

ARTIKEL RISET

# Kajian Komputasi Algoritma Kuantum *Quantum Variational Eigensolver* untuk Simulasi Molekul $H_2$

M. Sidik Augi Rahmat\* and Pekik Nurwantoro

## Ringkasan

Telah dilakukan telaah teoritis dan komputasi mengenai algoritma kuantum *variational quantum eigensolver* simulasi molekul  $H_2$ . Algoritma *variational quantum eigensolver* (VQE) adalah salah satu algoritma yang dapat diterapkan pada komputer kuantum sederhana pada masa kini dan merupakan algoritma yang cukup stabil dan efek dekoherensi. Algoritma VQE disebut sebagai *hybrid quantum-classical* karena sebagian algoritma dikerjakan pada komputer klasik. Prinsip dasar algoritma VQE adalah prinsip variasi, yaitu pencarian fungsi gelombang yang akan mengakibatkan energi sistem kuantum memiliki energi terendah. Fungsi gelombang dan Hamiltonan pada algoritma VQE disimulasikan dengan menggunakan gerbang-gerbang kuantum. Untuk dapat dioperasikan oleh gerbang kuantum. Hamiltonan dan fungsi gelombang pada penelitian ini menggunakan wakil kuantisasi kedua. Penelitian ini menggunakan transformasi Jordan-Wigner dan Bravyi-Kitaev dari operator fermionik menjadi operator kubit (*qubit*) atau gerbang kuantum.

Perhitungan atau komputasi energi sistem dilakukan menggunakan komputer kuantum, namun optimasi dilakukan pada komputer klasik menggunakan algoritma optimasi seperti Nelder-Mead, Powell dan BFGS. Penelitian ini akan mendekati fungsi gelombang sistem dengan beberapa basis fungsi dan metode, kemudian dari hasil yang diperoleh akan dilihat pendekatan seperti apa yang paling cocok untuk simulasi molekul  $H_2$ . Simulasi numerik pada penelitian ini menggunakan paket pemrograman OpenFermion dan layanan komputasi awan kuantum Rigetti Computing.

**Kata Kunci** : kuantum, komputer kuantum, algoritma kuantum.

## Abstract

A computational study of quantum algorithm variational quantum eigensolver to simulate  $H_2$  has been carried out (VQE). VQE algorithm has notable property that it can run on nearly future quantum computer such as robust against decoherence. Because optimization routine still run on classical computer VQE algorithm often called as hybrid quantum classical algorithm. VQE algorithm works on second quantisation formalism because of that Hamiltonian which is used to simulate quantum system represented by creation and annihilation operator. The trial wavefunction in this algorithm approached by parameterized quantum gate called ansatz. Jordan-Wigner and Bravyi-Kitaev has been used to map fermionic operator to quantum gate so that Hamiltonian and wavefunction can be run on quantum computer.

Optimization algorithm which used in this work are Nelder-Mead, Powell and BFGS. This work aim to approximate trial wavefunction with different chemical basis set and encoding to present hybrid classical variational approach in more detail offering both theoretical and practical development. In this work we use Quantum Computer provide by Rigetti Computing and OpenFermion to simulate  $H_2$  molecule.

**Keywords:** quantum; quantum computer; quantum algorithm.

\*Correspondence: [m.sidik.a@mail.ugm.ac.id](mailto:m.sidik.a@mail.ugm.ac.id)

Laboratorium Fisika Komputasi, Departemen Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Gadjah Mada, Sekip Utara Bulaksumur, Sinduadi, Mlati, Kota Yogyakarta, Daerah Istimewa Yogyakarta, Indonesia

Full list of author information is available at the end of the article

†Equal contributor

## PENDAHULUAN

Sejak kemunculan komputer elektronik (komputer klasik) pada abad ke-19, metode komputasi memiliki peran yang signifikan dalam perkembangan ilmu pengetahuan khususnya fisika dan kimia untuk memahami sifat dari atom dan molekul. Secara umum komputer klasik diharapkan mampu membantu untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger untuk mendapatkan energi suatu sistem.

Ketika sistem kuantum memiliki jumlah partikel yang banyak dan saling berinteraksi matriks keadaan sistem akan mengalami kenaikan secara eksponensial. Hal inilah yang menginspirasi para fisikawan untuk membangun sebuah algoritma yang dijalankan pada komputer kuantum yang mampu menyelesaikan permasalahan sistem banyak partikel. Ada banyak algoritma yang dijalankan pada komputer klasik yang telah berhasil menyelesaikan masalah banyak partikel, namun tetap saja ada batasan-batas yang belum mampu diselesaikan oleh algoritma klasik tersebut. Kemunculan komputer kuantum pada dekade terakhir memberikan gagasan untuk menyelesaikan masalah banyak partikel menggunakan komputer kuantum. Gagasan kuantum komputer sendiri pertama kali dicetuskan pada tahun 1982 oleh Feynmann [1]. Menurut Feynmann berdasarkan komputer klasik, sistem fisis yang dapat disimulasikan dengan komputer klasik, sistem fisis yang dapat disimulasikan dengan komputer klasik adalah sistem yang bersifat lokal, deterministik dan tidak dapat balik. Akan tetapi sistem kuantum berdiri atas dasar prinsip probabilitas, terbelit (*entangled*) dan tidak lokal sehingga menurut Feynmann sistem kuantum tidak dapat disimulasikan dengan baik menggunakan komputer klasik.

Fungsi gelombang tidak dapat disimpan dan dimanipulasi secara efisien pada komputer klasik. Pendekatan dengan komputer kuantum dilakukan dengan pendekatan fungsi gelombang yang model-model bervariasi dari model SCF hingga FCI. Fungsi gelombang pada masing-masing model memiliki spesifikasi parameter yang berbeda-beda yang menyebabkan akurasi dan kebutuhan sumber daya komputer yang berbeda-beda pula. Kemampuan kuantum komputer yang dapat menyimpan fungsi gelombang (matriks keadaan) diprediksi mampu mensimulasikan sistem yang lebih besar dan memberikan hasil yang lebih akurat. Akan tetapi efek dekoherensi yang dimiliki komputer kuantum juga memberikan tantangan dalam mensimulasikan sistem kuantum. Untuk jenis komputer kuantum dimana sekarang adalah *Noisy Intermediate Quantum* (NISQ). Perangkat NISQ adalah perangkat komputer diharapkan dapat mengatasi masalah yang muncul pada penyelesaian

molekul secara klasik, salah satu contohnya adalah algoritma *Variational Quantum Eigensolver* (VQE). Ketelitian algoritma VQE juga bergantung pada ansatz, ada dua jenis strategi dalam merancang ansatz (fungsi coba berparameter dalam bentuk gerbang kuantum) [2]. Pertama, *Physically motivated ansatz* (PMA), ansatz dirancang menggunakan metode numerik mendekati fungsi gelombang eksak sistem kuantum. Kedua, *Hardware heuristic ansatz* (HHA), meningkatkan kemampuan perangkat keras komputer kuantum sehingga sirkuit kuantum atau ansatz yang dirancang menggunakan perangkat tersebut mampu mendekati fungsi gelombang eksak sebuah sistem kuantum.

Penelitian ini akan membahas detail implementasi VQE untuk pendekatan atom dan sistem molekul, PMA dipilih untuk merancang ansatz. Model-model ansatz seperti *unitary coupled cluster* akan ditelaah lebih lanjut untuk meningkatkan efisiensi algoritma VQE.

## METODE PENELITIAN

### Kuantisasi Kedua

Penelitian ini menggunakan mekanika kuantum kuantisasi kedua sebab untuk mempermudah mengatur konfigurasi elektron/fermion dalam sistem kuantum. Kuantisasi kedua untuk mengatur konfigurasi elektron/fermion menggunakan operator kreasi dan operator anihilasi yang ditunjukkan pada persamaan 1 dan 2

$$a_p^\dagger = |k_1, k_2, \dots, 0_p, \dots, k_m\rangle = \Gamma_p^k |k_1, k_2, \dots, 1_p, \dots, k_m\rangle \quad (1)$$

$$a_p = |k_1, k_2, \dots, 1_p, \dots, k_m\rangle = \Gamma_p^k |k_1, k_2, \dots, 0_p, \dots, k_m\rangle \quad (2)$$

Relasi anti-komutasi untuk operator kreasi dan anihilasi ditunjukkan pada persamaan 3, persamaan 4 dan persamaan 5

$$[a_p^\dagger, a_q^\dagger] = 0 \quad (3)$$

$$[a_p, a_q] = 0 \quad (4)$$

$$[a_p^\dagger, a_q] = \delta_{pq} \quad (5)$$

Relasi anti-komutasi ini berguna untuk mendapatkan sifat-sifat aljabar operator kreasi dan anihilasi lainnya.

### Hamiltonan Molekular Elektronik

Hamiltonan diperlukan untuk mengetahui observabel energi untuk suatu sistem kuantum. Fungsi gelombang suatu sistem kuantum jika dikenakan pada operator Hamiltonan akan didapatkan energi sistem tersebut. Komputer kuantum mampu menyimpan Hamiltonan suatu sistem dalam bentuk matriks-matriks. Operator Hamiltonan dalam bentuk kuantisasi kedua tanpa medan luar, non-relativistik dan *spin-free* diberikan dalam bentuk [3]

$$\hat{H} = \sum_{pq} h_{pq} a_p^\dagger a_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} g_{pqrs} a_p^\dagger a_r^\dagger a_s a_q + h_{nuk} \quad (6)$$

dengan

$$h_{pq} = \int \Phi_p^*(x) \left( -\frac{1}{2} \nabla^2 - \left( \sum_i \frac{Z_i}{r_i} \right) \right) \Phi_q(x) dx \quad (7)$$

$$h_{pqrs} = \int \int \frac{\Phi_p^*(x_1) \Phi_r^*(x_2) \Phi_q(x_1) \Phi_s(x_2)}{r_{12}} dx_1 dx_2 \quad (8)$$

$$h_{nuk} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{Z_i Z_j}{R_{ij}} \quad (9)$$

dengan  $Z_i$  adalah muatan inti,  $r_i$  jarak antara elektron dan inti,  $r_{12}$  jarak antara elektron-elektron dan  $R_{IJ}$  jarak antara inti atom. Suku pertama pada persamaan 6 menunjukkan energi potensial dan kinetik sistem, suku kedua pada persamaan 6 menunjukkan interaksi antara elektron-elektron dan suku ketiga menunjukkan interaksi antara elektron dan inti.

### Fungsi Basis Molekul

Nilai konstanta pada persamaan 7, 8 dan 9 bergantung pada pemilihan basis molekul. Penelitian menggunakan dua jenis fungsi basis molekul yang berbeda yaitu fungsi basi molekul STO-3G dan 6-31G.

### Transformasi Fermion

Supaya Hamiltonan dari suatu sistem dapat dimodelkan dalam komputer kuantum harus diubah kedalam bentuk gerbang-gerbang kuantum. Teknik untuk merubah operator kreasi dan anihilasi menjadi gerbang kuantum ini disebut dengan transformasi fermion. Ada berbagai macam jenis transformasi fermion, namun pada penelitian ini hanya menggunakan dua jenis transformasi

fermion yaitu transformasi fermion Jordan-Wigner dan Bravyi-Kitaev. Transformasi Jordan-Wigner untuk masing-masing operator kreasi dan anihilasi ditunjukkan pada persamaan 10 dan 11 [4]

$$a_j^\dagger = \hat{Q}_j^+ \otimes Z^{\rightarrow}_{j-1} = \frac{1}{2} (X_j \otimes Z^{\rightarrow}_{j-1} - iY_j \otimes Z^{\rightarrow}_{j-1}) \quad (10)$$

$$a_j = \hat{Q}_j^- \otimes Z^{\rightarrow}_{j-1} = \frac{1}{2} (X_j \otimes Z^{\rightarrow}_{j-1} + iY_j \otimes Z^{\rightarrow}_{j-1}) \quad (11)$$

dengan

$$\hat{Q}_j^+ = \frac{1}{2} (X - iY), \hat{Q}_j^- = \frac{1}{2} (X + iY) \quad (12)$$

$$Z^{\rightarrow} = \sigma_i^z \otimes \sigma_{i-1}^z \otimes \dots \otimes \sigma_1^z \otimes \sigma_0^z \quad (13)$$

Operator  $Z^{\rightarrow}$  disebut dengan operator paritas yang mewakili swanilai 1 untuk milik kubit dengan indeks sama dengan  $i$  dan -1 untuk kubit dengan indeks kurang dari  $i$ .

Sedangkan untuk transformasi Bravyi-Kitaev, sedikit berbeda dengan transformasi Jordan-Wigner. Dalam transformasi Bravyi-Kitaev perlu ditentukan himpunan-himpunan pembaru kubit ( $U(j)$ ), pembalik kubit ( $F(j)$ ) dan paritas kubit ( $P(j)$ ). Himpunan tersebut ditentukan dengan menggunakan matriks Bravyi-Kitaev yang ditunjukkan pada persamaan [4]

$$\beta_{2^{x+1}} = \begin{bmatrix} \beta_{2^x} & 0 \\ A & \beta_{2^x} \end{bmatrix} \quad (14)$$

dengan  $A$  adalah ( $2^x \times 2^x$ ) matriks nol yang anggota baris terbawah matriks diisi dengan nilai satu dan 0 adalah matriks nol ( $2^x \times 2^x$ ). Operator kreasi dan anihilasi untuk indeks genap dituliskan sebagai [4]

$$a_j^\dagger = \frac{1}{2} (X_{U(j)} \otimes X_j \otimes Z_{P(j)} - iX_{U(j)} \otimes Y_j \otimes Z_{P(j)}) \quad (15)$$

$$a_j = \frac{1}{2} (X_{U(j)} \otimes X_j \otimes Z_{P(j)} + iX_{U(j)} \otimes Y_j \otimes Z_{P(j)}) \quad (16)$$

dan untuk kubit indeks ganjil

$$a_j^\dagger = \frac{1}{2} (X_{U(j)} \otimes X_j \otimes Z_{P(j)} - iX_{U(j)} \otimes Y_j \otimes Z_{R(j)}) \quad (17)$$

$$a_j = \frac{1}{2} (X_{U(j)} \otimes X_j \otimes Z_{P(j)} - iX_{U(j)} \otimes Y_j \otimes Z_{R(j)}) \quad (18)$$

$R(j)$  adalah himpunan yang anggotanya hanya termuat di  $P(j)$  sebagai

$$R(j) = P(j) \setminus F(j) \quad (19)$$

### Fungsi Coba UCCSD

*Unitary Coupled Cluserter Singlet Double* (UCCSD) adalah perluasan dari teknik *Coupled Cluster* yaitu teknik untuk mendekati fungsi gelombang suatu sistem kuantum. Tidak seperti *Coupled Cluster*, UCCSD bersifat variasional sehingga dapat diterapkan dalam algoritma kuantum VQE. Sebab algoritma VQE bekerja berdasarkan pada prinsip variasi. Dengan kata lain algoritma VQE fungsi gelombang sistem kuantum divariasikan dengan menggunakan pendekatan UCCSD. Secara umum fungsi gelombang yang didekati dengan metode UCCSD memiliki bentuk seperti pada persamaan 20 [2]

$$|\Psi\rangle = e^{T-T^\dagger} |\Phi_R\rangle \quad (20)$$

dengan operator  $T - T^\dagger$  adalah operator eksitasi yang anti-Hermitan dan  $|\Phi_R\rangle$ . Teknik UCCSD yang digunakan pada penelitian ini adalah UCCSD ordo 2. Sehingga akan ada dua operator eksitasi  $T$  yang dalam wakilan kuantisasi kedua dapat ditunjukkan pada persamaan 21 dan 22

$$T^{(1)}(\theta) = \sum_{i_1 p_1} \theta_{i_1 p_1} (a_{i_1}^\dagger a_{p_1} - a_{p_2}^\dagger a_{i_1}) \quad (21)$$

$$T^{(2)}(\theta) = \sum_{i_1 i_2 p_1 p_2} \theta_{i_1 i_2 p_1 p_2} (a_{i_1}^\dagger a_{p_1} a_{i_2}^\dagger a_{p_2} - a_{p_2}^\dagger a_{i_2} a_{p_1}^\dagger a_{i_1}) \quad (22)$$

## HASIL DAN PEMBAHASAN

### Hamiltonan dan Pemilihan Basis

Sistem yang akan disimulasikan menggunakan komputer kuantum adalah sistem molekul  $H_2$ . Sistem  $H_2$  dipilih dengan alasan komputer kuantum yang

ada pada saat ini masih sangat sederhana yaitu komputer kuantum dengan 9 kubit. Penelitian ini menggunakan layanan komputasi kuantum awan yang disediakan oleh Rigetti Computing. Untuk mensimulasikan molekul  $H_2$  membutuhkan 4 kubit jika menggunakan basis STO-3G dan 8 kubit jika menggunakan basis 6-31G. Pada basis 6-31G kubit yang digunakan akan dikurangi menggunakan metode *complete active space*. *Active space* yang dipilih pada pada penelitian ini adalah *active space* 4 (AS 4) yang artinya orbital atau kubit yang dipilih hanya 4 orbital saja. Dan *active space* 6 (AS 6) yang artinya orbital atau kubit yang dipilih hanya 6 orbital saja. Hal ini dapat dilakukan sebab pada sistem  $H_2$  hanya memiliki dua buah elektron. Sedangkan untuk masing-masing elektron paling tidak membutuhkan dua kubit untuk memodelkan *spin-up* dan *spin-down*. Sehingga untuk  $H_2$  kubit yang paling banyak dibutuhkan adalah 4 kubit.

Hamiltonan sistem  $H_2$  dalam bentuk gerbang-gerbang kuantum menggunakan transformasi Jordan-Wigner dan Bravyi-Kitaev ditunjukkan pada persamaan 23 dan 24

$$H_{JW} = h_0 I + h_1 Z_0 + h_2 Z_1 + h_3 Z_2 + h_4 Z_3 + h_5 Z_0 Z_1 + h_6 Z_0 Z_2 + h_7 Z_1 Z_2 + h_8 Z_0 Z_3 + h_9 Z_1 Z_3 + h_{10} Z_2 Z_3 + h_{11} Y_0 Y_1 X_2 X_3 + h_{12} X_0 Y_1 Y_2 X_3 + h_{13} Y_0 X_1 X_2 Y_3 + h_{14} X_0 X_1 Y_2 Y_3 \quad (23)$$

$$H_{BK} = h_0 I + h_1 Z_0 + h_2 Z_1 + h_3 Z_2 + h_4 Z_1 Z_2 Z_3 + h_5 Z_1 + h_6 Y_0 Z_1 Y_2 Z_3 + h_7 X_0 Z_1 X_2 + h_8 X_0 Z_1 X_2 Z_3 + h_9 Y_0 Z_1 Y_2 + h_{10} Z_0 Z_2 + h_{11} Z_0 Z_1 Z_2 Z_3 + h_{12} Z_0 Z_1 Z_2 + h_{13} Z_0 Z_2 Z_3 + h_{14} Z_1 Z_3 \quad (24)$$

Konstanta-konstanta untuk persamaan 23 dan 24 untuk masing-masing basis STO-3G dan 6-31G *active space* ditunjukkan pada Tabel 1 dan Tabel 2.

### Ketelitian Model

Masing-masing model dalam penelitian dibandingkan dengan beberapa algoritma klasik seperti *Hartree-Fock* (HF) dan *Coupled Cluster Single Double* (CCSD). Selain dibandingkan dengan algoritma klasik, ketelitian model juga dibandingkan dengan *chemical accuracy* yang berada pada ordo  $10^{-3}$ . Model dengan basis STO-3G baik menggunakan transformasi Jordan-Wigner ataupun Bravyi-Kitaev memberikan hasil yang sama (Gambar 1, Gambar 2, Gambar 3 dan Gambar 4). Energi sistem yang didapatkan dengan metode ini *overlap* dengan energi sistem jika dihitung menggunakan algoritma klasik. Namun ketelitian

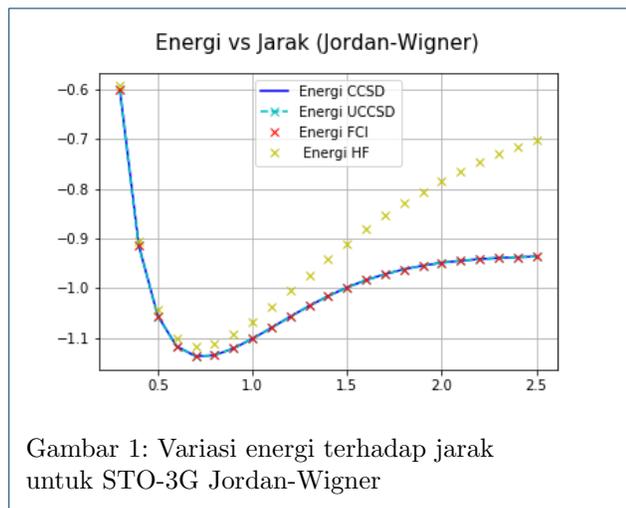
Tabel 1: Nilai konstanta integral untuk basis STO-3G

Konstanta Integral	Jordan-Wigner	Bravyi-Kitaev
$h_0$	-0.428044	-0.428044
$h_1$	0.263276	0.263276
$h_2$	0.263276	0.263276
$h_3$	-0.018667	-0.018667
$h_4$	-0.018667	-0.018667
$h_5$	0.162425	0.162425
$h_6$	0.088404	0.020036
$h_7$	0.108441	0.020036
$h_8$	0.108441	0.020036
$h_9$	0.088404	0.020036
$h_{10}$	0.096463	0.088404
$h_{11}$	-0.020036	0.108441
$h_{12}$	0.020036	0.108441
$h_{13}$	0.020036	0.088404
$h_{14}$	-0.020036	0.096463

Tabel 2: Nilai konstanta integral untuk basis 6-31G active space

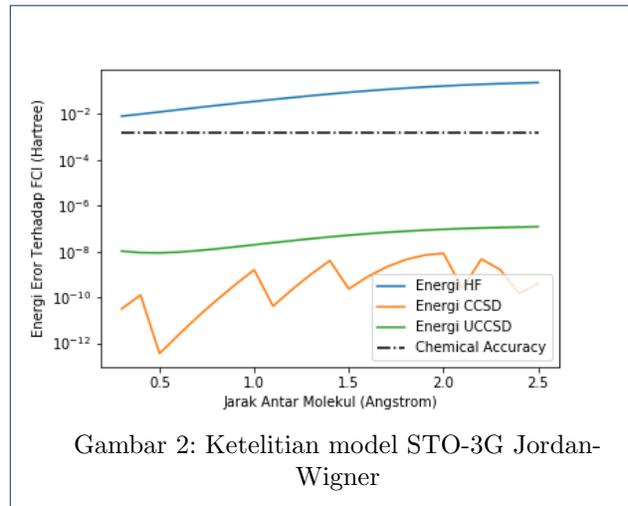
Konstanta Integral	Jordan-Wigner	Bravyi-Kitaev
$h_0$	-0.098864	-0.098864
$h_1$	0.171198	0.171198
$h_2$	0.171198	0.171198
$h_3$	-0.222786	-0.222786
$h_4$	-0.222786	-0.222786
$h_5$	0.168622	-0.222786
$h_6$	0.120545	0.168622
$h_7$	0.165867	0.045322
$h_8$	0.165867	0.045322
$h_9$	0.120545	0.045322
$h_{10}$	0.174350	0.120545
$h_{11}$	-0.045322	0.165867
$h_{12}$	0.045322	0.165867
$h_{13}$	0.045322	0.120545
$h_{14}$	-0.045322	0.174350

yang didapat jauh lebih teliti dibandingkan algoritma klasik dan *chemical accuracy*, model basis STO-3G memiliki ketelitian pada ordo  $10^{-3}$ .

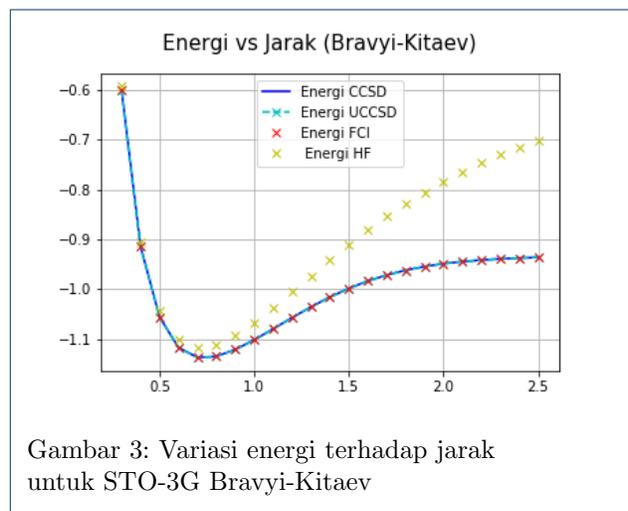


Gambar 1: Variasi energi terhadap jarak untuk STO-3G Jordan-Wigner

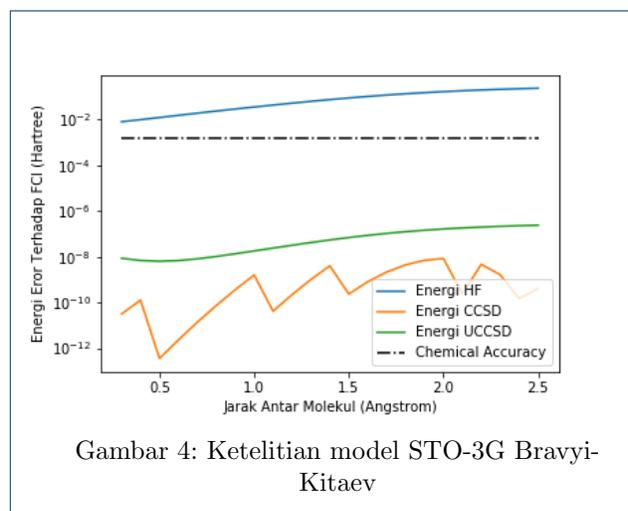
Untuk model dengan basis 631-G dilakukan dua perlakuan yaitu *active space* (AS 4) dan



Gambar 2: Ketelitian model STO-3G Jordan-Wigner



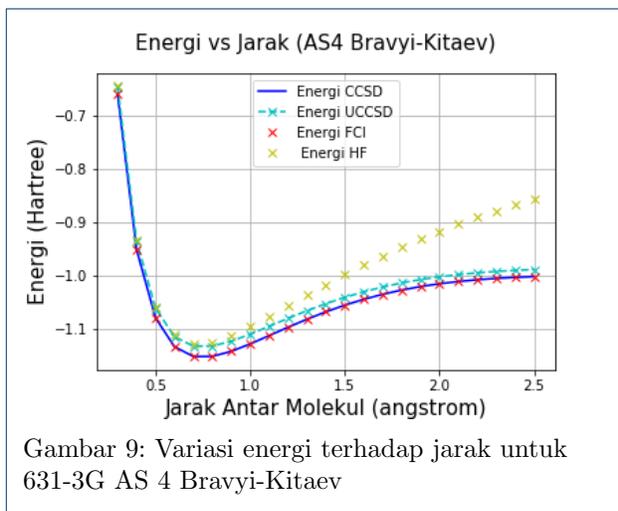
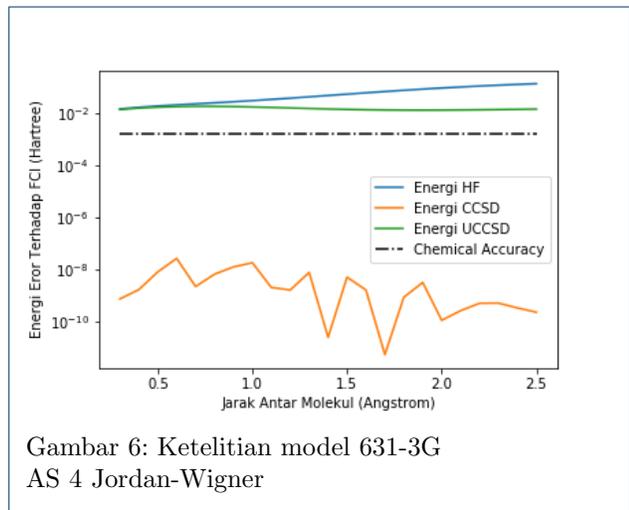
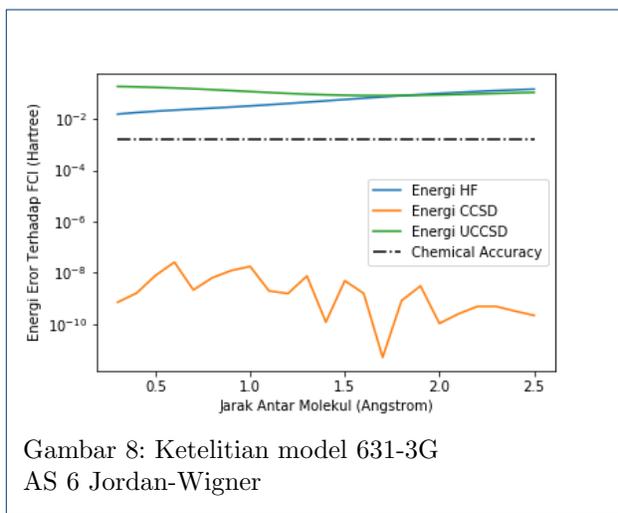
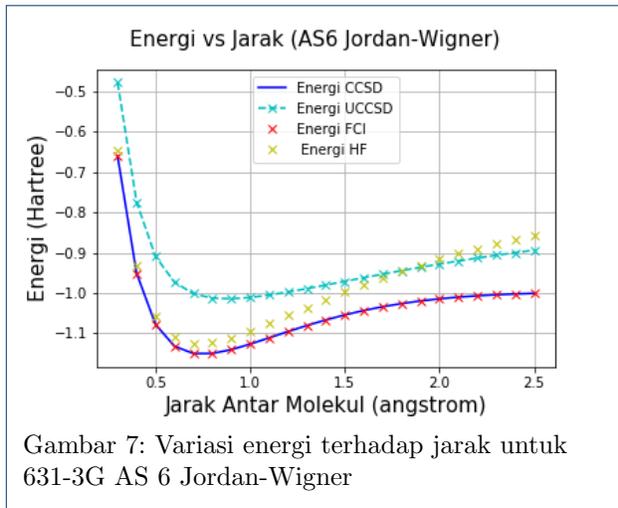
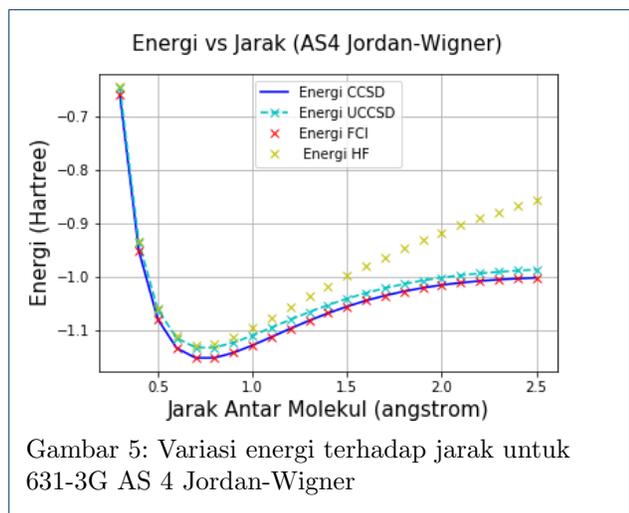
Gambar 3: Variasi energi terhadap jarak untuk STO-3G Bravyi-Kitaev



Gambar 4: Ketelitian model STO-3G Bravyi-Kitaev

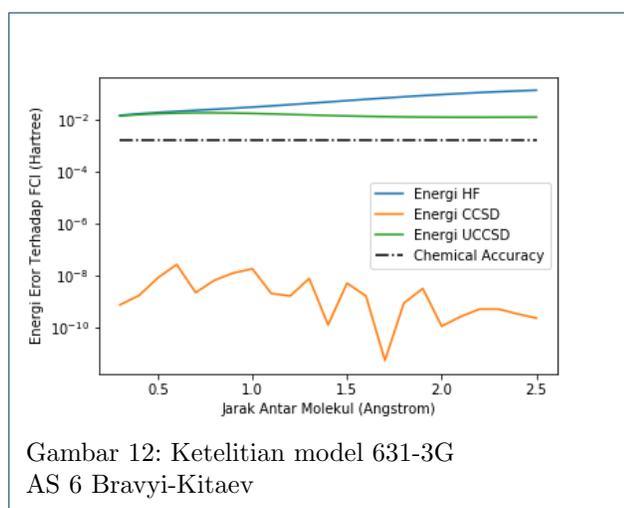
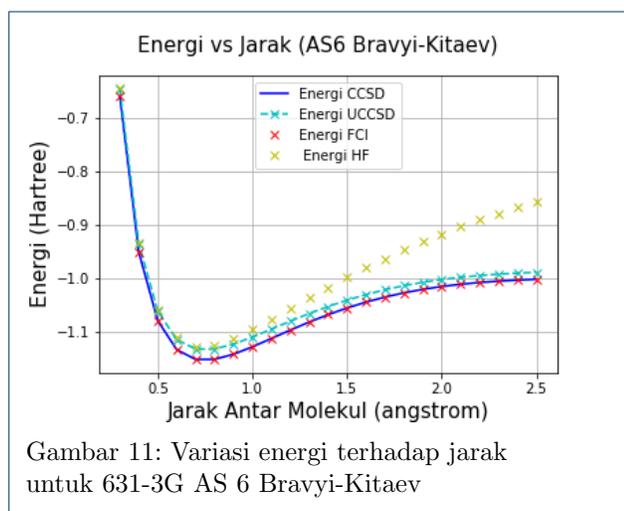
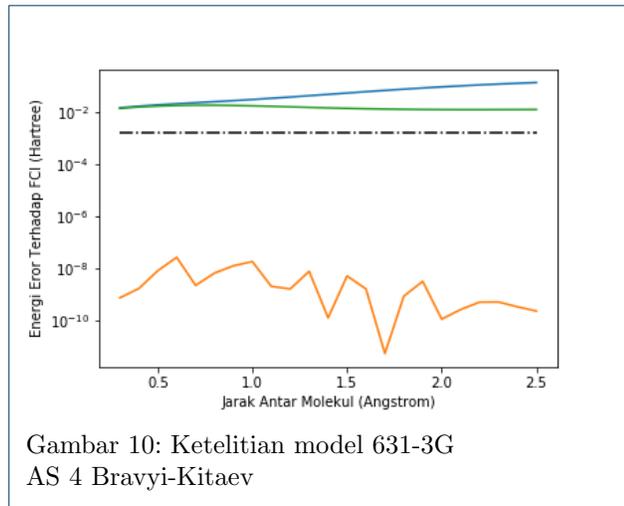
*active space* (AS 6). Untuk metode AS4 dengan transformasi Jordan-Wigner dan Bravyi-Kitaev energi

diperoleh tidak jauh berbeda dengan berbeda dengan hasil menggunakan algoritma klasik (Gambar 5, Gambar 6, Gambar 9 dan Gambar 10). Hanya saja ketelitian yang diapat belum mendekati ordo *chemical accuracy*. Sedangkan untuk AS6 dengan transformasi Jordan-Wigner (Gambar 7 dan Gambar 8) energi yang didapatkan hasilnya sangat menyimpang dengan hasil yang menggunakan algoritma klasik, ketelitiannyapun pun juga sangat jauh berbeda dengan *chemical accuracy* yakni hampir mendekati ordo  $10^0$ . Hasil dengan metode AS6 yang ditransformasikan menggunakan Bravyi-Kitaev (Gambar 11 dan Gambar 12) mirip dengan hasil pada metode AS 4.



Dari hasil yang didapatkan bahwa jumlah gerbang kuantum sangat mempengaruhi error pada pemodelan. Hal ini disebabkan semakin banyak jumlah gerbang efek dekoherensi sangat dominan. Kemudian antara transformasi Jordan-Wigner

dan Bravyi-Kitaev, transformasi Bravyi-Kitaev lebih membutuhkan gerbang kuantum yang lebih



begitu efisiensi gerbang kuantum yang digunakan untuk simulasi Hamiltonan dan fungsi gelombang lebih efisien. Setiap gerbang kuantum yang ada pada kubit untuk mewakili operator kreasi dan anihilasi pasti akan memunculkan gerbang CNOT yang berfungsi sebagai efek belitan kuantum. Efek belitan ini juga memberikan error ketika melakukan simulasi. Karena gerbang-gerbang kuantum yang dihasilkan oleh transformasi Bravyi-Kitaev lebih sedikit dibandingkan dengan Jordan-Wigner maka transformasi Bravyi-Kitaev lebih tahan akan error daripada transformasi Jordan-Wigner.

## KESIMPULAN

Algoritma kuantum *Variational Quantum Eigensolver* berhasil diimplementasikan pada komputer kuantum Rigetti 9 kubit. Dalam komputer kuantum operasi-operasi dilakukan dengan menggunakan gerbang-gerbang kuantum. Gerbang-gerbang kuantum ini juga akan memberikan gangguan terhadap sistem kuantum yang ditinjau akibat adanya efek dekoherensi. Dari penelitian ini dapat disimpulkan bahwa transformasi Bravyi-Kitaev cenderung lebih efektif dan efisien ketika mensimulasikan molekul terlebih jika molekul yang disimulasikan memiliki jumlah orbital yang banyak.

## PENULIS

- 1 M. Sidik Augi Rahmat  
Dari :  
(1) Laboratorium Fisika Komputasi, Departemen Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Gadjah Mada
- 2 Pekik Nurwantoro  
Dari :  
(1) Laboratorium Fisika Komputasi, Departemen Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Gadjah Mada

## Pustaka

1. Feynman RP. Simulating physics with computers. *Int J Theor Phys.* 1999;21(6/7).
2. McArdle S, Endo S, Aspuru-Guzik A, Benjamin S, Yuan X. Quantum computational chemistry. *arXiv preprint arXiv:180810402.* 2018;.
3. Helgaker T, Jorgensen P, Olsen J. *Molecular electronic-structure theory.* John Wiley & Sons; 2014.
4. Seeley JT, Richard MJ, Love PJ. The Bravyi-Kitaev transformation for quantum computation of electronic structure. *The Journal of chemical physics.* 2012;137(22):224109.

sedikit. Sebab transformasi Bravyi-Kitaev satu kubit tidak hanya menyimpan satu paritas, dengan