

ABSTRAK

Penerapan variational quantum eigensolver (VQE) pada perangkat kuantum jangka pendek untuk menyelesaikan Hamiltonian Kohn-Sham masih relatif jarang dieksplorasi. Dalam penelitian ini, weighted subspace-search variational quantum eigensolver (weighted SSVQE) digunakan untuk menghitung orbital Kohn-Sham terisi, energi yang terkait, serta energi total sistem. Pengaruh variasi blok unitari keterikatan, kedalaman sirkuit, dan strategi optimasi terhadap kinerja algoritma dikaji secara sistematis. Meskipun pemilihan algoritma optimasi memberikan pengaruh terbatas terhadap nilai akhir energi total, faktor tersebut secara signifikan memengaruhi perilaku konvergensi, stabilitas numerik, dan biaya komputasi. Konfigurasi bobot optimal diidentifikasi yang mampu mempercepat konvergensi sekaligus meningkatkan akurasi energi. Selain itu, hasil penelitian menunjukkan bahwa kedalaman sirkuit dan struktur blok unitari keterikatan berperan penting dalam menentukan akurasi energi total pada berbagai geometri molekuler. Desain sirkuit yang paling efektif diawali dengan ansatz berekspresibilitas rendah dan keterikatan lemah, seperti blok unitari keterikatan linier, yang diulang hingga jumlah lapisan yang memadai tercapai. Dengan menggunakan molekul homoatomik dan heteroatomik sebagai sistem pembanding, pendekatan yang diusulkan terbukti tetap andal dan efektif pada sistem dengan berbagai jenis korelasi elektron. Secara keseluruhan, metode ini memungkinkan penggunaan sirkuit kuantum dangkal yang ramah konvergensi dan menghasilkan energi yang sangat sesuai dengan perhitungan teori fungsional kerapatan standar, sehingga menawarkan strategi desain yang praktis untuk implementasi VQE yang efisien.

Kata Kunci : Variational quantum eigensolver; weighted subspace-search VQE; Hamiltonian Kohn-Sham; teori fungsional kerapatan; sirkuit quantum dangkal; komputasi kuantum jangka pendek