

Contribution ID : **220** Type : **Poster**

Determinación De La Energía Del Estado Fundamental Del LiH Mediante El Algoritmo VQE (Variational Quantum Eigensolver)

La simulación precisa de sistemas moleculares es un desafío fundamental en química cuántica debido al escalamiento exponencial del espacio de Hilbert. Este estudio implementa el algoritmo Variational Quantum Eigensolver (VQE) para computar la curva de energía potencial del estado fundamental del hidruro de litio (LiH). Se construyó el Hamiltoniano electrónico en la base STO-3G (mapeado a 12 qubits) mediante la transformación de Jordan-Wigner, obteniendo 631 términos de Pauli. Se empleó un Hardware-Efficient Ansatz (HEA) compuesto por rotaciones Ry y escaleras de compuertas CNOT, optimizado mediante el algoritmo Adam. Mediante un barrido de distancias (0.8 a 2.4 Å), los resultados de VQE se contrastaron con Hartree-Fock (HF) y Full Configuration Interaction (FCI).
Todo el cómputo se ejecutó en una laptop comercial (Intel Core i5-210H, 8 GB RAM, GPU RTX 3050), sin supercomputadoras, completando el cálculo en menos de 1 hora. En contraste, FCI escala factorialmente, requiriendo semanas o meses en clústeres HPC para sistemas medianos. Las energías calculadas satisfacen EHF>EVQE>EFCI, capturando el 80% de la energía de correlación en la geometría de equilibrio (1.6 Å) con un error de 4.7 mHa frente a FCI. Esto demuestra el potencial de las simulaciones cuánticas en la era NISQ.

Primary author(s) : HUAMANÍ MACHACA, Gael Alexander (UNSA)

Co-author(s) : Dr CASTRO PINTO, Ricardo Alexander (Universidade Federal de Pernambuco)

Presenter(s) : HUAMANÍ MACHACA, Gael Alexander (UNSA)

Session Classification : Poster Fisica del Estado Solido