

Erklärung des QC⁴H₂O-Hamiltonians

Überblick

Dieser Text erläutert die Terme des Hamiltonoperators, der im Projekt *QC⁴H₂O – Simulating Water on a Quantum Computer* verwendet wird. Dabei wird die gekoppelte Beschreibung von elektronischen und protonischen Freiheitsgraden auf einem Quantencomputer angestrebt.

Hamiltonian

Der vollständige Hamiltonoperator hat folgende Form:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_p v^{pO} \hat{\sigma}_p^z + \frac{1}{2} \sum_{p \neq q} v^{pq} \hat{\sigma}_p^z \hat{\sigma}_q^z + \sum_{i,j} [t_{ij} + v_{ij}^O] a_i^\dagger a_j + \sum_{i,j,p} v_{ij}^p a_i^\dagger a_j \hat{\sigma}_p^z \\ & + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} v_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k - \mu_{H^+} \sum_p \hat{\sigma}_p^z - \mu_{e^-} \sum_i a_i^\dagger a_i \end{aligned} \quad (1)$$

Erklärung der Terme

(1) Proton–Sauerstoff-Wechselwirkung:

$$\sum_p v^{pO} \hat{\sigma}_p^z$$

Dieser Term beschreibt die Coulomb-Anziehung zwischen einem Proton p und dem Sauerstoffkern. Die Besetzungsvariable $\hat{\sigma}_p^z$ (Pauli-Z-Operator) nimmt die Werte ± 1 bzw. 0 oder 1 für besetzt/unbesetzt an.

(2) Proton–Proton-Wechselwirkung:

$$\frac{1}{2} \sum_{p \neq q} v^{pq} \hat{\sigma}_p^z \hat{\sigma}_q^z$$

Repräsentiert die elektrostatische Abstoßung zwischen zwei verschiedenen Protonen.

(3) Elektronenkinetik und Elektron–Sauerstoff-Wechselwirkung:

$$\sum_{i,j} [t_{ij} + v_{ij}^O] a_i^\dagger a_j$$

- t_{ij} : Kinetische Energie der Elektronen (kinetischer Operator).
- v_{ij}^O : Coulomb-Anziehung zwischen Elektronen und dem fixen Sauerstoffkern.

(4) Elektron–Proton-Wechselwirkung:

$$\sum_{i,j,p} v_{ij}^p a_i^\dagger a_j \hat{\sigma}_p^z$$

Dieser Term beschreibt die Wechselwirkung zwischen Elektronen und den einzelnen Protonen, abhängig von deren Besetzung.

(5) Elektron–Elektron-Wechselwirkung:

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} v_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k$$

Repräsentiert die Coulomb-Wechselwirkungen zwischen Paaren von Elektronen (Zweikörperterm).

(6) Chemisches Potential für Protonen:

$$-\mu_{H^+} \sum_p \hat{\sigma}_p^z$$

Ermöglicht Kontrolle über die Anzahl der Protonen im System (z. B. Protonen-transfer).

(7) Chemisches Potential für Elektronen:

$$-\mu_{e^-} \sum_i a_i^\dagger a_i$$

Dient zur Kontrolle der Elektronenzahl im System (z. B. für Ladungsneutralität oder Ionen).

Zusätzliche Hinweise

- Die Operatoren a_i^\dagger, a_i sind Fermion-Erzeugungs- und -Vernichtungsoperatoren für Spinorbitale.
- Die $\hat{\sigma}_p^z$ sind Pauli-Z-Operatoren, die als Besetzungsvariablen für Protonen verwendet werden.
- Die Indizes i, j, k, l laufen über elektronische Spinorbitale; p, q über Protonensites.
- Der Hamiltonian ist in Born-Oppenheimer-Näherung formuliert – der Sauerstoffkern ist fixiert.