

재료 과학을 변혁시키는 양자 컴퓨팅: 기본 원리와 나노 소재 응용 연구 동향

한재희¹, 배준호² 

¹ 가천대학교 신소재공학과

² 가천대학교 물리학과

Quantum Computing Revolutionizing Materials Science: Basic Principles and Trends in Applications for Nanomaterials

Jae-Hee Han¹ and Joonho Bae²

¹ Department of Materials Science and Engineering, Gachon University, Seongnam 13120, Korea

² Department of Physics, Gachon University, Seongnam 13120, Korea

(Received September 23, 2024; Revised October 3, 2024; Accepted October 4, 2024)

Abstract: Quantum computing is set to transform the field of materials science, offering computational methods that could far surpass conventional approaches for tackling intricate material design challenges. This review introduces the foundational principles of rapidly growing quantum computing and its application trends in the design and analysis of nanomaterials. We explain how quantum speedup, achieved through quantum algorithms utilizing qubit superposition and entanglement, is applied to material design. Additionally, the principles and research trends of quantum variational methods, including the Variational Quantum Eigensolver (VQE), which has recently gained attention as a quantum algorithm simulation technique, will be discussed. By combining new techniques based on quantum algorithms with the quantum speed-up, the quantum computing is expected to offer new insights into data-intensive materials research and provide innovative methodologies for the development of new functional materials. With the advancement of quantum algorithms, the field of materials science could enter a new era, enabling more precise and efficient approaches in materials design and functional analysis.

Keywords: Quantum computing in materials science, Qubit superposition and entanglement, Quantum algorithm, Variational quantum eigensolver (VQE), Nanomaterials

1. 서론

자연과학과 공학은 자연현상 즉 데이터에서 패턴을 찾아내는 일에서 시작된다. 최근 컴퓨터 기술의 놀랄 만한 발

전은 많은 데이터에서 숨겨진 패턴을 찾는 일을 더 용이하게 만들어 주었다. 컴퓨터의 발전은 이제 단순히 데이터의 분석을 넘어서 기계 학습을 통해 데이터의 패턴을 스스로 알아내고 분류하는 단계에까지 이르렀다. 컴퓨터를 이용한 패턴 찾기에서 새로운 가능성을 보여주는 새로운 분야가 등장하였는데 바로 양자 컴퓨터 또는 양자 컴퓨팅 기술이다. 이 양자 컴퓨팅 기술이 얼마 전부터 전 세계적인 연구 개발의 붐을 일으키고 있다.

✉ Joonho Bae; baejh2k@gachon.ac.kr

Copyright ©2024 KIEEME. All rights reserved.
This is an Open-Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial License (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>) which permits unrestricted non-commercial use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

양자 컴퓨터는 단순히 말해서 양자역학에 기반을 둔 컴퓨터이다 [1-3]. 양자 컴퓨팅 기술이 특히 물리, 화학 및 재료 과학에서의 응용이 많은 기대를 모으는 것은, 원자, 분자와 재료의 물리적 화학적 성질이 기본적으로 양자 역학으로 기술되어야 정확하기 때문이다. 현재의 컴퓨터의 논리 게이트들은 양자역학의 법칙을 따르고 있지 않다. 고전적인 컴퓨팅에 의한 계산은 이러한 근본적인 한계를 갖고 있으며, 시뮬레이션하려는 시스템의 크기가 커질수록 지수함수적으로 비례해 시간과 자원을 필요로 하는 문제점을 지니고 있다.

양자 알고리즘은 계산화학 및 생물학 분야에서 기존의 고전적 알고리즘보다 우수한 성능을 발휘할 수 있는 중요한 응용 가능성을 가지고 있다. 특히 분자 구조의 최적화와 약물 디자인 과정에서, 양자 알고리즘은 특정 분자 구조를 검색하거나 최적의 상태를 찾는 문제를 보다 효율적으로 해결할 수 있는 장점을 지닌다. 예를 들어, 새로운 약물 후보를 설계할 때, 양자 알고리즘은 분자의 화학적 특성에 대한 정밀한 예측을 통해 최적의 구조를 빠르게 탐색할 수 있게 하여 약물 개발의 초기 단계에서 큰 도움을 준다 [4,5]. 이러한 알고리즘은 고전적인 방법으로는 계산이 복잡하고 시간이 오래 걸리는 문제를 양자 컴퓨팅의 계산 속도를 활용해 해결함으로써 신약 개발의 효율성을 크게 높일 수 있다. 또한, 양자 알고리즘은 단백질 접힘과 같은 복잡한 생물학적 시스템에서도 중요한 역할을 할 수 있다 [6,7]. 단백질의 특정 접힘 상태를 빠르게 예측하고 탐색함으로써, 생물학적 기능과 상호작용을 보다 정확하게 이해하는 데 기여하며, 이는 질병의 메커니즘 연구 및 치료제 개발에 중요한 데이터로 활용될 수 있다. 특히, 양자 알고리즘은 단백질의 에너지 상태를 빠르게 최적화하여 가능한 접힘 구조를 예측하는 데 뛰어난 성능을 보여주며, 전통적인 시뮬레이션 방법으로는 불가능했던 문제들을 해결할 수 있게 한다. 이러한 양자 알고리즘의 응용은 계산화학 및 생물학 분야에서 혁신적인 도구로 자리매김할 가능성을 보여주며, 분자 구조 분석, 약물 설계, 단백질 동역학 등 다양한 영역에서 중요한 역할을 수행할 수 있다.

본 리뷰에서는 최근 급성장하는 양자 컴퓨팅의 기초 원리와 나노 소재 설계와 해석에의 응용 동향을 소개하고자 한다. 큐비트의 중첩과 얽힘을 이용한 양자 알고리즘의 양자 스피드업이 재료 설계에 어떻게 응용되는지를 설명할 것이다. 또한, 최근 양자 알고리즘 시뮬레이션 기법으로 각광 받는 VQE (variational quantum eigensolver)를 비롯한 양자 변분법의 원리와 연구 동향을 설명한다.

2. 양자 컴퓨팅의 기본 원리

2.1 양자 상태

양자 컴퓨팅은 양자역학의 원리를 컴퓨터 과학에 적용한 기술로, 고전 컴퓨팅과는 매우 다른 계산 원리와 방식을 사용한다. 본 리뷰에서는 재료 과학에의 양자 컴퓨팅을 이해하기 위한 가장 기초적인 양자 컴퓨팅과 양자 시뮬레이션 기법의 원리를 설명해 본다.

고전 컴퓨터는 비트(0 또는 1)로 정보를 처리하는 반면, 양자 컴퓨터는 양자 비트(큐비트, qubit)로 작동한다 [2,3]. 큐비트는 0 또는 1의 상태뿐만 아니라 두 상태가 중첩된 상태(superposition)로도 존재할 수 있다. 그림 1은 양자역학에서 두 수준 계(큐비트)의 상태를 3차원 구[블로흐 구 (Bloch sphere)] 형태로 나타내는 기하학적 표현을 나타낸 것이다.

큐비트의 중첩(superposition): 큐비트는 0과 1의 조합으로 이루어진 양자 상태에 있을 수 있으며, 이를 통해 동시에 여러 계산을 수행하는 것이 가능하다.

큐비트의 얽힘(entanglement): 두 큐비트가 얽혀(entangled) 있으면, 한 큐비트의 상태가 다른 큐비트의 상태에 즉각적인 영향을 미친다. 이러한 얽힘은 양자 컴퓨팅에서 매우 중요한 역할을 한다. 얽힘을 통해 서로 멀리 떨어져 있어도 큐비트 간의 상태를 연결하여 병렬 연산을 가능하게 한다.

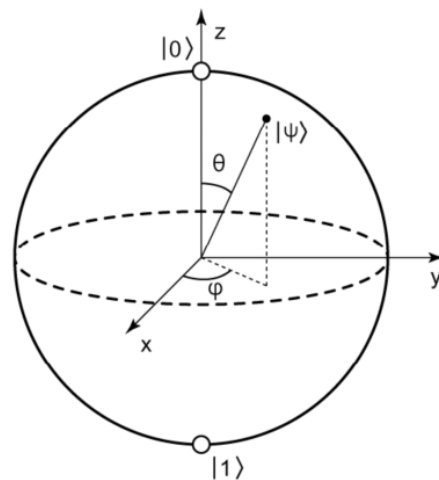


Fig. 1. A qubit represented on the Bloch sphere [3].

2.2 양자 게이트(quantum gates)

양자 게이트는 큐비트에 적용되는 연산을 나타낸다. 고전 컴퓨터의 논리 게이트(AND, OR 등)와 유사하지만, 양자 게이트는 큐비트의 중첩된 상태에 작용하여 병렬 연산을 수행할 수 있다. 대표적인 양자 게이트로는 하다마드(Hadamard), CNOT, Pauli-X, Pauli-Y, Pauli-Z 게이트 등이 있다 [8].

2.3 양자 측정(quantum measurement)

큐비트의 상태는 측정하기 전까지 중첩된 상태에 있다. 측정이 이루어지면 중첩 상태는 0 또는 1로 결정되며, 이 과정에서 정보가 상실될 수 있다. 양자 계산에서는 계산의 중간 결과를 측정하지 않고 끝까지 계산을 유지하는 것이 중요하다.

2.4 양자 병렬성(quantum parallelism)

큐비트의 중첩 상태와 얽힘을 활용하여 양자 컴퓨터는 병렬로 여러 연산을 동시에 수행할 수 있다. 이는 고전 컴퓨터와 차별화되는 강력한 계산 능력의 원천이다 [9].

양자 병렬성을 이용하면, 고전적인 컴퓨터가 순차적으로 입력 데이터를 처리하는 것과 달리 입력 데이터가 중첩된 큐비트의 양자 상태에 의해 병렬적인 처리가 가능하며, 양자 알고리즘이 고전적인 알고리즘보다 훨씬 빠르며, 계산의 시간 복잡도에서 우월하다 [10-19] (그림 2). 이러한 양자 병렬 처리를 담당하는 양자 알고리즘의 핵심 부분을 오라클(oracle)이라고 부른다.

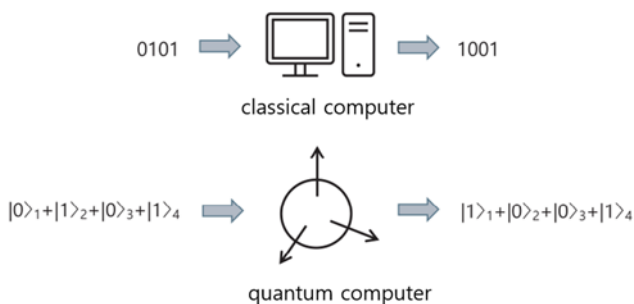


Fig. 2. Quantum parallelism compared to a conventional computer [3].

3. 재료 과학에서의 양자 컴퓨팅의 최근 동향과 도전 과제

양자 알고리즘이 재료 과학과 화학에 미치는 영향을 다루는 최근 연구들은 양자 컴퓨터의 독특한 특성을 활용해 복잡한 분자 구조 및 반응 메커니즘을 더 효율적으로 시뮬레이션하고 분석하는 방향으로 발전하고 있다. 특히, 양자 알고리즘과 나노 소재 설계의 융합은 재료의 특성 최적화와 새로운 기능성 소재 개발에 중요한 기여를 하고 있으며, 양자 컴퓨팅의 계산 속도를 활용한 혁신적 접근이 활발히 이루어지고 있다. 주요 논문과 연구 방향은 다음과 같다.

3.1 양자 컴퓨팅에 의한 재료 시뮬레이션의 필요성

양자 컴퓨터에 의한 재료 설계 및 시뮬레이션의 필요성을 이해하기 위하여 기존 분자 동역학 시뮬레이션의 한계를 생각해 보자. 만약 100개의 전자를 가진 양자계에 대해 시뮬레이션이 필요할 때, 오직 전자의 스핀 자유도만을 고려한다 해도 그 시뮬레이션에 대한 힐버트 공간의 차원 수는 $2^{100} \approx 1.3 \times 10^{30}$ 이다. 이러한 차원의 간에 현존하는 컴퓨터 기술로는 파동함수 정보를 저장하는 것은 거의 불가능하다.

그러나 제어 가능한 100큐비트를 갖춘 양자 컴퓨터는 이러한 양자 시스템을 시뮬레이션할 수 있다. 또한 앞에서 알아본 바와 같이 양자 알고리즘의 병렬 처리와 양자 상태의 중첩으로 기존 컴퓨팅보다 훨씬 빠른 계산 수행 가능하다. 이러한 사실은 소재의 본질적인 양자 역학적 성질로 인해 고전적인 컴퓨터보다 양자 컴퓨터가 근본적으로 시뮬레이션에서 적합하기 때문이다 [1].

3.2 양자 변분법(variational quantum algorithm, VQA)

양자 변분법 특히 그중 variational quantum eigensolver (VQE)는 양자 컴퓨팅을 사용해 분자의 에너지 준위를 계산하는 알고리즘으로, 고전적인 방식으로는 매우 어려운 전자 구조 문제를 해결하는 데 적용되고 있다 [20,21]. VQE는 재료 과학에서 중요한 화합물들의 바닥 상태 에너지를 계산하거나 반응 경로를 예측하는 데 사용된다. 최근 연구는 양자 컴퓨터가 더 복잡한 화학 시스템을 처리할 수 있도록 VQE 알고리즘을 개선하는 방향으로 발전하고 있다.

VQE 알고리즘은 NISQ (중간검증단계 양자) 시대에서 변분법(variational quantum algorithm, VQA)과 고전-양자 컴퓨터 하이브리드 기법을 이용하여 양자 이득을 얻

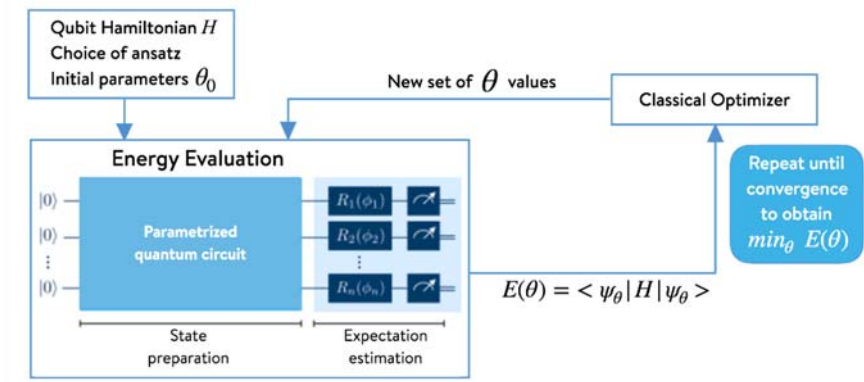


Fig. 3. Principle of VQE algorithm [23].

을 수 있는 양자 알고리즘이다.

현존하는 다양한 변분법 양자 알고리즘 중에서 물질의 바닥 상태 에너지를 계산하는 variational quantum eigensolver (VQE)가 가장 활용성이 높은 양자 변분법 알고리즘 중 하나로 연구가 활발하다.

그림 3은 VQE 알고리즘의 구동 원리를 도식화하여 보여주고 있다.

변분 원리는 양자역학에서 시스템의 실제 바닥 상태 에너지는 모든 가능한 상태 중에서 가장 낮은 에너지를 갖는다는 원리이다 [21,22].

수학적으로, 어떤 추정된 양자 상태 $|\psi(\theta)\rangle$ 에 대해, 그 기대값 $\langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle$ 은 해밀토니안 H 의 가장 낮은 에너지(즉 바닥 상태 에너지)보다 크거나 같다는 사실을 이용한다.

즉

$$E(\theta) = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle \geq E_{\text{ground}} \quad (1)$$

여기서 θ 는 파라미터이며, 이 파라미터를 최적화하여 $E(\theta)$ 를 최소화하는 것이 목표이다.

양자 회로는 바닥 상태의 추정값 $|\psi(\theta)\rangle$ 을 생성하는데 사용된다. 이 양자 상태는 다수의 파라미터 θ 로 표현된 회로를 통해 생성된다.

이 회로는 다양한 양자 게이트로 구성되며, 하다마드(Hadamard) 게이트, CNOT 게이트, 로테이션 게이트 등이 사용될 수 있다. 이 양자 상태는 특정 파라미터 세트 θ 에 대응하는 에너지를 측정하게 된다.

여기까지 양자 컴퓨팅 리소스를 사용하지만 측정된 에너지 기대값을 고전 컴퓨터로 전송한 후, 고전 컴퓨터는 파라미터 θ 를 조정하여 에너지를 최소화하는 방향으로 최적화한다.

최적화 과정이 수렴되면, 그때의 파라미터 θ_{opt} 에 해당하는 양자 상태 $|\psi(\theta_{\text{opt}})\rangle$ 가 시스템의 바닥 상태에 가까운 상태로 간주된다. 이때의 에너지 $E(\theta_{\text{opt}})$ 가 바닥 상태 에너지의 근사값이 된다.

이러한 VQE 양자 알고리즘의 장점으로서는 VQE의 장점으로서는 첫째 현존하는 양자 컴퓨터의 노이즈에 강하다는 점이 있다. VQE는 완전한 양자 알고리즘(예: quantum phase estimation)과 달리, 짧은 심도(depth)의 양자 회로만 필요하기 때문에 현재의 노이즈가 있는 양자 하드웨어에서 비교적 효율적으로 실행될 수 있다. 또한 VQE는 양자 컴퓨터와 고전 컴퓨터가 협력하여 최적화 문제를 해결하는 하이브리드 알고리즘이므로, 계산 자원을 효율적으로 분배할 수 있다.

현재 VQE에서 ground state energy를 계산할 수 있는 알고리즘은 많이 있으나 어떠한 알고리즘을 사용하는지, 더 나아가 계산 알고리즘의 파라미터들을 어떻게 빌드하는지에 따라 계산 정확도가 달라진다. 그림 4는 VQE 양자 알고리즘을 이용한 고분자 시뮬레이션을 나타낸다.

VQE 계산을 위한 주요 파라미터들에는 ansatz, classical optimizer, iteration, qubit converter 등이 있다. 연구자들은 정확한 계산을 할 수 있는 알고리즘을 개발하고 그 계산 코스트를 줄이려 연구 중이다. 그림 5는 리튬 하이드라이드 음이온의 결합 길이에 따른 에너지와 쌍극자 모멘트를 VQE 양자 알고리즘을 사용하여 계산한 결과를 나타낸다.

VQE를 사용한 재료 시뮬레이션의 도전 과제로서는 구체적 응용 가능성에 대한 기준과 양자 이득에 대한 규명이 필요하다. 또한 아직까지는 작은 크기의 재료에 대한 양자 시뮬레이션 실연이 주를 이루고 있어 실용성 있는 물질 크기에서의 양자 이득 규명이 필요하다.

Benchmarking HCN-isomerization

A particular task has been to calculate the ground-state energy surface of HCN relevant for HCN isomerization: $H-CN \leftrightarrow CN-H$. A useful basic comparison involves the 10-electron molecules N_2 , CN^- , HCN, and several HCN isomers described with 12-15 qubits (Table III). We have calculated the ground-state energy with the STO-6G basis set at

030005-6

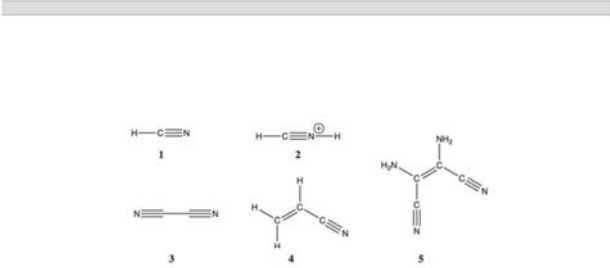


FIGURE 3. (1) Hydrogen cyanide, HCN; (2) $HCNH^+$; (3) Cyanogen; (4) Acrylonitrile; (5) Diaminomaleonitrile

TABLE I. H_2O and related molecules representing elements of water clusters and water chains: Execution times.

STO-6G	# electrons	# qubits	#gates	#vpar (vp)	TTS _{1,p} (s)	TTS _{tot} (min)	#E _{iter}	TTS _{con} (min)
OH ⁻	8	6	492	10	0.03	0.007	6	0.039
OH ⁻ (6-31G)	8	17	54290	404	7.4	50	10	500
H ₂ O	8	8	2291	30	0.12	0.06	9	0.52
H ₃ O ⁺ flat	8	10	6060	66	-	-	-	-
H ₃ O ⁺	8	11	10900	106	24	42	12	504
OHO ⁻	14	14	7478	68	1	1.15	129	148
O-HO ⁻	14	15	15089	130	1.8	4	118	472
H ₂ O-OH ⁻ straight	16	18	36112	252	10	42	19	420
H ₂ O-OH ⁻ bent	16	19	68162	492	31	254	12	3048
H ₂ O-OH ₂	16	19	36382	228	15	57	9	513
H ₂ O (STO-31G)	8	20	73274	408	60	408	9	3937
H ₂ O-HOH	16	20	71579	460	65	498	10	4980
H ₂ O-HOH	16	21	111733	390	390	4888	10	48880
H ₂ O-OH ₂ ⁺	16	21	61184	356	180	1068	10	10680
H ₂ OH-OH ₂ ⁺	16	22	116287	696	840	9744	10	97440
OH ₂ HO	22	24	112677	678	3000	33900	100	3.4 · 10 ⁶
O-HO-HO	22	24	114628	678	3900	44070	100	4.4 · 10 ⁶
H ₃ O ⁺ flat (6-31G)	8	24	124787	650	4200	45500	10	0.5 · 10 ⁶
H ₂ O (6-31+G [*])	8	38	503868	1726	-	-	-	-
H ₂ O (6-31++G [*])	8	44	820377	2472	-	-	-	-

* STO-6G is the default basis unless otherwise stated.

Fig. 4. Simulation of polymers using VQE method [24].

3.3 양자 위상 추정(quantum phase estimation, QPE)

양자 위상 추정은 양자역학적 시스템의 고유 상태와 고유값을 계산하는 알고리즘으로, 특히 전자 구조 문제에 적용된다. 양자 위상 추정은 한 유니타리 작용자의 위상이나 고유치를 추정하는 방법을 말하며, 쇼어 알고리즘을 비롯한 많은 양자 알고리즘의 핵심 루틴으로 사용된다. 이 수학적 과정은 양자 푸리에 변환과는 역의 관계에 있다 [2].

이 알고리즘은 양자 컴퓨터가 복잡한 재료나 화학 시스템의 정밀한 에너지 계산에 활용될 수 있는 중요한 도구이다 [26]. QPE는 양자 컴퓨팅의 병렬성을 이용해 특정 분자의 반응 메커니즘을 고효율적으로 분석할 수 있다.

관련 연구의 한 예로, Aspuru-Guzik 등의 연구 [26]는 양자 컴퓨팅이 분자 에너지를 효율적으로 계산하는 데 어떻게 사용될 수 있는지 최초로 제안한 연구 중 하나이다. 특히, QPE 알고리즘을 기반으로 한 분자 에너지 계산에서 양자 컴퓨터의 잠재적인 이점을 강조하였다. 이 연구는 양자 위상 추정을 활용해 수소 분자 (H₂) 같은 간단한 분자의

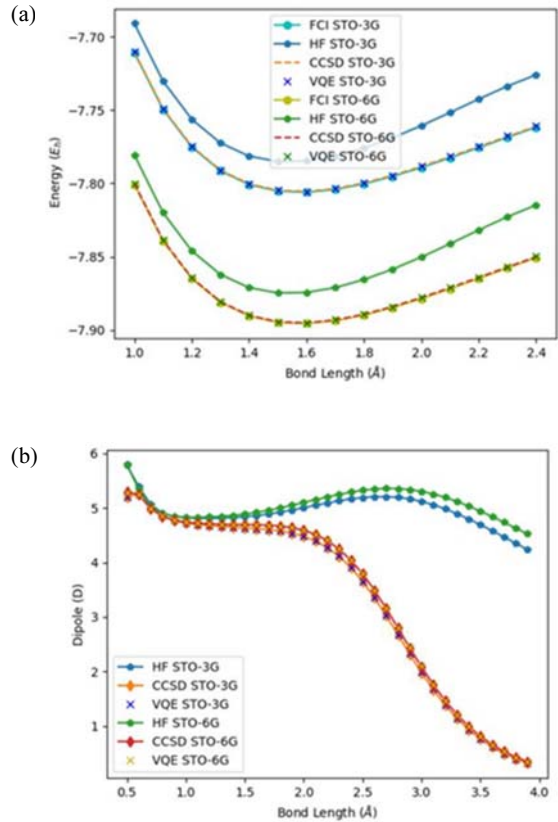


Fig. 5. (a) Lithium hydride anion: its potential energy curve and (b) dipole moment curve using VQE algorithm [25] (This is an open access article distributed under the terms of the creative commons CC BY license, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited. No permission required).

바닥 상태 에너지를 계산하는 방법을 실험적으로 시뮬레이션하는 과정을 보여주었다. 또한, 최근의 연구에서는 QPE를 활용하여 보다 큰 분자 시스템의 에너지를 계산할 수 있는 스케일러블한 방법을 소개한다 [27]. 실제 양자 하드웨어(초전도 큐비트)를 사용한 최초의 실험적 연구로, LiH 분자의 에너지 계산을 시연하였다.

3.4 Quantum machine learning (QML) for materials design

QML은 양자 컴퓨터의 머신 러닝 알고리즘을 활용해 재료의 특성을 예측하고, 새로운 재료를 설계하는 데 사용된다. 특히 복잡한 재료의 분자 구조나 상 변화를 양자 모델로 분석하여, 신소재 개발에 활용될 수 있다 [28]. QML은 양자 컴퓨팅의 이점을 기계 학습에 적용하여, 복잡한 재료

설계 문제를 해결할 수 있는 강력한 도구로 주목받고 있다. 특히, 재료 과학에서의 QML은 양자 시스템의 복잡성을 다루면서도 재료의 물리적, 화학적 특성을 더 빠르고 효율적으로 예측할 수 있는 잠재력을 가지고 있다. 머신 러닝과 양자 알고리즘을 결합한 QML은 에너지 저장 소재, 촉매, 반도체 등 다양한 재료 과학 분야에서 활발히 연구되고 있다.

한 연구에서는, 러닝을 사용하여 양자 화학 계산을 가속화하는 접근법을 제시하며, 특히 복잡한 분자 및 재료의 특성 예측에 중점을 둔다. 재료 설계에서 기계 학습 모델이 양자 화학 계산의 비용을 줄이면서도 높은 정확도를 유지할 수 있음을 보여주었다 [29].

3.5 Quantum monte carlo (QMC) methods

양자 몬테카를로 방법(QMC)은 양자 컴퓨터를 사용하여 몬테카를로 시뮬레이션을 효율적으로 실행함으로써, 전자 구조 문제 및 분자 동역학 시뮬레이션에 활용되고 있다 [30]. 특히 재료 과학에서 고전적인 몬테카를로 방법이 처리하기 힘든 복잡한 상호작용을 양자 알고리즘으로 더 빠르게 해결할 수 있다. 양자 몬테카를로 방법은 전자 구조 문제에서 재료의 정확한 에너지를 계산하는 데 유용한 수치적 방법론으로, 양자역학적 시스템의 복잡성을 다룰 수 있는 강력한 도구이다. 특히 QMC는 상호작용하는 전자들의 정확한 에너지와 물리적 특성을 예측하는 데 강점을 가지며, 이는 재료 설계에서 중요한 역할을 한다. 현재 QMC는 고체 물질의 상 변화, 결합 구조 분석 등 복잡한 재료 문제에 적용되고 있다. QMC 방법론을 이용해 고체 물질의 전자 구조를 계산하는 데 관한 포괄적인 리뷰가 발표되어 있으며 [31], QMC의 다양한 변형 방법(VMC, DMC 등)을 설명하고, QMC가 전자 상호작용을 정확하게 모델링할 수 있음을 시연하며, 반도체와 금속 같은 재료에 적용한다. 보다 최근의 연구에서, QMC의 계산 속도를 향상시키는 방법을 연구하여, 대규모 재료 시스템에서의 QMC 시뮬레이션을 보다 효율적으로 수행할 수 있는 기법을 제안한다. 이 논문은 특히 고체 재료 설계에서 QMC가 효율적으로 적용될 수 있음을 보여준다 [32].

3.6 Quantum simulation of chemical reactions

양자 컴퓨터는 분자의 결합 및 반응 메커니즘을 기존 고전 컴퓨터로는 계산하기 어려운 정밀도로 시뮬레이션할 수 있다 [33]. 예를 들어, 양자 시뮬레이션을 통해 촉매 반응 메커니즘을 이해하거나, 재료의 전자적 및 구조적 특성을 보다 정확하게 예측할 수 있다. 이러한 시뮬레이션은 차세

대 에너지 장치 개발 및 친환경 촉매 개발 등에 큰 기여를 하고 있다.

3.7 양자 알고리즘의 응용과 나노 소재 설계

양자 알고리즘은 계산화학과 생물학 분야에서 혁신적인 응용 가능성을 제시하며, 특히 복잡한 분자 구조 최적화와 약물 설계 과정에서 중요한 역할을 담당한다. 예를 들어, VQE (variational quantum eigensolver)와 같은 양자 변분 알고리즘은 기존의 전통적 계산 방법에 비해 복잡한 분자 시스템의 에너지 상태를 훨씬 빠르고 정밀하게 계산할 수 있다 [21]. 이를 통해 특정 화학적 특성을 가진 분자 구조를 효율적으로 설계하거나 새로운 약물 후보를 탐색하는 데 기여할 수 있다. 또한, 단백질 접힘 문제와 같은 고도의 생물학적 시스템에서 양자 알고리즘은 특정 접힘 상태를 빠르게 최적화함으로써, 분자 생물학과 재료 설계에서의 고난도 문제 해결에 중요한 역할을 한다. 이러한 알고리즘적 접근법은 재료 과학에서도 직접적으로 활용될 수 있으며, 양자 컴퓨팅을 통해 보다 정밀하고 효율적인 재료 특성 분석이 가능하다.

3.8 양자 소재의 독특한 특성 및 응용 연구

양자 소재는 양자 구속, 강한 전자 상관, 위상적 상태 등 독특한 물리적 특성을 통해 기존의 재료와는 근본적으로 다른 성능을 제공한다. 예를 들어, 양자점(quantum dots, QDs)과 같은 나노 소재는 전자의 양자 구속 효과로 인해 이산화된 에너지 준위를 갖게 되어, 재료 설계와 최적화에서 중요한 역할을 한다. 또한, 최근 연구에서는 그래핀 기반 양자점이 전자의 '밸리 상태'를 이용하여 큐비트를 구현하는 방법이 제시되었다 [34]. 이 논문에서 중국 칭화대의 Wu 연구팀은 그림 6에 나온 것과 같이 이중 그래핀 양자점을 통해 전위 장벽을 조정하여 DC/AC 전압을 조절하고, 따라서 그래핀 기반 양자점의 밸리 싱글렛 및 트리플렛 쌍을 통해 논리적 0과 1 상태를 나타낼 수 있음을 보고했다. 이는 양자 정보 처리를 위한 새로운 자유도를 제공한다. 이러한 양자 소재는 양자 컴퓨팅 시뮬레이션에서 분자의 전자 구조를 고도로 정밀하게 해석하는 데 필수적인 도구로 자리 잡고 있으며, 약물 개발이나 새로운 소재의 물리적 특성 예측 과정에서도 핵심적인 역할을 수행한다. 특히, 양자점은 전자의 스핀 자유도를 활용하여 스핀트로닉스류 기반으로 하는 양자 컴퓨팅 소자에서 중요한 역할을 한다. 양자점은 전자의 스핀을 제어하고 상호작용을 조절할 수 있는 독특한 물리적 특성을 제공함으로써, 큐비트 간의 상호

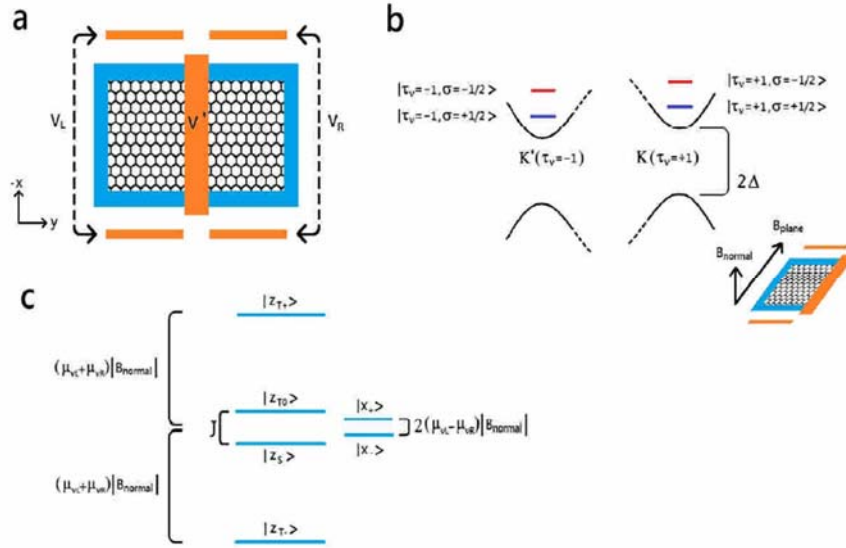


Fig. 6. The double QD qubit structure (The QDs are electrostatically defined. Gate V' is used to tune the potential barrier and, hence, J. Gates VL and VR are applied for DC/AC tuning) [34].

작용을 정밀하게 제어하는 데 기여한다 [35]. 이러한 양자 소재 또는 나노 소재의 특성은 특히 양자 컴퓨팅과 결합할 때 그 성능이 극대화될 수 있으며, 이를 통해 전통적인 시뮬레이션 방법들이 해결하지 못한 문제들을 해결할 수 있다.

3.9 큐빗의 중첩과 얽힘을 이용한 양자 스피드업

큐빗의 중첩과 얽힘은 양자 컴퓨팅의 본질적 원리로, 이를 통해 이전에는 불가능했던 수준의 계산 속도 향상, 즉 양자 스피드업(quantum speedup)을 가능하게 한다. 이와 같은 속성은 분자의 전자 구조를 고속으로 최적화하는 데 핵심적이며, 나노 소재의 전자적 특성 해석에서도 중요한 역할을 한다 [36]. 양자 소재 기반의 큐빗은 긴 일관성 시간을 유지하면서도 높은 양자 게이트 피델리티(quantum gate fidelity)를 제공해, 실질적 양자 컴퓨팅 구현에 필수적인 요소로 평가받고 있다. 이는 고도의 신뢰성과 효율성을 필요로 하는 첨단 재료 설계에서 중요한 기초가 된다.

3.10 최신 연구 결과와 실험적 접근

최신 연구는 양자 컴퓨팅을 활용해 나노 소재의 전자 구조와 상호작용을 시뮬레이션하고, 이를 바탕으로 새로운 재료의 설계와 최적화 전략을 발전시키고 있다. VQE와 같은 양자 알고리즘은 소재의 에너지 상태를 기존의 방법보

다 효율적으로 해석하고, 최적의 구조를 예측하여 실험적 검증을 통해 높은 성능을 보이는 재료 개발에 기여하고 있다 [37]. 이 같은 연구는 양자 알고리즘의 실용적 응용 가능성을 확장시켜, 양자 컴퓨팅과 나노 소재 설계를 통한 재료 과학의 혁신적 진보를 이끌어 내고 있다. 이러한 시도들은 양자 컴퓨팅이 재료 과학의 한계를 극복하는 데 있어 중요한 역할을 할 것으로 기대된다.

4. 결론: 재료 과학을 위한 양자 컴퓨팅의 도전 과제와 전망

현재 재료 설계 분야에서 양자 컴퓨팅의 적용은 큐빗 기술의 발전에 크게 의존하고 있으며, 이는 양자 알고리즘의 성능과 직결되는 중요한 문제로 부각되고 있다. 현재 VQE와 같은 양자 변분 알고리즘의 주요 도전 과제는 큐빗 하드웨어의 성능 한계와 밀접하게 연관되어 있다. 큐빗의 종류는 초전도 큐빗, 스핀 큐빗, 위상 큐빗 등으로 다양하며, 각각의 큐빗은 고유한 물리적 특성을 가지지만, 모든 유형이 피델리티, 일관성 시간, 잡음 민감성 등의 물리적 한계를 갖는다. 이러한 물리적 특성은 알고리즘의 효율성과 정확성에 직접적인 영향을 미치며, 양자 컴퓨팅이 실제 재료 설계에서 실용화되기 위해서는 이를 극복하는 기술적 혁신이 요구된다. 최근 연구들은 큐빗의 작동 방식에 따라 알고리즘의 성능이 어떻게 달라지는지를 분석하며, 큐빗의 최

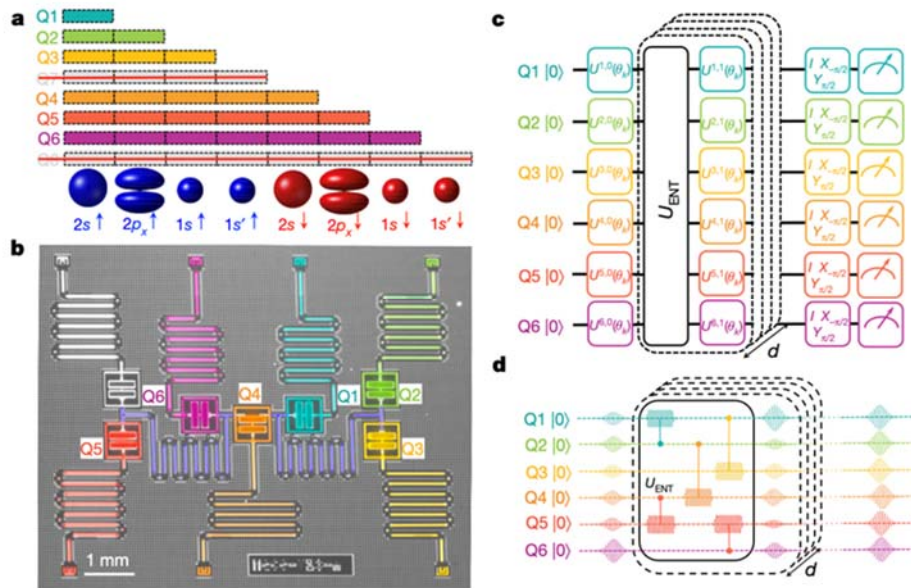


Fig. 7. Quantum chemistry on a superconducting quantum processor [21].

적화와 안정성 개선을 위한 다각적인 접근을 시도하고 있다. 특히 양자 게이트의 피델리티 향상과 큐비트 상태의 디코히런스를 줄이는 기술 개발은 양자 컴퓨팅이 재료 과학 응용에서 실질적인 성과를 거두기 위한 핵심 과제로 남아 있다. 고성능 큐비트의 개발은 나노소재와 같은 첨단 소재의 특성을 분석하고, 그 구조적 잡재성을 극대화하는 데 있어서 필수적이다. 또한, 양자 컴퓨팅이 실제 물질에서 응용될 때는 다수의 양자 게이트와 상호작용이 요구되므로, 양자 게이트의 피델리티뿐만 아니라 연산 속도와 안정성도 필수적으로 확보되어야 한다. 이는 양자 알고리즘의 정확성과 신뢰성을 보장하기 위한 핵심 요소로, 실험적 접근과 이론적 연구의 균형 잡힌 발전이 필요하다 [26,37-45].

향후 연구는 양자 소재 또는 나노 소재와 양자 알고리즘을 결합하여 큐비트의 성능을 최적화하고, 이를 통해 재료 설계의 정밀성과 효율성을 높이는 방향으로 나아갈 것이다. 예를 들어, 양자점(quantum dots, QDs), 그래핀, 2차원 전이금속 디칼코게나이드(transition metal dichalcogenide, TMD)와 같은 양자 소재 또는 나노 소재는 전자 이동성이 뛰어나고 안정적인 양자 상태 유지가 가능하며, 양자 게이트의 성능을 극대화할 수 있는 중요한 후보로 떠오르고 있다. 이러한 양자 소재 또는 나노 소재 기반 연구는 양자 컴퓨팅과 재료 과학의 융합을 가속화하고 있다. 그림 7은 초전도 양자 프로세서를 사용하여 양자 화학 문제를 해결하는 과정을 나타낸다. 그림 7(a)는 8개의 스핀 오비탈을 큐

비트 연산자로 매핑한 그림이며, 7(b)는 7개의 트랜스몬 큐비트로 구성된 초전도 양자 프로세서의 실제 이미지이다. 7(c)는 6개의 큐비트로 이루어진 하드웨어 효율적인 양자 회로를 보여주며, 7(d)는 이 회로에서 사용된 펄스 시퀀스를 설명한다. 또한, quantum machine learning (QML)과 같은 기법은 양자 컴퓨팅의 잠재력을 최대한 활용하여 복잡한 재료 설계 문제를 해결하는 데 새로운 접근을 제공할 것이다. QML은 기계 학습의 패턴 인식 능력을 양자 컴퓨팅의 속도와 결합하여, 데이터 집약적인 재료 연구에서 새로운 통찰을 제공하고, 새로운 기능성 재료 개발에 있어 혁신적인 방법론을 제공할 것으로 기대된다. 양자 알고리즘의 발전과 함께 재료 과학 분야는 새로운 시대를 맞이하게 될 것이며, 이를 통해 재료 설계와 기능성 분석이 한층 더 정밀하고 효율적인 방향으로 나아갈 수 있을 것이다.

ORCID

Joonho Bae

<https://orcid.org/0000-0003-0688-1008>

감사의 글

This work was supported by project # 202311800001. This work was supported by the National Research Foundation of Korea (NRF-2021R1A2C1008272).

REFERENCES

- [1] R. P. Feynman, *Feynman and Computation* (CRC Press, place, 2018), p. 133.
doi: <https://doi.org/10.1201/9780429500459-11>
- [2] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Place, 2010) p. 0.
doi: <https://doi.org/10.1017/CBO9780511976667>
- [3] J. Bae, *Introduction to Quantum Computing and Quantum Algorithm* (Gyomoon Publishing Co. place, 2023) p. 0.
- [4] Y. Cao, J. Romero, and A. Aspuru-Guzik. *IBM J. Res. Dev.*, **62**, 1 (2018).
doi: <https://doi.org/10.1147/JRD.2018.2888987>
- [5] K. Batra, K. M. Zorn, D. H. Foil, E. Minerali, V. O. Gawriljuk, T. R. Lane, and S. Ekins, *J. Chem. Inf. Model.*, **61**, 2641 (2021).
doi: <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c00166>
- [6] A. Perdomo-Ortiz, N. Dickson, M. Drew-Brook, G. Rose, and A. Aspuru-Guzik, *Sci. Rep.*, **2**, 571 (2012).
doi: <https://doi.org/10.1038/srep00571>
- [7] S. Pal, M. Bhattacharya, S. S. Lee, and C. Chakraborty, *Mol. Biotechnol.*, **66**, 163 (2024).
doi: <https://doi.org/10.1007/s12033-023-00765-4>
- [8] A. Barenco, C. H. Bennett, R. Cleve, D. P. DiVincenzo, N. Margolus, P. Shor, T. Sleator, J. A. Smolin, and H. Weinfurter, *Phys. Rev. A*, **52**, 3457 (1995).
doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.52.3457>
- [9] D. Deutsch, *Proc. R. Soc. A*, **400**, 97 (1985).
doi: <https://doi.org/10.1098/rspa.1985.0070>
- [10] C. Dürr and P. Høyer, *arXiv preprint quant-ph/9607014*, **0**, 0 (1996).
doi: <https://doi.org/10.48550/arXiv.quant-ph/9607014>
- [11] A. Ambainis, *ACM SIGACT News*, **35**, 22 (2004).
doi: <https://doi.org/10.1145/992287.992296>
- [12] S. Aaronson and A. Ambainis, *Proc. Forty-Seventh Annual ACM on Symposium on Theory of Computing (STOC '15)* (ACM, New York, USA, 2015) p. 307.
<http://hdl.handle.net/1721.1/99662>
- [13] C. R. Wie, *Quantum Inf. Comput.*, **19**, 0967 (2019).
doi: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1907.08119>
- [14] S. Aaronson and P. Rall, *Proc. 2020 Symposium on Simplicity in Algorithms (SOSA)* (publisher, place, 2020) p. 24.
doi: <https://doi.org/10.1137/1.9781611976014.5>
- [15] N. Benchasattabuse, P. Chongstitvatana, and C. Apomtewan, *Proc. 2018 3rd International Conference on Computer and Communication Systems (ICCCS)* (IEEE, Nagoya, Japan, 2018) p. 0.
doi: <https://doi.org/10.1109/CCOMS.2018.8463331>
- [16] D. Qiu, L. Luo, and L. Xiao, *Theor. Comput. Sci.*, **993**, 114461 (2024).
doi: <https://doi.org/10.1016/j.tcs.2024.114461>
- [17] G. Brassard, P. Høyer, M. Mosca, and A. Tapp, *Contemp. Math.*, **305**, 53 (2002).
doi: <https://doi.org/10.1090/conm/305/05215>
- [18] M. Boyer, G. Brassard, P. Høyer, and A. Tapp, *Fortschr. Phys.*, **46**, 493 (1998).
doi: [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-3978\(199806\)46:4/5<493::AID-PROP493>3.0.CO;2-P](https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-3978(199806)46:4/5<493::AID-PROP493>3.0.CO;2-P)
- [19] E. Ukkonen, *Inf. Control*, **64**, 100 (1985).
doi: [https://doi.org/10.1016/S0019-9958\(85\)80046-2](https://doi.org/10.1016/S0019-9958(85)80046-2)
- [20] Y. Cao, J. Romero, J. P. Olson, M. Degroote, P. D. Johnson, M. Kieferová, I. D. Kivlichan, T. Menke, B. Peropadre, N.P.D. Sawaya, S. Sim, L. Veis, and A. Aspuru-Guzik, *Chem. Rev.*, **119**, 10856 (2019).
doi: <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00803>
- [21] A. Kandala, A. Mezzacapo, K. Temme, M. Takita, M. Brink, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, *Nature*, **549**, 242 (2017).
doi: <https://doi.org/10.1038/nature23879>
- [22] A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt, M. H. Yung, X. Q. Zhou, P. J. Love, A. Aspuru-Guzik, and J. L. O'Brien, *Nat. Commun.*, **5**, 4213 (2014).
doi: <https://doi.org/10.1038/ncomms5213>
- [23] IQbit, *The Variational Quantum Eigensolver (VQE)*, http://openqemist.iqbit.com/docs/vqe_microsoft_qsharp.html (2019).
- [24] P. Lolur, M. Rahm, M. Skogh, L. García-Álvarez, and G. Wendin, *AIP Conf. Proc.*, **2362**, 030005 (2021).
doi: <https://doi.org/10.1063/5.0054915>
- [25] B. Avramidis, H. P. Paudel, D. Alfonso, Y. Duan, and K. D. Jordan, *AIP Adv.*, **14**, 035047 (2024).
doi: <https://doi.org/10.1063/5.0188249>
- [26] A. Aspuru-Guzik, A. D. Dutoi, P. J. Love, and M. Head-Gordon, *Science*, **309**, 1704 (2005).
doi: <https://doi.org/10.1126/science.1113479>
- [27] P.J.J. O'Malley, R. Babbush, I. D. Kivlichan, J. Romero, J. R. McClean, R. Barends, J. Kelly, P. Roushan, A. Tranter, N. Ding, B. Campbell, Y. Chen, Z. Chen, B. Chiaro, A. Dunsworth, A. G. Fowler, E. Jeffrey, E. Lucero, A. Megrant, J. Y. Mutus, M. Neeley, C. Neill, C. Quintana, D. Sank, A. Vainsencher, J. Wenner, T. C. White, P. V. Coveney, P. J. Love, H. Neven, A. Aspuru-Guzik, and J. M. Martinis, *Phys. Rev. X*, **6**, 031007 (2016).
doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.6.031007>
- [28] I. Cong, S. Choi, and M. D. Lukin, *Nat. Phys.*, **15**, 1273 (2019).
doi: <https://doi.org/10.1038/s41567-019-0648-8>
- [29] K. T. Schütt, F. Arbabzadah, S. Chmiela, K. R. Müller, and A. Tkatchenko, *Nat. Commun.*, **8**, 13890 (2017).
doi: <https://doi.org/10.1038/ncomms13890>
- [30] G. H. Booth, A.J.W. Thom, and A. Alavi, *J. Chem. Phys.*, **131**, 054106 (2009).
doi: <https://doi.org/10.1063/1.3193710>
- [31] W.M.C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs, and G. Rajagopal, *Rev.*

- Mod. Phys.*, **73**, 33 (2001).
doi: <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.73.33>
- [32] A. Zen, J. G. Brandenburg, J. Klimeš, A. Tkatchenko, D. Alfè, and A. Michaelides, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **115**, 1724 (2018).
doi: <https://doi.org/10.1073/pnas.1715434115>
- [33] M. Reiher, N. Wiebe, K. M. Svore, D. Wecker, and M. Troyer, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **114**, 7555 (2017).
doi: <https://doi.org/10.1073/pnas.1619152114>
- [34] G. Y. Wu, N. Y. Lue, and L. Chang, *Phys. Rev. B*, **84**, 195463 (2011).
doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.195463>
- [35] V. Cerletti, W. A. Coish, O. Gywat, and D. Loss, *Nanotechnology*, **16**, R27 (2005).
doi: <https://doi.org/10.1088/0957-4484/16/4/R01>
- [36] J. Preskill, *Quantum*, **2**, 79 (2018).
doi: <https://doi.org/10.22331/q-2018-08-06-79>
- [37] F. Arute, K. Arya, R. Babbush, D. Bacon, J. C. Bardin, R. Barends, R. Biswas, S. Boixo, F.G.S.L. Brandao, D. A. Buell, B. Burkett, Y. Chen, Z. Chen, B. Chiaro, R. Collins, W. Courtney, A. Dunsworth, E. Farhi, B. Foxen, A. Fowler, C. Gidney, M. Giustina, R. Graff, K. Guerin, S. Habegger, M. P. Harrigan, M. J. Hartmann, A. Ho, M. Hoffmann, T. Huang, T. S. Humble, S. V. Isakov, E. Jeffrey, Z. Jiang, D. Kafri, K. Kechedzhi, J. Kelly, P. V. Klimov, S. Knysh, A. Korotkov, F. Kostritsa, D. Landhuis, M. Lindmark, E. Lucero, D. Lyakh, S. Mandrà, J. R. McClean, M. McEwen, A. Megrant, X. Mi, K. Michielsen, M. Mohseni, J. Mutus, O. Naaman, M. Neeley, C. Neill, M. Y. Niu, E. Ostby, A. Petukhov, J. C. Platt, C. Quintana, E. G. Rieffel, P. Roushan, N. C. Rubin, D. Sank, K. J. Satzinger, V. Smelyanskiy, K. J. Sung, M. D. Trevithick, A. Vainsencher, B. Villalonga, T. White, Z. Jamie Yao, P. Yeh, A. Zalcman, H. Neven, and J. M. Martinis, *Nature*, **574**, 505 (2019).
doi: <https://doi.org/10.1038/s41586-019-1666-5>
- [38] S. Lloyd, M. Mohseni, and P. Rebentrost, *arXiv preprint arXiv:1307.0411* (2013).
doi: <https://doi.org/10.48550/arXiv.1307.0411>
- [39] L. DiCarlo, J. M. Chow, J. M. Gambetta, L. S. Bishop, B. R. Johnson, D. I. Schuster, J. Majer, A. Blais, L. Frunzio, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, *Nature*, **460**, 240 (2009).
doi: <https://doi.org/10.1038/nature08121>
- [40] K. A. Brickman, P. C. Haljan, P. J. Lee, M. Acton, L. Deslauriers, and C. Monroe, *Phys. Rev. A*, **72**, 050306 (2005).
doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.72.050306>
- [41] M. Feng, *Phys. Rev. A*, **63**, 052308 (2001).
doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.63.052308>
- [42] S. S. Ivanov, P. A. Ivanov, I. E. Linington, and N. V. Vitanov, *Phys. Rev. A*, **81**, 042328 (2010).
doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.81.042328>
- [43] S. S. Ivanov, P. A. Ivanov, and N. V. Vitanov, *Phys. Rev. A*, **78**, 030301 (2008).
doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.78.030301>
- [44] H. L. Shi, S. Y. Liu, X. H. Wang, W. L. Yang, Z. Y. Yang, and H. Fan, *Phys. Rev. A*, **95**, 032307 (2017).
doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.95.032307>
- [45] P. J. Salas, *Eur. Phys. J. D*, **46**, 365 (2008).
doi: <https://doi.org/10.1140/epjd/e2007-00295-1>