

시드니대학 연구진, 화학 반응 양자 시뮬레이션 최초 성공

(2025.05.21., 양자정보연구지원센터)

□ 시드니 대학교, 세계 최초로 실제 분자 기반 화학 동역학 양자 시뮬레이션 성공

○ 연구 개요

- 시드니 대학교 연구진이 세계 최초로 실제 분자(real molecules)의 화학 동역학(chemical dynamics)을 양자 시뮬레이션으로 구현함
- 해당 연구는 양자 기술을 화학 및 의학 분야에 적용하는 데 있어 중요한 이정표로 평가됨
- 연구 결과는 *Journal of the American Chemical Society*에 발표됨

○ 주요 성과

- 이전까지는 분자의 정적인 특성(예: 에너지 수준)만 양자컴퓨터로 계산 가능했음
- 이번 연구는 분자가 빛을 흡수하고 반응하는 동적인 과정(전자 및 진동 변화 포함)을 시뮬레이션함
- 시뮬레이션 대상: Allene(C_3H_4), Butatriene(C_4H_4), Pyrazine($C_4H_2N_2$)
- 이는 실제 화학 반응의 시뮬레이션이 가능해졌음을 의미함

○ 시뮬레이션 방식의 혁신성

- 기존 디지털 방식이 아닌 아날로그 양자 시뮬레이션 방식 사용
- 단 1개의 트랩 이온만으로 구현, 고전적인 디지털 방식 대비 약 100만 배 효율적
- 기존 방식은 11개의 완벽한 큐비트와 30만 개의 얽힘 게이트가 필요했음
- 시간 확장 기술(time dilation)을 활용해 펨토초(10^{-15} 초) 수준의 반응을 밀리초 단위로 시뮬레이션함(약 1000억 배 속도 저하)

○ 비유적 설명

- Kassal 교수는 이 과정을 “산악 등반”에 비유함
- 기존 계산은 출발점과 도착점만 알 수 있음
- 이 연구는 여정 중의 모든 경로(위치, 에너지 등)를 추적 가능함
- 응용 가능 분야
 - 광(light)이 개입된 화학 반응 전반을 시뮬레이션 가능
 - 광합성
 - 자외선(UV)에 의한 DNA 손상
 - 광역학 치료법(Photodynamic Therapy)
 - 피부암 연구 및 선크림 설계
 - 차세대 태양전지 및 에너지 시스템 개발
- 학문적 산업적 의의
 - 복잡한 화학 반응을 저자원으로 시뮬레이션한 것은 하계와 산업계에 큰 의미를 지님
 - 양자 기술이 기존 슈퍼컴퓨터로 처리 불가능한 분자 수준 반응까지 모사 가능함을 입증
 - 향후 의학, 에너지, 소재 과학 등 다양한 분야에서 실질적인 연구 도구로 활용 가능성 제시
- 향후 전망
 - 복잡한 분자의 반응 과정을 양자적으로 분석하는 새로운 접근의 출발점이 됨
 - 실제 분자 기반의 실험적 양자 시뮬레이션이 현실화되면서 과학적 발견의 속도 가속화 예상
 - 양자역학의 정밀성과 자원 효율성을 결합한 획기적 사례로 평가됨

(원문)

1. <https://thequantuminsider.com/2025/05/15/university-of-sydney-researchers-report-first-ever-quantum-simulation-of-chemical-dynamics/>