

SIMULASI ALGORITMA *VARIATIONAL QUANTUM EIGENSOLVER* UNTUK PENENTUAN ENERGI KEADAAN DASAR DAN KURVA *POTENTIAL ENERGY SURFACE* MOLEKUL NH_3

Salwa Aqilah Azzahra

Universitas Pertahanan RI

Email: azzahrasalwaaqilah@gmail.com

Abstrak

Komputasi kuantum menawarkan peluang besar dalam bidang kimia dan ilmu material, terutama untuk menyelesaikan masalah yang tidak dapat dipecahkan oleh komputasi klasik. Keunggulan ini berasal dari kemampuannya mengatasi tantangan yang rumit dengan memanfaatkan prinsip-prinsip kuantum seperti entanglement dan superposisi. Salah satu tantangan utama dalam kimia kuantum adalah menghitung energi keadaan dasar suatu molekul. Pemahaman ini sangat penting untuk kemajuan di berbagai bidang, termasuk pengembangan obat-obatan baru dalam farmasi serta penciptaan material mutakhir dengan sifat yang lebih kompleks. Melalui kombinasi teknik optimasi klasik dan kuantum, algoritma Variational Quantum Eigensolver (VQE) muncul sebagai solusi yang efisien, khususnya untuk perangkat kuantum skala menengah. Dalam penelitian ini, algoritma VQE diimplementasikan menggunakan perangkat lunak PennyLane untuk menghitung energi keadaan dasar molekul NH_3 . Selain itu, studi ini juga mengeksplorasi pemilihan active space guna menyederhanakan kompleksitas komputasi.

Kata Kunci: VQE, Active Space, PES.

Abstract

Quantum computing offers significant opportunities in the fields of chemistry and materials science, particularly for solving problems that are intractable for classical computation. This advantage stems from its ability to tackle complex challenges by leveraging quantum principles such as entanglement and superposition. One of the major challenges in quantum chemistry is the calculation of a molecule's ground state energy. Understanding this property is crucial for progress in various areas, including the development of new pharmaceutical drugs and the design of advanced materials with complex properties. By combining classical and quantum optimization techniques, the Variational Quantum Eigensolver (VQE) algorithm has emerged as an efficient solution, especially for Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) devices. In this study, the VQE algorithm is implemented using the PennyLane software framework to calculate the ground state energy of the NH_3 molecule. Additionally, this work explores the selection of the active space to reduce computational complexity.

Keywords: VQE, Active Space, PES.

PENDAHULUAN

Komputasi kuantum sebagai teknologi terobosan, berpotensi mengubah paradigma penelitian komputasi dalam kimia dan ilmu material. Berbeda dengan komputer klasik, sistem kuantum mampu mencapai *quantum advantage* dalam menyelesaikan masalah kimia yang sangat kompleks dengan memanfaatkan prinsip superposisi kuantum dan keadaan terjerat [1]. Beberapa tahun terakhir, riset untuk mengembangkan metode komputasi kuantum dalam kimia semakin berkembang pesat [2]. Salah satu tantangan kunci dalam kimia kuantum adalah penentuan energi keadaan dasar (*ground state energy*) molekul, yang memiliki implikasi luas di bidang teknik kimia, ilmu material, dan pengembangan obat. Pada sistem kuantum kompleks, pendekatan komputasi klasik menjadi tidak efisien karena pertumbuhan eksponensial fungsi gelombang *Full Configuration Interaction* (FCI) dan energi keadaan dasar [3]. Di sinilah komputasi kuantum, khususnya algoritma *Variational Quantum Eigensolver* (VQE), menawarkan solusi lebih efektif dengan memanfaatkan hukum mekanika kuantum [4]. VQE mengadopsi pendekatan hibrida kuantum-klasik melalui optimasi parameter ansatz dan pengukuran keadaan kuantum, menjadikannya ideal untuk perangkat kuantum skala menengah yang masih rentan noise (*Noisy Intermediate-Scale Quantum*/NISQ). Dalam penelitian ini, berfokus pada proses *benchmarking active space* dengan menentukan kombinasi terbaik antara *active orbital* dan *active electron* pada sistem molekul yang dikaji [5]. Proses ini sangat krusial dalam konteks algoritma *Variational Quantum Eigensolver* (VQE), karena pemilihan *active space* yang tepat secara langsung memengaruhi kemampuan algoritma dalam merepresentasikan fungsi gelombang molekul secara akurat.

HASIL DAN PEMBAHASAN

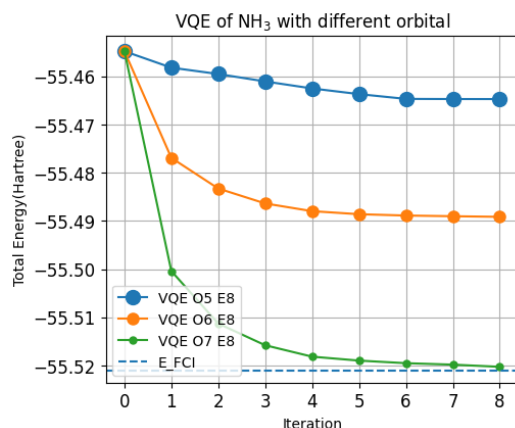
Melalui *benchmarking* ini, dipilih konfigurasi *active space* yang memberikan hasil energi ground state paling mendekati nilai referensi. Sehingga simulasi kuantum menjadi lebih andal. Nilai referensi yang digunakan dalam evaluasi adalah energi ground state yang dihitung menggunakan metode *Full Configuration Interaction* (FCI), yang dikenal sebagai metode paling akurat namun sangat mahal secara komputasi klasik. Dengan menentukan *active space* yang optimal, tidak hanya akurasi hasil VQE dapat ditingkatkan, tetapi juga efisiensi komputasi pada perangkat kuantum dapat dijaga, terutama dalam era **Noisy Intermediate-Scale Quantum** (NISQ) saat ini, di mana jumlah qubit dan ketahanan terhadap noise masih sangat terbatas [6].

Ground state energy vs. number of active orbitals

Dalam simulasi berbasis PennyLane, representasi sistem kuantum dilakukan melalui penggunaan qubit yang dikaitkan dengan orbital molekul. Setiap orbital merepresentasikan dua qubit, karena masing-masing orbital dapat menampung dua elektron dengan spin yang berbeda. Dalam penelitian ini, penulis memvariasikan jumlah *active orbital* untuk mengamati pengaruhnya terhadap akurasi perhitungan energi ground state menggunakan algoritma *Variational Quantum Eigensolver* (VQE). Jumlah *active electron* yang digunakan pada seluruh konfigurasi tetap, yaitu sebanyak 8 elektron, sementara jumlah *active orbital* divariasikan menjadi 5, 6, dan 7.

Pemilihan rentang orbital ini didasarkan pada jumlah total orbital molekul NH_3 , yaitu sebanyak 8 buah. Meskipun secara teoritis simulasi dapat diperluas hingga melibatkan seluruh 8 orbital, keterbatasan sumber daya komputasi yang tersedia pada perangkat penulis menjadi faktor pembatas, sehingga simulasi maksimal dilakukan hanya sampai 7 orbital. Jumlah orbital yang lebih besar secara langsung berimplikasi pada jumlah qubit yang lebih banyak dalam sirkuit kuantum. Sebagai contoh, konfigurasi dengan 7 orbital membutuhkan 14 qubit.

Hasil simulasi menunjukkan bahwa semakin banyak *active orbital* yang digunakan, yang berarti semakin besar pula jumlah qubit dalam system, maka semakin dekat pula hasil perhitungan energi *ground state* terhadap nilai referensi *Full Configuration Interaction* (FCI). Hal ini terlihat jelas pada Gambar 1, di mana konfigurasi dengan 7 orbital (14 qubit) menghasilkan nilai energi yang paling mendekati energi FCI dibandingkan konfigurasi dengan orbital yang lebih sedikit. Temuan ini menegaskan bahwa peningkatan ukuran *active space* dapat meningkatkan akurasi simulasi VQE, meskipun harus diimbangi dengan ketersediaan sumber daya komputasi yang memadai.



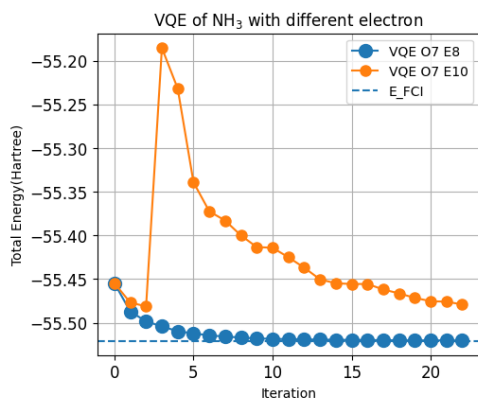
Gambar 1. NH_3 with different orbital

Ground state energy vs. electron number (fixed active orbital)

Setelah diketahui bahwa konfigurasi orbital aktif terbaik untuk mendekati nilai *ground state energy* adalah pada orbital ke-7, penulis melanjutkan analisis untuk mengevaluasi pengaruh jumlah elektron aktif terhadap akurasi hasil simulasi. Penelitian ini bertujuan untuk menguji asumsi umum bahwa semakin banyak elektron yang disertakan dalam *active space*, maka hasilnya akan semakin mendekati energi dasar. Namun, hasil simulasi menunjukkan bahwa asumsi tersebut tidak berlaku; justru penambahan jumlah elektron secara sembarangan dapat menyebabkan peningkatan energi total dan menjauh dari nilai referensi *ground state energy*.

Fenomena ini dapat dijelaskan melalui prinsip pengisian orbital elektron, yang mengikuti aturan Aufbau. Dalam aturan ini, elektron akan mengisi orbital yang memiliki energi lebih rendah terlebih dahulu [7]. Setelah semua orbital berenergi rendah terisi penuh, elektron-elektron berikutnya akan mengisi orbital dengan tingkat energi yang lebih tinggi [8]. Penambahan elektron ke orbital berenergi tinggi secara tidak tepat akan meningkatkan energi total sistem secara keseluruhan, bukan menurunkannya. Hal ini juga terlihat konsisten pada hasil simulasi dalam penelitian ini.

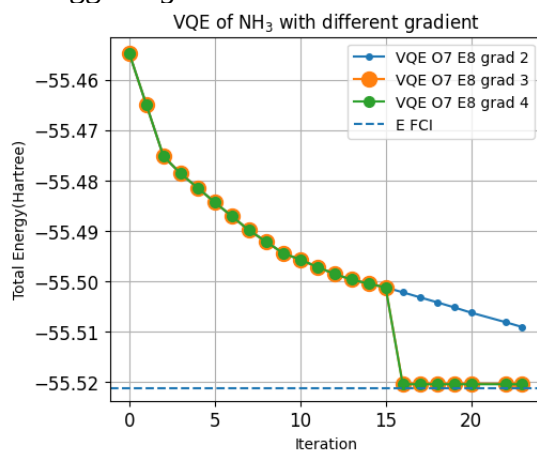
Penulis melakukan variasi jumlah elektron aktif menjadi 8 dan 10, sementara jumlah *active orbital* tetap dipertahankan pada 7 orbital. Hasil simulasi kemudian dianalisis dan divisualisasikan dalam Gambar 2, yang menunjukkan bahwa konfigurasi dengan 8 elektron memberikan hasil yang paling mendekati *ground state energy* referensi. Sebaliknya, ketika jumlah elektron ditingkatkan menjadi 10, terjadi peningkatan energi yang signifikan, menandakan bahwa sistem semakin jauh dari kondisi dasar. Temuan ini menegaskan pentingnya keseimbangan yang tepat antara jumlah orbital dan elektron aktif dalam pemodelan menggunakan algoritma *Variational Quantum Eigensolver* (VQE) agar diperoleh hasil yang optimal dan akurat.



Gambar 2. NH_3 with different electron

Ground state energy vs. gradient (fixed active space)

Setelah didapat *active orbital* 7 dan *active electron* 8 sebagai parameter *active space*, penulis ingin mengetahui pengaruh gradien yang digunakan, semakin kecil/teliti gradien yang digunakan maka akan semakin dekat dengan *ground state energy*, akan tetapi perlu diperhatikan juga bahwa semakin tinggi ketelitian gradien yang digunakan maka akan semakin banyak waktu komputasi yang diperlukan karena akan semakin banyak iterasi yang digunakan agar konvergen hingga ke *ground state*.



Gambar 3. NH_3 with different gradient

Perhitungan Variasional terhadap Active Space dan Persentase Error Relatif

Penulis memvariasikan jumlah *active orbital*, *active electron*, dan *gradien ground state energy* yang dihasilkan dengan metode Adaptive VQE, dan persentase error dalam sebuah tabel di bawah. Kombinasi *Active Orbital* 7, *Active Electron* 8, dan *gradient* (n) $3e-4$ menunjukkan error paling rendah dibanding kombinasi *active space* yang lain sehingga kombinasi inilah yang terbaik untuk molekul NH_3 .

AO	AE	Qubits	Excitations	Gradient (n)	Adapt-VQE [Ha]	% error
5	6	10	54	$3e-3$	-55.47449586	0.08402%
6	6	12	117	$3e-3$	-55.49653443	0.04433%
6	8	12	92	$3e-3$	-55.48921645	0.0575%
6	10	12	35	$3e-3$	-55.45991262	0.11029%
7	8	14	204	$3e-3$	-55.5202795896	0.00156%
7	8	14	204	$3e-4$	-55.52037556	0.0013%
7	10	14	140	$3e-3$	-55.18531234	0.604%

Potential Energy Surface (PES) NH_3 dengan Active Space yang Dioptimalkan

Penentuan *Potential Energy Surface* (PES) dalam penelitian ini bertujuan untuk memahami bagaimana energi total molekul berubah seiring dengan variasi geometri atomik,

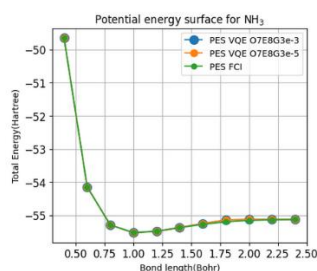
khususnya dalam konteks energi *ground state*. PES memberikan informasi penting mengenai struktur kesetimbangan molekul, serta menjadi dasar untuk menganalisis sifat kimia dan dinamika reaksi [9]. Setelah diperoleh konfigurasi *active space* terbaik yaitu kombinasi *active orbital* dan *active electron* yang menghasilkan nilai energi paling mendekati nilai referensi FCI maka langkah selanjutnya adalah membangun kurva PES secara sistematis [10].

PES dilakukan melalui pendekatan *distance variation*, yakni dengan melakukan variasi jarak antar-atom dalam molekul. Awalnya, pergeseran hanya dilakukan pada salah satu atom dalam satu arah, seperti pada sumbu x atau y. Namun, pendekatan ini tidak langsung menghasilkan PES yang sesuai dengan referensi FCI. Oleh karena itu, dilakukan proses *trial and error*, di mana posisi atom dimodifikasi secara bertahap dan hasilnya dibandingkan dengan data FCI. Melalui simulasi ini, ditemukan bahwa pergeseran secara simultan pada sumbu x dan y untuk semua atom dalam molekul memberikan hasil PES yang paling optimal dan mendekati bentuk PES referensi FCI. Hal ini menunjukkan pentingnya mempertimbangkan variasi geometri secara menyeluruh dan menyimulasikan konfigurasi molekul secara hati-hati untuk mendapatkan gambaran energi potensial yang akurat.

Potential Energy Surface (PES) merepresentasikan peta energi potensial dari suatu sistem molekuler sebagai fungsi dari posisi relatif atom-atom yang menyusun molekul tersebut. Dengan kata lain, PES menggambarkan bagaimana energi total sistem berubah seiring dengan variasi konfigurasi geometris atom-atom dalam molekul. Setiap titik pada permukaan ini mencerminkan energi *ground state* molekul pada suatu struktur tertentu. Dengan memetakan PES, kita dapat mengidentifikasi titik-titik minimum energi yang mengindikasikan konfigurasi geometris paling stabil, atau sering disebut sebagai struktur kesetimbangan molekul. Oleh karena itu, pemetaan PES berperan penting dalam optimasi geometri, yaitu proses penentuan struktur molekul dengan energi terendah.

Pada penelitian ini, dilakukan pemetaan PES menggunakan algoritma *Adaptive-Variational Quantum Eigensolver* (*Adaptive-VQE*), dan hasilnya dibandingkan dengan PES yang diperoleh dari metode *Full Configuration Interaction* (FCI) sebagai nilai referensi. Berdasarkan Gambar 4, terlihat bahwa setiap titik energi yang diperoleh dari *Adaptive-VQE* pada berbagai variasi panjang ikatan (*bond length*) menunjukkan kesesuaian yang sangat baik dengan hasil FCI. Hal ini ditunjukkan oleh tingkat akurasi tinggi, dengan nilai *error* relatif hanya sebesar 0,022%, yang menunjukkan perbedaan yang sangat kecil antara hasil simulasi kuantum dan nilai eksak.

Hasil ini menunjukkan bahwa algoritma *Adaptive-VQE* sangat efektif dalam menghasilkan estimasi energi *ground state* yang akurat, bahkan jika dibandingkan dengan metode eksak seperti FCI. Dengan demikian, *Adaptive-VQE* terbukti menjadi pendekatan yang sangat potensial untuk digunakan dalam simulasi sistem molekuler secara efisien pada perangkat kuantum, khususnya dalam konteks era NISQ (*Noisy Intermediate-Scale Quantum*), di mana efisiensi dan ketahanan terhadap noise menjadi sangat penting.



error : 0.022%

Gambar 4. PES VQE-PES FCI NH₃

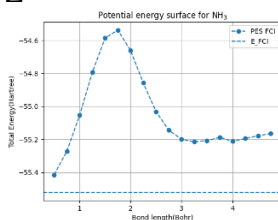
KESIMPULAN

Penelitian ini menunjukkan bahwa algoritma *Variational Quantum Eigensolver* (VQE), khususnya dengan pendekatan *Adaptive-VQE*, mampu menghitung energi keadaan dasar molekul NH_3 secara akurat dan efisien, bahkan jika dibandingkan dengan metode referensi *Full Configuration Interaction* (FCI) yang secara komputasi jauh lebih mahal. Melalui eksplorasi konfigurasi *active space*, diperoleh bahwa kombinasi **active orbital 7 dan active electron 8**, dengan nilai **gradien $3\text{e-}4$** , menghasilkan nilai energi paling mendekati referensi FCI dengan **error relatif hanya 0,0013%**.

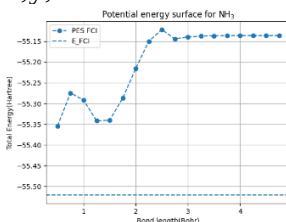
Selain itu, pemetaan *Potential Energy Surface* (PES) yang dilakukan menggunakan konfigurasi *active space* terbaik juga menunjukkan kesesuaian yang sangat baik dengan hasil FCI, dengan nilai **error relatif hanya 0,022%**. Hal ini menunjukkan bahwa *Adaptive-VQE* tidak hanya efektif dalam menghitung energi keadaan dasar, tetapi juga dapat diandalkan dalam membangun kurva energi potensial molekul. Secara keseluruhan, hasil penelitian ini menegaskan bahwa algoritma VQE, dengan pemilihan *active space* yang optimal, merupakan pendekatan yang sangat menjanjikan dalam simulasi kuantum molekul, terutama pada perangkat kuantum skala menengah yang rentan terhadap *noise*. Temuan ini memberikan kontribusi penting dalam upaya mengembangkan metode simulasi kuantum yang lebih efisien dan akurat untuk aplikasi di bidang kimia komputasi dan ilmu material pada era *Noisy Intermediate-Scale Quantum* (NISQ).

Trial and error menemukan PES NH_3

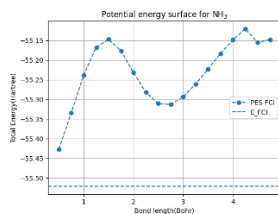
Menggeser atom N di sumbu Z



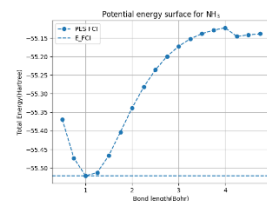
Menggeser atom N di sumbu x,y,z



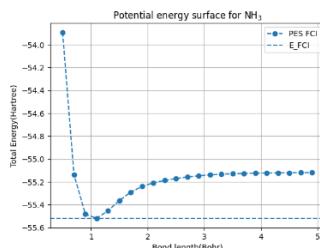
Menggeser atom N di sumbu x



Menggeser sumbu x di semua atom



Menggeser sumbu x&y di semua atom



DAFTAR PUSTAKA

- Arute, F., Arya, K., Babbush, R., et al. (2019). Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, 574(7779), 505–510. <https://doi.org/10.1038/s41586-019-1666-5>
- Cao, Y., Romero, J., Olson, J. P., Degroote, M., Johnson, P. D., Kieferová, M., Kivlichan, I. D., Menke, T., Peropadre, B., Sawaya, N. P., Sim, S., Veis, L., & Aspuru-Guzik, A. (2019). Quantum chemistry in the age of quantum computing. *Chemical Reviews*, 119(19), 10856–10915. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00803>
- Reiher, M., Wiebe, N., Svore, K. M., Wecker, D., & Troyer, M. (2017). Elucidating reaction mechanisms on quantum computers. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 114(29), 7555–7560. <https://doi.org/10.1073/pnas.1619152114>
- Peruzzo, A., McClean, J., Shadbolt, P., Yung, M. H., Zhou, X. Q., Love, P. J., Aspuru-Guzik, A., & O’Brien, J. L. (2014). A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor. *Nature Communications*, 5(1), 4213. <https://doi.org/10.1038/ncomms5213>
- Tilly, J., et al. (2022). The Variational Quantum Eigensolver: A review of methods and best practices. *Physics Reports*, 986, 1–128. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2022.01.003>
- McClean, J. R., Romero, J., Babbush, R., & Aspuru-Guzik, A. (2016). The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms. *New Journal of Physics*, 18(2), 023023. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/18/2/023023>
- Levine, I. N. (2014). *Quantum Chemistry* (7th ed.). Pearson.
- McQuarrie, D. A. (2008). *Quantum Chemistry* (2nd ed.). University Science Books.
- Cramer, C. J. (2013). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models* (2nd ed.). Wiley.
- McArdle, S., Endo, S., Aspuru-Guzik, A., Benjamin, S. C., & Yuan, X. (2020). Quantum computational chemistry. *Reviews of Modern Physics*, 92(1), 015003. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.92.015003>