

# Calculating Ground-State-Energy of $\text{LiCoO}_2$ by using Fragment molecular orbital-based Variational Quantum Eigensolver

## Abstract

VQE(Variational Quantum Eigensolver)는 바닥 상태 에너지를 계산하는 양자 컴퓨터 알고리즘으로 신약/배터리 개발 분야 등 신소재 개발분야에 효과적일 것으로 많은 기대를 받고 있다. 그러나 현재의 양자 컴퓨터는 사용할 수 있는 큐비트의 수가 제한적이어서, 산업에 사용되는 분자에 대한 VQE의 적용은 한계를 지닌다. 이를 해결하기 위해 본 연구에서는 FMO/VQE를 사용하는 방안을 제시한다. FMO(Fragment Molecular Orbital) 방식은 전체 시스템을 작은 조각으로 나누어 처리하는 방식이다. 그리고 FMO/VQE는 FMO방식을 VQE에 적용한 방법이다[1] 본 연구에서는 FMO/VQE 의 효용성을 보이기 위해 이차 전지의 양극재로 사용되는  $\text{LiCoO}_2$ 의 바닥 상태 에너지를 FMO/VQE를 사용하여 계산하였다. 이를 통해 기존의 VQE알고리즘에서 필요했던 큐비트의 개수를 24개에서 최대 14개로 줄일 수 있었다. 그럼에도 불구하고 고전적 방식에 의한 결과와 거의 동일한(99.989%의) 정확도를 얻을 수 있었다. 본 연구는, 제안되어진 VQE 알고리즘을 통해, 배터리/신약개발분야에서도 VQE 알고리즘을 성공적으로 적용할 수 있음을 보여준다.

## 1.Introduction.

분자의 바닥 상태와 그때의 에너지는 분자가 가질 수 있는 가장 안정적인 상태와 가장 낮은 에너지이다. 이를 알고 있으면 분자 사이의 결합이나 분자의 구조를 알 수 있어 신약 개발이나 새로운 이차전지 양극재 개발등 각종 화학 연구 분야에 활용할 수 있다. 현재의 분자의 바닥 상태 에너지는 대부분 고전적인 컴퓨터에서 계산되고 있다. 하지만 분자를 구성하는 원자의 수가 증가하거나 분자를 구성하는 원자의 원자 번호가 크면 고려해야 할 입자의 수가 많아지고 고려해야 할 각 입자의 상호작용이 기하급수적으로 많아진다. 각 입자의 상호작용은 분자에 해밀토니안에서 고려되고 이 분자 해밀토니안을 컴퓨터에서 표현할 때 많은 메모리와 계산량을 필요 하게 된다. 그래서 현재의 고전적인 컴퓨터를 활용한 분자의 바닥상태 에너지 계산은 큰 분자에는 적용하기 어려웠다.

양자 컴퓨터는 최근에 떠오르고 있는 분야로 현재 많은 연구가 진행되고 있다. 양자 컴퓨터는 고전 컴퓨터와 다른 큐비트 즉, 양자 비트를 사용하여 고전 컴퓨터의 0과 1만을 나타내는 비트와 다르게 0상태와 1상태가 중첩되는 큐비트를 사용한다. 이 때문에 분자의 바닥 상태 에너지 계산에서 입자의 수가 증가하여 필요한 메모리가 2배로 증가할 때 양자 컴퓨터에서는 큐비트를 한 개 늘리면 계산할 수 있다. 고전적인 컴퓨터가 기하급수적으로 메모리 양이 증가할 때 양자 컴퓨터는 다항적인 큐비트 증가로 해결할 수 있다. 따라서 현재로 계산 불가능한 큰 분자도 양자 컴퓨터로는 계산이 가능하다. 양자 컴퓨터 알고리즘 Quantum Phase Estimation (QPE)는 양자 컴퓨터에서 유니타리 행렬의 고유값과 고유 상태를 계산하는 알고리즘으로 이를 이용하면 분자의 바닥 상태 에너지를 구할 수 있다. 하지만 QPE를 구현하기 위해서는 매우 정확하고 많은 수의 큐비트가 필요하다 알려져 있다. 현재의 양자 컴퓨터는 NISQ(Noisy Intermediate-Scale Quantum device) 수준에 있다고 말한다. NISQ는 양자 컴퓨터가 노이즈가 많고 중간 단계 수준의 큐비트를 가진 것을 의미한다. 현재의 양자 컴퓨터는 아직까지 노이즈가 많아 정확도가 부족하고 큐비트의 수도

수십 수백개로 아직 부족하기 때문에 QPE를 구현하기는 어렵다.

Variational Quantum Eigensolver (VQE)는 이런 NISQ 수준의 양자 컴퓨터를 사용하여 고유값 문제를 풀기 위한 알고리즘으로 양자 컴퓨터와 고전컴퓨터를 모두 사용한다. VQE는 variational 원리를 기반으로 파라미터로 조절할 수 있는 시험 파동함수를 구성하여 분자 해밀토니안의 기댓값을 얻는다. 이 기댓값이 일정한 값으로 수렴할 때까지 파라미터를 조절해 가며 이를 반복하여 분자의 바닥 상태 에너지의 상한을 얻는 알고리즘이다. 이 과정에서 분자 해밀토니안과 시험 파동함수를 양자 회로로 바꾸고 기댓값을 얻는 과정은 양자 컴퓨터로 진행하고 시험 파동함수의 파라미터를 조절하는 최적화 과정은 고전 컴퓨터로 진행한다. VQE는 QPE와 다르게 많은 수의 큐비트가 필요하지 않고 현재의 양자 컴퓨터에선 어려운 최적화를 고전적인 컴퓨터로 계산하기 때문에 NISQ 시대에서 양자 컴퓨터를 상용할 수 있을 거라 많은 기대를 받고 있다. 하지만 현재의 양자 컴퓨터는 너무 많은 오류를 가지고 있어 회로의 깊이(circuit depth)가 깊어짐에 따라 정확도가 많이 줄어들고 사용할 수 있는 큐비트의 수도 제한되어 있어 매우 큰 분자를 계산하기에는 부족하다. 따라서 이를 해결하기 위한 다양한 방법 중에 Fragment Molecular Orbital method based Variational Quantum Eigensolver (FMO/VQE) 방법이 있다. FMO/VQE는 현재의 양자 컴퓨터의 한계로 인한 VQE의 제한을 개선하기 위해서 양자 화학 방법인 FMO 방법을 VQE에 적용한 알고리즘으로써 Hocheol Lim, et al. 에서 처음 고안되었다. FMO 방법은 전체의 시스템을 작은 조각들로 나누어서 전체 분자의 바닥상태 에너지를 근사하는 방법으로 작은 조각들 (monomer)과 작은 조각들의 쌍(dimer)의 바닥 상태 에너지를 구하여 이를 이용하여 전체 분자의 바닥상태 에너지를 근사한다. 분자를 작은 조각으로 나누기 때문에 전체 계산에서 고려해야 할 시스템의 최대 크기를 줄일 수 있고 이를 VQE에 적용하면 필요한 큐비트수를 줄이고 양자 회로의 깊이를 줄일 수 있다. 따라서 FMO/VQE를 통해서 가까운 시일 내에 양자 컴퓨터를 실 활용할 수 있는 방안으로 기대된다.

본서에서는 FMO/VQE를 활용하여 이차전지의 양극재로 사용되는 대표적인 물질  $\text{LiCoO}_2$ 의 바닥 상태 에너지를 계산하였고 이를 고전적인 컴퓨터 계산과 비교하였다. 또한 일반적인 VQE와 FMO/VQE의 정확도를 비교하여 FMO/VQE의 NISQ 시대에서 사용가능성을 확인한다.

## 2.Method.

### 2.1 Lithium-ion battery

리튬이온 배터리는 다양한 산업에서 사용하고 있는 2차전지중 하나이다. 리튬이온 배터리는 크게 양극재, 음극재, 전해질로 구성되며, 여기서 양극재로 사용되는 것이 리튬 산화물이다. 이 화합물은  $\text{CoO}_2$  산화물이 층상 구조를 이루고, 각 층 사이에  $\text{Li}^+$  이온이 결합 되어있는 구조를 가진다. 산화물에서 리튬이온이 산화되는 정도에 따라 에너지가 충전되게 된다. 리튬은 전세계에 매장된 양이 제한되어 있는 것으로 알려져 있다. 이에 대한 해결책으로 많은 방법들이 제시되었고, 그중 하나의 해결책이 하나의 리튬이온당 충전되는 에너지를 최대화하고자 하는 접근이다. 이는 리튬의 매장량과 관련해서도, 또 배터리의 소형화와 관련해서도 매우 중요한 상황이다. 이 리튬 하나당 저장되는 에너지의 양을 계산해내기 위해서는, 분자의 바닥상태의 계산이 반드시 필요하다. 하지만, 이 계산은 고전적으로 이루어지고 있으며, 더 큰 분자나 혹은 더 다양한 조합들의 계산은 제한적인 상황이다. 따라서 이번 연구를 통해  $\text{LiCoO}_2$  분자에 VQE 알고리즘을 적용한 결과를 보이

고, 배터리 개발 분야에서 양자컴퓨터의 적용가능성을 제시한다.

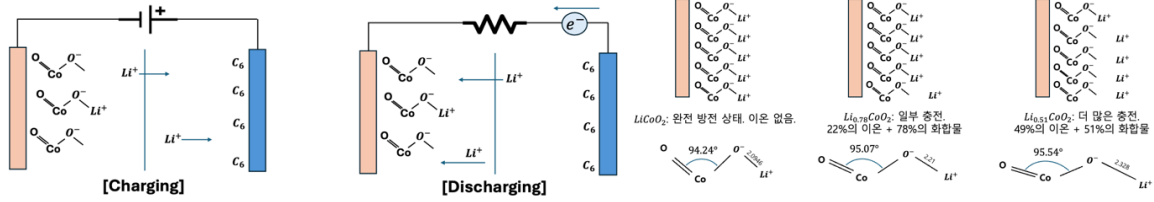


그림 1 충전과 방전의 모식도 , 그림 2 산화상태별 리튬이온의 평균적인 기하학적인 구조

양극과 음극에 전압을 걸어 전자를 공급 해주게 되면(즉, 충전),  $Li^+$ 이온이 음극재 쪽으로 이동하게 된다. 이렇게 충전이 된 상태에서 방전을 시키게 되면, 아래의 그림처럼 음극재에 있던  $Li^+$ 이온이 다시 양극재로 결합되면서, 저항에 전류가 흐르게 된다. 이때 리튬의 산화상태에 따라 분자구조의 평균적인 기하학적인 구조가 그림 () 와 같이 달라지게 되고, 따라서 그 기하학적인 구조를 이용해, Bulk에서의 에너지를 추정 할 수 있다. 그 평균적인 산화물의 구조를 하나의 분자로 생각하는 Gas-Phase model 을 가정하여 분자의 에너지를 계산한다.

## 2.2 VQE(Variational Quantum Eigensolver)

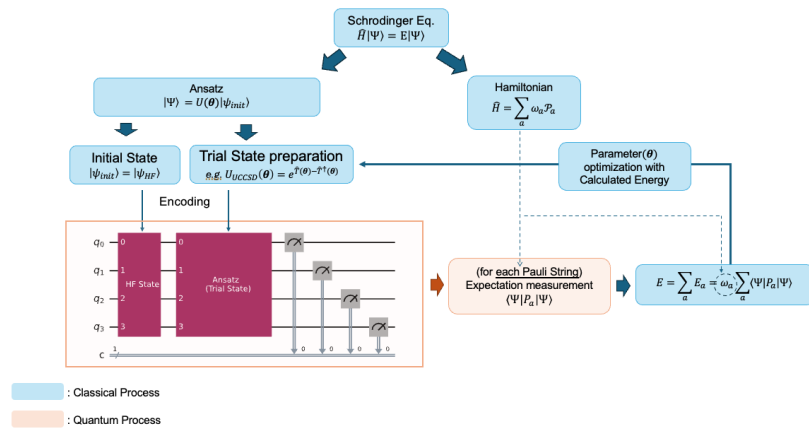


그림 2 VQE Pipeline

VQE 알고리즘은 Peruzzo et al. [2]에 의해 처음 제안된 고유값 문제 해결 알고리즘으로, Variational Principle에 따라 Hilbert 공간에서 바닥 상태 에너지의 상한을 제공하는 에너지를 계산하는 방식으로 작동한다. VQE는 양자 컴퓨터에서 에너지를 측정하고 고전 컴퓨터에서 최적화를 수행하여, 시스템의 바닥 상태 에너지를 계산한다. 시스템의 에너지를 양자컴퓨터에서 측정하기 위해 Hamiltonian을 파울리게이트로 매핑하고, 임의의 양자상태를 표현하여 이를 양자 회로에 인코딩해야한다.

### (1) Hamiltonian

분자의 Hamiltonian은 아래와 같은 Electronic Structure Hamiltonian으로 표현된다.

$$\hat{H}_{el}(r) = -\sum_i \frac{\nabla_{r_i}^2}{m_e} - \sum_I \sum_i \frac{Z_I}{|R_I - r_i|} + \sum_i \sum_{j>i} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$$

(여기서  $r_i$ 는  $i$ 번째 전자의 위치벡터를 나타내고,  $R_I$ 는  $I$ 번째 원자핵의 위치를 나타내고,  $Z_I$ 는  $I$ 번째 원자핵의 원자번호를 의미한다.) 이 Hamiltonian을 파울리 게이트로 매핑하기 위해 아래와같이 Fermionic Creation/annihilation operator를 통해 표현되는 Second Quantized form 으로 기술한다.

$$\hat{H}_{el} = \sum_{p,q} h_{pq} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q + \frac{1}{2} \sum_{p,q,r,s} h_{pqrs} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_r \hat{a}_s, \quad (\text{second quantized hamiotnian})$$

$$h_{pq} = \langle \phi_p | \hat{H} | \phi_q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_p^*(r) \left( -\frac{1}{2} \nabla^2 - \sum_I \frac{Z_I}{|R_I - r|} \right) \phi_q(r) dr$$

$$h_{pqrs} = \langle \phi_p \phi_q | \hat{H} | \phi_r \phi_s \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\phi_p^*(r_1) \phi_q^*(r_2) \phi_r(r_2) \phi_s(r_1)}{|r_1 - r_2|} dr_1 dr_2$$

여기서 Fermionic 연산자는 Jordan-Wigner mapping, Parity mapping, bravyi kitaev mapping 등의 방식을 이용해 파울리 게이트로 매핑할 수 있다. 이번 실험에서는 Parity mapping 방식을 사용할 것이다. Parity mapping은 i번째 큐비트에 i번째 오비탈까지의 전자 점유에 의한 Parity를 대응시켜 파울리 게이트를 통해 생성/소멸 연산자를 표현한다. 이때 분자의  $\alpha$ -spin  $\beta$ -spin 의 Parity를 이용하여 필요한 큐비트의 개수를 2개 줄일 수 있다. 매핑의 결과 헤밀토니안은 아래와 같은 파울리 스트링( $\mathcal{P}_a$ )과 그 가중치 혹은 선형계수( $\omega_a$ )를 통해 표현된다.

$$\hat{H} = \sum_a \omega_a \mathcal{P}_a$$

## (2) Ansatz

임의의 양자상태를 표현하기 위해 각 basis에 대응되는 선형 계수를 파라미터로 하는 PQC(Parameterized Quantum Circuit)를 구성한다. Ansatz의 경우 그 성능을 평가하기 힘들고, 시스템에 따라 어떤 Ansatz가 더 좋은 지 알 수 없는 선형적인 영역에 있다. 따라서, 이번 실험에서는 두가지의 Ansatz를 사용하여 더 나은 결과를 사용한다.

### a) Two-Local (Efficient SU2) Ansatz

Single 큐비트의 양자상태는 bloch sphere 상에서 2개의 임의의 각도에 대한 Rotation gate를 통해 표현된다. Rotation Gate의 각도를 파라미터 로하고, Multi qubit system 에서 큐비트가 갖는 성질인 Entanglement를 CNOT Gate를 이용해 표현하면, 임의의 Multi Qubit System에서의 양자상태를 파라미터를 이용하여 표현 할 수 있다.

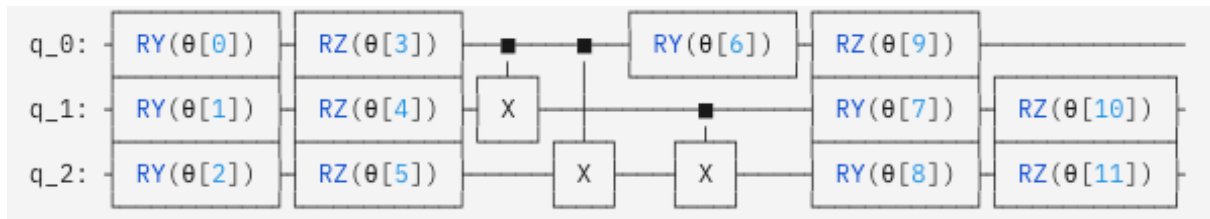


그림 3개의 큐비트에서의 Efficient SU2 Ansatz 예시.

Two\_Local Ansatz의 구성에는 헤밀토니안을 통한 해석이 들어가있지 않다. 이는 하드웨어에서 표현되는 임의의 양자상태에대한 표현이고, 따라서 Hardware Efficient 하다.

### b) UCCSD Ansatz

second quantization을 통해 헤밀토니안 연산자를 시스템의 분자오비탈을 Basis로 표현하였다. 결국 찾고자하는 상태는 헤밀토니안과 같은 Hilbert 공간상에 표현되므로, 같은 스핀오비탈을 Basis를 이용하면 헤밀토니안이 존재하는 Hilbert 공간내의 임의의 양자상태를 표현 할 수 있다. 이처럼 분자의 스핀오비탈 파동함수를 Basis로 하여 양자상태를 Coupled-Cluster Theory를 통해 표현하고, 2<sup>nd</sup>-order excitation 까지만 고려하여, 이를 Unitary로 표현한것이 UCCSD(Unitary Coupled

Cluster Singles and Doubles) 이고, 그 표현은 아래와 같다.

$$\hat{T} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2, \quad (\text{Cluster operator})$$

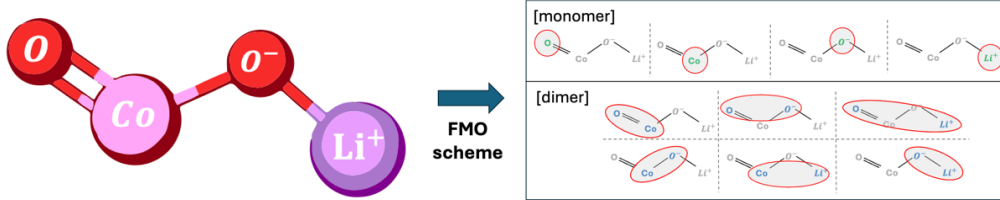
$$\text{where,} \quad T_1 = \sum_{i,a} c_i^a \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_i, \quad T_2 = \sum_{ijab} t_{ij}^{ab} \hat{a}_a^\dagger \hat{a}_b^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i$$

$$|\Psi\rangle_{UCCSD} = e^{\hat{T}-\hat{T}^\dagger} |\psi_{ref}\rangle$$

이는 생성/소멸 연산자를 통해 상태가 표현되게 되며, Jordan-Wigner mapping이나, Parity mapping을 통해 양자 회로에 인코딩 할 수 있다.

이렇게 구성된 양자 회로에 대해 Hamiltonian의 각 Pauli String에 대한 기댓값을 측정하여 시스템의 에너지를 계산한다. 이러한 측정을 반복하며 Ansatz의 파라미터를 최적화하여 계산된 에너지가 최소가 되도록 함으로써 바닥 상태 에너지의 상한의 최솟값을 찾는다. 결과적으로 그 최솟값이 시스템의 VQE알고리즘에서 계산된 바닥 상태 에너지에 해당한다.

## 2.2 FMO(Fragmental Molecular orbital)



FMO method는 전체 분자의 시스템을 작을 여러 개의 시스템 fragment로 나누고 각 fragment 1개(monomer)의 에너지와 fragment의 쌍들(dimer)의 에너지를 이용하여 전체 시스템의 에너지를 근사하는 방법이다. 분자의 바닥상태 에너지 계산을 일반적인 방법으로 계산하면 그 계산복잡도는 시스템의 크기에 지수적인 스케일을 가진다. 하지만 FMO method를 통해서 큰 시스템을 나누어서 다루게 되면 계산복잡도를 효과적으로 줄이는 효과를 얻을 수 있다.

FMO method는 크게 두 과정이 있다. 처음은 FMO based restricted Hartree-Fock(FMO-RHF) 과정으로 monomer와 dimer들의 Hamiltonian을 통해 RHF 계산을 하는 과정이다. Monomer의 Hamiltonian( $\hat{H}_A$ )와 dimer의 Hamiltonian( $\hat{H}_{AB}$ )는 다음과 같다.

$$\hat{H}_A = \sum_{i \in A} \left[ -\frac{\nabla_{r_i}^2}{m_e} - \sum_l \frac{Z_l}{|r_i - R_l|} + \sum_{C \neq A}^{N_{tot}} \int dr' \frac{\rho_J(r')}{|r_i - r'|} \right] + \sum_{i \in A} \sum_{j \in A} \frac{1}{|r_i - r_j|}$$

$$\hat{H}_{AB} = \sum_{i \in A, B} \left[ -\frac{\nabla_{r_i}^2}{m_e} - \sum_l \frac{Z_l}{|r_i - R_l|} + \sum_{C \neq A, B}^{N_{tot}} \int dr' \frac{\rho_J(r')}{|r_i - r'|} \right] + \sum_{i \in A, B} \sum_{j \in A, B} \frac{1}{|r_i - r_j|}$$

여기에서  $A, B$ 는 각 fragment들을 말한다.  $C$ 는 monomer  $A$ 나 dimer  $AB$ 에 포함되지 않는 fragment들을 말하고  $\rho_J(r')$ 항은 monomer나 dimer의 외부에 있는 fragment들의 Electric Charge density이다. 위에 Hamiltonian을 통해 각 monomer와 dimer의 RHF 계산을 하여  $E^{FMO-RHF}$ 를 얻을 수 있고 이것은 다음과 같은 식으로 표현할 수 있다.

$$E^{FMO2-RHF} = E^{FMO1-RHF} + \Delta E^{FMO2-RHF},$$

$$E^{FMO1-RHF} = \sum_A^N E_A,$$

$$\Delta E^{FMO2-RHF} = \sum_{A>B}^N [E_{IJ} - E_I - E_J],$$

위의 식에서  $N$ 은 모든 fragment를 말한다. 위의 식들을 통해서 전체 분자의 electrostatic potential을 포함한 HF 에너지를 얻을 수 있다.

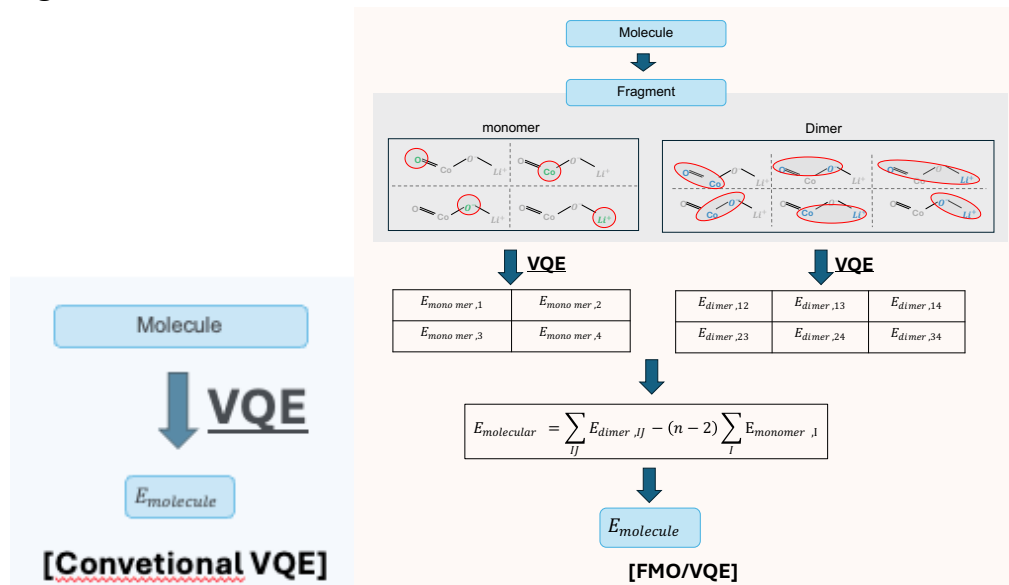
다음 과정은 FMO based coupled-cluster(FMO-CC)를 진행하는 과정이다. 이 과정은 FMO-RHF 에너지 보다 정확한 값을 얻기 위해서 진행하며 이 과정에서는 electrostatic potential을 포함하지 않기 때문에 Hamiltonian을 앞서 정의한 Electronic Structure Hamiltonian을 사용하여 계산할 수 있다. FMO-CC를 통해 얻은 전체 에너지( $E^{FMO-CC}$ )와 correlation energy( $E^{FMO-corr}$ )을 계산하는 과정은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} E^{FMO n-CC} &= E^{FMO n-RHF} + E^{FMO n-corr}, \\ E^{FMO2-corr} &= E^{FMO1-corr} + \Delta E^{FMO2-corr}, \\ E^{FMO1-corr} &= \sum_A^N E_I^{corr}, \\ \Delta E^{FMO2-corr} &= \sum_{A>B}^N (E_{IJ}^{corr} - E_J^{corr} - E_I^{corr}), \end{aligned}$$

위에서 FMO-RHF 과정과 FMO-CC 과정은 두 과정에서 사용하는 Hamiltonian이 다를 수 있기 때문에 반드시 분리되어야 하고 FMO-CC과정은 FMO-RHF의 SCF 계산이 수렴되고 진행해야 한다. 하지만 이번 실험에서는 FMO-RHF Hamiltonian에서 electrostatic potential 항을 무시하여 근사하였으므로 각 과정을 연달아 진행하였고 얻은 monomer와 dimer의 에너지를 통해 다음과 같은 식으로 전체 에너지를 계산하였다.

$$E = \sum_{I>J}^N E_{IJ} - (N-2) \sum_I^N E_I$$

## 2.3 FMO/VQE (Fragment molecular orbital-based Variational Quantum Eigensolver)



FMO/VQE는 Hochel Lim et al. 에서 처음 소개된 알고리즘으로 VQE 알고리즘에 FMO method를 접목시킨 방법이다. VQE 알고리즘에서 해밀토니안을 분자 스피노비탈을 basis로 해서 표현하므로, 분자의 스피노비탈 개수만큼의 큐비트를 필요로 한다. 하지만, 현재 큐비트의 개수는 한계가 있으므로, 기존의 VQE 알고리즘에서는 시뮬레이션 할 수 있는 분자의 수가 제한적이다. 하지만 기존의 VQE알고리즘에 FMO Method를 접목하게되면, 계산을 병렬적으로 진행하며, 총 시스템을 조각들로 나누어서 시뮬레이션 하므로 한번의 계산에서 필요한 큐비트의 개수를 줄일 수 있다. 큐비트의 개수는 시스템에서 고려해야할 스피노비탈 개수와 같다(Parity mapper를 사용하게되면 2개 줄어든다). 이때 결합에 관여할 확률이 적은 Core오비탈을 따로 상수로써 계산하고, 각 원자의 Valence오비탈 만을 고려하는 Freeze core (=Active space)방식을 사용하면 기존의 VQE계산에서 필요한 큐비트의 개수는 아래와 같다.

atom	Number of Valence orbital	Number of Valence electron
Li	2	1
O	6	8
Co	10	7

따라서 VQE 계산의 필요한 스피노비탈의 개수는 산소는 2개임을 고려하여 24개이다. 여기에 Parity mapper를 사용하게되면, 계산에 필요한 큐비트를 2개 줄일 수 있으므로, 이 시스템을 기존의 VQE를 통해 해결하기 위해서는 22개의 큐비트가 필요하다.

여기에 각 원자를 Fragment로 하는 FMO 방식을 적용해보자. 즉, 4개의 monomer 가 만들어지고, 6개의 dimer 시스템을 계산해야한다. 각 계산에서 필요한 스피노비탈의 개수는 아래와 같다.(조성이 같은 Configuration의 경우 한개만 표시함.)

	Configuration	Number of Valence orbital	Number of Valence electron
Monomer	Li	2	1

	O	6	4
	Co	10	7
Dimer	$Li - O$	6	5
	$Li - Co$	12	8
	$O - O$	12	8
	$Co - O$	16	11

따라서 계산에서 최대 필요한 큐비트의 개수는 14개이다(using Parity mapper). FMO 방식을 적용함으로 인해서 계산에 필요한 큐비트의 개수를 8개 줄일 수 있다. 나아가 이 방식의 포텐셜은 시스템이 더욱 커질때에 있다. 최근 많이 사용되는  $LiCoO_2$  분자에 Ni, Mn 등을 첨가한 더 큰 분자를 시뮬레이션할때, 기존의 VQE에서는 해당 원자의 Valence 오비탈 개수 만큼의 큐비트를 더 필요로 하게된다. 하지만, FMO/VQE에서는 시스템의 크기의 증가는 Fragment의 개수의 증가로 이어지게되고, 따라서 같은 개수의 큐비트를 사용해서 더 큰 분자의 에너지를 계산하는것이 가능하다.

## 결과

### 4.1.1 Monomer Energy

### 4.1.2 Dimer Energy

### 4.1.3 Molecular Energy

## Conclusions

본 연구에서 제안하는 양자알고리즘 FMO/VQE을 통해,  $LiCoO_2$  분자에서 고전적인 시뮬레이터와 비교하여 99.989%의 정확도로 분자의 바닥상태 에너지를 계산할 수 있었다. 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 불가능하다.

본 연구에서 제안하는 FMO/VQE알고리즘은 FMO 방식을 통해 계산에 필요로 하는 큐비트 수를 줄일수 있게 한다. 이는 계산하기 힘든 분자를 VQE를 이용하여 양자컴퓨터를 통해 해결할 수 있도록 한다. 이러한 결과는 복잡한 분자의 계산이 필요한 신약 합성과 신소재 개발분야에 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, 1-12 (2022)
- [4] J.T.Hertz et al. Magnetism and structure of  $Li_xCoO_2$  and comparison to  $Na_xCoO_2$ , 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](https://doi.org/10.1063/1.1672702).

## Acknowledgment

This work is supported by the Basic Science Research Program through the National Research Foundation of Korea (NRF) funded by the Ministry of Education, Science and Technology (NRF2022R1F1A1064459) and Creation of the Quantum Information Science R&D Ecosystem (Grant No. 2022M3H3A106307411) through the National Research Foundation of Korea (NRF) funded by the Korean government (Ministry of Science and ICT).