

# BAB I

## PENDAHULUAN

### A. Latar Belakang

Salah satu konsep utama dalam mekanika kuantum untuk menggambarkan struktur elektronik atom, yaitu persamaan Schrödinger. Persamaan ini memberikan informasi tentang fungsi gelombang dan energi pada sebuah sistem kuantum. Secara umum, menyelesaikan persamaan Schrödinger secara analitis sulit dilakukan, kecuali pada sistem kuantum yang sangat sederhana, seperti atom hidrogen. Oleh karena itu, untuk memprediksi sifat-sifat sistem kuantum yang lebih besar diperlukan metode aproksimasi. Penyelesaian persamaan Schrödinger secara aproksimasi menyebabkan adanya kehilangan korelasi elektron pada sistem kuantum. Hal ini disebabkan oleh transformasi pada sistem kuantum N-elektron menjadi sistem kuantum 1-elektron (Rahman et al., 2018).

Metode baru telah dikembangkan untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger, yaitu dengan menggunakan komputer kuantum. Istilah komputer kuantum muncul setelah proposal yang disampaikan oleh Feynman di tahun 1982. Komputer ini mampu mensimulasikan sistem kuantum secara efisien dan tidak mengalami kenaikan sumber daya secara eksponensial (Feynman, 1982). Selain itu, diharapkan bahwa komputer kuantum dapat menyelesaikan permasalahan pada komputer klasik dan memperoleh keuntungan dari penggunaan prinsip-prinsip mekanika kuantum (Boyn et al., 2021; Babbush et al., 2023).

Komputer kuantum memiliki perbedaan mendasar pada unit terkecil dalam merepresentasikan sebuah data. Pada komputer klasik, bit merupakan bilangan biner antara keadaan 0 atau keadaan 1. Sedangkan, pada komputer kuantum memiliki bit yang berupa keadaan 0, 1 atau superposisi dari keadaan bit 0 dan 1. Bit pada komputer kuantum dikenal dengan istilah bit kuantum (qubit). Penggunaan qubit dapat mempercepat perhitungan komputasi secara eksponensial dengan adanya komputasi paralel (Zhang, 2022; Qing & Xie, 2023).

Penyelesaian persamaan Schrödinger secara klasik telah dilakukan sebelumnya, antara lain solusi menggunakan fungsi basis 1-D pada kasus bakhidrogen (Rahman

et al., 2018) dan bakhelium (Rahman et al., 2021). Adapun penyelesaian menggunakan teknologi komputer kuantum, antara lain solusi pada molekul H<sub>2</sub> dengan metode *Quantum Phase Estimation* (QPE) (Whitfield et al., 2011; Zhang, 2022) dan metode *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) (Peruzzo et al., 2014; O'Malley et al., 2016; Abu-Nada, 2021; Qing & Xie, 2023).

Di tahun 2014, Peruzzo et al. mengembangkan algoritma *Variational Quantum Eigensolver* (VQE). Algoritma ini bekerja dengan mengeksplorasi struktur elektronik sebuah sistem kuantum dengan prinsip variasi Rayleigh-Ritz (Peruzzo et al., 2014). Algoritma VQE memiliki tujuan untuk mencari energi keadaan kuantum yang terendah untuk mendapatkan energi dasar sebuah sistem kuantum (Anaya & Delgado-Cepeda, 2022). Proses algoritma ini dimulai dari persiapan pembentukan fungsi gelombang coba (*ansatz*), diikuti dengan perhitungan nilai ekspektasi energi sistem kuantum, dan dilakukan optimasi secara klasik untuk mendapatkan energi terendah (Qing & Xie, 2023). Pada penerapannya, pemilihan *ansatz* dan pembentukan keadaan sistem kuantum akan sangat menentukan energi terendah yang diperoleh. Penggunaan *ansatz* dan keadaan sistem kuantum yang sederhana dapat memberikan korelasi yang hilang pada sistem kuantum (O'Malley et al., 2016).

Pada proses pembentukan sistem kuantum, basis set *Gaussian-Type Orbital* (GTO) sering dipakai sebagai dasar dalam mengevaluasi integral elektron (Nurlina & Bidalo, 2021). Namun, basis set ini memiliki tingkat keakuratan yang lebih rendah. Hal tersebut disebabkan oleh pendekatan fungsi gelombang eksak sebuah sistem kuantum dengan kombinasi linear fungsi eksponensial gaussian,  $\psi(r) = e^{-ar^2}$ . Pendekatan tersebut menyebabkan amplitudo fungsi gelombang pada jarak mendekati inti atom ( $r = 0$ ) tidak sesuai dan peluruhan yang cepat pada jarak yang membesar. Hal tersebut tidak sama dengan amplitudo fungsi gelombang eksak atom hidrogen yang curam pada jarak mendekati inti atom dan peluruhan lebih lama pada jarak yang membesar (Majumdar et al., 2021; Libretexts, 2023). Selain basis set GTO, terdapat basis set *Slater-Type Orbital* (STO) yang dikembangkan oleh J. C. Slater. Basis set ini memiliki kemiripan dengan fungsi gelombang eksak 1s

hidrogen dengan menggunakan fungsi  $\psi(r) = e^{-\alpha r}$  (Caffarel, 2019; Lesiuk et al., 2019). Pada sistem kuantum yang sederhana basis set STO dapat digunakan untuk meningkatkan keakuratan energi dasar sistem kuantum tanpa perlu menggunakan sumber daya tambahan pada simulasi kuantum.

Dalam penelitian ini, metode VQE akan digunakan untuk menerapkan perhitungan energi dasar pada sistem kuantum bakhidrogen (H hingga  $O^{7+}$ ) dan bakhelium (H<sup>-</sup> hingga  $O^{6+}$ ) dengan basis set 1s STO. Algoritma ini diterapkan pada simulasi komputer kuantum yang disediakan oleh IBM Quantum (IBM Quantum, 2023) dengan *library* Qiskit (Qiskit contributors, 2023) yang menggunakan bahasa pemrograman Python. Hasil energi dasar yang diperoleh akan dibandingkan terhadap energi dasar atom bakhidrogen dan bakhelium dengan basis set STO-3G, energi dasar eksak atom bakhidrogen, dan energi dasar atom bakhelium menggunakan Hartree-Fock basis set 6-31G.

## **B. Rumusan Masalah dan Pembatasan Masalah**

Dari penjelasan di atas, perumusan masalah yang akan dikaji dalam penelitian ini adalah melakukan perhitungan energi dasar pada sistem bakhidrogen dan bakhelium menggunakan basis set 1s STO pada komputer kuantum dan menganalisis perbandingannya terhadap hasil perhitungan menggunakan metode yang lain.

Adapun batasan masalah dalam penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Hasil perhitungan menggunakan metode *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) dan penggunaan *ansatz* yang sama.
2. Hasil yang disajikan berupa energi dasar pada sistem kuantum bakhidrogen dan bakhelium.

## **C. Tujuan Penelitian**

Adapun tujuan dalam penelitian ini terbagi menjadi tujuan umum dan khusus. Tujuan umum pada penelitian ini adalah untuk mencari pengaruh basis set 1s STO terhadap energi dasar atom bakhidrogen dan bakhelium. Sedangkan, tujuan khusus pada penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Menghitung energi dasar menggunakan basis set  $1s$  STO pada atom bakhidrogen dan bakhelium.
2. Membandingkan hasil energi dasar menggunakan basis set  $1s$  STO dan basis set lainnya pada atom bakhidrogen dan bakhelium.
3. Menganalisis hasil energi dasar menggunakan basis set  $1s$  STO pada atom bakhidrogen dan bakhelium.

#### **D. Manfaat Penelitian**

Adapun manfaat dalam penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Mengaplikasikan metode VQE dalam perhitungan energi dasar atom bakhidrogen dan bakhelium dengan komputer kuantum.
2. Menerapkan basis set STO pada sistem kuantum sederhana.
3. Sebagai referensi untuk penelitian selanjutnya dalam menghitung energi dasar pada atom Li, Be, B, dan sebagainya.