

[혁신도전형] 소재 혁신 양자시뮬레이터 개발사업

# 양자 시뮬레이터 핵심기술인

## 광자-전자-원자 포함 양자 동역학 기술법 개발

울산과학기술원 민승규 교수

E skmin@unist.ac.kr

양자시뮬레이션 성능을 향상시킬 수 있는 강한 빛-물질 상호작용 기술법 및 다중 성분 양자 동역학 시뮬레이션 계산 기술법을 확보하였다.

### 연구 배경

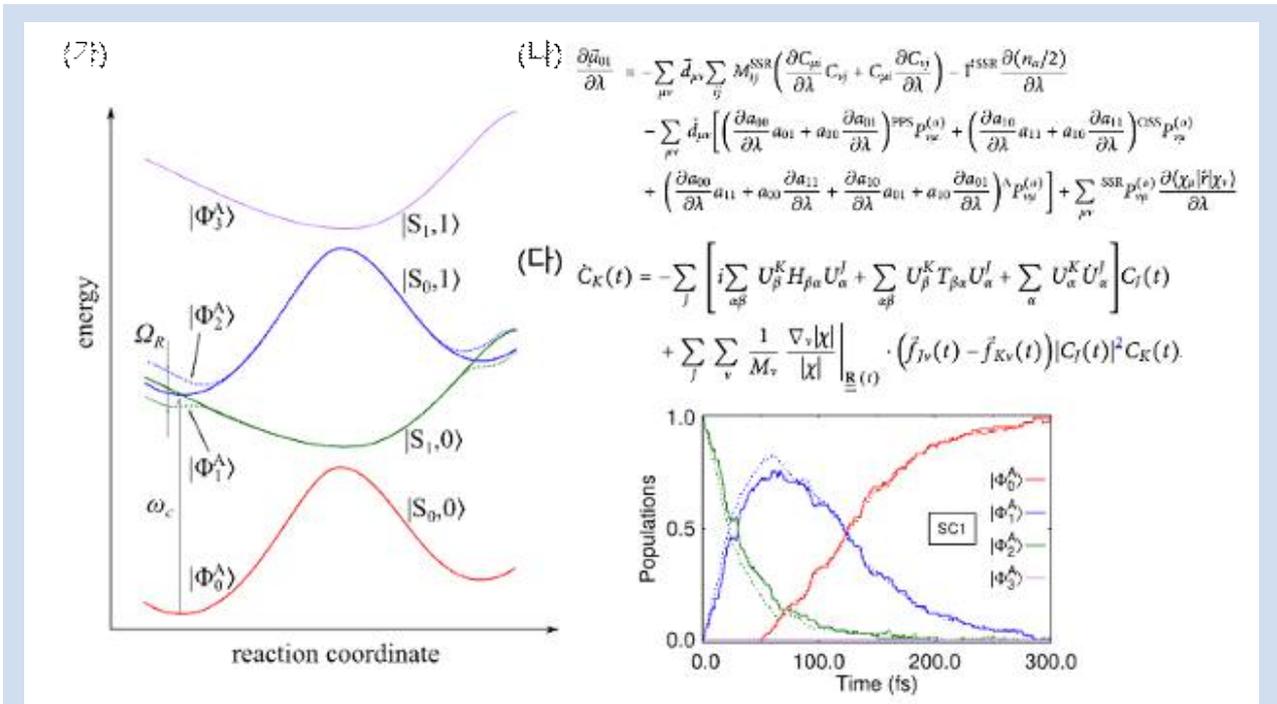
양자 상태를 정밀하게 조절하는 기술은 양자 시뮬레이션에서 매우 중요한 역할을 한다. 최근에는 빛과 물질이 상호작용하는 방식을 정밀하게 제어하여 양자 시뮬레이션의 성능을 더 향상시키려는 연구가 활발히 진행되고 있다. 예를 들어, 수소 생성 반응 같은 화학 반응에서 빛으로 전자를 자극하는 과정은 중요한 단계이며, 이러한 화학 반응을 아날로그 양자 시뮬레이션을 할 때 빛-물질 상호작용은 매우 중요한 역할을 할 수 있다.

빛-물질 상호작용이 강한 경우, 빛은 더 이상 고전 전자기파로 근사할 수 없어 양자 역학적 광자 상태로 다뤄야 한다. 또한, 물질의 양자 상태와 결합하여, 폴라리톤 (polariton) 상태를 형성한다. 이러한 폴라리톤 양자 상태는 외부 광자 에너지에 따라 쉽게 변하기 때문에, 정밀 제어가 가능하다는 이점이 있다.

계산화학적 측면에서 기존의 양자 동역학 기법들은 '약한' 빛-물질 상호작용에 의한 원자-전자 동역학을 기술할 수 있었지만, '강한' 빛-물질 상호작용을 기술할 수 있는 방법의 개발은 최근 대두되는 연구 분야이다. 특히, 폴라리톤 상태 간의 상호작용을 고려한 양자 동역학 방법론은 계산 안정성을 확보하기 위해 엄밀한 양자화학적 연구가 필요한 상황이다.

## 연구 내용

연구팀이 이번 연구를 통해 얻은 중요한 결과는 다음과 같다. 첫째, 폴라리톤 상태 간의 상호작용을 계산하는 방법을 개발하였다. 이 방법을 통해 상호작용의 변화를 이전보다 더 정확하게 계산하는 것이 가능해졌다. 이는 양자 상태의 거동을 장시간 안정적으로 모사(시뮬레이션)하기 위해 꼭 필요한 방법이다.



**(가) 강한 빛-물질 상호작용으로 형성된 폴라리톤 상태 도식**

광자가 결합된 전자 상태( $|S_{0,1}, 0/1\rangle$ , 실선)로부터 형성되는 폴라리톤 상태(점선)를 표현함. 빛 에너지, 빛-물질 상호작용의 크기에 따라 폴라리톤 상태의 모양이 조절될 수 있음.

**(나) 본 연구에서 새롭게 유도된 전이 쌍극자 기울기**

**(다) 동역학 시뮬레이션을 통한 시간에 따른 폴라리톤 상태의 양자상태 변화**

(가)의 두 번째 들뜬 폴라리톤 상태가 점유된 상태(녹색)로부터 시간에 따라 첫 번째 들뜬 폴라리톤 상태(파란색)를 지나 바닥 상태 폴라리톤의 점유도(빨간색)가 증가하는 것을 시뮬레이션할 수 있음.

둘째, 광자-전자-원자를 포함한 다중계 양자동역학 시뮬레이션 기법을 개발하였다. 혼합된 양자-고전 동역학 접근법을 통해, 폴라리톤 상태의 양자 결맞음<sup>1)</sup>, 점유도<sup>2)</sup>의 변화를 실시간으로 기술할 수 있으며, 빛-물질 상호작용의 크기에 따른 양자 현상의 변화를 보여줄 수 있다. 특히, 엄밀하게 해밀토니안(Hamiltonian) 연산자를 기술함으로써 수백 femtosecond 이상에 달하는 안정적인 양자동역학 시뮬레이션을 수행하였다.

논문 Formulation of Transition Dipole Gradients for Non-Adiabatic Dynamics with Polaritonic States(The Journal of Chemical Physics, 2024)

[논문 보기](#)

## 차별성 및 우수성

연구팀이 새롭게 개발한 폴라리톤 상태를 활용한 양자 동역학 시뮬레이션 기법은 기존의 양자 동역학 기술법에 비해 강한 빛-물질 상호작용을 다룰 수 있으며, 특히 물질의 상태에만 의존하는 양자 동역학을 넘어, 인간이 양자 상태를 조절하여 원하는 양자 결맞음 상태를 만들어낼 수 있는 엄밀한 수학적 접근법을 개발했다는 것이 고무적이다. 또한, 이러한 엄밀한 접근법은 광자-전자-원자의 다중계에서 각 입자 간의 양자역학적인 상관관계를 최대한 기술할 수 있다는 점에 이점이 있다.

## 파급효과 및 활용계획

현재 아날로그 양자 시뮬레이션에서는 주로 중성 원자나 아주 작은 분자가 활용되고 있다. 그러나 이번 연구는 더 큰 분자의 폴라리톤 상태를 활용하여 새로운 개념의 아날로그 양자 시뮬레이터를 구현할 가능성을 제시한다. 특히, 장시간 동안 양자 상태의 안정성을 확인할 수 있다는 점에서 높은 기대를 받고 있다.

또한, 추가 연구를 통해, 단일 광자 모드를 넘어선 다중 광자 모드를 통해 양자 상태를 조절할 수 있는 기술법도 개발할 수 있을 것으로 기대된다.

1) 양자 결맞음(quantum coherence) : 여러 양자 상태가 비슷한 위상을 유지하며 중첩(superposition)되어 있는 현상  
2) 점유도(population) : 특정 양자 상태를 점유할 확률