



최윤호 | 응용물리학과 | 한양대(ERICA) <cyh195535@hanyang.ac.kr>

Fwd: [392] Your abstract has been submitted to the 2024 KPS Fall Meeting.

1 개의 메일

권영현 <yyhkwon@hanyang.ac.kr>

2024년 8월 23일 오전 11:29

받는사람: "김도하 | 과학기술융합대학 응용물리학과 | 장학조교 | 한양대(ERICA) " <lichkim01@hanyang.ac.kr>, "최윤호 | 응용물리학과 | 한양대(ERICA) " <cyh195535@hanyang.ac.kr>, "김도연 | 응용물리학과 | 한양대(ERICA) " <rlaehdus3333@hanyang.ac.kr>

----- Forwarded message -----

보낸사람: <noreply@kps.or.kr>

Date: 2024년 8월 22일 (목) 오후 11:25

Subject: [392] Your abstract has been submitted to the 2024 KPS Fall Meeting.

To: <yyhkwon@hanyang.ac.kr>

KPS 한국물리학회
The Korean Physical Society

Abstract No	392
Corresponding Author	KWON Younghun / yyhkwon@hanyang.ac.kr
Submitter	권영현
Presentation Type	Poster
Division/Field/Session	Atomic & Molecular Physics / Atomic & Molecular Physics / Quantum Information - Simulations and Computings
Title	FMO/VQE를 활용한 LiCoO2의 바닥 상태 에너지
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 제한이어서, 산업에 사용되는 분자에 VQE를 적용하는 것은

본 메일은 E-mail 수신동의 여부에 관계없이, 한국물리학회 공지 목적으로 발송되는 메일입니다.

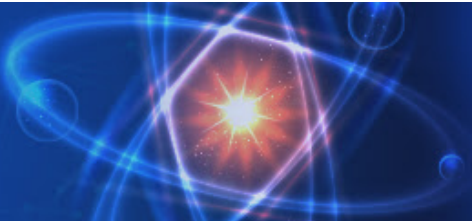
(본 메일은 발신 전용으로 회신하실 수 없습니다.)

(사)한국물리학회 사업자등록번호: 220-82-01588 | 대표: 홍석륜

06130 서울시 강남구 테헤란로 7길 22 한국과학기술회관 1관 601호

TEL: 02-556-4737, FAX: 02-554-1643

Copyright(C) KPS, All rights reserved.



	<p>한계가 있다.</p> <p>본 연구에서는 이를 해결하기 위한 방안으로 FMO/VQE를 사용하였다. Fragment Molecular Orbital (FMO) 방식은 전체 시스템을 작은 조각으로 나누어 처리하는 방식이며, FMO/VQE는 VQE에 양자 화학의 방법중 하나인 FMO방식을 VQE에 적용한 방법이다[1](Hochel Lim et al.)</p> <p>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 그럼에도 불구하고 기존의 결과와 비슷한 정확도를 얻을 수 있었다. 본 연구결과는 개선된 VQE 알고리즘을 이용한다면, 배터리/신약개발분야에서 VQE 알고리즘을 적용할 수 있음을 보여준다.</p>
Presenting Author	CHOI Yoonho
Keywords	VQE, 양자 컴퓨터, 알고리즘, FMO, 이차 전지

본 메일은 E-mail 수신동의 여부에 관계없이, 한국물리학회 공지 목적으로 발송되는 메일입니다.
(본 메일은 발신 전용으로 회신하실 수 없습니다.)
(사)한국물리학회 사업자등록번호: 220-82-01588 | 대표: 홍석륜
06130 서울시 강남구 테헤란로 7길 22 한국과학기술회관 1관 601호
TEL: 02-556-4737, FAX: 02-554-1643

Copyright(C) KPS, All rights reserved.