

양자역학 이론의 역사적 배경

19세기 후반부터 20세기 초반에, 물리학자들은 고전역학으로 설명할 수 없는 여러 현상을 연구하며 양자역학을 발전시켰다. 1897년, J.J. 톰슨(J.J. Thomson)은 음극선 실험을 통해 전자를 발견하며 원자가 더 작은 입자로 이루어졌음을 밝혔고 [1], 이후 러더퍼드(Rutherford)는 1911년 금박 실험을 통해 원자가 중심에 밀집된 핵과 주위를 도는 전자로 구성됨을 발견했다. [2] 1900년, 막스 플랑크(Planck)는 흑체복사 문제를 해결하는 과정에서, 에너지가 불연속적인 작은 단위(양자)로 방출됨을 제안했다. 이어서, 1905년에는 알베르트 아인슈타인(Einstein)이 광전효과를 설명하며 빛이 입자(광자)로 행동할 수 있음을 보였다.

1913년, 닐스 보어(Bohr)는 수소 원자 모형을 제시하며 전자가 에너지 준위에 맞는 특정 궤도를 따라 이동할 수 있다고 주장했다. [3] 이어서 1924년, 루이 드 브로이(De Broglie)는 전자 등 물질이 입자이면서도 파동 성질을 가질 수 있음을 제안했다. [4] 그리고 이를 1927년 데이비슨-거머(Davisson-Germer) 실험이 입증하며 전자의 파동성을 확인했다. [5] 같은 해, 하이젠베르크(Heisenberg)는 위치와 운동량을 동시에 정확히 측정할 수 없다는 불확정성 원리를 발표하며 [6], 양자역학에 확률적 해석이 필요함을 제시했다. 1926년, 슈뢰딩거(Schrodinger)는 파동 방정식을 제안하며 전자의 상태를 확률적으로 기술하는 양자역학의 수학적 틀을 마련했다. [7]

1935년, 아인슈타인-포돌스키-로젠(EPR) 역설은 양자역학이 불완전하다고 주장하며 양자 얽힘 문제를 제기했다. [8] 이후 1964년 벨(Bell)의 정리 등 연구를 통해 양자역학의 비국소성이 입증되며 현대 양자정보 이론의 기반이 마련되었다.

1982년, 리처드 파인만(Richard Feynman)은 논문 "Simulating Physics with Computers"에서 기존의 고전 컴퓨터로 양자 시스템을 시뮬레이션하는 것이 어렵다는 점을 지적하며 [9], 양자역학적 원리를 활용한 새로운 계산 패러다임을 제안했다. [10] 이는 곧 오늘날 양자컴퓨터의 개념적 기반이 되었다.

이후, 양자 컴퓨팅이 고전적 컴퓨팅보다 더욱 명확한 계산적 이점 (advantage)를 가지는 문제를 조사하는 과정에서, 1992년에 데이비드 도이치(David Deutsch)와 리처드 조자(Richard Jozsa)는 도이치-조자 알고리즘(Deutsch-Jozsa Algorithm)을 제안하였다, 이는 특정 함수가 균일한지의 여부를 양자컴퓨터가 고전 컴퓨터보다 훨씬 빠르게 판별할 수 있음을 보여주었다.¹⁾ [11] 이는 양자컴퓨터가 기존 컴퓨터보다 빠른 계산이 가능함을 처음으로 입증한 사례들 중 한 가지이다. [12]

1) 주어진 함수 f 가 모든 입력에 대해 동일한 값을 출력하는 상수 함수인지, 아니면 입력 값의 절반에 대해서는 0을, 나머지 절반에 대해서는 1을 출력하는 균형 함수인지 판단합니다.

1994년에 MIT 교수 피터 쇼어 (Peter Shor)는 소인수분해 알고리즘(Shor's Algorithm)을 개발하여 양자컴퓨터가 매우 큰 수를 효율적으로 소인수분해할 수 있음을 보였다. [13] 이 알고리즘은 RSA 암호체계를 위협할 수 있다는 중요한 결과로 이어졌으며, 추후 양자컴퓨터 연구의 주요 원동력이 되었다. [14] 같은 해, Bell Laboratories 연구원 러브 그로버(Lov Grover)는 양자 검색 알고리즘의 일종인 그로버 알고리즘(Grover's Algorithm)을 제안했으며, 이는 양자컴퓨터가 데이터베이스 검색, 최적화 문제 등에서 고전적 컴퓨터보다 월등히 빠른 속도로 계산이 가능함을 보였다. [15]

1998년, IBM 연구진은 2큐비트 양자 알고리즘을 최초로 핵자기공명(NMR) 양자컴퓨터를 이용해 구현해 보았으며, 이후 3큐비트 실험 또한 성공했다. [16] 현재까지는 초전도 큐비트, 이온 트랩 등 다양한 물리적 구현 방식이 연구되었다. [17]

현재, 양자컴퓨터 연구는 Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ)²⁾ 시대에 접어들었으며, 수백~수천 개의 큐비트를 포함하지만, 완전한 오류 보정이 미흡한 양자 프로세서가 개발된 상태이다. [18] 2024년 기준, VQE 알고리즘³⁾ 및 양자 머신러닝 같은 기술을 통해, 아직 미흡한 하드웨어 환경에서도 양자 우위 (supremacy)를 실현하기 위한 연구들이 진행 중이다. [19] 양자컴퓨터는 아직 완전히 실용적인 단계에 도달하지 않았지만, 지속적인 연구를 통해 향후 강력한 연산 능력을 갖춘 완전한 양자컴퓨터 개발이 기대된다. [20]

2) NISQ 시대는 '잡음이 많은 중간 규모 양자' 시대를 의미하며, 현재의 양자 컴퓨터 기술 수준을 나타내는 용어이다. 즉, 오류 보정이 어렵고 제한된 성능을 가진 소규모 양자 컴퓨터가 활용되는 시기를 의미한다.

3) VQE (Variational Quantum Eigensolver) 알고리즘: 양자 화학 및 재료 과학 분야에서 사용되는 하이브리드식 양자-고전 알고리즘으로, 양자 시스템의 바닥 상태 에너지를 찾는 데 사용된다.

양자컴퓨팅을 활용한 신약 개발 혁신

신약 개발 과정은 막대한 계산 비용이 요구되며, 이는 높은 비용과 긴 개발 기간의 주요 원인이 된다. [21] 신약 후보 물질 발굴과 유전체 분석 단계에서는 수백만 개의 화합물 라이브러리를 가상 스크리닝해야 하며, 단백질-약물 결합 구조 예측에는 분자 동역학(MD) 및 분자 역학(MM) 시뮬레이션이 필요해 계산 부담이 크다. [22] 또한, 약물 설계 및 최적화 과정에서는 다양한 화학 구조를 평가하고 QSAR 및 머신러닝 모델을 활용한 예측이 필수적이며, 최종 후보 물질 선정 시 ADMET(흡수, 분포, 대사, 배설, 독성) 분석과 약물의 효능·안전성 평가를 위한 복잡한 계산이 요구된다. [23] 2020년 연구에 따르면 새로운 신약을 해외 시장에 출시하는 데 드는 중간 비용은 9억 8,500만 달러 (1조 4,314억 원)로 추정되었다. [24]

이를 해결하기 위해 양자컴퓨팅과 인공지능(AI)이 새로운 기술로 주목받고 있으며, 향후 신약 개발의 속도를 단축하고 비용을 절감하는 데 중요한 역할을 할 것으로 기대된다. [25] 양자 컴퓨터는 신약 개발을 혁신할 수 있는 기술로, 약물 후보 물질 탐색을 가속화하고, 분자 상호작용을 정밀하게 시뮬레이션하며, 맞춤형 치료법 개발을 주도할 기술로 예상된다. [26]

VQE와 양자 근사 최적화 알고리즘(QAOA)⁴⁾ 같은 알고리즘을 활용하면 분자의 물리·화학적 특성을 더욱 정확히 계산할 수 있으며, [27] 기존 컴퓨터보다 최대 10⁴배 빠른 분자 동역학 시뮬레이션을 통해 약물 설계 최적화가 가능하다.

실제로 D-Wave Systems와 Biogen 같은 기업들이 양자 어닐링을 활용한 신약 개발 연구를 진행 중이며, [28] IBM은 유럽 연구소에서 암 치료제 개발을 위한 분자 상호작용 시뮬레이션에 양자컴퓨터를 적용하고 있다. [29] 이러한 기술 발전은 신약 개발 속도를 단축하고, 치료 효과를 향상시키며, 의료 비용을 절감하여 보다 많은 환자들에게 경제적으로 효과적인 치료를 제공할 수 있도록 한다.

궁극적으로, 이는 UN 지속가능발전목표(SDG) #3(건강과 웰빙)의 목표 달성에 기여하며, 암·알츠하이머 같은 난치성 질환 치료에도 새로운 가능성을 열어줄 것으로 기대된다.

4) 조합 최적화 문제를 해결하기 위해 설계된 하이브리드 양자-고전적 알고리즘. SARS-CoV-2, DPP-4, HIV-1 gp120 복합체 등을 대상으로, 단백질-리간드 분자 도킹을 최적화하는 용도 등으로 사용되며, 소음이 많은 중간 규모 양자(NISQ) 기기 환경에서 높은 하드웨어 적합성을 보인다.

사례1: 양자 컴퓨팅과 신약 개발 혁신⁵⁾

양자 컴퓨팅은 약물 개발에 있어서, 물질의 안정성 및 결합 친화도(binding affinity) 계산, 독성 예측 등, 초고차원(high-dimensional) 및 다변수 문제(multi-variable problems) 해결에 강점을 가지고 있다.

특히, 리간드-단백질 결합 상호작용을 분석하는 데 있어, 양자 기술은 실제 생물학적 환경에서의 약물-단백질 결합 메커니즘을 정확하게 모델링할 수 있도록 돕는다.

기존 신약 개발은 분자 간 상호작용의 엄청난 복잡성 때문에 시간이 오래 걸리고 비용이 많이 든다. 특히, 단백질이 가진 복잡한 3D 구조와 결합 포켓을 분석하는 것이 어려운데, 이 과정에서 물 분자의 역할이 중요한 변수로 작용한다. 물 분자는 단백질 내부로 침투하여 단백질의 모양과 안정성을 변화시키고, 리간드가 결합하는 방식에도 영향을 미친다. 이를 분석하는 과정을 단백질 수화(hydration) 분석이라 하며, 많은 계산량이 필요한 작업이다.

최근, 프랑스 양자 컴퓨팅 회사 Pasqal과 미국 제약기업 Qubit Pharmaceuticals은 고전적 알고리즘 (3D-RISM)을 이용해 단백질 내부의 물 분포를 예측하고, 양자 알고리즘을 활용해 물 분자의 위치를 정밀하게 배치하는 방식으로, 양자적-고전적 방식의 하이브리드 접근법을 개발했다.⁶⁾ 이 과정에서 양자 컴퓨팅의 중첩(superposition)과 얽힘(entanglement) 원리를 이용하여, 기존 컴퓨터보다 훨씬 더 빠르고 정확하게 계산할 수 있다.

이번 연구는 단백질-약물 결합분석 과정 중, '단백질 내부의 물 분포'를 분석할 수 있는 하이브리드 양자-고전 알고리즘을 제안하고 검증한 최초의 사례이다.

단백질은 생체 내에서 다양한 기능을 수행하는 거대 분자로, 단백질의 비정상적인 변형은 질병(예: 암)을 유발할 수 있다. 질병 치료를 위한 신약은 보통 '리간드(ligand)'라고 불리는 작은 분자로, 유해한 단백질의 특정 부위에 결합하여 작용을 억제하는 방식으로 개발된다.

그러나 단백질-약물 결합 과정은 단순한 화학 반응이 아니라, 세포 내부 환경(특히 물 분자)의 영향을 강하게 받는다. 단백질 내부에 존재하는 '포켓(pocket)'에는 물 분자가 존재할 수 있으며, 이 물 분자들이 단백질의 구조와 약물의 결합 친화도(binding affinity)에 큰 영향을 미친다. 따라서 단백질 내부의 물 분자의 위치와 개수를 정확히 파악하는 것이 효과적인 신약 개발에 필수적이다.

현재 컴퓨터 시뮬레이션을 이용한 단백질 수화(hydration) 분석 기술이 발전하고 있지만, 단백질 내부 깊은 곳 (occluded pockets)의 물 분포 분석은 기존 컴퓨터로 해결하기 어려운

5) <https://www.weforum.org/stories/2025/01/quantum-computing-drug-development/>

6) Pasqal. "Quantum Algorithm Can Help Drug Discovery." *Pasqal*, <https://www.pasqal.com/news/quantum-algorithm-can-help-drug-discovery/>. Accessed 16 Feb. 2025.

문제이다.

먼저, X-선 결정학(X-ray Crystallography) 기법의 한계가 있다. X-선 결정학은 단백질 결정에 X-선을 쏘아 회절 패턴을 분석함으로써 단백질의 3차원 구조를 규명하는 기법이다. 단, 단백질 내부의 좁은 공간이나 깊은 포켓에 있는 물 분자의 정확한 위치를 파악하는 데 해상도가 부족하다. 또한, 고전적인 분자 동역학(MD) 시뮬레이션을 통해 물 분자의 위치를 계산할 수 있지만, 이는 계산 비용이 매우 높고 시간이 오래 걸린다.

양자 컴퓨터는 동시에 많은 조합을 고려하는 병렬 처리 능력이 뛰어나, 단백질 내부에서 물 분자가 존재할 확률이 높은 위치를 더 빠르고 정확하게 계산할 수 있다. 연구팀은 Major Urinary Protein-1 (MUP-1) 단백질을 모델로 사용하여 Fresnel 1 (중성 원자 기반 양자 컴퓨터)에서 실험을 수행하였다. 실험 결과, 양자 알고리즘으로 계산한 물 분자의 위치가 기존 고전적 시뮬레이션 결과와 높은 일치도를 보였다.

단, 현재 양자 컴퓨터의 큐비트 수가 제한적이므로, 더 큰 시스템에 적용할 수 있도록 확장 및 오류 보정(error correction) 및 양자 알고리즘 최적화 연구가 필요한 상태이다.

사례 2: 양자 컴퓨팅을 활용한 단백질 구조 예측 연구⁷⁾

최근 Cleveland Clinic과 IBM 연구팀이 *Journal of Chemical Theory and Computation*에 발표한 연구에서 양자 컴퓨팅을 이용한 단백질 구조 예측 가능성을 제시했다.

단백질은 특정한 3차원 구조로 접힌 상태로 기능을 수행하며, 이 구조는 질병의 진행 방식과 치료법 개발에 중요한 역할을 한다. 따라서 단백질 구조를 정확히 예측하는 것은 질병 치료 전략을 수립하는 데 필수적이다.

기존에는 컴퓨터 기반 예측 기법이 사용되어 왔으며, 최근에는 머신러닝(ML) 기반 모델, 특히 AlphaFold2 같은 딥러닝 기술이 큰 발전을 이루었다. 그러나 머신러닝 모델은 실험적으로 밝혀진 단백질 구조 데이터에 의존하기 때문에, 유전자 돌연변이(mutated proteins)나 기존 데이터와 크게 다른 단백질을 예측하는 데 한계를 가진다.

한편, 단백질 구조를 예측하는 또 다른 방법은 물리학적 시뮬레이션을 통해 가능한 모든 단백질 접힘 경로를 계산하는 것이다. 하지만 이 방법은 고전적 슈퍼컴퓨터로도 극도로 어려운 문제이다. 예를 들어, 100개의 아미노산으로 이루어진 단백질을 완전 탐색하려면 우주의 나이만큼 긴 시간이 필요할 정도로 계산량이 많다.

이러한 계산상의 한계를 극복하기 위해, 연구팀은 양자 컴퓨팅과 고전적 컴퓨팅을 결합한 하이브리드 프레임워크를 개발했다.

양자 컴퓨팅은 단백질 크기가 증가함에 따라 발생하는 문제들인 구조적 무질서(intrinsic disorder), 돌연변이, 접힘 과정의 물리학적 복잡성과 같은 고전적 컴퓨팅이 해결하기 어려운 영역을 처리하는 데 활용되었다.

본 논문 연구팀은 Zika 바이러스 NS3 헬리케이스의 7개 아미노산 측매 P-루프 구조를 실험 대상으로, 양자 알고리즘을 이용하여 최소 에너지 상태 (energy conformation)를 계산했다. 즉, 단백질의 주골격 (backbone) 접힘을 예측하는 과정은 계산적으로 가장 까다로운 단계인데, 이를 양자 컴퓨터가 수행하였다. 이후, 고전적 알고리즘을 이용하여, 양자 컴퓨터에서 계산된 결과를 기반으로 단백질의 곁사슬 (sidechain)을 추가하고, 분자동역학으로 정밀한 구조를 보정하였다.

연구 결과, 양자적-고전적 하이브리드 접근법이 고전적 물리 모델 기반 방법보다 정확도가 높았다. 또한, AlphaFold2보다도 작은 단백질 예측에서는 더 정확한 결과를 보였다. AlphaFold2는 대형 단백질에서 강점을 보이지만, 훈련 데이터에 의존하기 때문에 새로운 구조에서는 한계가 있다.

7) Doga, Hakan, et al. "A Perspective on Protein Structure Prediction Using Quantum Computers." *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 20, no. 9, 14 May 2024, pp. 3359-3378. <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/38703105/>. Accessed 16 Feb. 2025.

이 연구는 양자 컴퓨팅이 신약 개발 및 단백질 연구에서 활용될 가능성을 입증한 중요한 사례로 평가된다. 연구를 주도한 Bryan Raubenolt 박사(Cleveland Clinic)와 Hakan Doga 박사(IBM)는 이번 연구가 양자 컴퓨팅을 단백질 구조 예측에 적용하는 첫걸음이 될 것이라고 설명했다. 현재 양자 컴퓨터 하드웨어의 한계로 인해 보다 큰 단백질 예측이 어려운 문제가 있으며, 이를 해결하기 위해 양자 알고리즘의 최적화가 필요한 상태이다. 특히, 에러 보정 및 효율적인 계산 방법 개선이 요구되며, 양자 컴퓨팅이 실제 신약 개발 환경에서 효과적으로 적용될 수 있도록 추가 연구가 이루어져야 한다.

참고 문헌

- [1] Smith, J., and R. Thomson. "Quantum Mechanics and Its Applications." Princeton University Department of Computer Science, Fall 2005, www.cs.princeton.edu/courses/archive/fall05/frs119/papers/smith97_thomson.pfg.pdf.
- [2] "Rutherford's Discovery of the Atomic Nucleus." APS News, American Physical Society, May 2006, www.aps.org/apsnews/2006/05/rutherford-discovery-atomic-nucleus.
- [3] "Bohr Model." Wikipedia, Wikimedia Foundation, en.wikipedia.org/wiki/Bohr_model.
- [4] "Wave-Particle Duality II." Chemistry LibreTexts, Libretexts, [chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_\(Physical_and_Theoretical_Chemistry\)/Quantum_Mechanics/09._The_Hydrogen_Atom/Atomic_Theory/Electrons_in_Atoms/Wave-Particle_Duality_II](http://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Quantum_Mechanics/09._The_Hydrogen_Atom/Atomic_Theory/Electrons_in_Atoms/Wave-Particle_Duality_II).
- [5] "Davisson-Germer Experiment." BYJU'S, byjus.com/physics/davisson-germer-experiment/.
- [6] "The Uncertainty Principle." PBS, Public Broadcasting Service, www.pbs.org/wgbh/aso/databank/entries/dp27un.html.
- [7] "The Schrödinger Wave Equation." Chemistry LibreTexts, Grinnell College, [chem.libretexts.org/Courses/Grinnell_College/CHM_363:_Physical_Chemistry_1_\(Grinnell_College\)/01:_Energy_Levels_and_Spectroscopy/1.05:_The_Schrodinger_Wave_Equation](http://chem.libretexts.org/Courses/Grinnell_College/CHM_363:_Physical_Chemistry_1_(Grinnell_College)/01:_Energy_Levels_and_Spectroscopy/1.05:_The_Schrodinger_Wave_Equation).
- [8] "The Einstein-Podolsky-Rosen Paradox." Physics LibreTexts, Libretexts, [phys.libretexts.org/Bookshelves/Quantum_Mechanics/Quantum_Mechanics_III_\(Chong\)/03:_Quantum_Entanglement/3.03:_The_Einstein-Podolsky-Rosen_Paradox](http://phys.libretexts.org/Bookshelves/Quantum_Mechanics/Quantum_Mechanics_III_(Chong)/03:_Quantum_Entanglement/3.03:_The_Einstein-Podolsky-Rosen_Paradox).
- [9] "Richard Feynman and Quantum Computing." EE Journal, www.eejournal.com/article/richard-feynman-and-quantum-computing/.
- [10] "Quantum Computing: Latest Developments and Future Prospects." arXiv, arxiv.org/html/2405.03366v1.
- [11] "Deutsch-Jozsa Algorithm." Wikipedia, Wikimedia Foundation, en.wikipedia.org/wiki/Deutsch%E2%80%93Jozsa_algorithm.

- [12] "The Deutsch-Jozsa Algorithm Explained." Classiq,
www.classiq.io/insights/the-deutsch-jozsa-algorithm-explained.
- [13] "Shor's Algorithm." Wikipedia, Wikimedia Foundation,
en.wikipedia.org/wiki/Shor's_algorithm.
- [14] "Quantum Computing Breakthroughs." SpinQuanta,
www.spinquanta.com/newsDetail/f9b82dc1-9f68-4d9e-a7dd-317620eeaaf4.
- [15] "Grover's Algorithm." Wikipedia, Wikimedia Foundation,
en.wikipedia.org/wiki/Grover's_algorithm.
- [16] "Quantum Timeline: Experimental Milestones." University of Bristol QET Labs,
www.bristol.ac.uk/qet-labs/outreach/quantum-timeline/experimental/.
- [17] "Trapped Ions vs Superconductors." Duke University Ion Trap Lab,
iontrap.duke.edu/2017/03/13/trapped-ions-vs-superconductors/.
- [18] "Quantum Timeline: Experimental Milestones." University of Bristol QET Labs,
www.bristol.ac.uk/qet-labs/outreach/quantum-timeline/experimental/.
- [19] "What Is Quantum Supremacy?" Live Science,
www.livescience.com/technology/computing/what-is-quantum-supremacy.
- [20] "Quantum Machine Learning: Trends 2024." Restack,
www.restack.io/p/quantum-machine-learning-answer-trends-2024-cat-ai.
- [21] "Pharma's Digital Rx: Quantum Computing in Drug Research and Development." McKinsey & Company,
www.mckinsey.com/industries/life-sciences/our-insights/pharmas-digital-rx-quantum-computing-in-drug-research-and-development.
- [22] "Quantum Computing Applications in Drug Discovery." Nature Scientific Reports, www.nature.com/articles/s41598-024-67897-8.
- [23] "The Convergence of Quantum Computing and Early Drug Discovery." Kvantify,
www.kvantify.com/inspiration/the-convergence-of-quantum-computing-and-early-drug-discovery.
- [24] "Quantum Computing in Drug Discovery: A Review." PMC, National Center for

Biotechnology Information, [pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC11214120/](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC11214120/).

[25] "Quantum Computing Applications in Drug Discovery." Nature Scientific Reports, www.nature.com/articles/s41598-024-67897-8.

[26] "The Convergence of Quantum Computing and Early Drug Discovery." Kvantify, www.kvantify.com/inspiration/the-convergence-of-quantum-computing-and-early-drug-discovery.

[27] "Quantum Computing and Drug Discovery." Horizon, Korea Institute for Advanced Study, horizon.kias.re.kr/16769/.

[28] "Quantum Computing Accelerates Drug Discovery from Years to Weeks." The Quantum Insider, thequantuminsider.com/2024/07/12/quantum-computing-accelerates-drug-discovery-from-years-to-weeks/.

[29] "IBM's Quantum Computer Tasked with Tackling Cancer Research in Europe." The Quantum Insider, thequantuminsider.com/2021/11/12/ibms-quantum-computer-tasked-with-tackling-cancer-research-in-europe/.