_z}{2}. \tag{4}$$

Diese Paulimatrizen bilden eine orthogonale Basis für die Dichtematrizen- sogar für alle komplexen 2×2 Matrizen, wenn man komplexe Koeffizienten erlaubt. Diese Darstellung der Dichtematrix kann für Mehr-Qubit-Systeme natürlich verallgemeinert werden. Wegen der Forderung $\mathrm{Tr}(\rho^2) = 1$ an pure Ensembles erhält man mit der Darstellung der Dichtematrix nach Gleichung (4), dass $\mathrm{Tr}(\rho\sigma_x)^2 + \mathrm{Tr}(\rho\sigma_y)^2 + \mathrm{Tr}(\rho\sigma_z)^2 = 1$. Alternativ kann man auch sagen,

$$\vec{a} = (\mathrm{Tr}(\rho\sigma_x), \mathrm{Tr}(\rho\sigma_y), \mathrm{Tr}(\rho\sigma_z)) \in \mathbb{S}^2. \tag{5}$$

$\vec{a}$ wird auch *Blochvektor* genannt. Für gemischte Ensembles gilt nur $|\vec{a}| \leq 1$ [BS, S. 1f.]. Damit gibt sich eine äquivalente Darstellung einer Dichtematrix eines puren Ensembles als ein Vektor auf der Einheitskugel.
Der self-guided-Algorithmus lässt sich, im Falle von einem Qubit, in dieser Blochvektor-Darstellung der Dichtematrix sehr anschaulich verstehen [TSG, S. 1f.]: Zuerst wird ein zufälliger Blochvektor ausgewählt, dann folgt ein Iterationsverfahren, welches den ausgewählten Blochvektor solange aktualisiert, bis er „nahe genug“ am tatsächlich zu detektierenden Vektor liegt. Die notwendige Distanzmessung zwischen geratenem und echtem, vorhandenen Zustand des Ensembles wird dann experimentell vorgenommen. Ich habe in meinem Praktikum Simulationen davon mithilfe der Mathematica Software programmiert.
Der Weg des ursprünglichen Blochvektors bis zum tatsächlichen erfolgt nicht zufällig, sondern wird mittels diskretisierter symmetrischer Ableitung der Distanzfunktion in eine zufällige Richtung in jedem Punkt des Iterationsschrittes neu bestimmt. Durch die Aus-

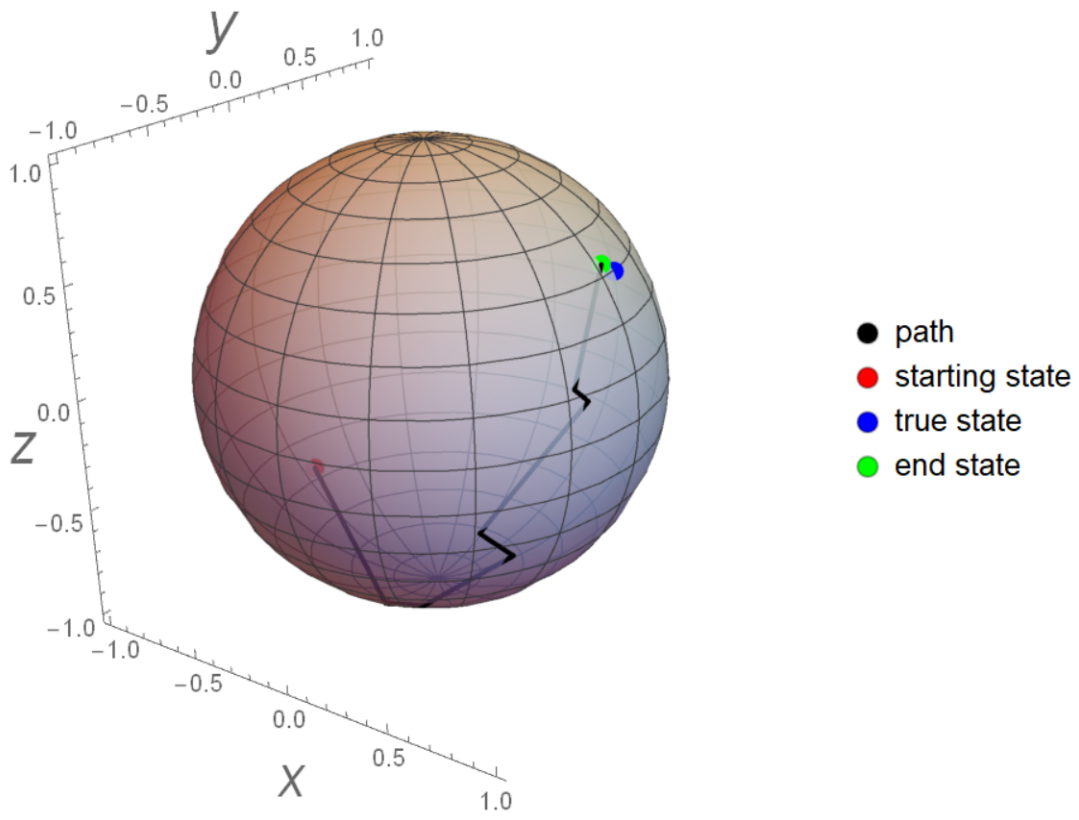


Abbildung 3: Ein Beispielpfad des Iterationsprozesses der self-guided QST. Die Iteration wird ab einer bestimmten Genauigkeit abgebrochen (fidelity $F \geq 0.99$). Es ist gut erkennbar, dass alle Zustände auf der Kugeloberfläche liegen und demnach gültige Dichtematrizen von puren Ensembles darstellen. Der Startzustand ist rot markiert, der Endzustand grün dargestellt, welcher den echten Zustand (blau) approximieren soll.

wahl zufälliger, unkorrelierter Richtungen zur Bestimmung des Gradienten der Distanzfunktion in jedem Iterationsschritt wird der Algorithmus stabiler gegenüber Messfehler im Vergleich zum Standard QST Protokoll. [TSG]
Die Pfade, welche der Blochvektor nimmt, kann man gut visualisieren, wie ein Beispiel in Abbildung 3 zeigt.
Interessant ist nun, dass es nicht nur eine Distanzfunktion, d.h. eine Metrik, gibt, welche man auf dem Raum der Dichtematrizen einführen kann: So gibt es die sogenannte *trace distance*, *Hilbert-Schmidt-distance* sowie die *Bures distance* bzw. *fidelity*, um nur einige zu nennen [AQT, S. 4f.]. Ich habe anhand der von mir programmierten Simulation der self-guided QST diese Distanzfunktionen implementiert und Anzeichen auf Unterschiede bezüglich ihrer Effizienz für das hier umgesetzte QST Protokoll festgestellt.
Doch es bleibt noch zu untersuchen, wie sich die Effizienz des self-guided Algorithmus'

gegenüber der erreichten Genauigkeit (fidelity) bei den verschiedenen Distanzfunktionen verhält. Bisher habe ich für die verschiedenen Distanzfunktionen nur die Anzahl der nötigen Messungen untersucht, die es benötigt, um eine feste Genauigkeit in der Bestimmung der Dichtematrix zu erhalten. Ein weiterer Ausblick geht sicherlich in Richtung Implementation von Mehr-Qubit-Systemen in der self-guided QST.

Schlussendlich kann ich sagen, dass ich inhaltlich viel in meinem Praktikum gelernt habe, aber auch außerhalb der Forschung die indische Kultur und der Kulturaustausch meine Zeit im Ausland sehr bereichert haben. Die Betreuungssituation war nicht immer ideal, da Treffen oft verschoben oder krankheitsbedingt ausfallen mussten. Dennoch konnte ich durch selbstständiges Einarbeiten und Arbeiten in dem Forschungsthema und mit Unterstützung der Doktoranden in der Arbeitsgruppe einen guten Einblick in die aktuelle Forschung gewinnen. Ihnen ist es auch zu verdanken, dass ich mich von Anfang an gut integriert gefühlt habe, Anschluss und Freunde gefunden habe. Bei kleinen Problemen im Alltag standen sie mir stets hilfsbereit zur Seite und haben mir ebenso einen kleinen Einblick in ihr Leben gegeben. Davon habe ich sehr profitiert. Doch dieses Praktikum wäre ohne den DAAD nicht denkbar gewesen. Daher bedanke ich mich bei Ihnen für die organisatorische und finanzielle Unterstützung, die diesen Austausch erst möglich gemacht hat.

5 Bibliografie

MQM Sakurai, J.J./ Napolitano, Jim J.: Modern Quantum Mechanics, 2. Auflage, 2014

QIP Oliviera, Ivan S./ Bonagamba, Tito J./ Sarthour, Roberto S./ Freitas, Jair C.C./ deAzevedo, Eduardo R.: NMR Quantum Information Processing, 2007

SD Lewitt, Malcolm H.: Spin Dynamics, 2. Auflage, 2008

NMRQIP Leskowitz, Garett M. / Mueller, Leonard J.: State interrogation in nuclear magnetic resonance quantum-information processing, DOI: 10.1103/PhysRevA.69.052302

EXSG Chapman, Robert J./ Ferrie, Christopher/ Peruzzo, Alberto: Experimental Demonstration of Self-Guided Quantum Tomography,
DOI: 10.1103/PhysRevLett.117.040402

TSG Ferrie, Christopher: Self-Guided Quantum Tomography, DOI: 10.1103/PhysRevLett.113.190404

BS Christandl, Matthias: QSIT. Quantum Information Theory. Solutions 1,
http://edu.itp.phys.ethz.ch/hs12/qsit/qsitqit12-ex01_sol.pdf, zuletzt eingesehen am 03.10.2018

AQT Straupe, S.S.: Adaptive Quantum Tomography, DOI: 10.1134/S0021364016190024

SLT Hannemann, Th./ Reiss, D./ Balzer, Ch./ Neuhauser, W./ Toschek, P. E./ Wunderlich, Ch.: Self learning estimation of quantum states, DOI: 10.1103/PhysRevA.65.050303

CVD Singh, Harpreet/ Arvind/ Dorai, Kavita: Constructing valid density matrices on an NMR quantum information processor via maximum likelihood estimation,
https://doi.org/10.1016/j.physleta.2016.07.046