

# DAFTAR ISI

<b>Halaman Judul</b>	<b>ii</b>
<b>Halaman Pengesahan</b>	<b>iii</b>
<b>Halaman Pernyataan</b>	<b>iv</b>
<b>Halaman Persembahan</b>	<b>v</b>
<b>Halaman Motto</b>	<b>vi</b>
<b>PRAKATA</b>	<b>vii</b>
<b>DAFTAR ISI</b>	<b>viii</b>
<b>DAFTAR TABEL</b>	<b>xii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	<b>xiii</b>
<b>INTISARI</b>	<b>xv</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xvi</b>
<b>I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang Masalah . . . . .	1
1.2 Perumusan Masalah . . . . .	4
1.3 Batasan Masalah . . . . .	4
1.4 Tujuan Penelitian . . . . .	5
1.5 Manfaat Penelitian . . . . .	5
1.6 Sistematika Penulisan Tesis . . . . .	5
1.7 Keaslian Tesis . . . . .	6
<b>II TINJAUAN PUSTAKA</b>	<b>7</b>

<b>III DASAR TEORI</b>	<b>10</b>
3.1 Kuantisasi Kedua	10
3.1.1 Ruang Fock	10
3.1.2 Operator Kreasi dan Anihilasi	11
3.1.3 Relasi Antikomutasi	13
3.1.4 Wakilan Operator Untuk Satu dan Dua Elektron	14
3.1.5 Hamiltonan Molekular Elektronik	17
3.2 Fungsi Basis Molekul	18
3.2.1 <i>Slater Type Orbital</i>	18
3.2.2 <i>Gussian Type Orbital</i>	20
3.2.3 STO-kG	21
3.2.4 <i>Split-valence</i>	22
3.3 Komputasi Kuantum	22
3.3.1 Kuantum Bit	22
3.3.2 Gerbang Kuantum	25
3.4 Transformasi Fermion	31
3.4.1 Transformasi Jordan-Wigner	31
3.4.2 Transformasi Paritas	32
3.4.3 Transformasi Bravyi-Kitaev	34
3.4.4 Wakilan Operator $a_j^{(\dagger)}$ untuk $j$ Genap	39
3.4.5 Wakilan Operator $a_j^{(\dagger)}$ untuk $j$ Ganjil	40
3.5 Algoritma Kuantum	41
3.5.1 Algoritma <i>Variational Quantum Eigensolver (VQE)</i>	43
3.5.2 Keadaan Referensi	45
3.5.3 <i>Unitary Coupled Cluster</i>	45
<b>IV METODE PENELITIAN</b>	<b>50</b>
4.1 Pemilihan Basis dan Keadaan Referensi	50
4.2 Transformasi Hamiltonan	51
4.3 Fungsi Coba UCCSD	53
4.4 Pengukuran Energi	55
4.5 Optimasi	55
4.6 Diagram Alir Penelitian	56
<b>V HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	<b>57</b>
5.1 Pemilihan Basis	57

5.1.1	STO-3G . . . . .	57
5.1.2	631-G . . . . .	59
5.2	Sirkuit UCCSD . . . . .	60
5.3	Pengukuran Hamiltonan . . . . .	63
5.4	Optimasi . . . . .	65
5.5	Ketelitian Model . . . . .	67
<b>VI</b>	<b>SIMPULAN DAN SARAN</b>	<b>69</b>
6.1	Simpulan . . . . .	69
6.2	Saran . . . . .	69
	<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	<b>71</b>
	<b>LAMPIRAN</b>	<b>74</b>
<b>A</b>	<b>Sirkuit Kuantum</b>	<b>74</b>
1.1	Sirkuit H <sub>2</sub> STO-3G Jordan-Wigner . . . . .	74
1.2	Sirkuit H <sub>2</sub> STO-3G Bravyi-Kitaev . . . . .	76
1.3	<i>Small-Ansatz</i> H <sub>2</sub> Jordan-Wigner . . . . .	78
1.4	<i>Small-Ansatz</i> H <sub>2</sub> Bravyi-Kitaev . . . . .	78
1.5	Sirkuit H <sub>2</sub> AS4 Jordan-Wigner . . . . .	79
1.6	Sirkuit H <sub>2</sub> AS4 Bravyi-Kitaev . . . . .	85
1.7	Sirkuit H <sub>2</sub> AS6 Jordan-Wigner . . . . .	91
1.8	Sirkuit H <sub>2</sub> AS6 Bravyi-Kitaev . . . . .	102
<b>B</b>	<b>Pengukuran Observabel</b>	<b>114</b>
2.1	Pengukuran Hamiltonan <i>Small-Ansatz</i> H <sub>2</sub> Jordan-Wigner . . . . .	114
2.2	Pengukuran Hamiltonan <i>Small-Ansatz</i> H <sub>2</sub> Bravyi-Kitaev . . . . .	116
2.3	Pengukuran Hamiltonan H <sub>2</sub> Jordan-Wigner . . . . .	118
2.4	Pengukuran Hamiltonan H <sub>2</sub> Bravyi-Kitaev . . . . .	121
<b>C</b>	<b>Optimasi</b>	<b>124</b>
3.1	Optimasi <i>Small-Ansatz</i> H <sub>2</sub> Jordan-Wigner . . . . .	124
3.2	Optimasi <i>Small-Ansatz</i> H <sub>2</sub> Bravyi-Kitaev . . . . .	125
3.3	Optimasi H <sub>2</sub> Jordan-Wigner STO-3G . . . . .	126
3.4	Optimasi H <sub>2</sub> Bravyi-Kitaev STO-3G . . . . .	128

<b>D</b>	<b>Ketelitian</b>	<b>130</b>
4.1	<i>Small-Ansatz</i> Jordan-Wigner . . . . .	130
4.2	<i>Small-Ansatz</i> Bravyi-Kitaev . . . . .	131
4.3	H <sub>2</sub> Jordan-Wigner STO-3G . . . . .	132
4.4	H <sub>2</sub> Bravyi-Kitaev STO-3G . . . . .	133
4.5	AS4 Jordan-Wigner . . . . .	134
4.6	AS4 Bravyi-Kitaev . . . . .	135
4.7	AS6 Jordan-Wigner . . . . .	136
4.8	AS6 Bravyi-Kitaev . . . . .	137
<b>E</b>	<b>Listing Program</b>	<b>138</b>
5.1	Listing Program Operator Kreasi dan Anihilasi untuk Fungsi UCCSD	138
5.2	Listing Transformasi Jordan-Wigner Atau Bravyi-Kitaev . . . . .	139
5.3	Listing <i>Variational Quantum Eigensolver</i> . . . . .	139

# DAFTAR TABEL

4.1	Contoh Transformasi Menjadi Gerbang Kuantum . . . . .	52
5.1	Tabel Nilai Integral <i>Active-Space</i> . . . . .	60
5.2	Hasil Optimasi . . . . .	66

# DAFTAR GAMBAR

3.1	Contoh fisis Kubit untuk kubit $ 1\rangle$ diwakili dengan spin-up kubit $ 0\rangle$ spin-down. . . . .	23
3.2	Bola Bloch (Nielsen dan Chuang, 2002) . . . . .	24
3.3	Gerbang Logika Komputer Klasik (Nielsen dan Chuang, 2002) . . . . .	25
3.5	Skema Algoritma HQC . . . . .	42
3.6	Contoh circuit UCCSD operator kluster orde 1 atau eksitasi tunggal $(a_{i_1}^\dagger a_{p_1} - a_{p_2}^\dagger a_{i_1})$ . . . . .	48
3.7	Contoh circuit UCCSD operator kluster orde 2 atau eksitasi ganda $(a_{i_1}^\dagger a_{p_1} a_{i_2}^\dagger a_{p_2} - a_{p_2}^\dagger a_{i_2} a_{p_1}^\dagger a_{i_1})$ . . . . .	49
4.1	Ilustrasi Sirkuit $\exp\frac{\theta}{2}(Z_0 Z_1 Z_2)$ . . . . .	54
4.2	Ilustrasi Sirkuit $ \Psi\rangle = \exp\left[-i\theta(X_3 X_2 X_1 Y_0)\right]$ . . . . .	54
4.3	Ilustrasi Sirkuit Kuantum Pengukuran Suku Hamiltonan $X_0 Z_1 Y_2 Z_3$ . . . . .	55
4.4	Diagram Alir Penelitian . . . . .	56
5.1	Tabel Nilai Integral . . . . .	59
5.2	(a).Pengukuran Observabel $Z_0$ dan $Z_1$ Pada Sirkuit <i>Small-Ansatz</i> Jordan Wigner (b). Pengukuran Observabel $Z_0$ Pada Sirkuit H <sub>2</sub> Jordan-Wigner (c). Pengukuran Observabel $Z_1$ Pada Sirkuit H <sub>2</sub> Jordan-Wigner . . . . .	64
5.3	(a).Pengukuran Observabel $Z_2$ dan $Z_0 Z_1$ Pada Sirkuit <i>Small-Ansatz</i> Bravyi-Kitaev (b). Pengukuran Observabel $Z_2$ Pada Sirkuit H <sub>2</sub> Bravyi-Kitaev (c). Pengukuran Observabel $Z_0 Z_1$ Pada Sirkuit H <sub>2</sub> Bravyi-Kitaev . . . . .	64
5.4	Ketelitian Model . . . . .	67
A.1	Sirkuit H <sub>2</sub> Jordan-Wigner STO-3G . . . . .	76
A.2	Sirkuit H <sub>2</sub> Bravyi-Kitaev STO-3G . . . . .	78
A.3	Sirkuit <i>Small-Ansatz</i> H <sub>2</sub> Jordan-Wigner . . . . .	78

A.4	Sirkuit $H_2$ AS4 Jordan-Wigner	84
A.5	Sirkuit $H_2$ AS4 Bravyi-Kitaev	90
A.6	Sirkuit $H_2$ AS6 Jordan-Wigner	102
A.7	Sirkuit $H_2$ AS6 Bravyi-Kitaev	113
B.1	Pengukuran Hamiltonan <i>Small-Ansatz</i> $H_2$ Jordan-Wigner	115
B.2	Pengukuran Hamiltonan <i>Small-Ansatz</i> $H_2$ Bravyi-Kitaev	117
B.4	Pengukuran Hamiltonan untuk Sirkuit $H_2$ Jordan-Wigner	120
B.5	Pengukuran Hamiltonan untuk Sirkuit $H_2$ Bravyi-Kitaev	123
C.1		124
C.2	(a). Optimasi Nelder-Mead (b). Optimasi Powell (c). Optimasi BFGS	125
C.3		127
C.5		129