

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
REKOMENDASI LAYAK UJIAN TESIS	ii
HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS	iii
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TESIS UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIK	iv
HALAMAN PENGESAHAN TESIS	v
KATA PENGANTAR	vi
ABSTRAK	viii
ABSTRACT	ix
DAFTAR ISI	x
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR LAMPIRAN	xiv
ARTI LAMBANG DAN SINGKATAN	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Tujuan Penelitian	2
1.3 Manfaat Penelitian	3
BAB II DASAR TEORI	4
2.1 Pengantar Teori Fungsional Kerapatan pada Atom Helium	4
2.2 Perhitungan DFT pada H_2 Menggunakan $1s$ Orbital Tipe Slater	16
2.3 Pengantar Komputasi Kuantum dengan Derivasi Transformasi Basis Bilangan Keterisian (<i>Jordan-Wigner Qubit-Mapping</i>) pada Hamiltonian H_2	27
2.4 Konstruksi <i>Hardware Efficient Ansatz</i> dalam Algoritma <i>Variational Quantum Eigensolver</i> untuk Solusi DFT Rantai Hidrogen H_8	60
BAB III METODE PENELITIAN	77
3.1 Waktu dan Tempat Penelitian	77
3.2 Alat dan Bahan Penelitian	77
3.3 Diagram Alir Penelitian	78
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	81
4.1 Perbandingan Energi Total Q-DFT dengan Ψ_4	81
4.2 Konvergensi Energi Total dan Orbital Kohn-Sham	83
4.3 Pengaruh Konfigurasi Bobot pada Konvergensi	84
4.4 Pengaruh Struktur Keterikatan dan Kedalaman Ansatz	86
4.5 Efisiensi Sirkuit dan Biaya Optimasi	87
4.6 Pengaruh Jumlah Lapisan terhadap Akurasi Energi	88
4.7 Pengaruh Algoritma Optimasi terhadap Stabilitas Konvergensi	89
4.8 Ketergantungan Kedalaman Minimum Sirkuit terhadap Jarak Internuklir ..	90

4.9 Waktu Komputasi dan Kompleksitas Sirkuit	91
4.10 Validasi pada Molekul LiH	93
4.11 Validasi pada Molekul H ₂ dengan Berbagai Basis Set	94
BAB V PENUTUP	95
5.1 Kesimpulan	95
5.2 Saran	96
DAFTAR PUSTAKA	98
LAMPIRAN	102