

양자 기술과 화학

김 현 우 (광주과학기술원 화학과 조교수)

1. 서론

전 세계에서 양자 기술에 관한 관심이 높아지고 있다. 우리나라도 올해 12대 국가 전략기술을 발표하며 양자 기술을 포함했다. 화학은 원자 혹은 전자 수준에서 소재와 분자를 연구하는 학문이기에 화학 전공자는 원자 구조를 배울 때부터 양자를 배운다. 파동 함수와 측정, 양자 상태와 같은 단어들이 물리 화학 교과서에 등장한다. 하지만 아직은 양자 기술이 화학 연구자들에게 다소 생소한 개념이 될 때가 많다. 이 글에서는 양자 기술과 관련된 화학 분야 연구가 소개될 것이다.

2. 본론

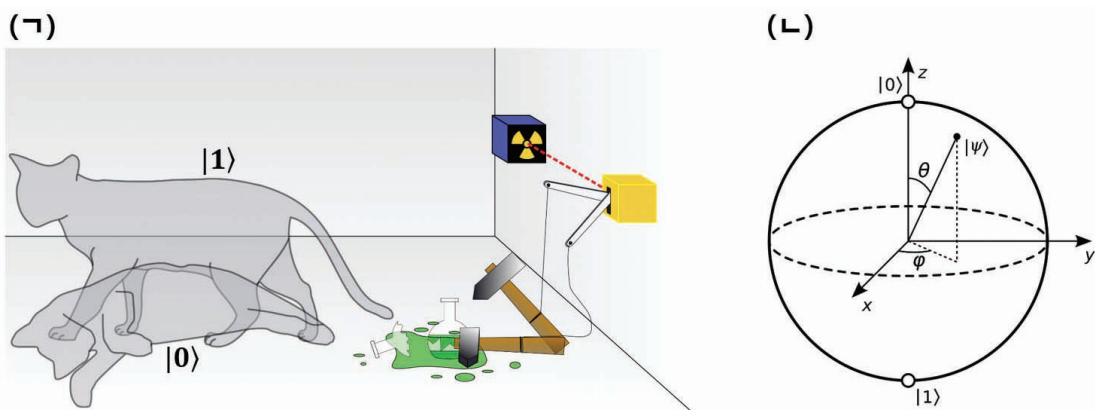
2.1. 양자 화학 계산과 양자 기술

양자 화학 계산은 주어진 화학 구조에서 전자 구조를 계산하여 구조와 특성 사이 관계를 밝히는 연구에 주로 이용된다. 밀도 범함수 이론(density functional theory, DFT) 계산이 가장 널리 이용되어 많은 연구자에게 알려져 있다. DFT는 계산 효율성과 정확성이 적절한 균형을 이룬 방법으로 다양한 화학 실험 결과를 설명할 수 있는 규모로 계산을 할 수 있다는 장점

이 있다. DFT가 가진 단점은 포텐셜 에너지 일부를 정확하게 계산할 수 없다는 점이고, 이 때문에 근사법이 도입된다. DFT와 다른 양자 화학 계산 이론인 파동 함수 이론(wave function theory, WFT)은 정확한 계산 결과를 주는 방법을 제시할 수 있다. 하지만 여러 전자 배치가 섞여 있는 분자와 소재를 효율적으로 계산하기에는 어려움이 따른다. 이를 해결하는 방법들이 DFT와 WFT에서 모두 개발되고 있다.

필자는 계산화학 전공자로 양자 기술에 대한 전문가가 아니지만, 이론 및 계산 화학에서 진행되는 양자 기술관련 내용을 설명하기에 필요한 간단한 배경 지식을 소개하려 한다. 양자 컴퓨터는 말 그대로 양자 현상을 이용한 컴퓨터이다. 기존 컴퓨터가 비트(bit)라고 부르는 0과 1로 정보를 기술한다면, 양자 컴퓨터는 정보를 다루는 기본 단위로 큐비트(qubit)을 이용한다. 큐비트가 특별한 점은 중첩에 있는데, 만약 0과 1로 표현되는 두 가지 상태가 있다면 익히 알려진 슈뢰딩거 고양이 예제처럼 측정하기 전에는 두 가지 상태가 중첩되어 있는 상태로 존재한다는 것이다.

슈뢰딩거(Schrödinger) 방정식에 따르면 파동 함수와 해밀토니안(Hamiltonian)을 이용해서 고유값(eigenvalue) 문제를 푸는 방식으로 에너지



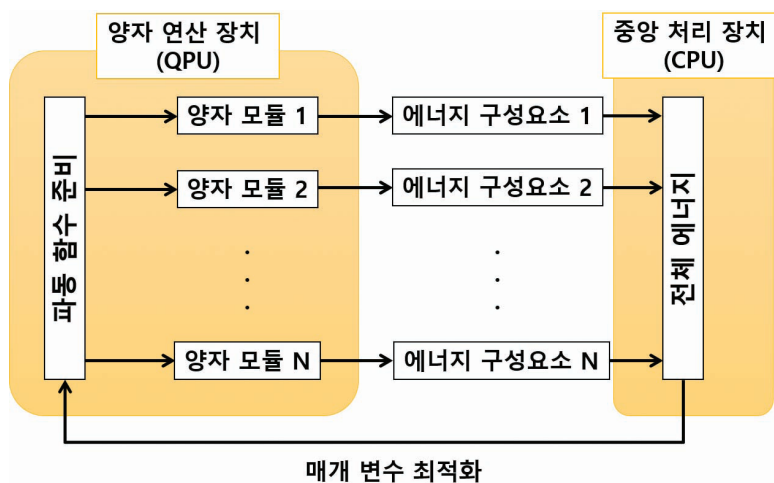
[그림 1] (ㄱ) 슈뢰딩거 고양이 (ㄴ) 공간에 표현된 큐비트 (출처: 위키피디아)

를 구한다. 큐비트를 이용한 양자 컴퓨터를 양자 화학 계산에서 이용하기 위해서는 파동 함수와 해밀토니안이 큐비트로 표현되어야 한다. 먼저 큐비트 표현으로 파동 함수를 기술하는 방법은 Jordan–Wigner, Bravyi–Kitaev 변환 등이 알려져 있다. 또한 해밀토니안도 큐비트를 이용한 표현으로 기술될 수 있다.

물리 화학에서 배운 변분 원리는 ‘임의로 파동 함수를 이용하여 에너지를 계산하는 경우 계산된 값은 실제 에너지보다 전혀 작지 않다.’라는 문장으로 설명될 수 있다. 다르게 말하면 변분 원리는 모든 파동 함수를 시도해서 가장 낮은 에너지가 계산되는 파동 함수를 찾으면 그 파동 함수와 에너지가 바닥 상태에 대응된다고 말하고 있다. 이 원리를 이용해서 개발된 변분 양자 알고리즘(variational quantum algorithm, VQA) 중에서 가장 대표적인 예가 양자 컴퓨터와 고전 컴퓨터를 함께 이용하는 variational quantum eigensolver (VQE)가 있다. VQE

에서는 그림2와 같이 준비된 양자 상태에 따라 에너지를 측정하고, 고전 컴퓨터에서 최적화를 진행해서 다음 양자 상태를 찾는 과정을 반복한다. 이 과정이 반복되며 에너지 최소값을 찾아 바닥상태 에너지와 파동 함수가 찾아진다.

현재 VQE를 이용한 연구는 작은 분자계에서 주로 이루어졌으며 이론 방법도 파동 함수 이론 중에서 coupled cluster (CC)에 기반을 둔 방법이 주로 이용되고 있다. 양자 화학에서 효율성과 정확성을 모두 만족하기 위해 개발되었던 방법들이 양자 알고리즘을 개선하기 위해 도입되고 있다. 예를 들어, 오비탈을 최적화하는 방법 등이 최근 VQE와 함께 연구되었다. 개발된 양자 알고리즘이 양자 연산 장치(quantum processing unit, QPU)에서 구현되어 분자 에너지를 보고한 사례도 있다. 아직 고전 컴퓨터에서 DFT를 이용해서 연구하는 분자계에 비하면 그 규모는 작지만, 최근 하드웨어 발전과 함께 알고리즘 연구도 진행되고 있다.



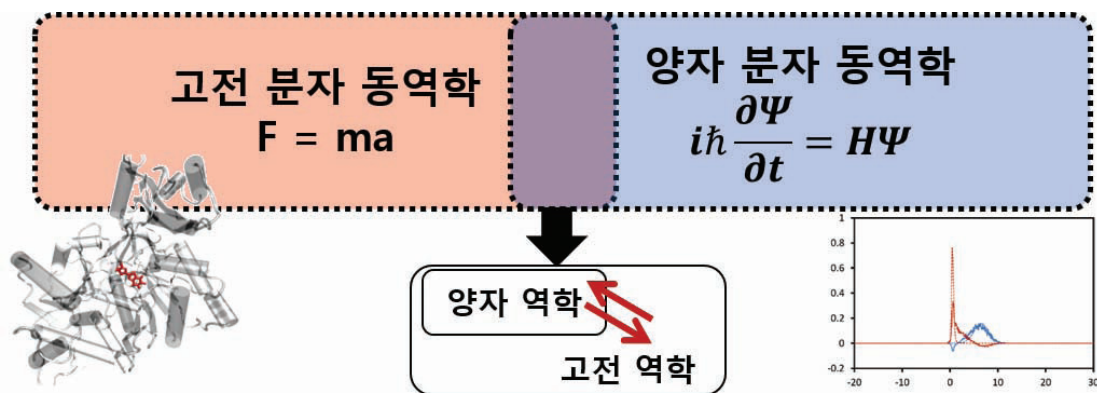
[그림 2] VQE를 간단히 나타낸 그림

2.2. 분자 동역학 전산 모사와 양자 기술

분자 동역학 전산 모사는 시간에 따라 변화하는 분자와 소재 구조 및 특성을 통계 처리하여 화학 현상을 설명하는 분야이다. 작은 유기 분자가 녹아있는 용액부터 생체 고분자나 무기 재료를 포함하는 다양한 화학계를 다루는 방법으로 분자 동역학이 연구되고 있다. 분자 동역학에서 널리 이용되는 방법은 고전 역학을 이용한 방법으로 힘은 질량과 가속도의 곱으로 설명되는 운동 방정식을 이용해서 분자가 시간에 따른 움직임을 기술하는 방법이다. 다만 이 방법은 에너지 표면이 하나만 있을 때 일어나는 화학 현상을 설명할 수 있다는 단점이 있다. 따라서 바닥 상태와 들뜬 상태 혹은 여러 들뜬 상태가 관여된 화학 현상을 설명하기 위해서 양자 분자 동역학도 연구되고 있다. 앞서 양자 화학 계산 연구가 시간 비의존 슈뢰딩거 방정식을 근사하여 진행되는 것과 다르게 양자 분자 동역학 연구는 시간 의존 슈뢰딩거 방정

식을 근사하여 전산모사를 진행된다. 독자들이 짐작하는 것처럼 고전 역학에 따른 분자 동역학에 비해 양자 분자 동역학을 전산 모사하는 것이 더 많은 계산량을 요구하므로 이 둘을 혼합한 양자-고전 혼합 분자 동역학도 연구되고 있다.

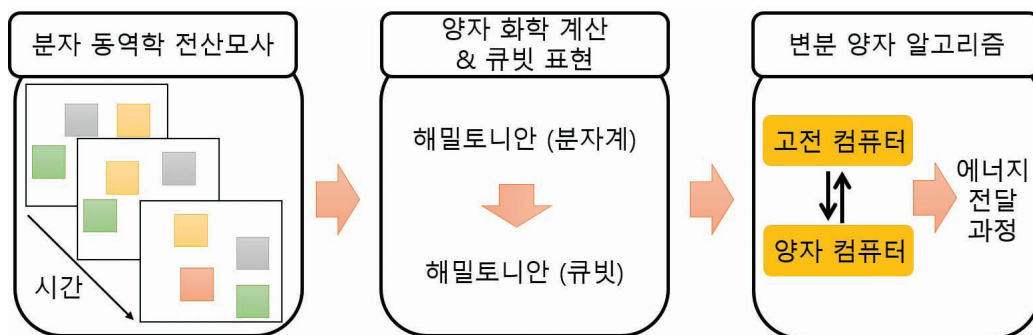
이 글에서는 양자 분자 동역학과 관련해서 양자 기술이 응용된 두 가지 사례를 소개하고자 한다. 첫 번째는 앞서 양자 화학 계산과 같이 분자 동역학 일부 과정에서 큐비트로 표현된 수식을 양자 컴퓨터가 계산하는 것이다. 예시로 유기 분자들이 만든 결정 구조에서 에너지 전달이 일어나는 과정을 설명한 연구가 있다 (그림3). 이 연구에서는 양자 화학 계산에서 소개된 VQA를 시간에 따라 바뀌는 파동 함수에 응용하였다. 먼저 슈뢰딩거 방정식을 풀기 위해서는 해밀토니안이 필요하다. 유기 분자 결정은 주어진 열역학 조건에 따라 여러 가지 구조로 존재할 수 있으므로 고전 컴퓨터를



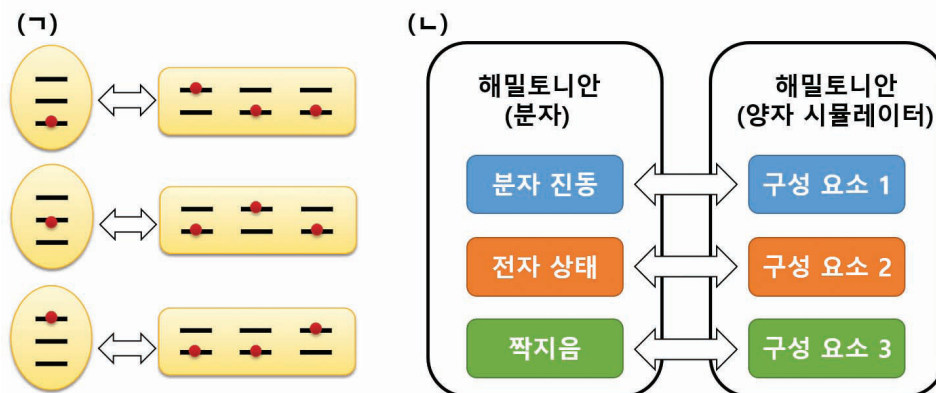
[그림 3] 분자 동역학 방법 설명

이용한 분자 동역학으로 가능한 구조가 추출될 수 있고, 각각 구조에 대해 양자 화학 계산으로 해밀토니안을 구성하는 요소들이 계산될 수 있다. 해밀토니안 요소가 계산된 다음에는 큐비트를 이용한 표현으로 해밀토니안을 새롭게 작성하는 과정이 진행된다. 이 과정에서 N개의 들뜬 상태를 $\log_2(N)$ 개의 큐비트로 기술하는 방법을 이용할 수 있다. 이 방법의 장점은 바닥 상태와 첫 번째 들뜬 상태를 포함하는 동역학을

연구할 때 큐비트를 1개만 이용해도 되는 등 필요한 큐비트 개수가 적다는 것이다. 이러한 방법은 진동 분광학 스펙트럼을 양자 컴퓨터를 이용해서 전산 모사할 때도 이용되었다. 해밀토니안이 큐비트로 기술된 다음에는 변분 원리를 이용해 파동 함수가 시간에 따라 변화하는 것을 전산 모사할 수 있다. 이 글에서는 유기분자 4개로 이루어진 구조에서 에너지가 전달되는 과정을 실제 양자 컴퓨터를 이용해서 전산 모



[그림 4] 변분 양자 알고리즘을 이용한 에너지 전달 과정 전산 모사 방법 예시



[그림 5] (ㄱ) 들뜬 상태와 조화 진동자 사이의 사상 예시 (ㄴ) 양자 시뮬레이터에서 해밀토니안 사상 예시

사되었다는 것을 소개하는 수준으로 글을 마무리하겠다.

분자 동역학에서 두 번째 사례는 사상(mapping)을 이용하는 전산모사 방법이다. 사상을 이용하는 분자 동역학에 이용하는 아이디어는 이미 보고되어 있었다. 예를 들어 들뜬 상태 3개가 있을 때 이를 조화 진동자 3개에 대응시켜서 분자 동역학을 조화 진동자로 전산 모사하고 결과는 들뜬 상태 분자 동역학으로 해석하는 것이 가능하다.

양자 시뮬레이터를 이용한 연구에서 사상은 양자 시뮬레이터에서 일어나는 현상을 설명하기 위한 해밀토니안과 분자 동역학을 기술하기 위한 해밀토니안 구성 요소가 수식으로 비슷하여 서로 대응될 수 있다는 관점에서 시작된다. 따라서 어떤 양자 상태가 준비되고 양자 시뮬레이터에서 일정 시간 이후에 측정을 하면 결과를 분자가 일정 시간 이후에 보여줄 분자 동역학 결과로 해석할 수 있는 것이다. 다만 이 방법이 가진 단점은 아직 오랜 시간 동안 전산모사

가 어렵다는 것과 측정을 한 이후에는 다시 양자 상태를 준비해야 한다는 것을 들 수 있다.

2.3. 기계학습과 양자 기술

빅데이터 시대에 화학 연구자들도 다양한 데이터를 수집하여 기계학습을 도입하는 등 변화에 대응하고 있다. 기계학습 방법은 데이터에서 사람이 쉽게 찾을 수 없는 패턴을 인식하여 신약과 신소재 개발 등에서 유용하다. 이러한 기계학습 방법을 양자 컴퓨터에 구현하는 연구가 최근 진행되었다. 이 글에서 필자는 기계학습에서 많이 쓰이는 방법인 인공 신경망을 양자 컴퓨터에서 이용할 수 있게 만든 양자 신경망을 소개하려 하였으나, 간단한 정보만 남기고 더 궁금한 독자를 위해 참고 문헌을 남기도록 하겠다.

양자 신경망은 기존 신경망에서 행렬 연산으로 층끼리 정보를 전달했다면, 게이트 연산이라는 다른 연산 방식을 통해 층끼리 정보를 전달하는 방식을 이용한다. 이 방법이 가지는 장

점은 여러 매개변수에 대해 더 민감할 수 있다는 점이다. 여러 매개변수가 조금 바뀌는 것에 대한 효과가 크다는 것으로 생각될 수 있고 이는 양자 신경망을 학습할 때 예측 오차를 더 줄일 수 있게 매개변수가 최적화될 수 있다는 것을 의미한다. 이에 따라 학습 단계의 수가 더 적어도 저 작은 오차를 보이는 예제가 보고되었다.

다양한 기계학습 방법이 양자 컴퓨터에서 이용될 수 있도록 연구되고 있으므로 기계학습을 화학 분야에 응용하는 연구에서도 향후 새로운 결과가 보고될 것이다.

3. 맺음말

이 글에서 필자는 양자 기술을 화학에 적용하는 사례를 일부 소개하였다. 많은 관심을 받고 빠르게 변화하는 주제에 대해서 최신 주제가 모두 다루어질 수는 없었다. 하지만 이 글이 화학 연구자들이 관심을 두는 주제들이 양자 기술과 함께 연구되고 있다는 점을 전달할 수 있기를 바란다.

4. 참고 문헌

4.1. 양자 화학 계산과 양자 기술

- (1) McArdle, S., et al. (2020). Rev. Mod. Phys., 92, 015003.
- (2) Zhao, L., et al. (2023). npj Quantum Inf., 9, 60.
- (3) Bauer, B., et al. (2020). Chem. Rev., 120, 12685.

4.2. 분자 동역학 전산모사와 양자 기술

- (1) Cerezo, M., et al. (2021). Nat. Rev. Phys., 3, 625.
- (2) Lee, C. K., et al. (2022). J. Chem. Theory Comput., 18, 1347.
- (3) MacDonell, R. J. et al. (2021). Chem. Sci., 12, 9794.

4.3. 기계 학습과 양자 기술

- (1) Sajjan, M., et al. (2022). Chem. Soc. Rev., 51, 6475.
- (2) Abbas, A., et al. (2021). Nat. Comput. Sci., 1, 403.