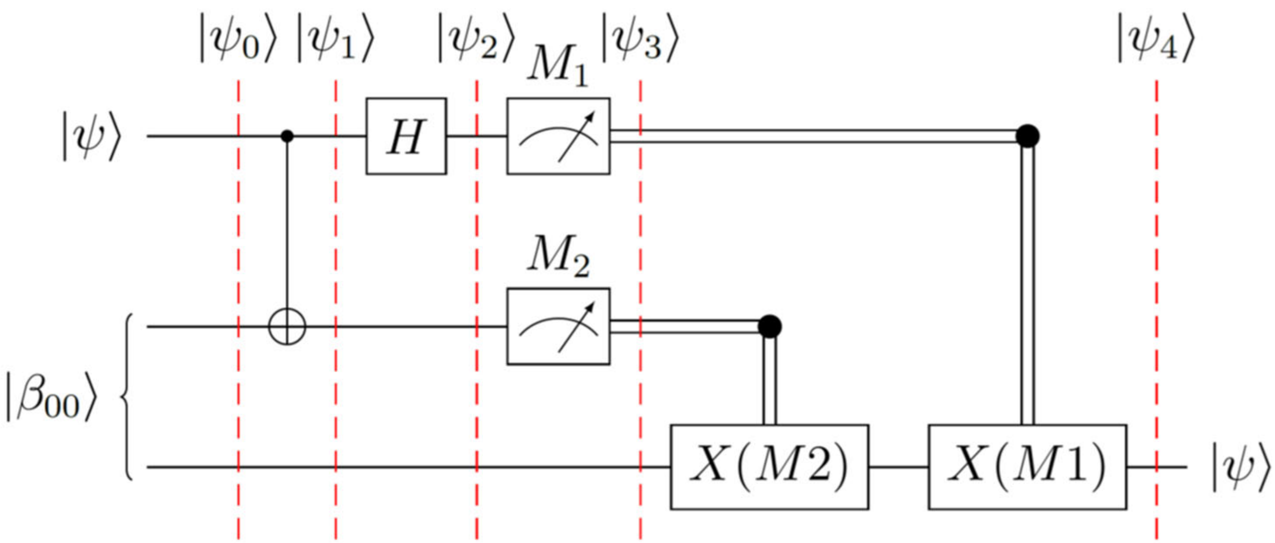
SEBUAH JALAN KE KOMPUTASI KUANTUM: KASUS PERANCANGAN MATERIAL FUNGSIONAL LANJUT



$$|1\rangle|10\rangle = |1\rangle \otimes |10\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0\end{bmatrix}^T$$

$$|1\rangle|01\rangle = |1\rangle \otimes |01\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0\end{bmatrix}^T$$

LAB. PMFLRK-KK AFM-FTI-ITB

BAHASAN

- CMD&QE Lab: Mengapa tertarik ke Komputasi Kuantum
- Langkah Menjadi Calon Pengguna Komputasi Kuantum
- Sepintas Komputasi Kuantum

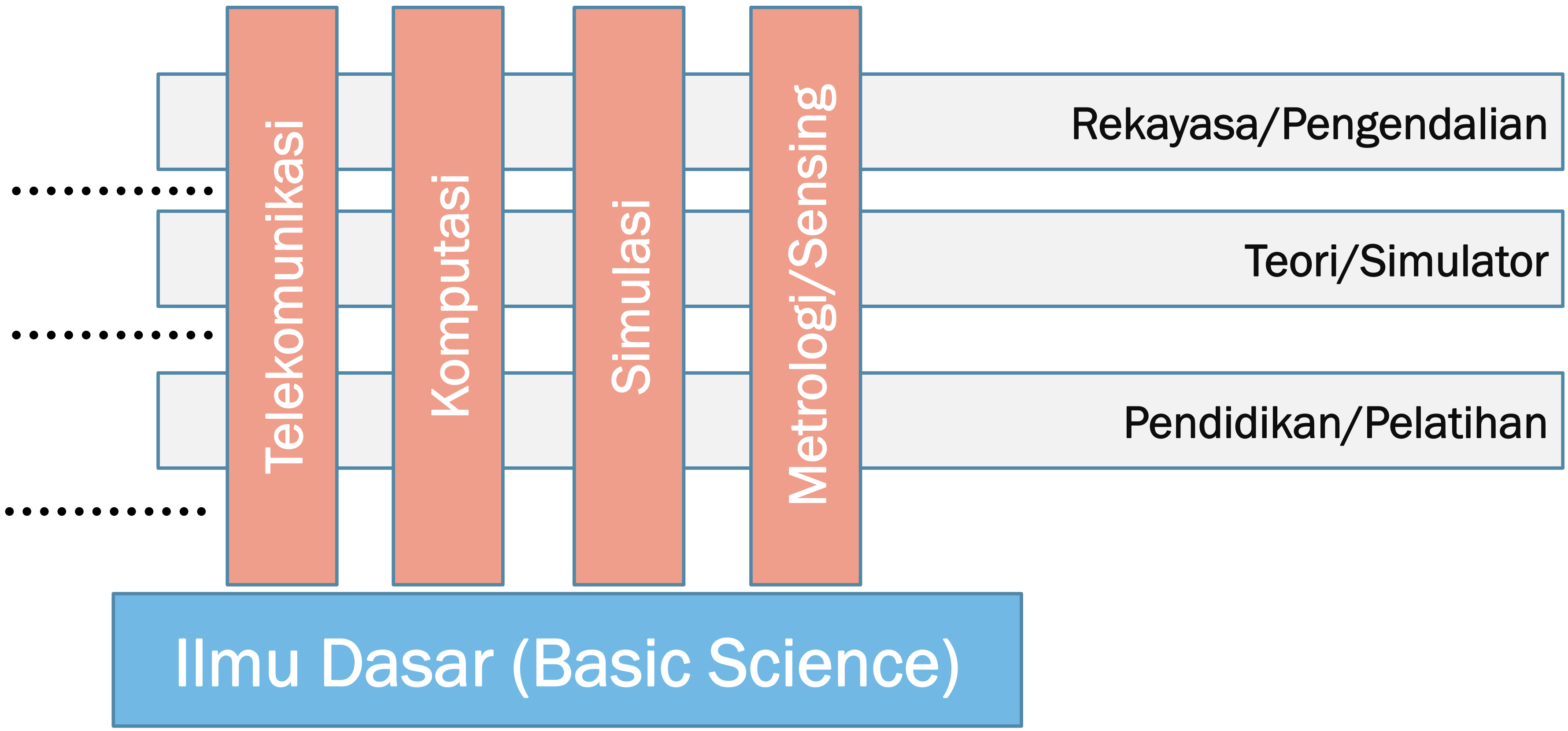
COMPUTATIONAL MATERIALS DESIGN AND QUANTUM ENGINEERING LABORATORY
KK ADVANCED FUNCTIONAL MATERIALS, FTI - ITB

- Prof. Hermawan Kresno Dipojono, Ph.D.
- M. Kemal Agusta, Ph. D.
- Adhitya Gandaryus Saputro, Ph. D.
- M. Fadjar Fathurrahman, Ph. D.
- M. Haris Mahyuddin, Ph. D.
- Ganes Shukri, Ph. D.
- Agung Budiyono, Ph. D. (post-doc)
- Lusia Pulo Boli, Hasna Afifah, M. Akrom (Mahasiswa S3)
- 15 mahasiswa S1 dan S2.

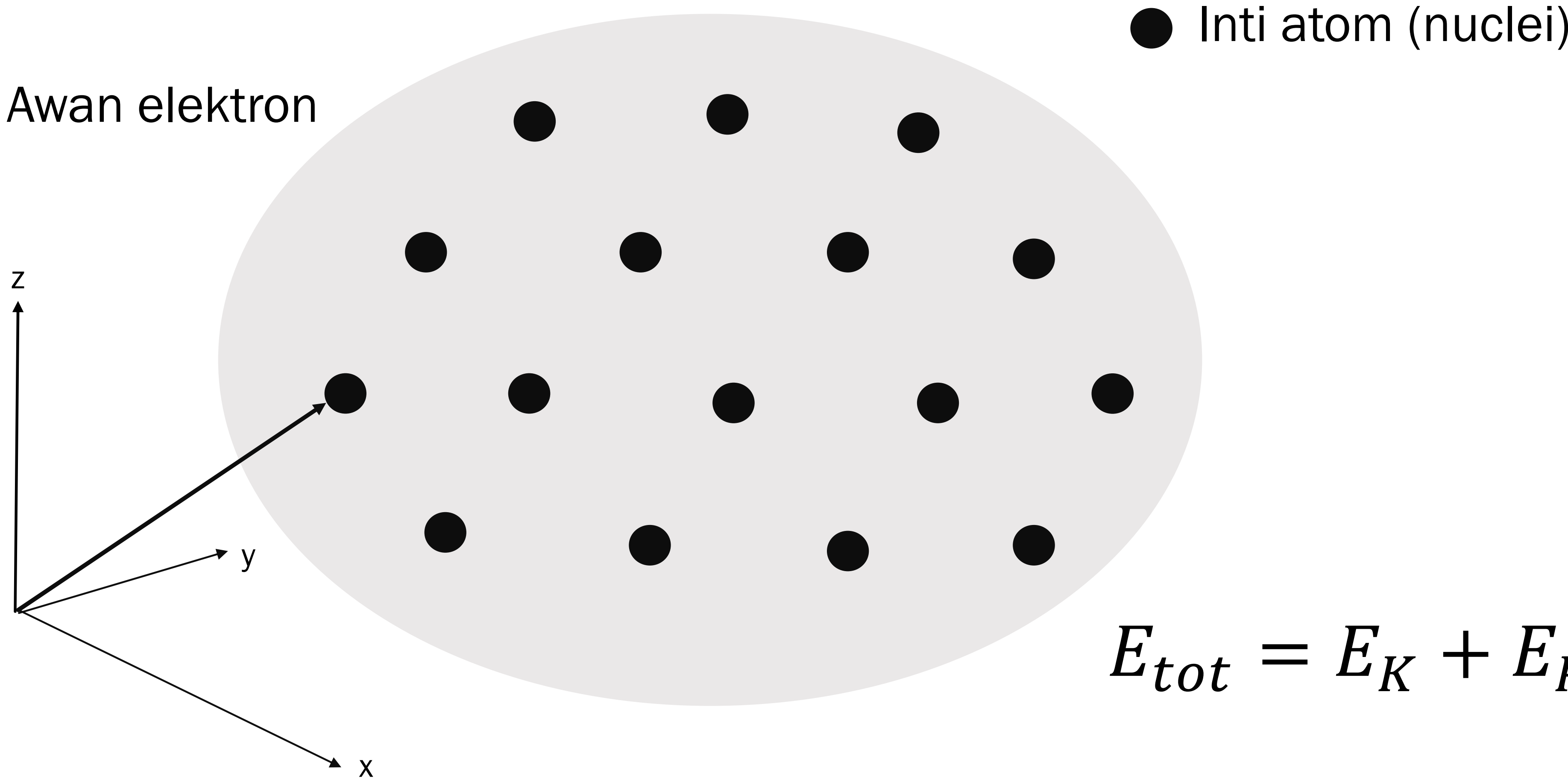
- Prof. Yoshitada Morikawa (Osaka University)
- Prof. Wilson A. Dino (Osaka University)
- Prof. Katsuyuki Fukutani (University of Tokyo)
- Prof. Kazunari Yoshizawa (Kyushu University)
- Prof.Ryo Maezono (JAIST)
- Dr. Cica Gustiani (University of Oxford)
- Jonathan Conrad (Helmholtz Zentrum Berlin)

SEBUAH PETA JALAN KE KOMPUTASI KUANTUM

1996-2003	2004-2009	2010-2022	2018-2022	2020-
Membuat dan mengembangkan simulator kuantum: dinamika molekuler kuantum dgn skema Carr-Parrinello, diimplementasikan di komputer klasik (digital)	Memasukkan mekanika kuantum dalam kurikulum TF Memperkenalkan dan membuat simulator kuantum DFT berdasar skema Tomas Arias (MIT) diimplementasikan di komputer klasik (digital)	Pengguna setia berbagai simulator kuantum DFT spt Espresso, VASP (Viena Ab-initio Simulation Package) untuk memecahkan persoalan kuantum dengan bantuan komputer klasik (digital)	Membuat dan mengembangkan simulator kuantum DFT berbahasa JULIA diimplementasikan di komputer klasik (digital)	Memperkenalkan, dan membuat kajian tentang metrologi dan komputasi kuantum. Full-scale koding kami perkirakan siap pada tahun 2024.


Rekayasa/Pengendalian
Teori/Simulator
Pendidikan/Pelatihan
Telekomunikasi
Komputasi
Simulasi
Metrologi/Sensing
Ilmu Dasar (Basic Science)

SISTEM KUANTUM



$$E_{tot} = E_K + E_P$$

HAMILTONIAN SISTEM KUANTUM

$$H = -\sum_{i}^{N} \frac{\nabla_i^2}{2} - \sum_{k}^{K} \frac{\nabla_I^2}{2M} - \sum_{i,k}^{N,K} \frac{Z_I}{\left|\vec{r}_i - \vec{R}_I\right|} + \frac{1}{2}\sum_{i \neq j} \frac{1}{\left|\vec{r}_i - \vec{r}_j\right|} + \frac{1}{2}\sum_{k \neq m} \frac{Z_k Z_m}{\left|\vec{R}_k - \vec{R}_m\right|}$$

Menentukan harga energi dan keadaan eigen dari Hamiltonian ini. Ketelitian sekurang-kurangnya $1{,}6 \times 10^{-3}$ Hartree yang dikenal sebagai ‘chemical accuracy’. Laju reaksi kimia dapat diprediksi dari

$$\text{Laju reaksi} \propto e^{-\Delta E / k_B T}$$

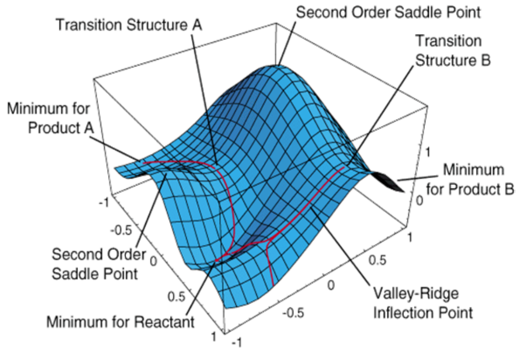
ΔE beda energi antara keadaan reaktan dan produk, k_B konstanta Boltzmann, dan T temperature sistem.

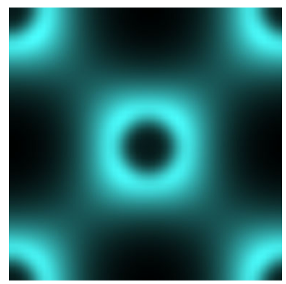
PAM Dirac in 1929:

The general theory of quantum mechanics is now almost complete. The underlying physical laws … for … a large part of physics and the whole chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that …. these laws lead to equations much to difficult to be soluble.

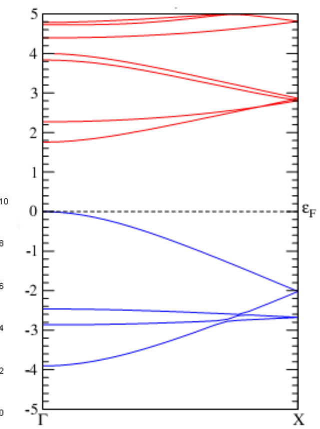
Sifat-sifat Fisiska dan Kimia Material

Potential energy surface & Reaction pathways



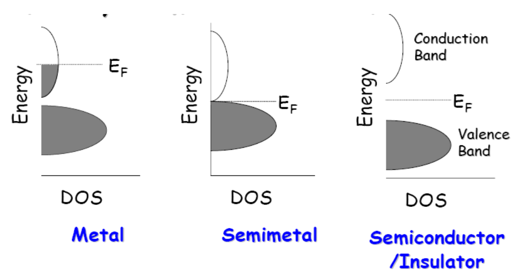


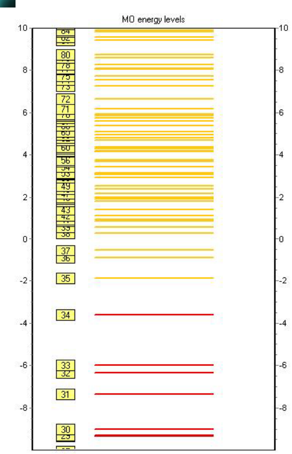
Band structure



Electronic properties

Structures





Reactivity

PENGGUNA YANG BAIK PERANGKAT LUNAK MODERN

THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C

pubs.acs.org/JPCC Article

Dissociative Oxygen Reduction Reaction Mechanism on the Neighboring Active Sites of a Boron-Doped Pyrolyzed Fe−N−C Catalyst

Adhitya Gandaryus Saputro,* Apresio Kefin Fajrial, Arifin Luthfi Maulana, Fadjar Fathurrahman, Mohammad Kemal Agusta, Fiki Taufik Akbar, and Hermawan Kresno Dipojono*

THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C

pubs.acs.org/JPCC Article

Novel Mechanistic Insights into Methane Activation over Fe and Cu Active Sites in Zeolites: A Comparative DFT Study Using Meta-GGA Functionals

Muhammad Haris Mahyuddin,* Aleksandar Staykov, Adhitya Gandaryus Saputro, Mohammad Kemal Agusta, Hermawan Kresno Dipojono,* and Kazunari Yoshizawa*

IOP Publishing Journal of Physi

J. Phys.: Condens. Matter **31** (2019) 365001 (12pp) https://doi.org/10.10

Density functional study of methyl butanoate adsorption and its C–O bon cleavage on MoS_2-based catalyst with various loads of Ni promoters

Wahyu Aji Eko Prabowo[1,2,3], Subagjo[4], Nugraha[1,5], Mohammad Kemal Agusta[1,5], Adhitya Gandaryus Saputro[1,5], Supriadi Rustad[2], Ryo Maezono[6], Wilson Agerico Diño[7] and Hermawan Kresno Dipojono[1,5]

ROYAL SOCIETY OPEN SCIENCE

royalsocietypublishing.org/journal/rsos

Research

Check for updates

Cite this article: Khoirunisa V, Rusydi F, Boli LSP, Puspitasari I, Rachmawati H, Dipojono HK. 2021 The significance of long-range correction to the hydroperoxyl radical-scavenging reaction of trans-resveratrol and gnetin C. *R. Soc. Open Sci.* **8**: 201127.

https://doi.org/10.1098/rsos.201127

The significance of long-range correction to the hydroperoxyl radical-scavenging reaction of trans-resveratrol and gnetin C

Vera Khoirunisa[2,4,5], Febdian Rusydi[1,2], Lusia S. P. Boli[2,5], Ira Puspitasari[2,3], Heni Rachmawati[6,7] and Hermawan K. Dipojono[5,7]

Komputer kuantum untuk apa?

Simulating Physics with Computers

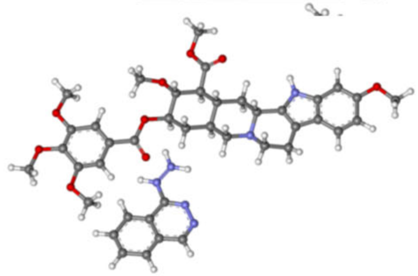
Richard P. Feynman

Department of Physics, California Institute of Technology, Pasadena, California 91107

Received May 7, 1981

1. INTRODUCTION

On the program it says this is a keynote speech—and I don't know what a keynote speech is. I do not intend in any way to suggest what should be in this meeting as a keynote of the subjects or anything like that. I have my own things to say and to talk about and there's no implication that anybody needs to talk about the same thing or anything like it. So what I want to talk about is what Mike Dertouzos suggested that nobody would talk about. I want to talk about the problem of simulating physics with computers and I mean that in a specific way which I am going to explain.



$|\Psi\rangle = c_{0,0,\ldots,0}\,|0,0,\ldots,0\rangle +$
$c_{0,0,\ldots,1}\,|0,0,\ldots,1\rangle + \cdots + c_{1,1,\ldots,1}\,|1,1,\ldots$

exp-memory $\mathcal{O}(2^N)$, exp-waktu $\mathcal{O}(2^N)$

Kompleksitas$\approx \mathcal{O}(2^{N^N})$ (superEXP)

$H = \ldots$

hitung $\langle\Psi|\,O\,|\Psi\rangle$

- Persiapkan $|\Psi_0\rangle$, evolusi $|\Psi\rangle = e^{-iHt}\,|\Psi_0\rangle$, dan ukur.
- Poly-memori $\mathcal{O}(N)$, poly-waktu $\approx \mathcal{O}(Nt\,\mathrm{polylog}(Nt/\varepsilon))$

Mengapa komputer kuantum?

Richard P. Feynman in 1982:

If you want to make a simulation of nature, you'd better make it quantum mechanical, and by golly it's a wonderful problem, because it doesn't look so easy.

BAGAIMANA MENJADI PENGGUNA YANG BAIK SECEPATNYA

- Perangkat lunak kuantum yang dibutuhkan mungkin belum tersedia walau akses qubit minimal telah tersedia
- Harus melakukan koding sendiri; algoritma klasikal tidak serta merta dapat dikonversi menjadi algoritma kuantum, bahkan mungkin tidak dapat dikonversi sama sekali.
- Memahami detail isi atau koding perangkat lunak klasikal; rumuskan algoritma kuantum yang dibutuhkan.

Langkah ke Komputasi Kuantum

Computer Physics Communications 256 (2020) 107372

Contents lists available at ScienceDirect

Computer Physics Communications

journal homepage: www.elsevier.com/locate/cpc

PWDFT.jl: A Julia package for electronic structure calculation using density functional theory and plane wave basis☆,☆☆

Fadjar Fathurrahman*, Mohammad Kemal Agusta, Adhitya Gandaryus Saputro, Hermawan Kresno Dipojono

Department of Engineering of Physics, Bandung Institute of Technology, West Java, Indonesia
Research Center of Nanoscience and Nanotechnology, Bandung Institute of Technology, West Java, Indonesia

SCIENTIFIC REPORTS
natureresearch

OPEN

Efficient classical computation of expectation values in a class of quantum circuits with an epistemically restricted phase space representation

Agung Budiyono[1,2,3,4] & Hermawan K. Dipojono[1,3]

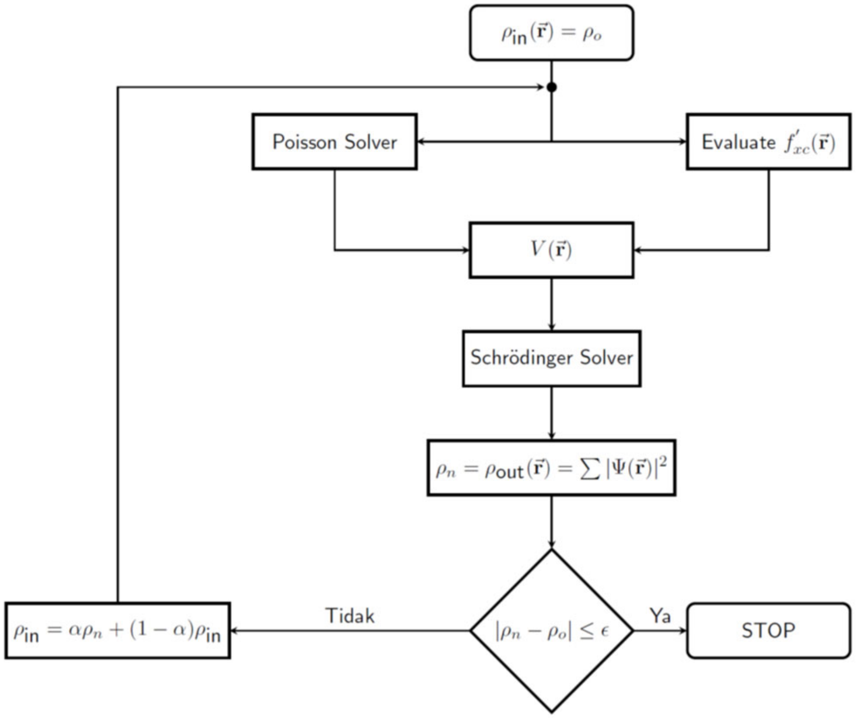
Julia programming language

Some pros:

- A rather new programming language (2009, announced 2012), first developed by Jeff Bezanson, Stefan Karpinski, Viral B. Shah, and Alan Edelman.
- The syntax is familiar to MATLAB or Python users
- Built-in support for multidimensional array and linear algebra (like MATLAB and Fortran)
- Loop is fast, no need for vectorization (as in other ecosystems or programming languages like MATLAB, Python (Numpy), or R)

Some cons:

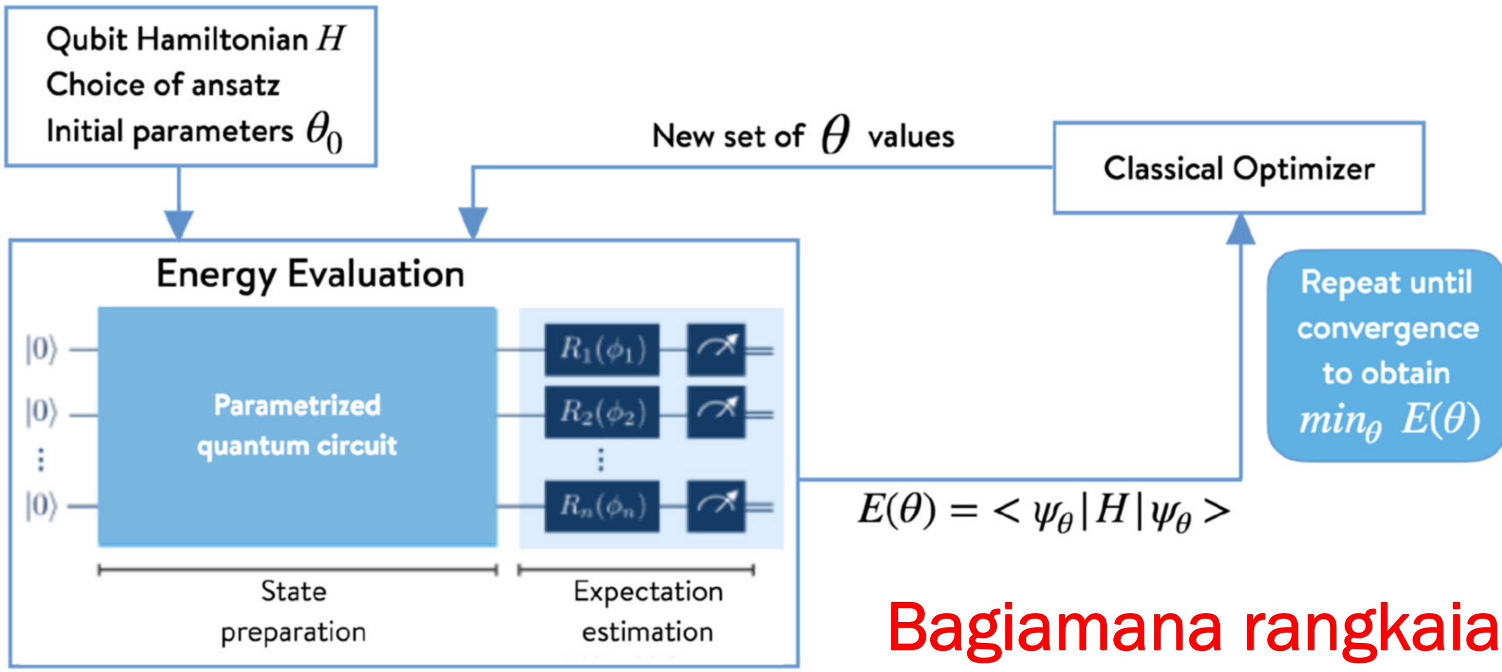
- Large runtime (LLVM, OS specific functions, garbage collectors, ...)
- Compilation time (e.g. time-to-first-plot problem)
- No straighforward way to produce single executable file
- Smaller community (compared to Python, MATLAB, R, etc)



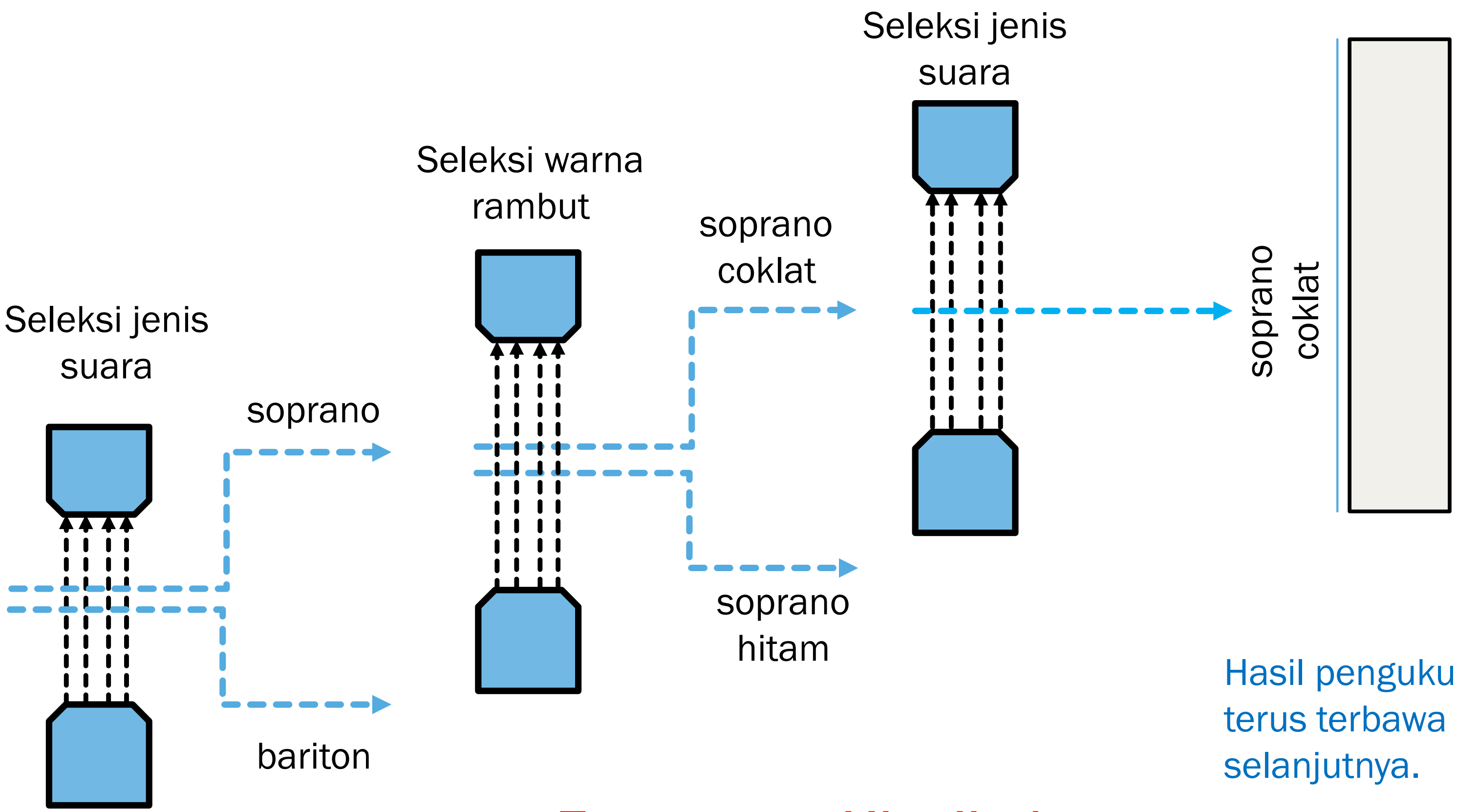
Bagaimana mengubah permasalahan dalam gerbang-gerbang kuantum? Bagaimana diskritisasi harus dilakukan? Bagaimana orakel anzat yang diperlukan ditentukan? Bagaimana menentukan minimum gerbang dihitung?

Variational Quantum Eigensolver

Salah satu alternatif:

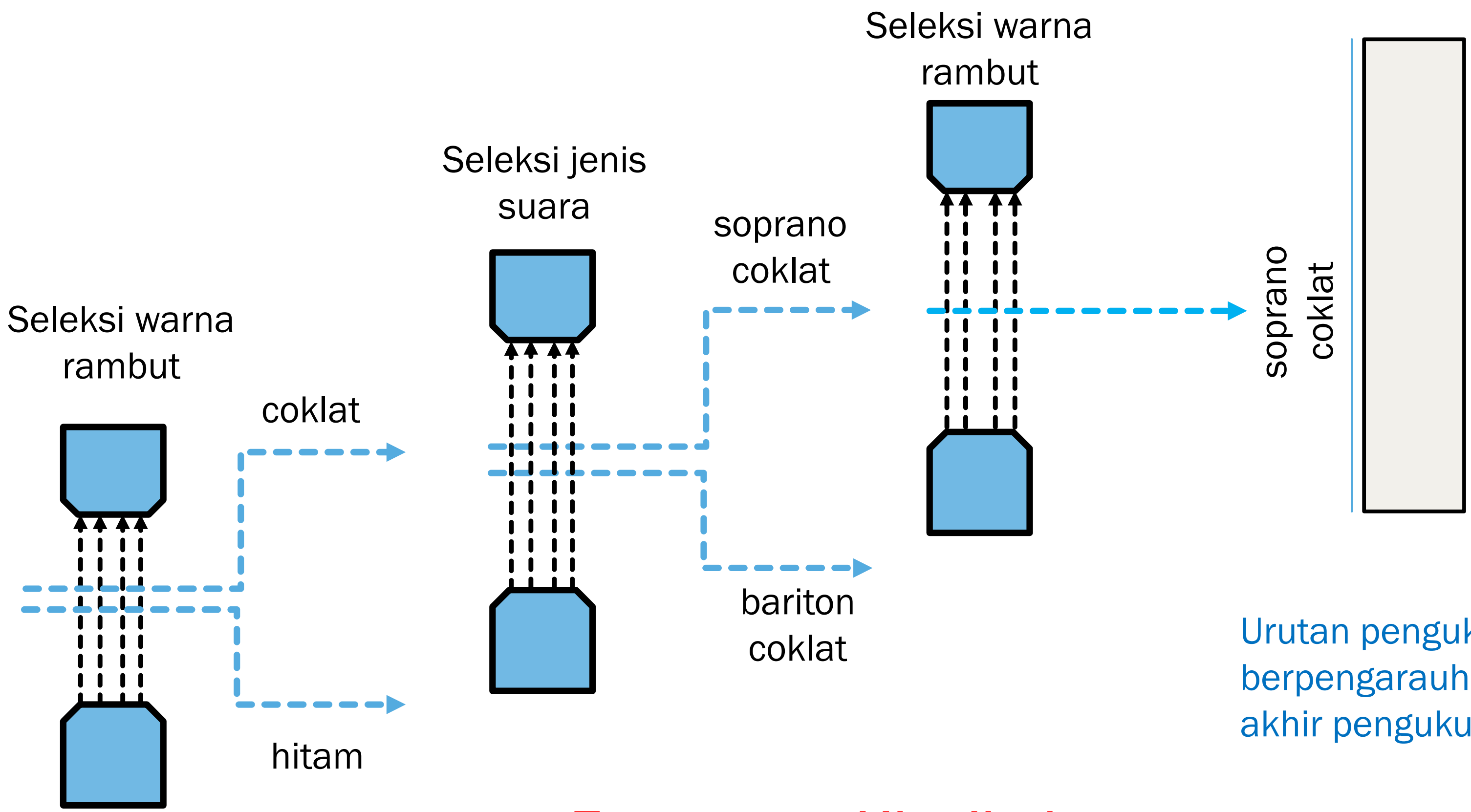


Bagiamana rangkaian kuantum bekerja?



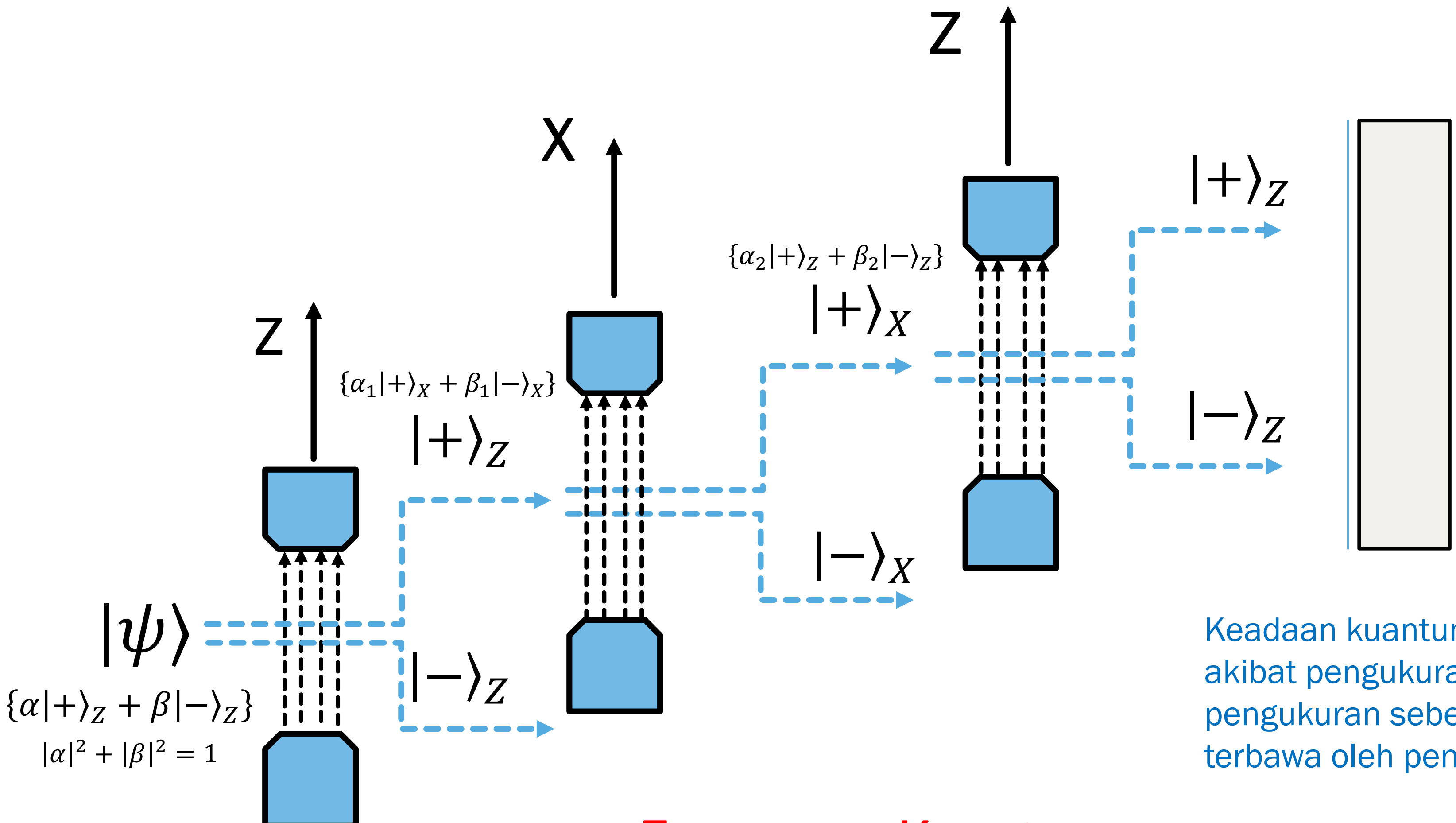
Hasil pengukuran sebelumnya terus terbawa dalam pengukuran selanjutnya.

Fenomena Klasikal



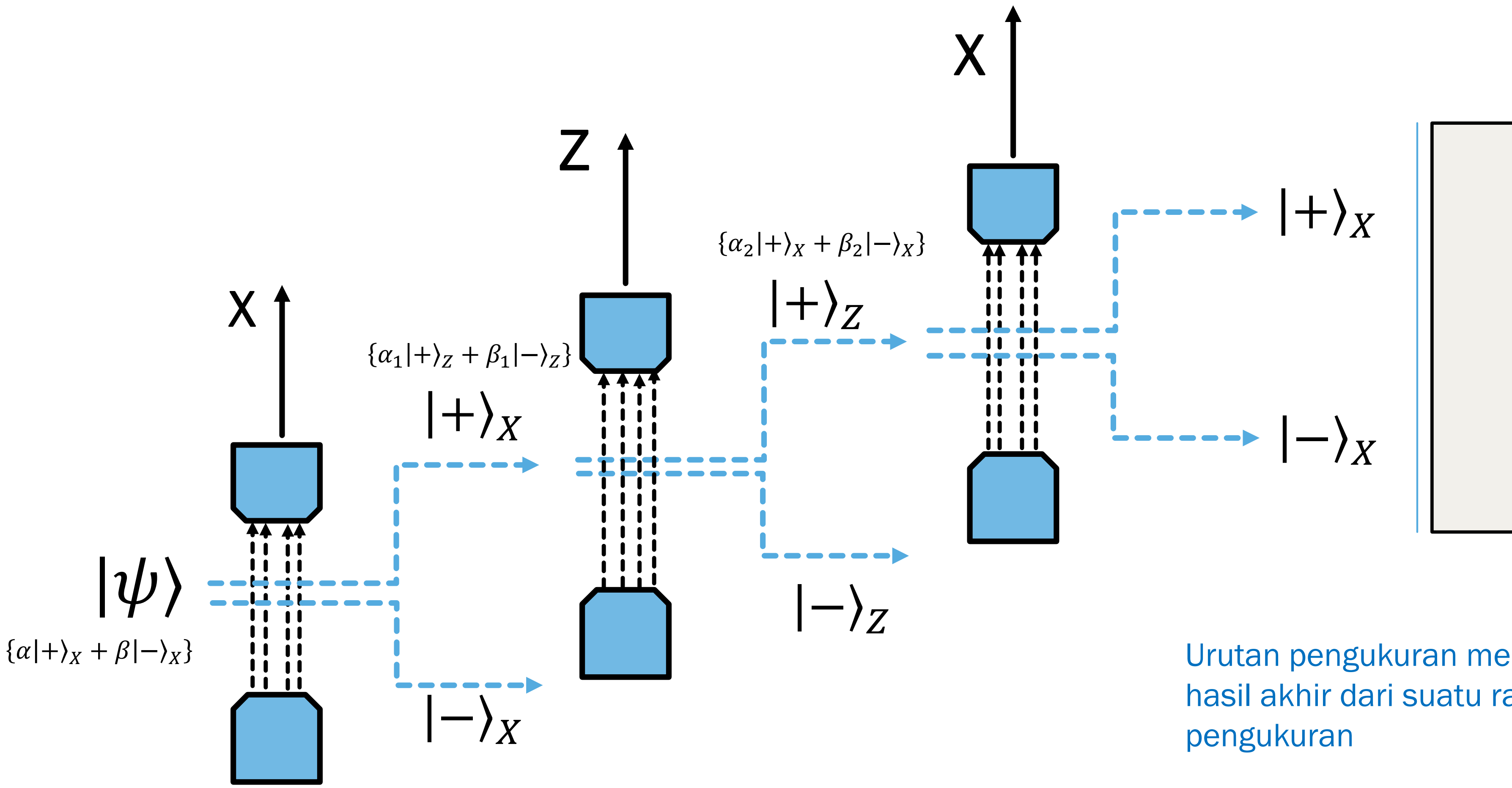
Urutan pengukuran tidak berpengarauh pada hasil akhir pengukuran

Fenomena Klasikal



Keadaan kuantum berubah akibat pengukuran atau hasil pengukuran sebelumnya tidak terbawa oleh pengukuran berikutnya

Fenomena Kuantum



Urutan pengukuran mempengaruhi hasil akhir dari suatu rangkaian pengukuran

Fenomena Kuantum

KARAKTERISTIK FUNDAMENTAL KUANTUM

(ELEKTRON, PHOTON, DAN PARTIKEL KUANTUM LAINNYA)

- Perangkat ukur kuantum sistem kuantum dua keadaan mempunyai dua keadaan yang membentuk basis orthonormal ruang vektor dua dimensi
- Pengukuran keadaan kuantum akan mengubah keadaan kuantum tersebut dan akan menghasilkan keadaan basis alat ukur dengan probabilitas tertentu
- Urutan pengukuran rangkaian keadaan kuantum akan mempengaruhi hasil akhir pengukuran
- Dua atau lebih keadaan kuantum dapat dalam keadaan terbelit (*entangle*)

Black magic quantum calculus

- Feynman: “..it is safe to say that **no body understands** quantum mechanics.”
- Gell-Mann: “Quantum mechanics,…., which **none of us really understands** but which we know how to use.”
- Bohr: “For those who are **not shocked** when they first come across quantum theory **cannot possibly have understood it**.”

NOTASI DIRAC: KET DAN BRA

$|???\rangle$ $\langle ???|$

ket bra

$|\alpha\rangle$ $|+\rangle$ $\langle -|$ $|\uparrow\rangle$ $|\rightarrow\rangle$ $\langle 0|$ $\langle a|$

$$\langle 0|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 1$$

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad \langle 0| = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$|1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$|0\rangle\langle 0| = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$\otimes$ operator tensor → $|0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{bmatrix} 1 & \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ 0 & \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = |00\rangle$

$$|0\rangle \otimes |1\rangle \neq |1\rangle \otimes |0\rangle$$

BIT, QUBIT, KEADAAN KUANTUM

Bit: satuan informasi yang digunakan dalam komputer klasik (digital) yang direpresentasikan oleh 0 dan 1.

Qubit: satuan informasi dalam komputer kuantum, yaitu komputer yang memanfaatkan keadaan kuantum dari partikel kuantum (elektron, photon dll), baik tunggal ataupun jamak.

Setiap partikel tunggal maupun jamak mempunyai keadaan keadaan basis yang *orthogonal.* Dalam hal elektron dan photon keadaan basisnya ada dua.

QUBIT DAN KEADAAN KUANTUM

Dua keadaan basis itu dapat disimbolkan oleh pasangan $|0\rangle$ dan $|1\rangle$, atau $|+\rangle$ dan $|-\rangle$, atau $|\uparrow\rangle$ dan $|\rightarrow\rangle$ tergantung dari sistemnya.

Qubit tunggal dapat berada di salah satu dari tak hingga keadaan kuantum $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ di mana $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ dengan α dan β adalah sembarang bilangan kompleks.

Qubit adalah sebuah keadaan kuantum dua dimensi (vektor yang berada di ruang vektor kompleks Hilbert dua dimensi).

SISTEM *N-QUBIT* DAN KETERBELITAN

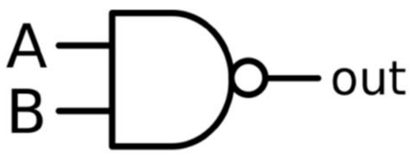
Keadaan kuantum sistem *n-qubit* dapat dituliskan sebagai normalisasi kombinasi linier dari 2^n *bit-string* (yang dibentuk oleh perkalian-perkalian tensor $|0\rangle$ dan $|1\rangle$.

Basis orthonormal yang dibentuk oleh keadaan-keadaan 2^n *bit-string* disebut basis komputasional. Untuk $n = 2$ basis itu adalah $|0\rangle \otimes |0\rangle = |00\rangle, |0\rangle \otimes |1\rangle = |01\rangle, |1\rangle \otimes |0\rangle = |10\rangle$, dan $|1\rangle \otimes |1\rangle = |11\rangle$.

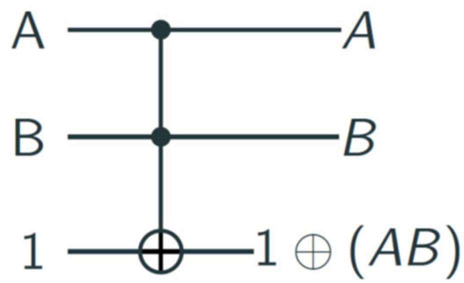
Terbelit → $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \neq (a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)$

Gerbang Logika dan Gerbang Kuantum
Cari Operasi Uniter

NAND: $\overline{AB}$



A	B	out
0	0	1
0	1	1
1	0	1
1	1	0



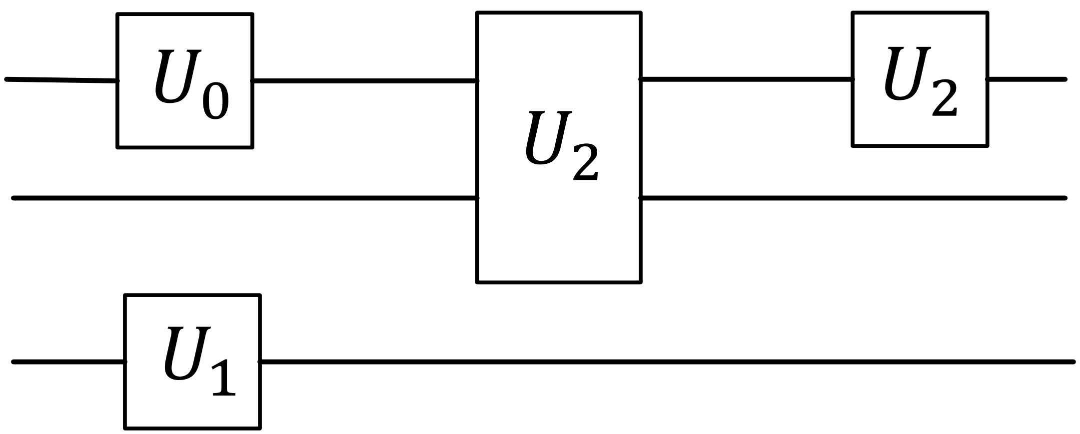
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(Toffoli)

$|001\rangle \mapsto |001\rangle$, $|011\rangle \mapsto |011\rangle$, $|101\rangle \mapsto |101\rangle$,
$|111\rangle \mapsto |110\rangle$

Rangkaian Kuantum Sederhana

Komputasi kompleks dapat dilakukan dengan gabungan atau komposisi sejumlah elemen sederhana. Transformasi keadaan kuantum sistem *n-qubit* dapat direalisasikan menggunakan barisan transformasi keadaan kuantum satu atau dua-qubit. Sembarang transformasi keadaan kuantum yang bekerja pada sejumlah terbatas qubit disebut gerbang kuantum. Barisan gerbang-gerbang kuantum disebut rangkaian atau sirkit (*circuit*) kuantum.

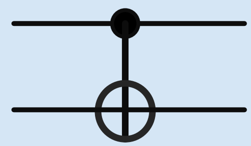
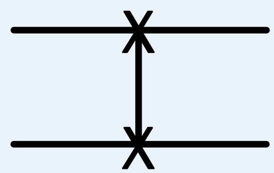
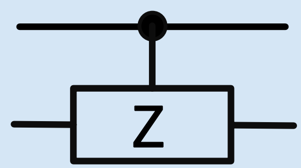
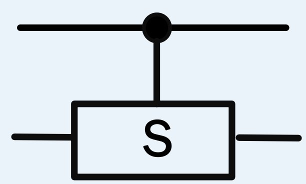


Transformasi di sebelah kiri dilakukan dilakukan terlebih dahulu, dan pengolahan berjalan dari kiri ke kanan.

Transformator harus uniter → $\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{\dagger} = \boldsymbol{I}$

Nama	Simbol Gerbang	Representasi Matriks
Hadamard	$-\boxed{H}-$	$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$
Pauli-X	$-\boxed{X}-$	$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Y	$-\boxed{Y}-$	$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Z	$-\boxed{Z}-$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
Phase-S	$-\boxed{S}-$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$
Phase-T	$-\boxed{T}-$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$

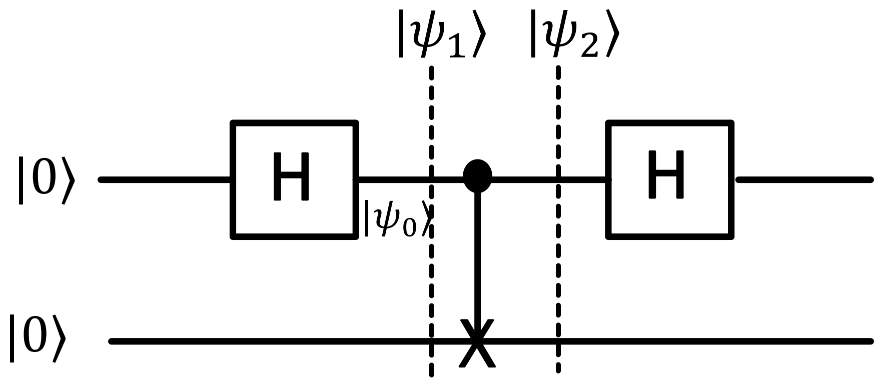
Sejumlah Matriks Penting

Nama	Simbol Gerbang	Representasi Matriks
Controlled -- NOT		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$
Swap		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
Controlled -- Z		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$
Controlled -- phase		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \end{bmatrix}$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \longrightarrow \boxed{\;H\;} \longrightarrow \frac{1}{2}\left(\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}\right)$$

$$\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix} \qquad \frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & 1\\1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}$$

$$\tfrac{1}{2}\left(\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}\right) = \tfrac{1}{2}\left(\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}\right) = |0\rangle \leftarrow \text{qubit}$$



$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = |\psi_0\rangle$$

$$|\psi_1\rangle = |\psi\rangle|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)|0\rangle$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|0\rangle + |1\rangle|1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \longrightarrow \text{Keadaan berbelit}$$

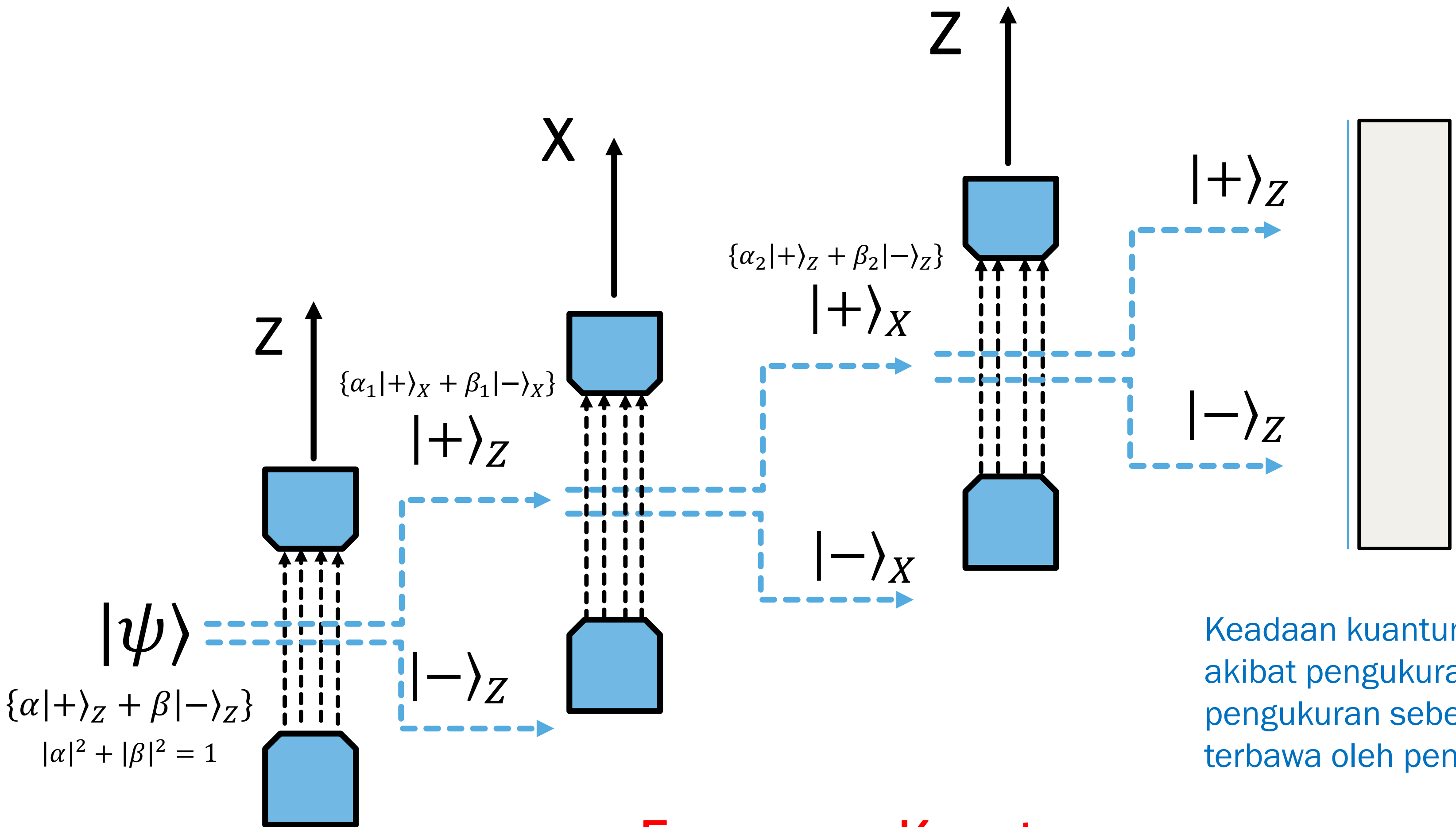
$$H \otimes I = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 1\\ 1 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & -1\end{bmatrix}$$

$$(H \otimes I)|\psi_2\rangle = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 1\\ 1 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & -1\end{bmatrix}\left(\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix}\right) = \frac{1}{2}\left(\begin{bmatrix}1\\0\\1\\0\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}0\\1\\0\\-1\end{bmatrix}\right) = \frac{1}{2}(|00\rangle + |10\rangle + |01\rangle - |11\rangle)$$

POSTULAT PENGUKURAN

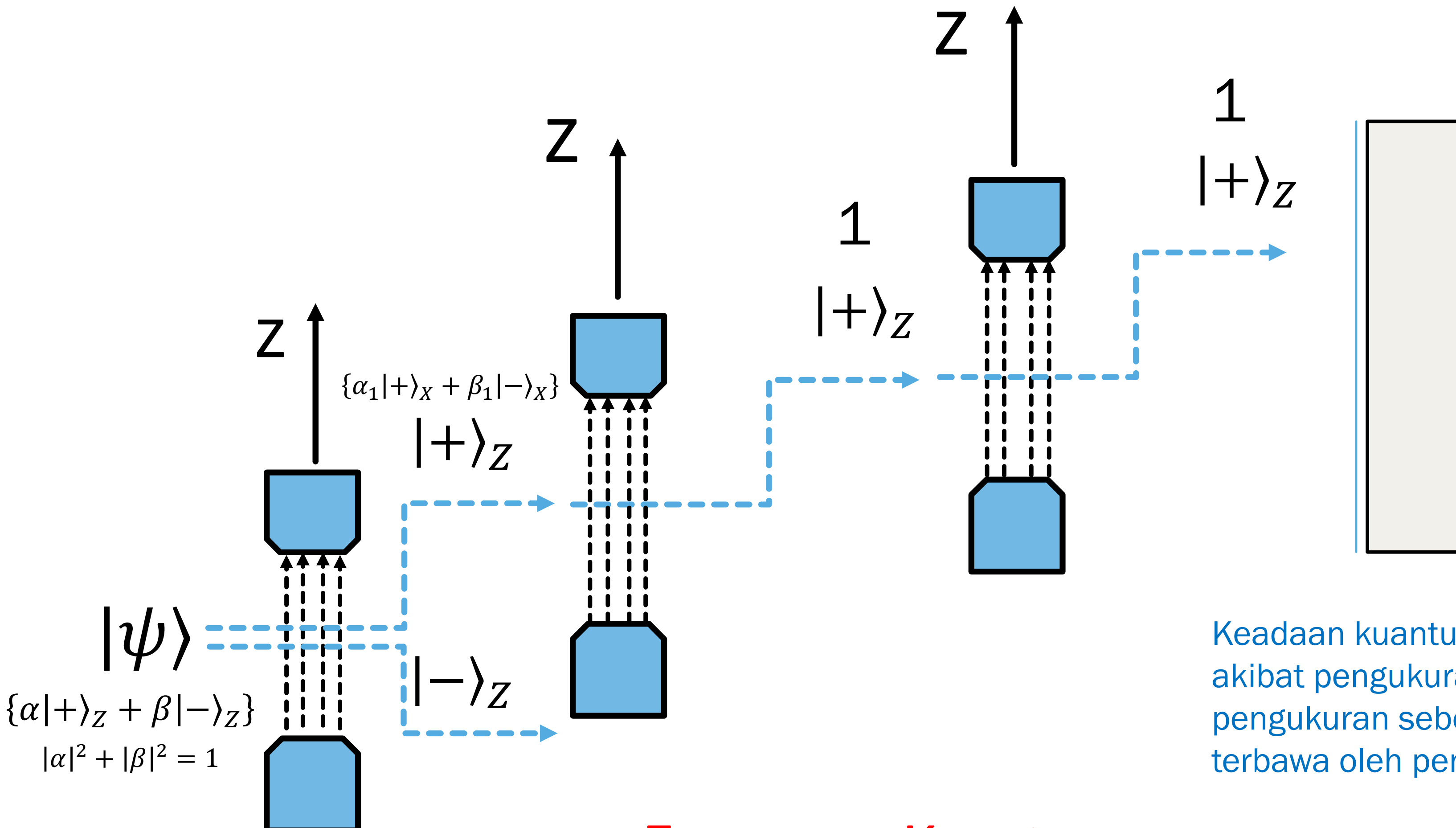
- Sembarang pengukuran kuantum dapat dinyatakan dengan sebuah operator Hermit *O* yang disebut sebagai *observable*.
- Luaran yang mungkin dari suatu pengukuran terhadap sebuah keadaan $|\psi\rangle$ dengan sebuah *observable O* dilabelkan oleh harga-harga eigen dari *O*. Pengukuran $|\psi\rangle$ akan menghasilkan luaran yang diberi label dengan harga eigen λ_i dari *O* dengan probabilitas $|P_i|\psi\rangle|^2$ di mana P_i adalah proyektor pada $\lambda_i -$ ruang eigen.
- (**Proyeksi**) Keadaan setelah pengukuran adalah proyeksi ternormalisir $P_i|\psi\rangle/|P_i|\psi\rangle|$ dari $|\psi\rangle$ pada $\lambda_i -$ ruang eigen S_i. Jadi keadaan setelah pengukuran adalah sebuah vektor eigen satuan dari *O* dengan harga eigen λ_i.

Mengingat sembarang observable pada sebuah sistem *n-qubit* mempunyai sebanyak-banyaknya 2^n harga-harga eigen yang berbeda maka ada sebanyak-banyaknya 2^n hasil pengukuran. Jadi, sebuah pengukuran tunggal pada sebuah sistem *n*-qubit akan menghasilkan paling banyak *n*-bit informasi klasik. Mengingat secara umum pengukuran akan mengubah keadaan, sembarang pengukuran selanjutnya akan memberi informasi keadaan yang baru, bukan keadaan awalnya. Khususnya, jika observable mempunyai 2^n harga-harga eigen yang berbeda, pengukuran mengirim keadaan pada sebuah vektor eigen, dan pengukuran selanjutnya tidak akan dapat mengekstrak tambahan informasi mengenai keadaan awal.



Keadaan kuantum berubah akibat pengukuran atau hasil pengukuran sebelumnya tidak terbawa oleh pengukuran berikutnya

Fenomena Kuantum

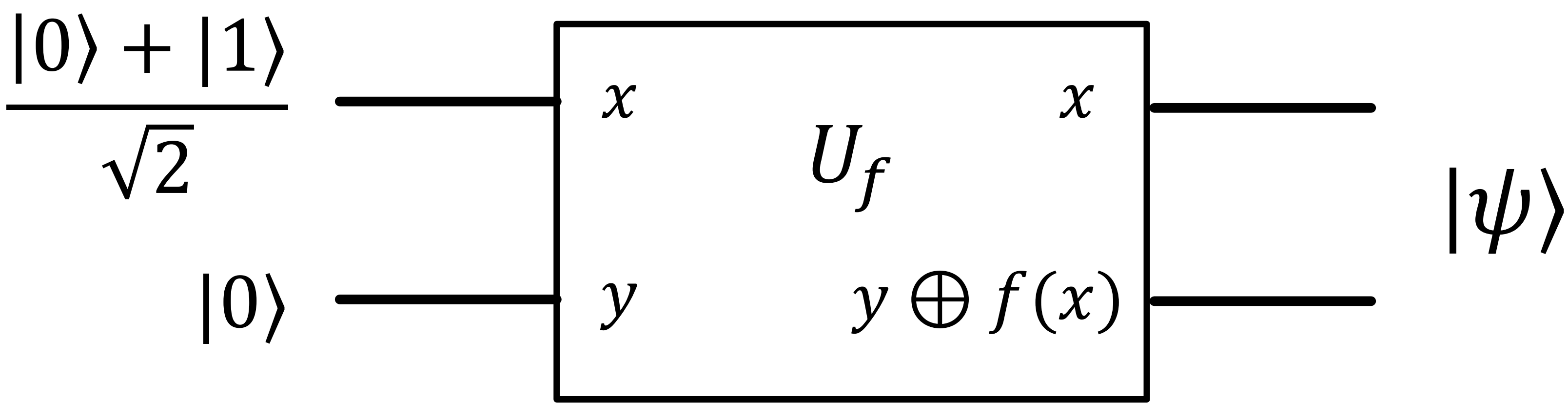


Keadaan kuantum berubah akibat pengukuran atau hasil pengukuran sebelumnya tidak terbawa oleh pengukuran berikutnya

Fenomena Kuantum

PARALELLISME KUANTUM

Parallelisme kuantum memungkinkan komputer kuantum menghitung $f(x)$ untuk berbagai harga x secara serempak. Misal computer kuantum dua qubit dengan keadaan awal $|x, y\rangle$. Dengan gerbang kuantum yang tepat keadaan ini dapat ditransformasikan menjadi $|x, y \oplus f(x)\rangle$ di mana $\oplus$ penjumlahan modulo 2, register pertama disebut register data, dan yang kedua disebut register target. Pemetaan $|x, y\rangle \longrightarrow |x, y \oplus f(x)\rangle$ untuk selanjutnya disebut U_f. Jika $y = 0$ maka keadaan akhir adalah $f(x)$.



$$\frac{|0, f(0)\rangle + |1, f(1)\rangle}{\sqrt{2}}$$

Apa yang menarik? Parallelisasi; hasilnya sekaligus berisi informasi tentang $f(0)$ dan $f(1)$.

SUMBER KESALAHAN

- Infidelity dan Decoherence.
- Infidelity: gerbang yang digunakan oleh pengguna tidak tepat sama dengan gerbang fisis yang digunakan; gunakan seminimal mungkin gerbang multi-qubit.
- Decoherence: dengan berjalannya waktu computer kuantum kehilangan sifat kuantum-nya. Setiap qubit mempunyai laju decohere sendiri; perlu menyusun algoritma yg baik.

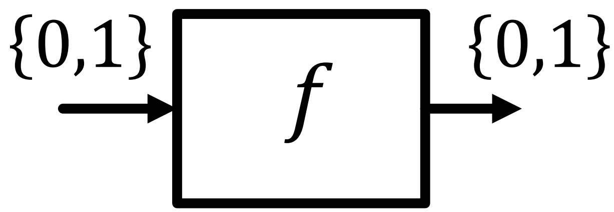
KRITERIA DIVICENZO: SYARAT IMPLEMENTASI

- Coherence times are long enough for allowing coherent operation
- Initial state can be set
- Can be operated on logically with a universal set of gates
- The final state can be measured

GERBANG DI IBMQX4

- *I, X, Y, Z, H, S, S⁺, T, T⁺*, $U_1(\lambda)$, $U_2(\phi,\lambda)$, $U_3(\lambda,\phi,\theta)$, *CNOT*
- $U_1(\lambda) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\lambda} \end{bmatrix}$, $U_2(\lambda,\phi) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & -e^{i\lambda} \\ e^{i\phi} & e^{i(\lambda+\phi)} \end{bmatrix}$
- $U_3(\lambda,\phi,\theta) = \begin{bmatrix} cos(\theta/2) & -e^{i\lambda}sin(\theta/2) \\ e^{i\phi}sin(\theta/2) & e^{i(\lambda+\phi)}cos(\theta/2) \end{bmatrix}$
- *Physical gate di IBM hanya* $\{U_1(\lambda), R_x(\pi/2), CNOT\}$. Gerbang R_x tidak lain adalah $R_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{bmatrix}$

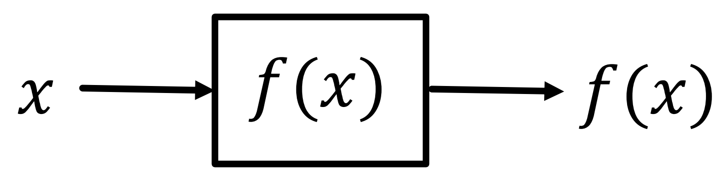
ALGORITMA DEUTSCH



$$f(0) \rightarrow 0 \quad f(0) \rightarrow 1$$

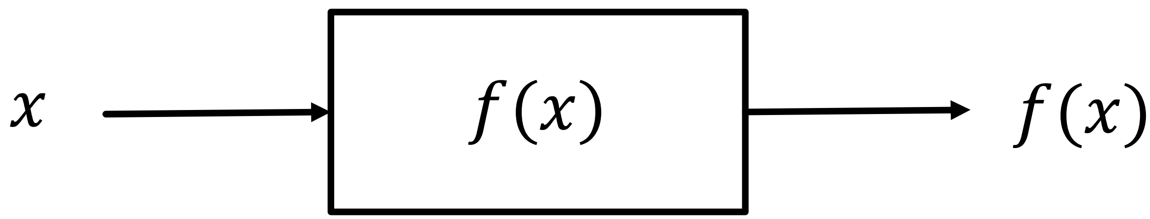
$$f(1) \rightarrow 0 \quad f(1) \rightarrow 1$$

$f: \rightarrow$ $f(0)\rightarrow 1$ $f(1)\rightarrow 0$ $f(0)\neq f(1)$ seimbang
$f(0)\rightarrow 1$ $f(1)\rightarrow 1$ $f(0) = f(1)$ konstan

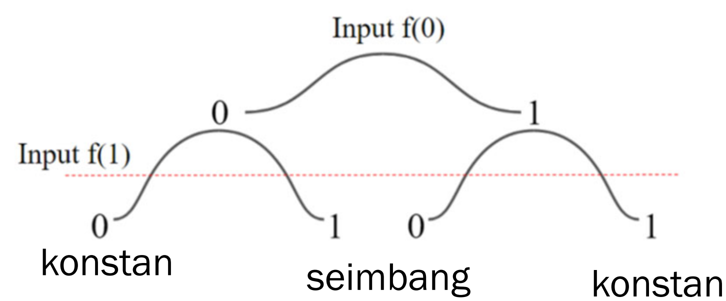


Berapa kali testing harus dilakukan agar tahu f ?

ALGORITMA DEUTSCH



- $f : 0 \mapsto 0,\ f : 1 \mapsto 0$ (konstan)
- $f : 0 \mapsto 1,\ f : 1 \mapsto 1$ (konstan)
- $f : 0 \mapsto 1,\ f : 1 \mapsto 0$ (seimbang)
- $f : 0 \mapsto 0,\ f : 1 \mapsto 1$ (seimbang)



klasik: 2 permintaan

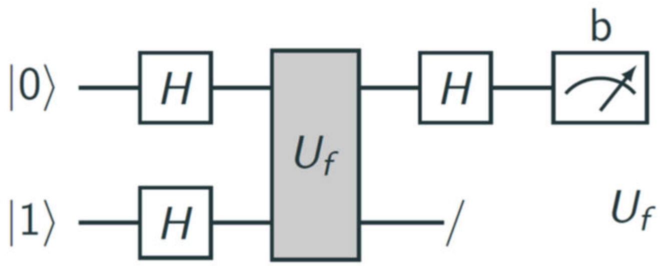
Koding klasikal

```python
import math as m
import scipy as sci

def blackbox_f():
    '''
    Returns one of four possible f functions
    '''
    def F1(x):
        return 0

    def F2(x):
        return 1

    def F3(x):
        return x%2

    def F4(x):
        return (x+1)%2

    functions = [F1,F2,F3,F4]
    f = functions[ int( m.floor( 4*sci.rand() ) ) ]
    return f

F = blackbox_f()

print('f(0): ',F(0))
print('f(1): ',F(1))

if(F(0) == F(1)):
    print('conclusion: f is constant!')
else:
    print('conclusion: f is balanced!')
```

```
f(0):  1
f(1):  0
conclusion: f is balanced!
```

Buat 4 kemungkinan fungsi kotak hitam, uji dengan f(0) dan f(1)

ALGORITMA KUANTUM DEUTSCH



Orakel:

$$U_f \, |x, a\rangle = |x, a \oplus f(x)\rangle$$

$$U_f \, |x\rangle \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|x, f(x)\rangle - |x, f(x) \oplus 1\rangle}{\sqrt{2}}$$

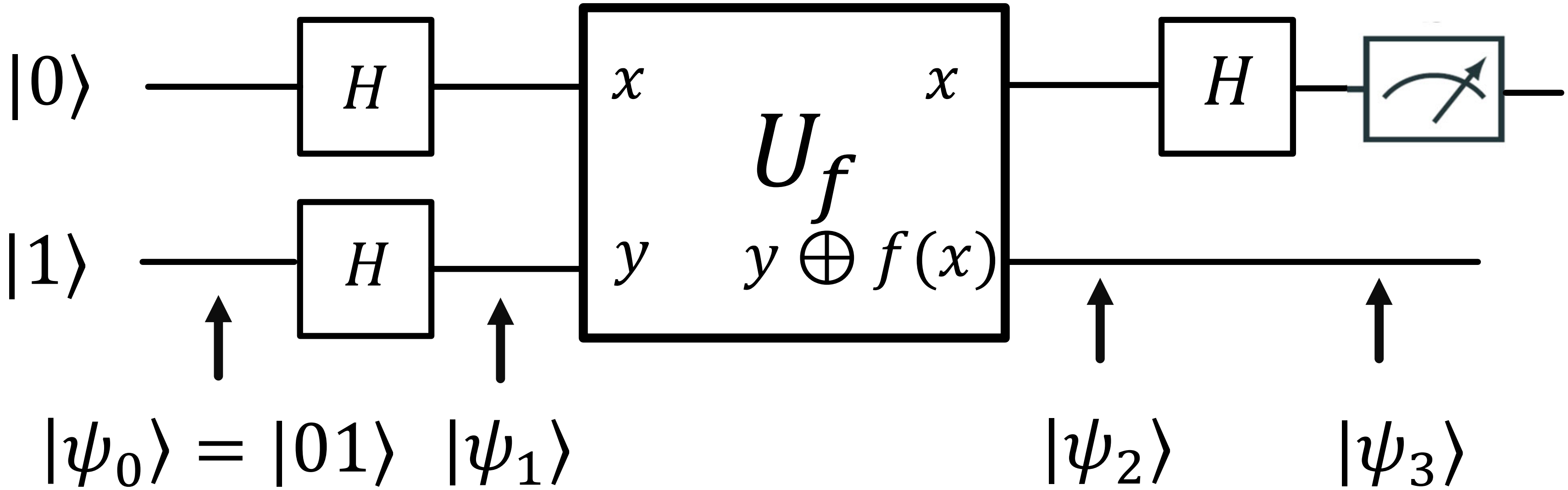
$$= (-1)^{f(x)} \, |x\rangle \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|0\rangle \, |1\rangle \xmapsto{H \otimes H} \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \xmapsto{U_f} \frac{(-1)^{f(0)} \, |0\rangle + (-1)^{f(1)} \, |1\rangle}{\sqrt{2}} \, |-\rangle$$

Konstan: $\pm \, |+\rangle \, |-\rangle$, pengukuran $b = 0$ (peluang 1)

Seimbang: $\pm \, |-\rangle \, |-\rangle$, pengukuran $b = 1$ (peluang 1)

Percepatan: 2 vs 1



$$|\psi_1\rangle = \left[\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}\right]\left[\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right]$$

$$|\psi_2\rangle = \begin{cases} \pm\left[\dfrac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}\right]\left[\dfrac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right] & \text{Jika } f(0) = f(1) \\ \pm\left[\dfrac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right]\left[\dfrac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right] & \text{Jika } f(0) \neq f(1) \end{cases}$$

$$|\psi_3\rangle = \begin{cases} \pm|0\rangle\left[\dfrac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right] & \text{Jika } f(0) = f(1) \\ \pm|1\rangle\left[\dfrac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}\right] & \text{Jika } f(0) \neq f(1) \end{cases}$$

Dengan mengukur qubit pertama sudah dapat ditentukan yg dicari

Analisis Rinci Algortima Kuantum Deutsch

Input harus berupa qubit, misal: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$

Misal menghasilkan $f(x)$ konstan maka:

$$f\left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)\right) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |1\rangle) = \frac{2}{\sqrt{2}}|1\rangle$$ ← bukan qubit!!!

$f(x)$ tidak uniter!!!! → ubah jadi uniter

Bagaimana caranya???

Analisis Rinci Algortima Kuantum Deutsch

Buat operator uniter g sehingga:

$$g|q_1\rangle|q_2\rangle \rightarrow |q_1\rangle|q_2 \oplus f(q_1)\rangle$$

$\oplus$ penjumlahan modulo 2: $0 \oplus 1 = 1 \quad 1 \oplus 2 = 0$

$f(0,1) \rightarrow (0,1)$ untuk konstan, sehingga akan diperoleh:

$$g\frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle + |01\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|11\rangle + |01\rangle)$$

Perhatikan: $\quad g|10\rangle = g|1\rangle|0\rangle \rightarrow |1\rangle|0 \oplus f(1)\rangle = |11\rangle$

Analisis Rinci Kekuatan Paralel Algoritma Kuantum

$f(0,1) \to (0,1)$	$f(0,1) \to (1,0)$	$f(0,1) \to 0$	$f(0,1) \to 1$
$g(\|00\rangle) \to \|00\rangle$	$g(\|00\rangle) \to \|01\rangle$	$g(\|00\rangle) \to \|00\rangle$	$g(\|00\rangle) \to \|01\rangle$
$g(\|01\rangle) \to \|01\rangle$	$g(\|01\rangle) \to \|00\rangle$	$g(\|01\rangle) \to \|01\rangle$	$g(\|01\rangle) \to \|00\rangle$
$g(\|10\rangle) \to \|11\rangle$	$g(\|10\rangle) \to \|10\rangle$	$g(\|10\rangle) \to \|10\rangle$	$g(\|10\rangle) \to \|11\rangle$
$g(\|11\rangle) \to \|10\rangle$	$g(\|11\rangle) \to \|11\rangle$	$g(\|11\rangle) \to \|11\rangle$	$g(\|11\rangle) \to \|10\rangle$

Perhatikan, misal inputnya $|00\rangle$ outputnya dua saja: $|00\rangle$ atau $|01\rangle$. Jadi dua dari empat kemungkinan sudah tereliminasi.

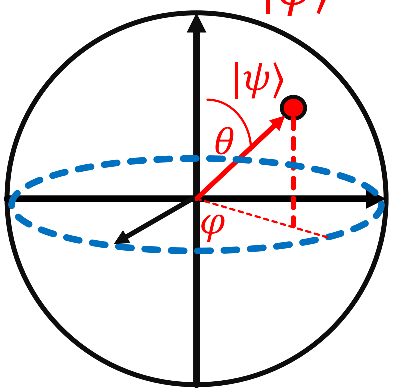
Terima kasih atas perhatiannya

Qubit Tunggal: Bola Bloch

Dapat petakan setiap keadaan, yang direpresentasikan oleh bilangan kompleks $\alpha = s + iq$, pada bola satuan dalam ruang riil tiga-dimensi titik-titik $(x, y, z) \in C$ yang memenuhi $|x|^2 + |y|^2 + |z|^2 = 1$ via proyeksi stereografik

$$(s, q) \mapsto \left(\frac{2s}{|\alpha|^2 + 1}, \frac{2q}{|\alpha|^2 + 1}, \frac{1 - |\alpha|^2}{|\alpha|^2 + 1}\right) \qquad (0,0,1) \mapsto \infty \qquad \text{atau}$$

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + (\cos\varphi + i\sin\varphi)\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$$



Misal $\theta = 90^o$ dan $\varphi = 0^o$ maka akan diperoleh

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle = |+\rangle$$

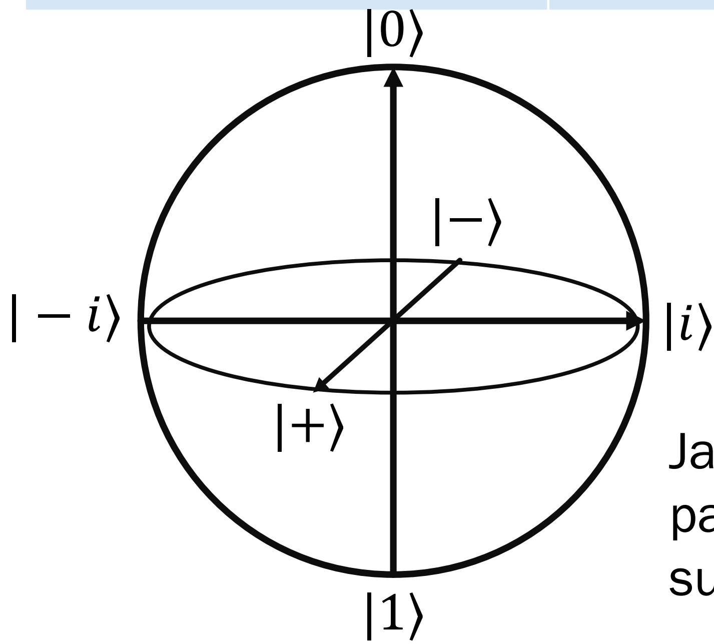
Misal $\theta = 90^o$ dan $\varphi = 90^o$ maka akan diperoleh

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + i\ \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i\ |1\rangle) = |i\rangle$$

Qubit Tunggal

Plus syarat $\infty \longmapsto (0,0,1)$. Pemetaan lainnya dapat dilihat di tabel berikut:

$\vert 0\rangle \longmapsto (\mathbf{0,0,1})$	$\vert +\rangle \longmapsto (\mathbf{1,0,0})$	$\vert i\rangle \longmapsto (\mathbf{0,1,0})$
$\vert 1\rangle \longmapsto (0,0,-1)$	$\vert -\rangle \longmapsto (-1,0,0)$	$\vert -i\rangle \longmapsto (0,-1,0)$



$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}$$

$$|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}$$

Jadi operasi Hadamard tidak lain adalah rotasi pada sumbu $\hat{y}$ sebesar 90^o disusul rotasi pada sumbu $\hat{x}$ sebesar 180^o.

Perhatikan $|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle)$ dan $|-i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i|1\rangle)$; gunakan $\alpha = i$ maka dapat diperoleh $i \longmapsto \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle) = |i\rangle$ dan juga $-i \longmapsto |-i\rangle$. Bagaimana pemetaan ke bola Bloch? Perhatikan untuk $\alpha = s + iq = i$ atau berarti $s = 0$ dan $t = 1$ maka $(0,1) \longmapsto (0,1,0)$ atau dengan kata lain $|i\rangle \longmapsto (0,1,0)$. Perhatikan juga untuk $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ yang berarti $\alpha = 1$ atau $s = 1, q = 0$ sehingga $(1,0) \longmapsto (1,0,0)$ atau dengan kata lain $|+\rangle \longmapsto (1,0,0)$. Dengan demikian dapat diperoleh titik-titik penting dipermukaan bola Bloch yang berkorespondensi dengan keadaan-keadaan kuantum. Jadi ada tiga representasi ruang keadaan kuantum untuk sebuah system qubit tunggal: (a) dalam bentuk vector yang ditulis dengan notasi ket: $a|0\rangle + b|1\rangle$ di mana a dan b bilangan kompleks yang memenuhi syarat $|a|^2 + |b|^2 = 1$ karena terikat oleh ketentuan fasa global maka representasi ini tidak satu-satu; (b) bidang kompleks yang diperluas: sebuah bilangan kompleks α dan ∞, representasi ini satu-satu; (c) representasi bola Bloch yang juga satu-satu.