

메틸렌 분자 모델링에서 양자 시뮬레이션 성과 보고

(2025.06.05. 양자정보연구지원센터)

□ IBM-룩히드마틴 공동연구팀, 메틸렌 분자 모델링에서 이론과 실험 간 격차 좁히는 양자 시뮬레이션 성과 보고

○ 연구 개요

- IBM과 룩히드마틴 공동 연구팀은 같은 오픈셸(open-shell)분자의 전자 구조 계산에 있어 양자 컴퓨팅 기반 시뮬레이션이 고전적 방법보다 정확하게 실험 결과에 근접함을 입증
- 샘플 기반 양자 대각화(SQD, Sample-based Quantum Diagonalization) 기법을 통해 최초로 오픈셸 분자에 적용(*Journal of Chemical Theory and Computation* 게재)

○ 기술 및 방법

- 52큐비트 양자 프로세서(ibm_nazca)을 이용해 CH_2 분자의 전자 상태를 시뮬레이션
- 6개의 전자와 23개의 오비탈로 구성된 분자를 LUCJ(Local Unitary cluster Jastrow) ansatz 기반으로 초기 파동함수를 설정
- 양자 노이즈를 줄이기 위해 자기 일관성 에러 복구 기법을 적용하고, 전자 수 보존 조건을 만족시키는 방식으로 후처리 수행

○ 주요 성과

- 싱글렛(singlet)과 트리플렛(triplet) 상태의 포텐셜 에너지 곡선을 계산, 고전 계산 결과 및 실험치와 높은 정확도로 일치
- 특히, 싱글렛-트리플렛 에너지 차이(gap)는 실험 결과(14 mHa)에 비해 19 mHa로 매우 근접했으며, 고전적 방법의 24 mHa보다 정확도가 우수함을 입증
- 이는 양자 컴퓨터가 복잡한 전자 상호작용과 정전기적 효과를 더 잘 반영할 수 있다는 가능성을 시사

○ 산업적 시사점

- 메틸렌은 연소, 대기 화학, 우주 화학 등 다양한 분야에서 중요한 라디칼 분자로, 정확한 모델링은 항공우주 및 방위 산업에서 매우 유용
- 향후 더 복잡한 라디칼, 전이 금속 화합물 등에 유사한 양자 기반 접근이 가능할 것으로 기대
- 록히드마틴 등 방위 산업체 입장에서는 고위험 화합물의 예측적 설계 가능성을 열어주는 기술로 평가됨

○ 한계 및 향후 과제

- 트리플렛 상태에서 결합 거리 증가에 따라 정확도가 떨어지는 문제 확인 → 이는 전자 파동함수가 퍼지고 다중 참조(multi-reference) 특성이 강해질수록 SQD 기법의 표현력이 제한되기 때문
- 향후, 다양한 스핀 구성 샘플 확보 및 에러 복구 알고리즘 개선, 다중 구성 파동함수 표현 역량 강화가 필요
- 양자 하드웨어의 에러율 개선, 양자 앤사츠(Ansatz)의 표현력 향상 등을 통해 대규모 분자 시스템까지 확장 가능

○ 결론

- 이번 연구는 NISQ(Noise Intermediate-Scale Quantum) 하드웨어 상에서 오픈셀 분자에 대해 고화질 양자 시뮬레이션이 가능함을 입증하며, 양자 컴퓨터가 실제 화학 계산 문제에 유용한 도구로 진입하고 있음을 시사
- 고전 계산의 한계를 넘고자 하는 화학, 소재, 에너지 분야에서 양자 중심 접근의 실용 가능성을 확인하는 중요한 이정표로 평가됨
- IBM 연구진은 “장난감 문제 수준을 넘어서 실질적인 화학 시뮬레이션에서도 양자 컴퓨터가 가치를 발휘하기 시작함” 밝힘

(원문)

1. <https://thequantuminsider.com/2025/05/25/ibm-lockheed-martin-team-reports-quantum-simulation-is-closing-gap-between-theory-and-experiment-in-modeling-methylene/>