

The Electron Density: A Fidelity Witness for Quantum Computation

SND-ID: 2023-198. **Version:** 1. **DOI:** <https://doi.org/10.5878/0n2y-dp56>

Detta är en tidigare förhandsvisning av en nu publicerad katalogpost.

Du når den publicerade posten här: <https://snd.se/sv/catalogue/dataset/2023-198>.

Citering

Skogh, M., Rahm, M., Lolur, P., & Barucha-Dobrautz, W. (2025) The Electron Density: A Fidelity Witness for Quantum Computation (Version 1) [Dataset]. Chalmers tekniska högskola. Tillgänglig via: <https://doi.org/10.5878/0n2y-dp56>

Skapare/primärforskare

[Mårten Skogh](#) - Chalmers tekniska högskola, Institutionen för kemi och kemiteknik

[Martin Rahm](#) - Chalmers Tekniska Högskola, Institutionen för kemi och kemiteknik

[Phalgun Lolur](#) - Chalmers Tekniska Högskola, Institutionen för kemi och kemiteknik

[Werner Barucha-Dobrautz](#) - Chalmers Tekniska Högskola, Institutionen för kemi och kemiteknik

Forskningshuvudman

[Chalmers tekniska högskola](#)

Beskrivning

Elektrontäthet beräknad med hjälp av fysiska (supraledande kvantbitar) och simulerade kvantdatorer för väte molekylen (H_2), litiumhydrid (LiH), di-litium (Li_2) samt vätecyanid (HCN). Inkluderar även den reducerad enpartikeltäthetsmatrisen (one-particle reduced density matrix, 1-RDM) och resultat av topologisk analys av elektrontätheterna för molekylerna. Beräkningar på fysisk hårdvara utfördes på Särimmer, en kvantprocessor med tre supraledande kvantbitar. Simulering av kvantdatorer utfördes med Qiskit,

Data innefattar personuppgifter

Nej

Språk

[Engelska](#)

Dataformat / datastruktur

[Numeriska](#)

Datainsamling 1

- Insamlingsmetod: Fysiska mätningar och tester
- Beskrivning av insamlingsmetod: Beräkningar utförda på kvantdatorer
- Datainsamlare: Chalmers tekniska högskola

Datainsamling 2

- Insamlingsmetod: Simulering
- Beskrivning av insamlingsmetod: Simuleringar av brusiga och brusfria kvantdatorer
- Datainsamlare: Chalmers tekniska högskola

Medverkande

Janka Biznárová - Chalmers Tekniska Högskola, Institutionen för mikroteknologi och nanovetenskap

Amr Osman - Chalmers Tekniska Högskola, Institutionen för mikroteknologi och nanovetenskap

Christopher Warren - Chalmers Tekniska Högskola, Institutionen för mikroteknologi och nanovetenskap

Jonas Bylander - Chalmers Tekniska Högskola, Institutionen för mikroteknologi och nanovetenskap

Giovanna Tancredi - Chalmers Tekniska Högskola, Institutionen för mikroteknologi och nanovetenskap

Finansiering 1

- Finansiär: Europeiska kommissionen
- Diarienummer hos finansiär: HORIZON-CL4-2022-QUANTUM-01-SGA
- Projektnamn på ansökan: OpenSuperQPlus100

Finansiering 2

- Finansiär: Vetenskapsrådet
- Diarienummer hos finansiär: 2022-06725
- Projektnamn på ansökan: NAISS

Finansiering 3

- Finansiär: Wallenberg Center for Quantum Technology (WACQT)

Finansiering 4

- Finansiär: Vetenskapsrådet
- Diarienummer hos finansiär: 2018-0597

Finansiering 5

- Finansiär: Europeiska kommissionen
- Diarienummer hos finansiär: 101062864
- Projektnamn på ansökan: Marie Skłodowska-Curie grant

Finansiering 6

- Finansiär: Europeiska kommissionen
- Diarienummer hos finansiär: H2020-FETFLAG-2018-03
- Projektnamn på ansökan: OpenSuperQ

Forskningsområde

[Teoretisk kemi](#) (Standard för svensk indelning av forskningsämnen 2011)

[Annan fysik](#) (Standard för svensk indelning av forskningsämnen 2011)

Nyckelord

[Beräkningskemi](#), [Kvantdatorer](#), [Electronic structure](#)

Publikationer

M. Skogh, W. Dobrautz, P. Lolur, C. Warren, J. Biznárová, A. Osman, G. Tancredi, J. Bylander and M. Rahm. The Electron Density: A Fidelity Witness for Quantum Computation. Chem. Sci., 2024.

DOI: <https://doi.org/10.1039/D3SC05269A>

Tillgänglighetsnivå

Åtkomst till data via SND

Data är fritt tillgängliga

Användning av data

[Att tänka på vid användning av data som delas via SND](#)

Licens

[CC BY 4.0](#)

Versioner

Version 1. 2024-01-11

Relaterade forskningsdata i SND:s katalog

[Snabbare konvergens för Variational Quantum Eigensolver genom parameteröverföring](#)

Ladda ner metadata

[DataCite](#)

[DDI 2.5](#)

[DDI 3.3](#)

[DCAT-AP-SE 2.0](#)

[JSON-LD](#)

[PDF](#)

[Citation \(CSL\)](#)

Publicerad: 2024-01-11

Senast uppdaterad: 2024-01-11