

단일 광자 고차원 양자 시스템을 이용한 양자컴퓨팅

한국과학기술연구원 임향택 박사

E hyangtag.lim@kist.re.kr

양자 화학 계산을 위해 활용될 수 있는 VQE(variational quantum eigensolver)를 단일 광자 큐비트 시스템(고차원 양자 시스템)에서 구현하여 기존 연구보다 적은 자원을 활용하여 더 정확한 계산을 수행할 수 있음을 보였다.

연구 배경

양자적 특성을 이용하여 복잡한 계산을 병렬적으로 수행할 수 있는 양자컴퓨팅 기술이 미래를 선도할 기술로 주목받고 있다. 하지만 현재 기술 수준으로는 양자 자원이 늘어남에 따라, 잡음의 영향으로 인한 오류가 급격히 증가한다. 따라서 가까운 미래에 양자 컴퓨터 기술을 구현하기 위해 디지털 컴퓨터(양자 컴퓨터와 대비하기 위해 고전 컴퓨터라고도 부름)를 같이 활용하는 양자-고전 하이브리드 알고리즘이 제안되었다.

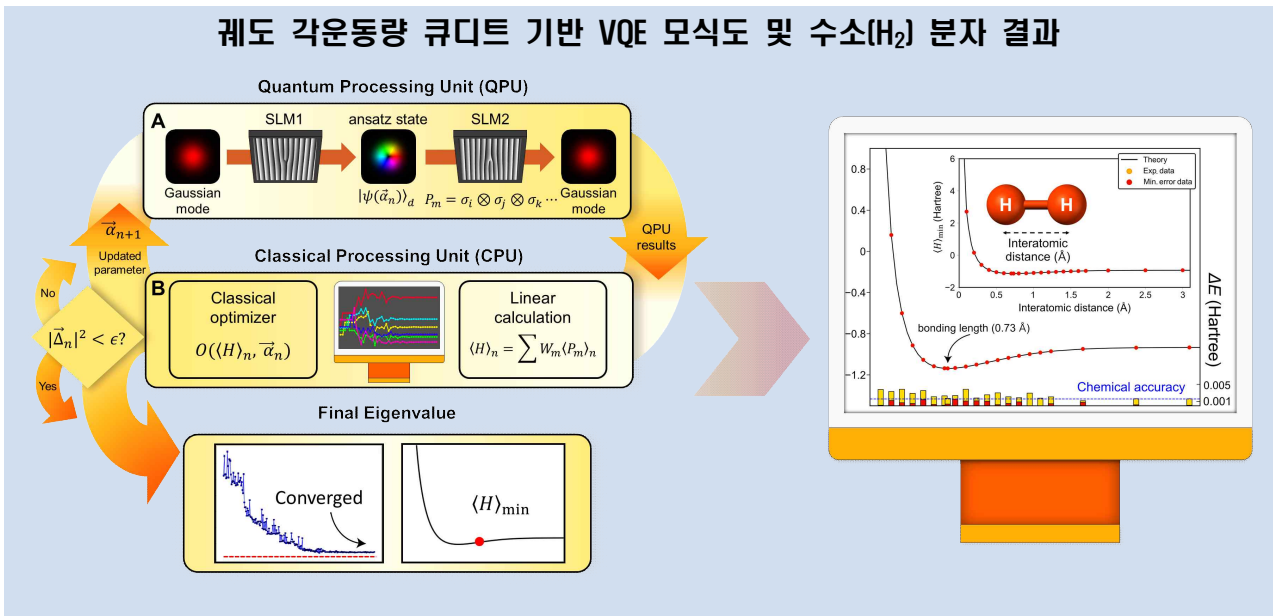
그중 VQE(variational quantum eigensolver)는 바닥 상태를 구하는 알고리즘으로, 큐비트(qubit)를 기반으로 하여 구글, IBM 등 세계 유수의 기관에서 활발히 연구되고 있다. 기존 큐비트 기반의 VQE는 차원이 확장됨에 따라 높은 충실도의 복잡한 양자 게이트¹⁾와 많은 수의 큐비트가 요구되는 어려움이 있다. 신약 개발을 위한 물질의 특성 탐구, 배터리 성능 개선 등 실용적인 문제에 기술을 활용하기 위해서는 고차원 확장이 필수적이므로 이를 위한 연구가 필요하다.

1) 양자 게이트 : 큐비트의 상태를 변환하여 양자 정보를 처리하는 수학적 연산. 고전 논리 게이트와 유사하나, 중첩과 얽힘 같은 양자 특성을 활용함

연구 내용

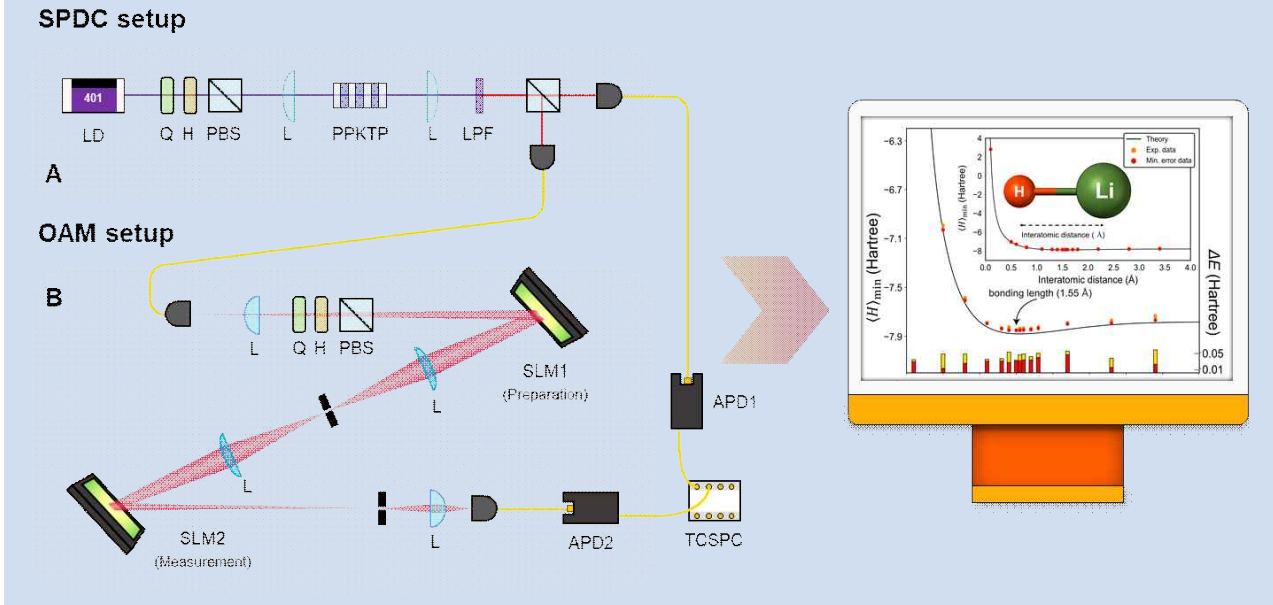
측정 수행 후 나오는 결과가 0 또는 1로 2개 사건(2차원 양자 공간)이 가능한 큐비트와 달리 d가지 사건(d차원 양자 공간)이 가능한 양자 시스템을 큐디트(qudit)라고 한다. 양자 공간의 차원이 커지면 한 번에 계산할 수 있는 경우의 수도 함께 커진다. 특히 우리가 사용한 궤도 각운동량²⁾ 큐디트가 가지는 공간은 원리적으로 무한하여, 양자컴퓨팅을 위해 차원을 확장하기 용이하다. 또한, 기존 큐비트 기반의 VQE에서 필요한 상태를 구현하기 위해 복잡한 양자 게이트가 요구되었으나, 궤도 각운동량 큐디트 기반에서는 홀로그램 이미지를 통해 광자의 위상을 제어하는 것만으로 쉽게 상태를 구현할 수 있다.

본 연구에서는 이러한 기술을 바탕으로 광학 기반 VQE에서 최초로 최대 16차원에 해당하는 분자의 양자 화학 계산을 수행할 수 있었다. 결과적으로 기존 VQE에서 정확한 계산을 위해 반드시 요구되던 양자 오류 완화 기술³⁾ 없이도 높은 화학적 정확도⁴⁾로 분자의 바닥 상태 에너지를 계산할 수 있음을 실험적으로 증명하였다.



- 2) **빛의 궤도 각운동량** : 빛이 축을 중심으로 주기적으로 회전하는 궤도 운동을 할 때 가지는 운동량
- 3) **양자 오류 완화 기술** : 양자 컴퓨터에서 발생하는 오류의 영향을 최소화하기 위해 적용되는 일련의 기술
- 4) **화학적 정확도** : 양자 화학에서 분자 특성이나 반응에 대한 이론적 계산의 정확성을 설명하는 지표. 계산 화학에서는 계산 결과가 화학적 정확도에 도달해야 의미 있는 결과에 해당함. 1Kcal/mol(0.0016 Hartree)에 해당

실험 셋업 모식도 및 리튬화수소 (LiH) 분자 결과



논문 Qudit-based variational quantum eigensolver using photonic orbital angular momentum states (Science Advances, 2024)

[논문 보기](#)

차별성 및 우수성

기존 큐비트 시스템과 달리 궤도 각운동량 큐디트를 기반으로 VQE를 구현하였다. 그 결과, 복잡한 양자 게이트와 많은 큐비트 없이 적은 자원으로도 분자의 결합거리를 계산할 수 있음을 보였다. 특히 광자 시스템으로 16차원의 계산을 수행한 것은 최초이며, 최초로 별도의 양자 오류 완화 기술을 사용하지 않고도 화학적 정확도에 도달한 결과를 보였다.

파급효과 및 활용계획

기존 슈퍼컴퓨터로도 계산하기 어려운 복잡한 분자구조 계산, 다체문제 등의 해결에 적용할 수 있는 기술로, 새로운 소재의 특성 파악, 신약을 위한 물질 개발, 안정적이고 효율적인 배터리 물질 개발 등에 활용될 수 있다.

궤도 각운동량 큐디트 시스템은 다양한 고차원 양자 연구에 활용될 수 있는 플랫폼으로 추후 이를 활용하여 VQE 외에도 다양한 양자 알고리즘 구현을 위한 연구를 수행할 계획이다.