

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Teori fungsional kerapatan (DFT) (Kohn dan Sham, 1965) merupakan salah satu pilar utama dalam kimia kuantum dan ilmu material karena kemampuannya memprediksi sifat atom, molekul, dan material melalui penyelesaian Hamiltonian Kohn-Sham (Rydberg dkk., 2014). Pendekatan ini memodelkan sistem elektron banyak-partikel sebagai sistem bantu elektron tak berinteraksi (Ur Rahman dkk., 2021), sehingga memungkinkan perhitungan numerik yang efisien dan akurat (Sarwono dkk., 2020). Seiring dengan berkembangnya komputasi kuantum (Nielsen dan Chuang, 2010), pemanfaatan algoritma kuantum untuk menyelesaikan Hamiltonian Kohn-Sham mulai menarik perhatian karena potensi percepatan komputasi yang melampaui kemampuan komputer klasik (Senjean dkk., 2023), khususnya pada sistem dengan kompleksitas tinggi (Barca dkk., 2020).

Meskipun demikian, penerapan algoritma kuantum untuk memperoleh orbital Kohn-Sham terisi (Baker and Poulin, 2020) tidak hanya terbatas pada pencarian orbital energi terendah (McArdle dkk., 2020), tetapi juga menghadapi tantangan yang signifikan. Tantangan tersebut mencakup kesulitan optimasi, stabilitas konvergensi, serta risiko terjadinya *variational collapse* ke satu keadaan dasar. Berbagai pendekatan kuantum telah dikembangkan untuk menangani keadaan tereksitasi, yang secara umum diklasifikasikan menjadi metode berbasis referensi dan metode berbasis keadaan (Motta dkk., 2023). Metode berbasis referensi mengaproksimasi keadaan tereksitasi dalam subruang berdimensi rendah (Lee dkk., 2022), sedangkan metode berbasis keadaan secara langsung mengoptimasi ansatz kuantum untuk menghasilkan keadaan eigen dengan menjaga ortogonalitas antar keadaan (Nakanishi dkk., 2019). Walaupun berbagai strategi ansatz (Lyu dkk., 2023) dan algoritma optimasi telah diusulkan, peran karakteristik sirkuit kuantum, khususnya ekspresibilitas dan kemampuan keterikatan (Sim dkk., 2019), dalam kerangka VQE (Baaquie dan Kwek., 2023) yang diaplikasikan pada DFT masih belum dieksplorasi secara sistematis.

Sebagai solusi, penelitian ini memfokuskan pada metode berbasis keadaan, yaitu *weighted subspace-search variational quantum eigensolver* (*weighted SSVQE*), yang memungkinkan penargetan beberapa keadaan Kohn-Sham secara simultan dalam satu proses optimasi. Pengaruh kedalaman sirkuit, jenis blok unitari keterikatan, dan strategi optimasi klasik diamati dalam konteks DFT kuantum. Hamiltonian Kohn-Sham dipetakan ke Hamiltonian qubit menggunakan transformasi Jordan-Wigner, sehingga dapat diselesaikan dengan algoritma kuantum. Hasil penelitian menunjukkan bahwa desain sirkuit dengan ekspresibilitas rendah dan keterikatan lemah, khususnya blok keterikatan linier yang diulang hingga kedalaman tertentu, memberikan efisiensi komputasi yang optimal. Pendekatan ini memungkinkan penggunaan sirkuit kuantum dangkal yang stabil, menghindari masalah konvergensi, dan menghasilkan energi total yang sangat mendekati hasil perhitungan DFT standar, sekaligus menegaskan hubungan langsung antara karakteristik sirkuit kuantum dan observabel DFT.

1.2 Tujuan Penelitian

Penelitian ini ditujukan untuk menganalisis orisinalitas sebagai berikut.

1. Menerapkan *weighted subspace-search variational quantum eigensolver* (*weighted SSVQE*) untuk menyelesaikan Hamiltonian Kohn-Sham pada sistem rantai atom hidrogen (H_8) dalam kerangka teori fungsional kerapatan (DFT).
2. Menentukan orbital Kohn-Sham terisi, energi orbital, dan energi total sistem H_8 menggunakan pendekatan VQE pada perangkat kuantum jangka pendek
3. Menganalisis pengaruh blok unitari keterikatan, kedalaman sirkuit, dan strategi optimasi terhadap akurasi energi dan perilaku konvergensi pada sistem H_8 .
4. Mengidentifikasi konfigurasi bobot optimal pada *weighted SSVQE* yang menghasilkan konvergensi lebih cepat dan akurasi energi yang lebih tinggi untuk keadaan energi orbital Kohn-Sham pada H_8 .

5. Mengevaluasi efektivitas ansatz dengan ekspresibilitas rendah dan keterikatan lemah dalam menghasilkan energi total H_8 yang stabil dan akurat
6. Menguji validitas pendekatan pada molekul homoatomik dan heteroatomik dengan karakter korelasi elektron yang berbeda.

1.3 Manfaat Penelitian

Manfaat penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Menyediakan bukti metodologis mengenai kelayakan weighted SSVQE sebagai pendekatan kuantum dalam menangani sistem homoatomik H_8 melalui pendekatan Hamiltonian Kohn-Sham.
2. Memberikan referensi kuantitatif mengenai kemampuan VQE dalam mereproduksi orbital dan energi Kohn-Sham pada sistem homoatomik H_8 menggunakan perangkat kuantum jangka pendek.
3. Menjadi pedoman dalam pemilihan blok keterikatan, kedalaman sirkuit, dan algoritma optimasi yang mendukung konvergensi dan efisiensi komputasi untuk memodelkan sistem homoatomik H_8 .
4. Menawarkan strategi praktis dalam penentuan konfigurasi bobot untuk meningkatkan kecepatan konvergensi dan akurasi hasil perhitungan pada keadaan energi orbital Kohn-Sham sistem homoatomik H_8 .
5. Mendukung pengembangan desain sirkuit kuantum dangkal yang stabil, efisien, dan sesuai untuk keterbatasan perangkat kuantum saat ini pada sistem homoatomik H_8 .
6. Memperluas validasi penerapan metode VQE pada sistem molekuler dengan berbagai tingkat korelasi elektron, baik homoatomik maupun heteroatomik.