

**SOLUSI PERSAMAAN SCHRÖDINGER PADA ATOM
BAKHIDROGEN DAN BAKHELIUM
MENGUNAKAN KOMPUTER KUANTUM DENGAN
*1s SLATER-TYPE ORBITAL***

Skripsi

**Disusun untuk memenuhi salah satu syarat memperoleh gelar
Sarjana Sains**










**Difa Farhani Hakim
1306620040**

**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS NEGERI JAKARTA
2024**

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

Solusi Persamaan Schrödinger pada Atom Bakhidrogen dan Bakhelium
Menggunakan Komputer Kuantum dengan $1s$ Slater-Type Orbital

Nama : Difa Farhani Hakim
No. Registrasi : 1306620040

Nama	Tanda Tangan	Tanggal
Penanggung Jawab		
Dekan : Prof. Dr. Muktiningsih N. M.Si. NIP. 196405111989032001		29/07 '24
Wakil Penanggung Jawab		
Wakil Dekan I : Dr. Esmar Budi, M.T. NIP. 197207281999031002		19/07 '24
Ketua Sidang : Dr. Esmar Budi, M.T. NIP. 197207281999031002		19/07 '24
Sekretaris : Syafrima Wahyu, M.Si. NIP. 199110132023211021		19/07 '24
Anggota		
Pembimbing I : Dr. Teguh Budi Prayitno, M.Si. NIP. 198205262008121001		19/07 '24
Pembimbing II : Yanoar Pribadi Sarwono, Ph.D. NIP. 198201072022021001		19 Juli 2024
Penguji : Haris Suhendar, M.Si. NIP. 199404282022031006		19/07 '24

Dinyatakan lulus pada tanggal 11 Juli 2024.

LEMBAR PERNYATAAN ORISINALITAS

Saya yang bertanda tangan di bawah ini menyatakan bahwa skripsi dengan berjudul **“Solusi Persamaan Schrödinger pada Atom Bakhidrogen dan Bakhelium Menggunakan Komputer Kuantum dengan *1s Slater-Type Orbital*”** yang disusun sebagai syarat untuk memperoleh gelar Sarjan Sains dari Program Studi Fisika Universitas Negeri Jakarta adalah karya ilmiah yang saya buat dengan arahan para dosen pembimbing.

Segala sumber informasi yang diperoleh dari penulis lain yang telah dipublikasikan yang disebutkan dalam teks skripsi ini, telah dicantumkan dalam Daftar Pustaka sesuai dengan norma, kaidah, dan etika penulisan ilmiah.

Jika dikemudian hari ditemukan sebagian skripsi ini bukan hasil karya saya sendiri, saya bersedia menerima sanksi pencabutan gelar akademik yang saya peroleh dan sanksi-sanksi lainnya sesuai dengan peraturan perundang-undangan yang berlaku.

Jakarta, 11 Juli 2024


Difa Farhani Hakim



KEMENTERIAN PENDIDIKAN, KEBUDAYAAN, RISET DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS NEGERI JAKARTA
UPT PERPUSTAKAAN

Jalan Rawamangun Muka Jakarta 13220
Telepon/Faksimili: 021-4894221
Laman: lib.unj.ac.id

LEMBAR PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI
KARYA ILMIAH UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS

Sebagai sivitas akademika Universitas Negeri Jakarta, yang bertanda tangan di bawah ini, saya:

Nama : DIFA FARHANI HAKIM
NIM : 1306620040
Fakultas/Prodi : FMIPA / FISIKA
Alamat email : difa.farhani@gmail.com / difa.farhanihakim - 1306620040@ms.unj.ac.id

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada UPT Perpustakaan Universitas Negeri Jakarta, Hak Bebas Royalti Non-Eksklusif atas karya ilmiah:

Skripsi Tesis Disertasi Lain-lain (.....)

yang berjudul :

Solusi Persamaan Schrödinger pada Atom Borhidrogen dan
Berkhelium Menggunakan Komputer Kuantum dengan 1s Slater-
Type Orbital

Dengan Hak Bebas Royalti Non-Eksklusif ini UPT Perpustakaan Universitas Negeri Jakarta berhak menyimpan, mengalihmediakan, mengelolanya dalam bentuk pangkalan data (*database*), mendistribusikannya, dan menampilkan/mempublikasikannya di internet atau media lain secara *fulltext* untuk kepentingan akademis tanpa perlu meminta ijin dari saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan atau penerbit yang bersangkutan.

Saya bersedia untuk menanggung secara pribadi, tanpa melibatkan pihak Perpustakaan Universitas Negeri Jakarta, segala bentuk tuntutan hukum yang timbul atas pelanggaran Hak Cipta dalam karya ilmiah saya ini.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Jakarta, 02 Agustus 2024

Penulis


(DIFA FARHANI HAKIM)
nama dan tanda tangan

KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatan kepada Allah SWT atas segala rahmat dan karunia-Nya, sehingga penulis dapat menyelesaikan penyusunan skripsi ini dengan judul “Solusi Persamaan Schrödinger pada Atom Bakhidrogen dan Bakhelium Menggunakan Komputer Kuantum dengan $1s$ Slater-Type Orbital” yang dilaksanakan dari bulan Desember 2023 – Juni 2024.

Pada kesempatan ini, penulis ingin menyampaikan ucapan terima kasih kepada seluruh pihak yang secara langsung maupun tidak langsung membantu dalam penyusunan skripsi ini, terutama kepada:

1. Dr. Teguh Budi Prayitno, M.Si., selaku Pembimbing I atas bimbingan, arahan, dan dukungan dalam penulisan skripsi ini.
2. Yanoar Pribadi Sarwono, Ph.D., selaku Pembimbing II yang telah membimbing dan mendukung proses penelitian.
3. Dr. Umiatin, M.Si., selaku Koordinator Program Studi Fisika FMIPA Universitas Negeri Jakarta.
4. Prof. Dr. Mangasi Alion Marpaung, M.Si., selaku Dosen Pembimbing Akademik.
5. Seluruh dosen dan tenaga kependidikan Program Studi Fisika FMIPA Universitas Negeri Jakarta.
6. Orang tua, saudara, dan keluarga yang telah mendoakan dan mendukung proses penulisan skripsi ini.
7. Abdullah Mu'adz Muflih, Bagas Anwar Arif Nur, Muhammad Rizky Anugrah, Vivi Fitriyani selaku teman seperjuangan dalam penulisan skripsi ini.
8. Teman-teman angkatan 2019, 2020, dan 2021 program studi Fisika FMIPA Universitas Negeri Jakarta yang telah berbagi ilmu dan pengalamannya.

Penulis menyadari bahwa dalam penyusunan skripsi ini belum sempurna dan masih terdapat banyak kekurangan dalam ilmu pengetahuan dan pengalaman. Maka dari itu, penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun demi penulisan selanjutnya yang lebih baik.

Jakarta, 11 Juli 2024

Difa Farhani Hakim



ABSTRAK

DIFA FARHANI HAKIM. Solusi Persamaan Schrödinger pada Atom Bakhidrogen dan Bakhelium Menggunakan Komputer Kuantum dengan *1s Slater-Type Orbital*. Di bawah bimbingan TEGUH BUDI PRAYITNO, YANOAR PRIBADI SARWONO.

Perhitungan persamaan Schrödinger dengan algoritma komputer kuantum dan menggunakan fungsi gelombang *1s Slater-Type Orbital* (STO) pada atom bakhidrogen dan bakhelium telah dilakukan. Penyelesaian persamaan Schrödinger secara aproksimasi menimbulkan adanya kehilangan korelasi elektron pada sistem kuantum. Selain itu, penggunaan fungsi gelombang gaussian tidak mampu mereplikasi fungsi gelombang eksak *1s*, sehingga terdapat kehilangan keakuratan energi dasar sistem kuantum. Maka dari itu, pada penelitian ini digunakan algoritma komputer kuantum dan fungsi gelombang *1s* STO untuk mengembalikan korelasi antar elektron dan menggunakan fungsi gelombang yang sesuai pada atom bakhidrogen dan bakhelium. Perhitungan ini dilakukan menggunakan algoritma *Variational Quantum Eigensolver* yang terdapat pada *library* qiskit. Hasil perhitungan menggunakan basis set *1s* STO memperoleh peningkatan performa dibandingkan dengan menggunakan basis set STO-3G dan juga mendekati hasil perhitungan 6-31G.

Kata Kunci: Persamaan Schrödinger, Komputer Kuantum, *Slater-Type Orbital*

ABSTRACT

DIFA FARHANI HAKIM. Schrödinger Equation Solution on Hydrogen-like and Helium-like Atoms using Quantum Computing with 1s Slater-Type Orbital. Under supervision by TEGUH BUDI PRAYITNO, YANOAR PRIBADI SARWONO.

The Schrödinger equation is calculated with a quantum computer algorithm and using the 1s Slater-Type Orbital (STO) wave function on hydrogen-like and helium-like atoms. Solving the Schrödinger equation by approximation causes the loss of electron correlation in the quantum system. In addition, the use of gaussian wave functions is not able to replicate the exact 1s wave function behavior, resulting in a loss of accuracy in the ground state energy of the quantum system. Therefore, in this study, the quantum computer algorithm and the 1s STO wave function are used to restore the correlation between electrons and use the appropriate wave function of hydrogen-like and helium-like atoms. This calculation is done using the Variational Quantum Eigensolver algorithm found in the qiskit library. The results of calculations using the 1s STO basis set obtained improved performance compared to using the STO-3G basis set and approached the results of the 6-31G calculation.

Keywords: Schrödinger Equation, Quantum Computing, Slater-Type Orbital

DAFTAR ISI

Halaman

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI.....	i
LEMBAR PERNYATAAN ORISINALITAS.....	ii
LEMBAR PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI.....	iii
KATA PENGANTAR.....	iv
ABSTRAK	vi
ABSTRACT	vii
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR.....	x
DAFTAR SINGKATAN.....	xi
DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR LAMPIRAN	xiii
BAB I PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Rumusan Masalah dan Pembatasan Masalah.....	3
C. Tujuan Penelitian	3
D. Manfaat Penelitian	4
BAB II KAJIAN PUSTAKA	5
A. Struktur Elektronik dengan Hamiltonian Kuantisasi Kedua.....	5
B. Hamiltonian Atom Bakhidrogen dan Bakhelium.....	7
C. Komputer Kuantum.....	9
D. Basis Set.....	9
E. Operator Pemusnahan dan Pembentukan.....	11

F.	Transformasi Jordan-Wigner	12
G.	Gerbang Kuantum	13
H.	<i>Ansatz</i>	15
I.	Algoritma <i>Variational Quantum Eigensolver</i> (VQE)	16
J.	<i>State Overlap</i>	18
K.	<i>Library</i> Qiskit	19
L.	<i>Library</i> PySCF	19
BAB III METODOLOGI PENELITIAN		21
A.	Waktu dan Tempat Penelitian	21
B.	Metode Penelitian	21
C.	Teknik Pengumpulan dan Analisa Data	26
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN		28
A.	Energi Dasar Atom Bakhidrogen 1s STO	28
B.	Energi Dasar Atom Bakhelium 1s STO	30
C.	Energi Dasar Atom Hidrogen dan Helium	32
D.	Nilai Ekspektasi Atom Hidrogen dan Helium	35
E.	<i>State Overlap</i> Atom Hidrogen dan Helium	39
F.	Peta Hasil Penelitian	42
G.	Kelebihan dan Kekurangan Penelitian	42
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN		43
A.	Kesimpulan	43
B.	Saran	43
DAFTAR PUSTAKA		44
LAMPIRAN		48
DAFTAR RIWAYAT HIDUP		53

DAFTAR GAMBAR

No		Halaman
Gambar 2.1	Perbandingan fungsi STO dan GTO.....	11
Gambar 2.2	<i>Ansatz</i> pendekatan kimia UCC.....	16
Gambar 2.3	<i>Hardware Efficient Ansatz</i>	16
Gambar 2.4	Diagram VQE	17
Gambar 3.1	<i>Ansatz</i> HEA dengan 8 parameter.....	25
Gambar 3.2	Diagram alir penelitian.....	26
Gambar 4.1	Grafik perhitungan energi dasar pada atom bakhidrogen.....	29
Gambar 4.2	Grafik perhitungan energi dasar pada atom bakhelium.....	31
Gambar 4.3	Grafik perhitungan energi dasar pada atom hidrogen	33
Gambar 4.4	Grafik perhitungan energi dasar pada atom helium	34
Gambar 4.5	Grafik perhitungan nilai ekspektasi atom hidrogen dengan basis set STO-3G	36
Gambar 4.6	Grafik perhitungan nilai ekspektasi atom hidrogen dengan basis set 1s STO.....	36
Gambar 4.7	Grafik perhitungan nilai ekspektasi atom helium dengan basis set STO-3G	37
Gambar 4.8	Grafik perhitungan nilai ekspektasi atom helium dengan basis set 1s STO.....	38
Gambar 4.9	Grafik perhitungan <i>state overlap</i> pada atom hidrogen.....	40
Gambar 4.10	Grafik perhitungan <i>state overlap</i> pada atom helium	41

DAFTAR SINGKATAN

COBYLA	:	<i>Constrained Optimization by Linear Approximation</i>
CX	:	<i>Controlled-X</i>
CZ	:	<i>Controlled-Z</i>
DFT	:	<i>Density Function Theory</i>
GTO	:	<i>Gaussian-Type Orbital</i>
HEA	:	<i>Hardware Efficient Ansatz</i>
HF	:	<i>Hartree-Fock</i>
IBM	:	<i>Internasional Business Machines</i>
JW	:	<i>Jordan-Wigner</i>
MP2	:	<i>Møller-Plesset perturbation theory</i>
NMR	:	<i>Nuclear Magnetic Resonance</i>
NumPy	:	<i>Numerical Python</i>
PySCF	:	<i>Python-based Simulations of Chemistry Framework</i>
QPE	:	<i>Quantum Phase Estimation</i>
QSVM	:	<i>Quantum Super Vector Machine</i>
RX	:	<i>Rotasi sumbu-x</i>
RY	:	<i>Rotasi sumbu-y</i>
RZ	:	<i>Rotasi sumbu-z</i>
SciPy	:	<i>Scientific Python</i>
STO	:	<i>Slater-Type Orbital</i>
UCC	:	<i>Unitary Coupled-Cluster</i>
VQC	:	<i>Variational Quantum Classifier</i>
VQE	:	<i>Variational Quantum Eigensolver</i>

DAFTAR TABEL

No	Halaman
Tabel 2.1 Evaluasi integral elektron fungsi $1s$ STO	8
Tabel 2.2 Transformasi Jordan-Wigner	13
Tabel 2.3 Gerbang kuantum <i>unary</i>	14
Tabel 2.4 Nilai Ekspektasi Komponen Qubit Hamiltonian	17
Tabel 3.1 Rincian garis waktu pelaksanaan penelitian	21
Tabel 3.2 Evaluasi integral elektron pada atom bakhidrogen	23
Tabel 3.3 Evaluasi integral elektron pada atom bakhelium	23
Tabel 4.1 Hasil perhitungan energi dasar pada atom bakhidrogen	30
Tabel 4.2 Hasil perhitungan energi dasar pada atom bakhelium	32
Tabel 4.3 Hasil perhitungan energi dasar pada atom hidrogen dan helium	35



DAFTAR LAMPIRAN

No	Halaman
Lampiran 1. Alur perhitungan metode <i>Variational Quantum Eigensolver</i>	49
Lampiran 2. Hamiltonian Qubit pada atom bakhidrogen dan bakhelium.....	52

