

양자컴퓨터를 이용한 LiCoO₂ 화합물의 Ground-State Energy 계산

Yoonho Choi, Doha Kim, Doyeon Kim, Younghun kwon[†]

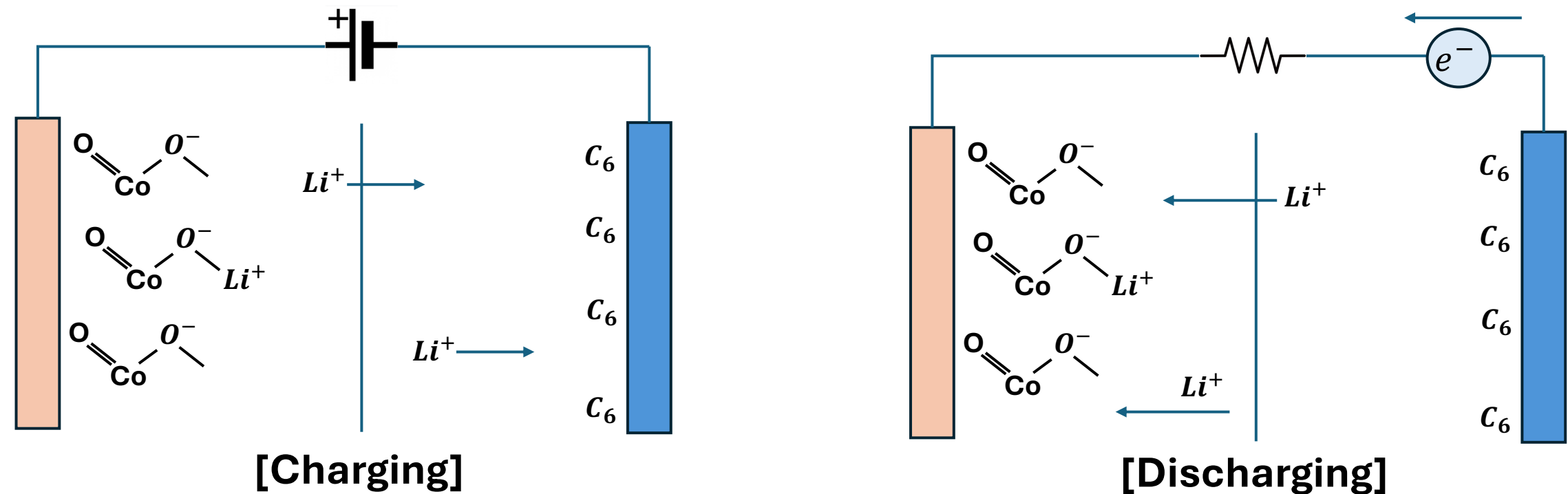
Department of Applied Physics, Hanyang University, Ansan, 15588, Republic of Korea



Abstract

VQE(Variational Quantum Eigensolver)는 분자의 바닥 상태의 에너지를 계산하는 양자 컴퓨터 알고리즘으로 신약/배터리 개발 분야 등 신소재 개발분야에 효과적일 것이라 많은 기대를 받는 알고리즘이다. 하지만 현재의 양자 컴퓨터는 사용할 수 있는 큐비트의 수가 제한적 이어서, 산업에 사용되는 분자에 VQE를 적용하는 것은 한계가 있다. 본 연구에서는 이를 해결하기 위한 방안으로 FMO/VQE를 사용하였다.FMO(Fragment Molecular Orbital) 방식은 전체 시스템을 작은 조각으로 나누어 처리하는 방식이며, FMO/VQE는 VQE에 양자 화학의 방법중 하나인 FMO방식을 VQE에 적용한 방법이다[1](Hochel Lim et al.) 본 실험에서는 이차 전지의 양극재로 사용되는 LiCoO₂ 분자의 바닥 상태 에너지를 FMO/VQE를 사용하여 계산하였다. 이를 통해 기존의 VQE알고리즘에서 필요했던 큐비트의 개수를 24개에서 최대 14개로 줄일 수 있었다. 또한 그림에도 불구하고 기존의 결과와 비슷한 정확도를 얻을 수 있었다. 본 연구결과는 개선된 VQE 알고리즘을 이용한다면, 배터리/신약개발분야에서 VQE 알고리즘을 적용할 수 있음을 보여준다.

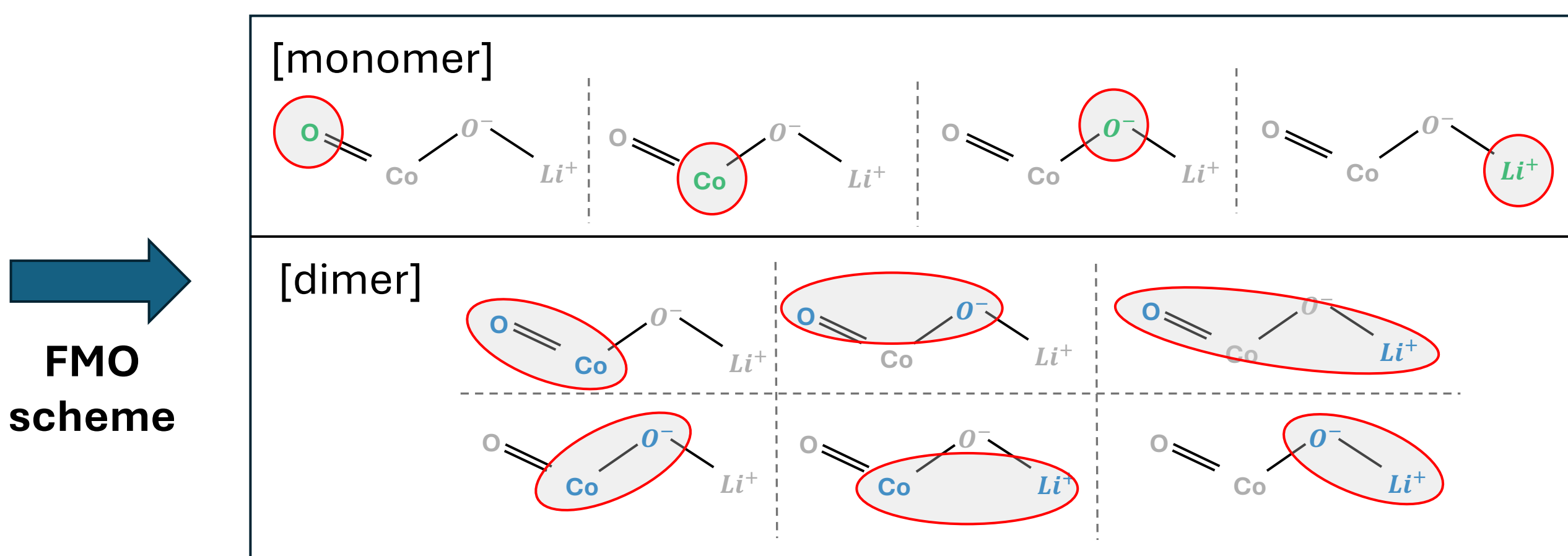
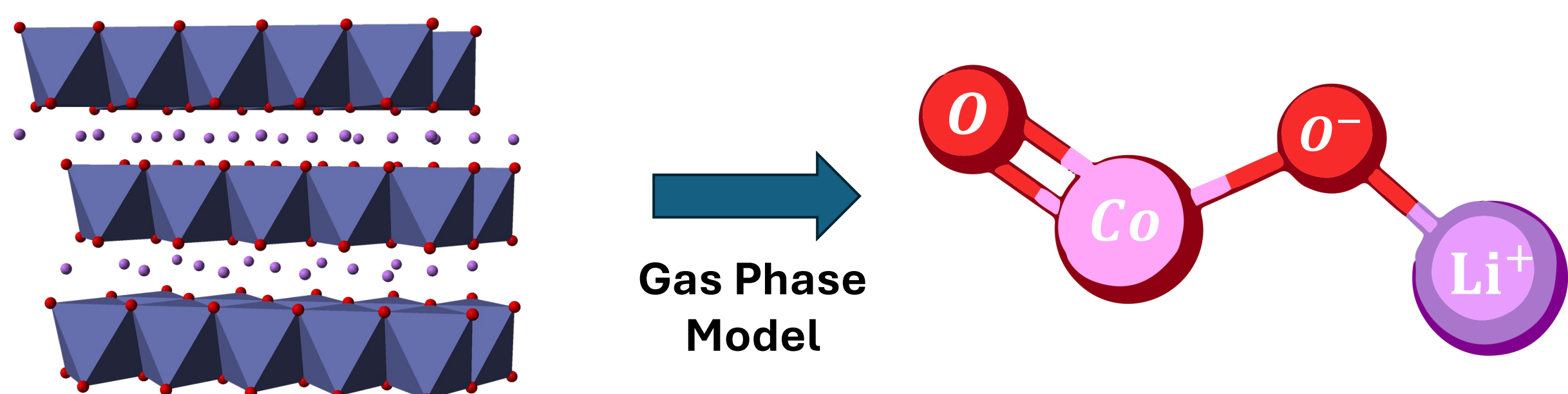
Introduction



최근 배터리개발, 신약개발 등의 신소재 개발분야는 매우 빠르게 발전해 나가고있다. 이러한 산업의 주된 목표는 새로운 분자를 찾아 그 분자의 특성을 파악하는 것이다. 그 중 분자의 바닥상태 에너지는 많은 현상들과 연관 있는 중요한 물리량이고, 이는 시스템에 관한 슈뢰딩거 방정식을 풀어서 구할 수 있다. 현재 이러한 계산은 고전컴퓨터에 의존하고있다. 하지만, 고전컴퓨터는 분명 그 한계가 있다. 분자에 대한 문제를 해결하는 것은 그 계산복잡도가 지수적으로 증가하며, 따라서 분자가 더욱 복잡해지면, 고전컴퓨터만으로는 문제를 유의미한 시간내에 해결하는 것이 불가능하다. 하지만 슈뢰딩거 방정식은 헤밀토니안(\hat{H})에 대응되는 행렬의 고유치문제 이고, 이러한 문제는 양자컴퓨터를 이용하면 잘 해결할 수 있다고 알려져 있다. 신소재 개발분야의 새로운 지평을 열기위해서는, 다양한 분자의 더 빠른 시뮬레이션이 필요하고, 이를 위해서는 새로운 패러다임이 필요하다. 이번 연구에서는 배터리 분야에 사용되는 리튬코발트산화물(LiCoO₂)에 FMOVQE 알고리즘을 적용해 바닥상태 에너지를 계산하여, 신소재 개발분야에서의 양자컴퓨터 적용가능성을 보일 것 이다.

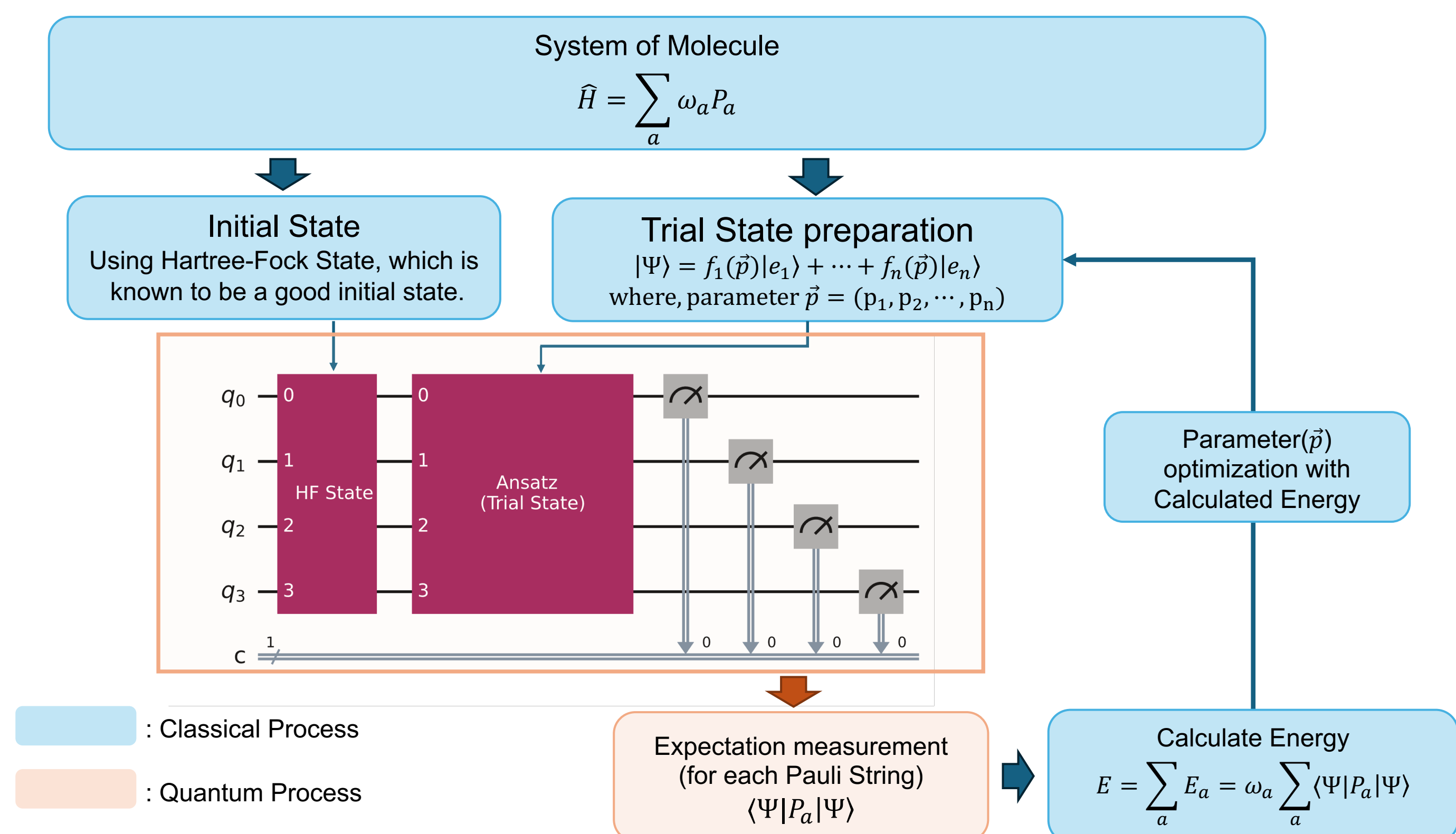
Method

■ Calculation Pipeline



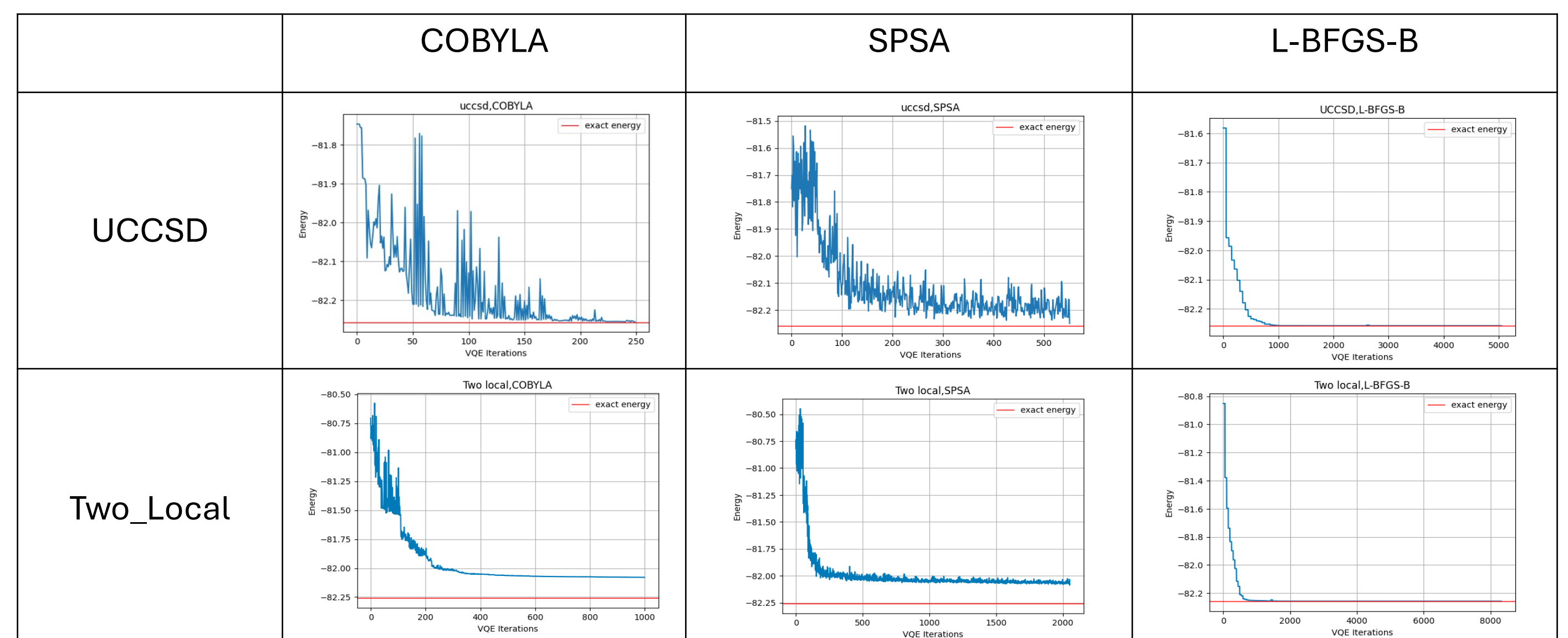
Each monomer/dimer calculate with **VQE**

■ VQE(Variational Quantum Eigensolver)



Result

1. Dimer(Monomer) Calculation with VQE

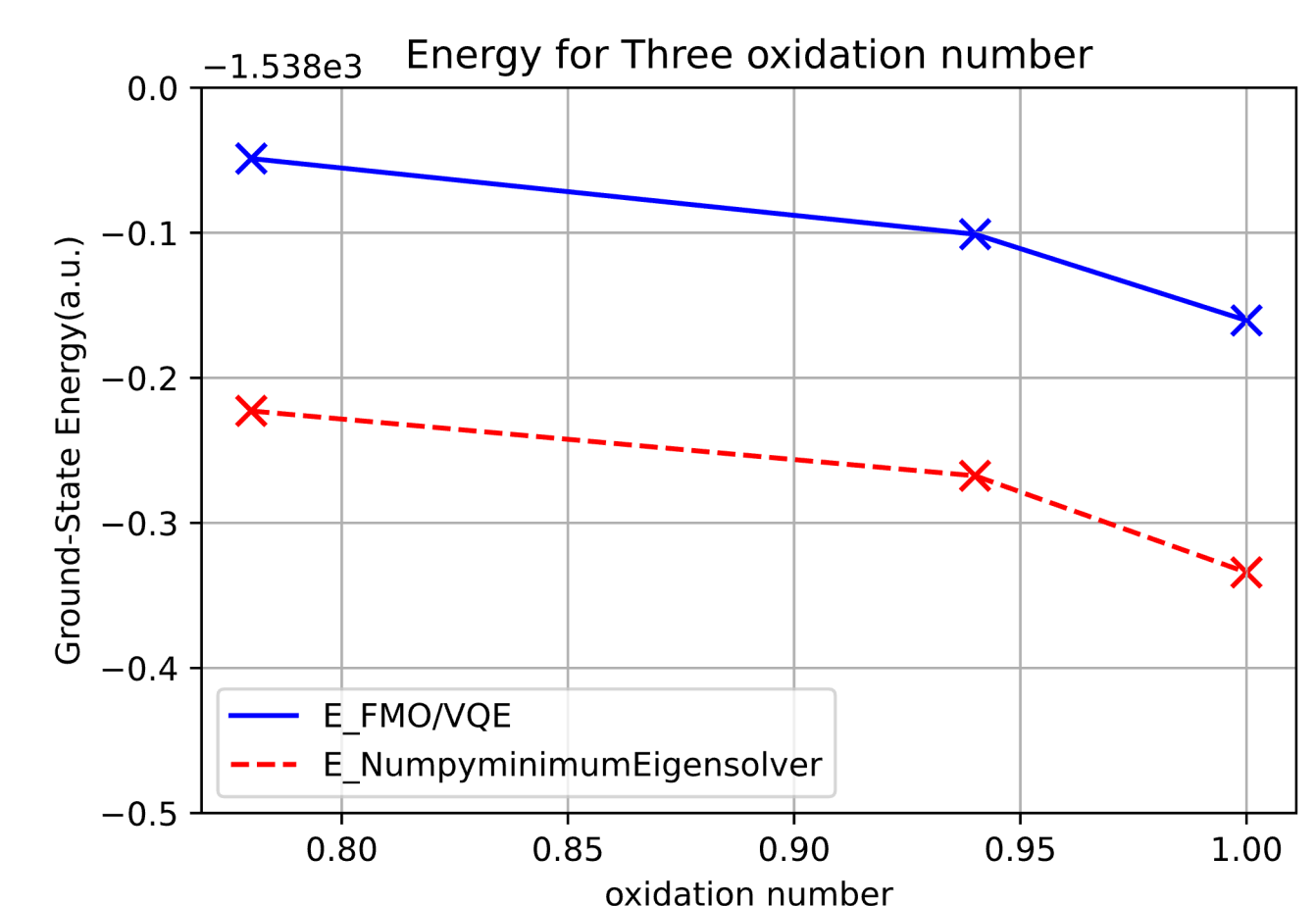


[x = 1]	configuration	계산값(a. u.)	오차(a. u.)	오차(%)
monomer	O	-74.78751	0	0
	Li	-7.43241	0	0
	Co	-1381.35417	0.00455	0.0003
dimer	O - Li (close)	-82.25731	0	0
	O - Li (far)	-82.22028	0	0
	Co - Li	-1388.72975	0.05198	0.00374
	O - O	-149.550971	0.00213	0.00142
	Co = O	-1456.05019	0.03758	0.00258
	Co - O	-1456.14717	0.01968	0.00135

2. Calculation Molecular Energy with FMO

$$E_{molecular} = \sum_{IJ} E_{dimer,IJ} - (n - 2) \sum_I E_{monomer,I}$$

Oxidation number	FMO/VQE (a. u.)	Numpy Minimum Eigensolver (a. u.)	Accuracy (%)
1	-1538.16043	-1538.33411	99.989
0.94	-1538.10099	-1538.26750	99.989
0.78	-1538.04882	-1538.22281	99.989



Conclusions

본 연구에서 제안하는 양자알고리즘 FMO/VQE는 LiCoO₂분자에서 고전적인 시뮬레이터와 비교하여 99.989%의 정확도로 분자의 바닥상태 에너지 계산할 수 있음을 확인하였다. 이 결과는 앞으로의 신약 합성과 신소재 개발에 FMO/VQE 방식의 적용 가능성을 말해준다. 고전적인 컴퓨팅 방식으로는 신약 합성과 신소재 개발에 필요한 복잡한 분자의 경우 계산이 불가능하지만 VQE알고리즘의 경우 개발에 필요한 분자를 계산할 수 있다. 그러나 VQE알고리즘은 현재 양자 하드웨어가 큐비트 수의 제한으로 적용할 수 있는 분자에 한계가 있다.

본 연구에서 제안하는 FMO/VQE알고리즘은 FMO 방식을 통해 계산에 필요로 하는 큐비트 수를 줄여 VQE로도 계산하기 힘든 분자를 양자컴퓨터로 해결할 수 있도록 한다. 이러한 결과는 복잡한 분자의 계산이 필요한 신약 합성과 신소재 개발에 FMO/VQE알고리즘이 새로운 패러다임이 될 수 있음을 보여준다.

Reference

- [1] Hocheol Lim, et al., Fragment molecular orbital-based variational quantum eigensolver for quantum chemistry in the age of quantum computing, Scientific Reports 14, 2422 (2024)
- [2] Peruzzo A., et al., A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor, Nature Communications 5, 4213 (2014).
- [3] Jules Tilly, et al. The Variational Quantum Eigensolver: A review of methods and best practices, Physic Reports 986, 1-128 (2022)
- [4] Magnetism and structure of Li_xCoO_2 and comparison to Na_xCoO_2 , J.T.Hertz et al., Department of Chemistry, Princeton University, DOI: 10.1103/PhysRevB.77.075119
- [5] Kazuo Kitaura, et al., Fragment molecular orbital method: an approximate computational method for large molecules, Chemical Physics Letters 313, 701-706 (1999)
- [6] Dmitri G. Fedorov, Kazuo Kitaura, Coupled-cluster theory based upon the fragment molecular-orbital method, The Journal of Chemical Physics 123, 134103 (2005)
- [7] Stewart, Robert F. (1 January 1970). "Small Gaussian Expansions of Slater-Type Orbitals". *The Journal of Chemical Physics*. **52** (1): 431-438. doi:10.1063/1.1672702.