10년 후의 물리학: 원자 및 분자물리학

DOI: 10.3938/PhiT.23.018

김진태

Prospects for Physics after 10 Years: Atomic and Molecular Physics

Jin-Tae KIM

Since the term “atomos” was first used 2500 years ago, much progress in atomic and molecular physics has been made. In this paper, the historical background of the atom and the molecule is introduced. Cooling and trapping of atoms and molecules are research areas that have seen rapid and major improvements. Among such fields Bose-Einstein condensation, optical clocks, ion traps, Rydberg states, *etc.* are hot topics that will receive attention in the near future. Cooling and trapping of hetero-nuclear diatomic molecules, measurements of electron electric dipole moments, manipulations of molecules, chemical reaction manipulation at ultracold temperatures, the formation and the detection of macromolecule, *etc.* are attractive research topics in the field of molecular physics.

본 기고문은 원자 및 분자물리에 대한 기본적인 지식이 많지 않은 독자들을 위해 먼저 원자 및 분자에 대한 기본적 성

질, 역사적 고찰 등을 살펴본다. 또한, 케네디가 10년 뒤 달에 인류가 갈 것이라고 예언할 당시와는 달리 빠르게 변화하지만, 최근 발전하고 있는 원자 및 분자물리 분야 중 냉각 및 포획에 기반을 둔 분야들에 대해 10년 후의 발전방향에 대해 소개하고자 한다. 이러한 글들이 원자 및 분자물리에 관심을 가진 고등학생 및 대학생들이 향후 무엇을 할 것인가에 대한 목표를 설정할 수 있는 계기가 되었으면 하는 마음이 간절하다.

분자의 경우는 원자물리와 많은 연관이 있는 이원자 분자에 국한을 한다. 냉각 및 포획된 원자 및 분자를 이용한 분야 또한 매우 넓어, 에너지 측면에서는 이온화 전후 영역과 이온화된 원자, 원자와 원자 간 거리가 매우 떨어져 있는 분자의 경우, 원자나 분자의 온도가 매우 낮아 원자들 사이의 상호작용이 매우 큰 경우들에 대한 연구 등을 고려한다. 이러한 분야들을 자세히 설명하기에는 많은 지면이 필요할 것으로 생각되므로 중요한 요점만을 살피고자 한다.

원자 및 분자 물리의 태동 및 발전

원자에 대한 개념 정리를 초기 그리스 시대부터 현대까지 중요한 발견들에 대한 정리가 필요한 것 같다. 2500년 전 철학자 데모크리토스는 모든 물질은 쪼갤 수 없는 매우 작은 원자라는 작은 입자로 구성되어 있는데 이것을 그리스 말로 보이지 않는 혹은 더 자를 수 없는 뜻을 가진 “atomos”로 기술하였다. 아리스토텔레스는 모든 물질이 뜨거움, 차가움, 마른 것, 젖은 것으로 구성된 흙, 공기, 불, 물로 구성된 4 원소설을 제기하였는 바, 예를 들어 물은 차가운 것과 젖은 것의 결합으로 구성되었다고 생각하였다. 이러한 원자 구성에 대한 잘못된 생각들이 수세기 동안 사람들에게 의해 믿어졌다.

현재 잘 알려진 원자의 실체가 실험적으로 증명되기 시작한 것은 18세기에 접어들면서 실험 데이터들을 통해 알려졌다. 스톤니는 1891년 원자가 전하를 띤 전자들로 구성되었다고 제안하였다. 돌턴의 원자 모델은 고체 구들로 구성되어진 것으로 묘사되었다. 톰슨의 실험을 통해 처음으로 원자들은 더 작은

저자약력

김진태 교수는 미국 Iowa 대학교 물리학과에서 포타슘 이원자 분자 레이저 분광학 분야로 이학박사(1995), 초음속 빔으로 형성된 수소 분자 레이저 분광학으로 코네티컷 대학교 박사후 연구원(1995-1997), 가돌리늄 원자의 효율적 광이온화 분야로 한국원자력연구원 박사 후 연구원 및 선임연구원(1997-2000), 이중 핵종 이원자 분자의 냉각 및 포획 분야로 코네티컷 대학교 방문교수(2005-2007), 겸임연구교수(2007-) 등을 거쳐, 조선대학교 광기술공학과 교수(2000-)로 재직 중이다. 현재 한국물리학회 원자 및 분자물리학과 위원장(2013-), 국제 레이저 기술 IEC/TC 76 전문위원(2003-), 한국 광산업진흥회 운영위원(2012-) 등을 맡고 있으며, 연구 분야는 원자 및 분자 레이저 분광학, 레이저 가공 및 계측 등의 연구를 수행하고 있다. (kimjt@chosun.ac.kr)

입자들로 구성되었음을 알았다. 그러나 그의 원자모델은 양전하 내에 음전하인 전자들이 수박씨처럼 원자 내에 박혀 있다고 생각하였다. 이러한 모델은 러더포드에 의해 양전하를 가지는 핵자가 중앙에 존재한다는 것을 알파 입자 산란 실험을 통해 증명하였다. 또한, 전자들은 그 핵자 주변을 무작위로 움직인다고 생각하였다. 이러한 모델이 보어에 의해 전자들은 무작위로 움직이는 것이 아니고 행성의 운동 방식과 같이 핵자 주위를 원 궤도 운동을 하는 것으로 고려하였다. 그러나 그의 모델은 좀머펠트와 함께 양자화된 개념을 도입하였으나, 수소원자를 제외하고는 설명할 수 없었다. 물론 이 모델이 양자화 개념에 대한 시발점이 되어 양자역학을 태동시킨 사실은 자명하다. 드브로이는 입자가 작아지면 파동의 성격을 띠며, 입자도 파동의 특성을 가져 입자의 운동량에 따라 파장을 가진다는 것을 제안하였다.

원자의 현대 모델로 이끈 슈뢰딩거 방정식은 파동의 개념과 고전역학의 해밀톤 방정식으로부터 유도되었다. 이러한 원자들은 전자 오비탈 개념이 도입되어 양자 역학적으로 파동함수와 에너지 준위를 슈뢰딩거 방정식을 적용하여 풀 수 있는 방법이 제안되고 이러한 파동함수와 에너지들은 원자 내에 존재하는 전자, 양성자, 중성자들의 상호작용에 의한 해밀토니안을 고려하여 원자들의 양자 상태들을 기술할 수가 있다. 그러므로 원자 및 분자 시스템의 정확한 해밀토니안 해석을 통해 에너지 준위 값들과 파동함수 상태들을 얻을 수 있다. 전자를 파동의 입장에서 해석 시 전자구름으로 해석하는 것은 파동함수의 제곱($|\Psi(\vec{r}, t)|^2$)을 이용한 전자 분포로 이해가 가능하다. 이러한 파동함수는 고전역학에서와 같이 확정적으로 위치를 알 수는 없고, 막스 본이 해석한 바와 같이 전자를 발견할 확률을 줄 뿐이다. 그러므로 원자는 쿨롱력에 의해 원자핵에 결합된 하나 이상의 전자들의 시스템으로 표현 가능하며, 슈뢰딩거 방정식에 의해 얻어질 수 있는 원자 오비탈이라 명명되는 전자의 파동 함수(전자 구름)에 의해 기술되어질 수 있다. 1932년 채드윅은 핵자가 중성자를 포함하는 것을 확인함으로써 원자 구조를 마침내 정립하게 되었다.

원자물리와 분자 물리는 원자 혹은 분자의 스펙트라를 이해하기 위한 시도로 발생한 학문이라 해도 좋을 듯하다. 스펙트라를 이해하기 위해서는 전자의 락스만 준위들 사이의 광자에 의한 천이에 대한 이해가 필요하다. 원자가 빛을 흡수함으로써 기저 에너지 준위에서 여기 에너지 준위로의 전자 천이를 통해 발생하는 분광선들의 해석이야말로 원자를 이해하는 데 지대한 기여를 한 것으로 볼 수 있다. 이러한 원자의 천이 특성을 분석하는 분광학은 고체 내의 원자, 분자 등의 분광학 연구를 통해 분석될 수 있다.

과연 분자가 무엇이라고 생각될까? 분자 역시 원자와 같이 보어에 의해 기술되었으나 보어의 분자 모델에 대해서는 언급

된 곳이 많지 않다. 이원자 분자의 경우 원자에 비해 또 다른 원자핵이 존재하여 더 많은 전자가 존재하여 원자보다 더 복잡하다. 그럼에도 불구하고 허시바하 등^[1]에 의하면 분자의 보어의 모델을 무한대 차원 슈뢰딩거 방정식을 이용하면 슈뢰딩거 방정식의 근사로 볼 수 있는 흥미로운 보고가 있다. 수정된 보어 모델에 의한 수소 분자의 기저상태와 몇 여기 준위를 사용하여 얻은 분자의 퍼텐셜은 슈퍼컴퓨터를 사용하여 계산한 정확한 *ab initio* 양자역학적 계산과 잘 일치하는 것이 증명되었다.

원자가 화학적 결합 반응 등을 통해 이원자 분자를 이해하고자 했을 때, 분자 양자 상태들에 대한 기본적인 전자 파동함수와 결합(bonding), 반결합(antibonding)이 먼저 이해되어야 한다. 두 원자 오비탈이 결합하여 결합 및 반결합의 분자 오비탈이 형성하게 된다. 또한, 분자의 대칭성, 분자 구조 등에 따라 분자 결합 형태들에 관한 이해가 필요하다. 분자를 결합시키는 전자가 상호 반발하는 전자들을 공유해서 분자 결합을 하는 것이 이상하게 생각될지 모르나, 원자들 사이의 공유 전자들의 파동함수들의 대칭성 등을 고려하면 분자 결합을 잘 이해할 수가 있다. 마치 쿼크들을 결합시켜주는 글루온처럼 분자들을 결합해주는 것은 전자들이다. 이러한 전자는 아직도 정확한 크기 및 특성들이 정확히 알려져 있지 않다. 이러한 전자의 특성을 해석하는 것은 현대물리 및 화학이 풀어야 할 숙제이다.

이원자 분자의 경우도 많은 전자들 사이의 상호작용, 원자핵과 전자들의 상호작용, 원자핵들 사이의 상호작용 등의 매우 복잡한 특성을 가지게 된다. 실질적으로 더 복잡한 분자들 역시 분자 시스템에 대한 해밀토니안을 정확히 분석하여 슈뢰딩거 방정식의 해를 구함으로써 분자 시스템을 이해할 수가 있다. 분자를 형성하는 원자들이 많아지는 경우에는 정확한 분자 내의 전자 특성을 알기가 힘든 상황에 이르게 된다. 탄소 원자와 수소 원자들로 구성된 화합물들에 대한 분석 역시 탄소와 수소 원자들 사이의 공유 결합들의 연결로서 생각해볼 수 있지만, 이원자 분자들의 경우와 같이 전자들의 상태들에 대한 좀 더 정확한 이론적인 해를 알기가 힘들다.

원자물리 분야 발전 방향

체임버 내의 가스는 가스의 온도에 따라 맥스웰-볼츠만 분포로 빨리 움직이는 상태로 있게 된다. 레이저를 이용하여 이렇

REFERENCES

- [1] A. A. Svidzinsky, M. O. Scully and D. R. Herschbach, Phys. Rev. Lett. **95**, 080401 (2005).

게 빨리 움직이는 가스 원자 혹은 분자의 속도와 내부 에너지를 줄이려는 노력이 있었다. 이러한 극저온 상태의 원자들은 빨리 움직이는 원자들에 비해 레이저와 상호작용 시간이 길게 되어 측정하고자 하는 물리량들을 좀 더 정확하게 측정하는 것이 가능하다. 또한, 극저온에서의 새로운 화학 반응 제어, 고체물리에서 이론적으로 예측되었던 새로운 물리현상들이 규명되어지고 있다. 1987년 Na 원자를 자기장과 레이저를 이용하여 포획하여 원자의 속도를 줄이는 방법으로 1997년 노벨물리학상이 수여되었다. 또한, 1995년 Na 원자에 대한 보즈-아인슈타인 응축 현상 분야에 2001년 노벨 물리학상이 수여되었다.

1. 초저온 보즈-아인슈타인 응축 현상과 응용

보즈-아인슈타인 응축 현상이 1924년에 보즈와 아인슈타인에 의해 절대 온도 0 K 근처에 있는 ^4He 원자에 예측되었으니 10년 후면 100년이 되는 해가 된다. 보즈-아인슈타인 응축 상태에서는 절대 온도 0 K 근처에서 대부분의 보손들은 기저 준위에 있게 된다. 이 원자들은 결맞음성을 가진 물질과 특성과 군집 행동을 하는 특성을 가지게 된다. 이러한 응축 가스들에 의한 보즈-아인슈타인 응축 현상은 1995년 170 nK로 냉각된 루비듐 원자에서 관측되었다.^[2] 온도가 낮아짐에 따라 응축된 가스들의 속도 분포가 중앙에 밀집하게 된다. 이러한 현상은 온도가 낮아짐에 따라 빠른 커피 원자는 증발되어 날아가고 느린 커피 원자는 남아서 진한 커피 원액이 되는 것과 같은 원리이다. 알칼리 원자들에 대한 보즈-아인슈타인 응축이 1995년 수행된 이후로 많은 응용 연구들이 수행되어졌다. 보즈 가스의 마찰이 없는 초유체 현상, 페르미 가스의 저항이 없는 초전도 현상, 양자화된 각운동량에 기인해서 생성된 양자 보텍스(Vortex), 응축 상태들간의 간섭현상, 모트 절연체와 초유체 사이의 상전이와 같은 많은 물리 현상들이 관측되었다.

이러한 응축 가스들은 기존 유체보다 조절할 수 있는 인자들이 많아 쉽게 유체 특성 변화를 변화시키기에 매우 용이하다. 또한, 강한 상호작용을 가지는 원자들로 고체와 유사한 시스템의 구현이 가능하다. 그 시스템의 특성을 파악하기 위하여 고체에서는 조절하기가 불가능한 파라미터들을 조절할 수가 있어 기체로 구성된 시스템에서 분수 양자 홀 효과^[3] 등을 관측할 수가 있다. 그 특성 변화를 파라미터 변화에 따른 특성 변화를 관찰하여 강한 자기장 내에서 준입자처럼 행동하는 “전자”의 거동 현상을 규명할 수 있을 것으로 전망된다.

단지 하나의 원자 혹은 분자를 안정하게 광격자에 놓이게 하는 기술은 양자정보 처리 기술에 매우 중요하다. 아래에서 기술될 중성원자, 이온, 분자 등을 통한 양자 연산 방법들은 양자 연산 처리하고자 하는 객체를 레이저를 이용하여 생성된

광격자에 안정하게 위치하게 한 후 이 객체들의 양자 상태들을 또 다른 레이저들을 사용하여 조절하는 방법을 이용하게 된다. 이러한 양자 연산을 하기 위해 시스템의 집적화는 매우 중요하다. 현재 이러한 소형화를 위하여 칩 상에서 보즈-아인슈타인 응축된 가스를 형성하는 방법이 사용되고 있으며, 이러한 방법을 적용하여 보즈-아인슈타인 응축체의 거동을 조절하는 기술의 발전이 빠르게 진행될 것으로 전망된다.

2. 중성원자 및 이온 제어를 통한 양자 연산

파인만이 얽힘(entanglement)이라는 용어를 사용한 이후로 양자, 원자, 분자 등을 이용한 양자 연산을 개발하고자 하려는 많은 노력이 있어왔다. 기존 컴퓨터 개발의 한계인 소자 크기의 극소화로 인해 이 문제를 해결해줄 수 있는 양자 연산 기술은 21세기의 광정보 혁명으로 이루 말할 수 없는 경제적 가치를 줄 것으로 생각된다. 국외에서는 많은 국가들의 연구소, 학교, 산업체에서 진행되고 있는데 미국은 QUEST 프로그램을 통해 양자 정보 분야에 연구를 예산 공개 없이 수행하고 있으며, 단일 포획된 이온의 전자 스핀을 이용하여 NIST의 미그달 등은 얽힘 광원 및 검출기를 1 kHz 수율로 수행하고 있다. 미국 메릴랜드 대학 물리과에서는 단일 포획된 이온의 전자 스핀 혹은 내부 에너지 양자 상태를 이용한 연구가 수행되어지고 있다.

현재 사용되는 최소 정보 저장의 단위로 하나의 비트는 0과 1의 값의 이진 값들을 이용한다. 연산을 위한 게이트들 중 CNOT (controlled not)이 완성되면, 임의의 연산들이 가능하게 되어 수행되어져야 할 기본 연산자로 생각될 수 있다.

양자 연산에서는 이러한 0 혹은 1이 아니라 0과 1인 중첩된 양자상태로 비트 대신 큐비트로 정의한다. 이러한 0과 1은 예를 들어 이온 혹은 원자 등의 스핀의 up down 스핀 상태로 구현할 수가 있다. 큐비트 수는 상태수 N 에 따라 2^N 으로 상태를 표현 가능하여 기존 정보저장에 사용하는 비트에 비해 계산 능력이 매우 빨라지게 된다. 양자연산은 0과 1을 개별적 이온 포획 상태에 있는 강한 상호작용을 하는 이온들 사이의 상호 작용을 조절하여 얽힘 상태를 만들어 양자 큐비트를 만든다. 양자 큐비트를 만들기 위해서는 포획된 이온의 에너지 준위를 레이저 등을 이용하여 에너지 상태들을 제어함에 의해서 가능하다. 매우 큰 수의 소인수분해를 가능하게 한 쇼어 알

REFERENCES

- [2] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman and E. A. Cornell, Science **269**, 198 (1995).
- [3] Y. Liu, A. L. Graninger, S. Hasdemir, M. Shayegan, L. N. Pfeiffer, K. W. West, K. W. Baldwin and R. Winkler, Phys. Rev. Lett. **112**, 046804 (2014).

고리즘의 집적화된 구현을 위해서는 많은 이온들이 상호 얽힘 상태로 있어야 한다. 그러나 이러한 얽힘 상태를 만드는 작업은 주위로부터의 외부 섭동으로 인해 구현하기가 힘들다. 이러한 이온 포획 방법을 위해 칩 표면에 수십 개의 이온들을 포획하는 방식인 표면 포획방식을 적용하여 시스템 크기를 줄이려는 노력^[4]이 메릴랜드 대학 및 듀크 대학에서 진행되고 있다. 향후 외부잡음, 섭동에 기인한 결잃음 현상들을 제거할 수 있는 중성원자, 중성분자, 이것들의 이온들의 포획 기술이 매우 발전하여 30 큐비트 수 확대가 10년 내에 가능할 것으로 전망된다.

3. 정확한 시간 측정

우주가 탄생한 시기는 137.72 ± 0.59 억 년 전에 빅뱅을 통해 탄생되었다고 예측한다. 우주 탄생 시기에 대한 큰 시간 오차를 가지고 있음을 쉽게 알 수 있다. 현재 인류가 가장 정확하게 측정할 수 있는 시간의 오차는 얼마나 될까? 약 50억 년에 1초의 불확도(1.6×10^{-18} 초)를 가지는 광시계가 있다.^[5] 4년 전 물리학과 첨단기술에 실린 “광시계: 10^{-18} 불확도를 향해”라는 원고에서 사실 그 당시에도 이온을 이용한 시계는 약 37억 년에 1초의 불확도를 가지는 시계였다.

2008년 스트론튬 원자를 이용한 광격자 시계의 불확도를 줄여 현재는 스트론튬 원자를 이용하여 1.6×10^{-18} 초의 불확도를 얻었으니, 6년 만에 100배 이상 불확도가 줄어든 것을 알 수 있다. 현재 이러한 추세라면 곧 우주의 나이에 대해 1초 정도의 불확도를 가지는 시계가 곧 도래될 것이다. 이러한 시간의 정확도는 GPS를 이용한 거리 측정의 불확도를 줄여줄 수 있다.

현재 시간 측정의 선두 그룹은 이온을 이용한 메릴랜드 대학의 와인랜드 그룹과 이터븀 원자, 스트론튬 원자 광시계를 사용하는 콜로라도 대학의 준예 그룹이 선두를 달리고 있다. 현재 표준시간은 세슘원자 시계에 기반을 두고 있는 바 2014년 미국 표준연구소(NIST)가 3억 년에 1초 미만의 정확도를 갖춘 새로운 세슘을 이용한 원자시계를 개발하였다.^[6] 그러므로 세슘 원자를 이용 10^{-18} 한계를 극복할 수 있는 기술 개발이 곧 도래할 것으로 보인다. 자세한 광시계와 이온 시계의 원리들에 대한 내용들은 물리학과 첨단기술(2010년 5월호, 2012년 12월호)에 잘 기술되어 있다.

4. 리드버그 원자 형성과 응용

양자 연산을 위해 원자 내부 양자 상태를 이용하는 컴퓨터들은 수백만 개의 원자들로 구성된 트랜지스터를 통해 구동되는 재래식 컴퓨터가 불가능한 문제들을 해결할 수 있는 가능

성을 가지고 있다. 양자 컴퓨터를 만들기 위한 도전 중의 하나는 각 원자들의 양자상태들을 조절할 수 있는 기술을 필요로 한다.

원자 냉각 기술의 발달로 광격자의 각 사이트마다 하나의 원자를 배치하는 것이 가능하게 되었다. 초냉각된 리드버그 원자들을 공간광변조기를 이용하여 행렬 형태로 배열한 후, 각 사이트에 있는 원자의 상태를 조절이 가능하다. 리드버그 원자들은 매우 강하게, 장거리에서 상호작용을 한다. 원자들의 양자 상태들은 수 초 동안 유지할 수가 있어 실제 계산을 위하여 필요로 하는 수백만 번의 개개 연산을 가능하게 한다. 또한, 매우 큰 분극도를 가지며, 생명주기가 큰 특성을 가지게 되어, 레이저와 상호작용 시간이 길며, 용이하게 조절이 쉽게 된다. 이러한 특성을 가진 리드버그 원자들을 광격자 형태로 만들어 리드버그 원자의 양자 상태들을 조절하려는 노력으로 양자 큐비트를 구현할 수 있게 되었다.

원자들의 쌍극자가 편광되어 있을 때, 인접한 두 원자들은 서로 강한 상호작용에 기인한 퍼텐셜에너지 때문에 동시에 특정 영역 내에 있는 각 원자의 동일한 양자 상태를 여기시킬 수가 없게 하는 쌍극자 블로케이드를 형성한다.^[7] 이 블로케이드 영역은 두 원자 사이의 거리에 따른 반데르발스 퍼텐셜을 이용하여 계산이 가능하다. 이러한 결합은 매우 강해 단지 하나의 스핀 방향을 원자구름으로부터 변경시키는 것도 가능하다.

이미 구현된^[8] 2 큐비트를 블로케이드 내에 있는 두 리드버그 원자들을 이용하여 연산하여 조절-Z(C_2) 게이트 경우를 생각해보자. 두 원자 중 하나는 조절용(control)이고 다른 원자는 표적용(target)이다. 이 조절 Z-게이트와 $\pi/2$ 회전 연산자를 표적 원자의 $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ 적용하면 CNOT 게이트가 구현이 될 수 있어 중요하다. 먼저 원자의 기저준위를 $|0\rangle$ 과 $|1\rangle$ 로 하고 리드버그 상태를 $|R\rangle$ 이라 하면, 조절 원자가 $|0\rangle$ 에 있고 표적은 $|1\rangle$ 상태에 있는 시스템을 고려하면, 시스템의 양자 상태는 $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$ 으로 표현 가능하다. 2π 펄스를 가지는 레이저의 주파수가 $|1\rangle$ 에서 $|R\rangle$ 로 여기가 가능할

REFERENCES

- [4] C. Monroe and J. Kim, Science **339**, 1164 (2013).
- [5] B. J. Bloom, T. L. Nicholson, J. R. Williams, S. L. Campbell, M. Bishof, X. Zhang, W. Zhang, S. L. Bromley and J. Ye, Nature **506**, 71 (2014).
- [6] T. P. Heavner, E. A. Donley, F. Levi, G. Costanzo, T. E. Parker, J. H. Shirley, N. Ashby, S. E. Barlow and S. R. Jefferts, Metrologia **51**, 174 (2014).
- [7] D. Jaksch, J. I. Cirac, P. Zoller, S. L. Rolston, R. Côté and M. D. Lukin, Phys. Rev. Lett. **85**, 2208 (2000).
- [8] Saffman, T. G. Walker and K. Mølmer, Rev. Mod. Phys. **82**, 2313 (2010).

때, $|1\rangle$ 은 $|R\rangle$ 을 거쳐 $|1\rangle$ 로 밀도 이전되어 π 위상 천이가 일어난다. 또 다른 시스템은 원자의 기저준위를 $|1\rangle$ 과 $|1\rangle$ 로 하고 리드버그 상태를 $|R\rangle$ 이라 하면, 조절 원자와 표적 원자들 다 $|1\rangle$ 에 시스템의 양자 상태는 얽힘에 의해 $|11\rangle$ 으로 표현 가능하다. 그러나 리드버그 원자들의 상호작용에 의한 블로케이드 현상에 의해 두 원자는 동시에 여기가 가능하지 않기 때문에 표적 원자는 $|1\rangle$ 에서 $|R\rangle$ 로 여기가 가능하지 않다. 그러므로 조절 원자의 $|1\rangle$ 상태는 $|R\rangle$ 을 통해 π 위상차가 가능하고 표적 원자는 상호작용이 없어 위상차가 0이 되게 된다. 그러므로 $|01\rangle$ 양자 베이스는 위상차가 π 만큼, $|11\rangle$ 양자 베이스는 위상차가 없는 C_2 양자 연산자를 두 리드버그 원자와 펄스 레이저들을 이용하여 가능하게 된다.

이러한 리드버그 원자를 이용한 양자 연산하는 방법들과 원자 냉각 및 포획 기술들은 최근 활발히 연구되어지고 있어 향후 10년 뒤에는 이러한 리드버그 원자들을 이용하여 큐비트가 증대되고 안정한 양자연산이 가능할 것으로 전망된다.

분자물리 발전방향

이원자 분자에 대한 노벨 화학상 수상은 현재 허시바하 등^[9]이 분자빔을 이용한 냉각된 이원자 분자빔 반응 동력학 연구로 노벨화학상을 수상한 이후로 없었다. 그러나 그 후 분자의 냉각 및 포획 등의 방법에 대한 개발들이 급속도로 진전하여 극저온 상태에 있는 이원자 분자의 화학 반응 연구, 이원자 분자를 이용한 물리상수 등의 초정밀 측정 등의 연구를 통해 향후 이 분야에서 노벨 화학상을 받을 확률이 클 것으로 생각된다.

1. 초냉각 분자의 형성과 응용

이원자 분자는 두 개의 원자들이 스프링에 의해 연결된 것으로 생각할 수 있다. 그러므로 병진 운동만 하는 원자와는 달리 분자 내 두 개의 원자들은 스프링에 의해 진동, 전체가 회전할 수 있으며 병진 운동하는 시스템이다.

100년 전 분자들의 내부 에너지와 속도를 정지 시키려는 노력이 시작된 이후로 현재 많은 연구들이 수행되어져 왔다. 분자 가스들을 노즐을 통해 단열적 팽창을 이용하는 초음속 빔을 통해 내부 온도를 줄이는 방법, 직접적인 분자 속도를 낮추는 방법은 극저온 용기에 냉각된 완충 가스에 의한 분자 혹은 원자의 냉각, 전기장 쌍극자들에 의한 분자의 포텐셜 에너지를 증가시켜 분자의 속도를 줄이는 스타크 감속기, 원자에서와 같은 자기 광학 포획, 스타크 감속기와 자기 광학 포획을 결합한 방법 등을 사용하여 왔다. 하버드 대학의 도일 그룹은 완충 가스를 이용하여 ^4He 를 냉각 시킨 후에 자기장 포획, 표면으로

부터의 증발, 초전도체를 이용한 사중극-이오페 배치 포획, RF 칼을 이용한 과정을 거쳐 5 μK 온도의 보즈-아인슈타인 응축을 이루었다.^[10]

원자 포획 기술의 발전은 보즈-아인슈타인 응축 원자를 생성할 수 있을 뿐만 아니라, 분자의 단일 양자 상태를 준비할 수 있는 수준까지 올 수 있게 되었다. 분자 또한, 이러한 초냉각된 원자들을 이용하여 초냉각된 분자를 얻을 수가 있어 분자의 병진 에너지가 포획된 원자의 냉각 온도에 근접하는 등 많은 발전이 이루어지고 있다. 그러나 현재까지 이중 핵종 이원자 알칼리 분자들에 대한 보즈-응축 현상은 아직 구현이 되고 있지 않은 상태이다. 이러한 분자들에 대한 보즈-응축 연구는 밀도가 높고 초저온 상태에서의 페르미-보손 원자 충돌 현상 규명, 보손-보손 원자, 페르미-페르미 원자 충돌 메커니즘을 통한 분자 형성 메커니즘 규명을 위해 매우 중요하며 새로운 높은 온도 영역에서 볼 수 없는 새로운 화학 및 물리 현상들이 발견될 것으로 전망된다.

이러한 분자 냉각 방법은 1987년 쏘샤임 등에 의해 광연합을 통한 분자 형성 방법이 제안^[11]된 이후로 많은 분자 냉각 연구들이 수행되어져 왔다. 포획된 원자에 광연합 레이저 혹은 자기장을 가해주게 되면 냉각 분자가 형성되게 된다. 그러나 이렇게 형성된 분자는 아직도 기저준위의 해리에너지 근처에 위치한 매우 높은 진동 및 낮은 회전 양자 상태로 있기 때문에 이 밀도를 유도 라만 단열과정(STIRAP) 방법 등을 이용하여 최소 에너지를 가진 기저 에너지 상태 $X^1\Sigma_g^+$ 전자상태로 밀도를 이전하여 내부 에너지를 줄일 필요가 있다.

이러한 기저준위로 밀도 이전된 극성분자들은 충돌에 의한 밀도이완이 방지되고, 극대화된 전기쌍극자 모멘트를 가지게 되어, 양자 상태 조절, 외부장치에서 분자의 조절, 분자 화학반응 조절 등이 여기 준위에 있는 양자 상태들보다 쉽게 된다. 원자가 병진 자유도만을 가진 것에 비해, 분자는 회전, 진동, 전자 내부 구조를 가지기 때문에 더 많은 내부 자유도를 가지게 된다. 이러한 자유도는 장점과 단점을 가지고 있다. 단점은 이러한 자유도를 조절하기가 힘들다. 장점은 자유도들이 조절되는 경우에는 원자와는 달리 기저준위에 매우 큰 영구 쌍극자 모멘트를 가진 냉각 분자들을 전기장이나 자기장을 사용하여 조절하여 전자 상태들을 조절하는 것이 좀 더 쉽게 된다. 예일대학교 드밀은 기저준위로 밀도 이전된 냉각 분자들을 광

REFERENCES

- [9] J. V. Houten, J. Chem. Edu. **79**, 926 (2002).
- [10] S. C. Doret, C. B. Connolly, W. Ketterle and J. M. Doyle, Phys. Rev. Lett. **103**, 103005 (2009).
- [11] H. R. Thorsheim, J. Weiner and P. S. Julienne, Phys. Rev. Lett. **58**, 2420 (1987).

격자에 단일 초냉각 분자를 포획하고 전기장을 이용한 양자 컴퓨터 개발을 제안하였다.^[12] 극성을 가진 이중 핵종 이원자 분자들은 전기장과 극성 쌍극자와의 상호 작용을 사용하여 연속적으로 매우 강력하고, 원거리에서 분자의 양자 상태들을 사용하여 전기장을 이용 격자점에 위치한 분자의 전기장 조절에 의한 큐비트 조절이 가능하게 된다.

원자와 같이 직접 포획을 통한 분자의 속도를 줄이는 방법은 현재 원자에 비해 분자의 많은 회전, 진동, 전자 내부 에너지 구조 때문에 닫힌 사이클링 계를 만들기가 쉽지 않기 때문에 사이클링 계를 만들기 쉬운 특이한 내부 구조를 가지는 분자들에 대해서만 수행이 되어지고 있지만, 새로운 분자 포획 기술과 더불어 새로운 전기가 마련될 것으로 생각된다.

2. 전자의 전기 쌍극자 모멘트 측정

입자 상호 작용을 기술해주는 로렌츠 불변 양자장 이론은 CPT 대칭성을 반영하여 왔다. 그러나 강한 상호 작용에 의해 케이온 입자가 붕괴될 때, CP 대칭성 붕괴가 관찰되어 T 대칭성 또한 붕괴될 것으로 예측된다. 자연의 경이로운 대칭성이 깨지는, 즉 완전함이 없음을 알려주는 신호이다. CP 붕괴는 전기 약력과 쿼크들의 상호작용을 매개하는 입자들을 예측하는 표준모델은 전자를 포함한 입자들이 영구쌍극자 모멘트를 가질 것으로 예측하고 있다.^[13] 전자는 파동과 입자의 이중성을 가지며, 현재까지는 형태를 알 수 없는 음전하를 가진 렙톤이다. 크라이오제닉 컨테이너 내에 있는 냉각 분자의 양자 상태 이중항을 이용한 한 개의 가전자를 가지는 분자를 형성하고, 장시간의 생명 주기를 가지는 양자 상태를 이용하면, 레이저와 분자의 양자 상태와 상호작용 시간이 길기 때문에 물리상수들의 측정 정밀도를 높일 수가 있다. 원자들에 비해 극성 이중 핵종 이원자 분자들은 회전 양자 상태들 간의 작은 에너지 간격으로 야기되는 매우 큰 분극률을 가진다. 또한, 영구 전기 쌍극자 모멘트가 큰 분자를 이용하는 경우 외부 전기장에 기인한 내부 전기장의 세기가 매우 크기 때문에 이에 기인한 전자 상태의 대칭성에 기인한 영향 등을 좀 더 쉽게 관찰할 수가 있다.

이러한 특성을 이용하여 분자들 내에서 아주 작은 대칭-위반 효과에 기인한 신호들을 증폭시키고, 분자들을 전기장 등을 이용하여 조정하기 위한 수단들로 사용 가능하다. 냉각 분자 등을 이용하여 측정 민감도에 있어 100배 이상의 증대를 통해, 표준 모델을 넘는 새로운 물리의 증거들이 발견되어지고 있다. 전자의 전기쌍극자모멘트를 측정하기 위한 많은 노력들이 이루어졌는데 최근 ACME(Advanced Cold Molecule Electron EDM) 협력 기관들은 2014년 ThO 분자를 사용하여 표준모델을 초대칭성을 고려하여 예측된 전자 전기쌍극자 상한인 d_e

$< 8.7 \times 10^{-29}$ e.cm에 접근하는 값인 $d_e = (-2.1 \pm 3.7_{\text{stat}} \pm 2.5_{\text{syst}}) \times 10^{-29}$ e.cm를 얻었다.^[14] 이러한 분자 냉각 기술의 발전으로 좀 더 정밀하게 측정이 가능할 것으로 보여 곧 전자가 전기 쌍극자 모멘트를 가지는가를 확인시켜 주면 또 하나의 전자 특성이 규명될 것으로 보인다.

3. 거대 이원자 분자 형성 및 측정

이원자 분자들의 밀도 분포는 열평형 온도에 따라 기저 전자 상태 퍼텐셜의 최소 에너지 근처(퍼텐셜 곡선의 핵 간 평균 거리 근처)의 진동 및 회전 양자 상태들에 분포하게 된다. 반면에 포획된 원자들을 이용하여 냉각 분자를 형성하는 경우에는 포획된 원자들의 운동에너지(온도)에 따라 핵 간 평균거리에서 멀리 떨어진 수십 Å에서 수천 Å 이상까지 달라질 수 있다. 두 전자 상태들 사이의 전이 확률을 기술하는 프랑크-콘돈 원리에 의하면, 각 전자 상태를 만드는 퍼텐셜 곡선들이 같은 핵 간 거리에 있는 곳에서 처음 전자 상태에서 여기 전자 상태로 레이저에 의한 전자 쌍극자 전이 시 확률이 제일 크게 된다. 그러므로 여기 리드버그 전자상태들의 퍼텐셜 곡선들은 핵 간 거리가 멀리 떨어진 리드버그 전자 상태들을 레이저를 이용하여 매우 약하게 구속된 기저 상태(혹은 자유 원자 상태)로부터 용이하게 관측할 수가 있다.

거대 리드버그 분자를 형성하는 방법들은 다음 4가지로 분류할 수가 있다. 첫 번째는 원자 이온 중심에서 멀리 떨어진 리드버그 전자에 의해 형성되는 리드버그 원자와 같이 분자 이온 중심에서 리드버그 전자가 존재하는 경우이다. 두 번째는 기저준위에 있는 원자와 리드버그 원자 사이의 상호 작용에 의해 형성되는 리드버그 분자들은 삼엽충 형태의 전자 공간 분포를 가지게 된다. 세 번째로 리드버그 원자와 리드버그 원자의 상호 작용에 의해 형성되는 리드버그 분자이다. 네 번째는 원자 음이온과 원자 양이온 쌍에 의해 형성되는 리드버그 분자이다. 이렇게 형성되어진 분자들은 핵 간 거리가 먼 곳까지 전자 밀도 분포가 가능하여 거대 이원자 분자를 형성하게 된다. 또한, 형성된 전자상태들의 퍼텐셜 곡선들은 핵간 거리가 먼 곳까지 진동하는 형태를 가진 하나의 특이한 퍼텐셜이 존재하게 된다. 이러한 특이 퍼텐셜을 원자 핵간 거리에

REFERENCES

- [12] D. DeMille, Phys. Rev. Lett. **88**, 067901 (2000).
- [13] M. Pospelov and A. Ritz, Annals of Physics **318**, 119 (2005).
- [14] J. Baron, W. C. Campbell, D. DeMille, J. M. Doyle, G. Gabrielse, Y. V. Gurevich, P. W. Hess, N. R. Hutzel, E. Kirilov, Kozryev, B. R. O'Leary, C. D. Panda, M. F. Parsons, E. S. Petrik, B. Spaun, A. C. Vutha and A. D. West, Science **343**, 269 (2014).

따라 측정하게 되면 리드버그 분자들의 핵 간 거리에 따른 전자 분포들을 간접적으로 예측할 수 있을 것으로 전망된다.

보즈-아인슈타인 응축체와 전자의 결합에서 전자가 응축체의 크기인 수 마이크로미터 만큼 떨어진 곳에서도 이 응축체와 전자가 상호 작용하는 것을 보여주고 있다.^[15] 이 전자가 리드버그 전자 역할을 하여 분자를 형성하는 모습을 보여주는데, 이러한 현상은 응축체의 상호작용하는 퍼텐셜 거리가 매우 장 거리임을 확인해 주고 있다.

약하게 구속된 초냉각된 리드버그 분자들은 서로 매우 강하고, 장거리로, 비대칭적으로 상호작용을 하며, 매우 큰 분극도를 가지며, 크기가 매우 크고, 생명주기가 매우 긴 특성을 가진다. 특히, 긴 생명주기는 레이저와 분자가 상호작용하는 시간을 길게 하여 양자 정보 응용 등에 매우 유용하다. 또한, 리드버그 원자와 리드버그 원자 사이의 강한 상호 작용에 의해 형성된 분자들은 다체계 효과를 주어 응집물리에서 기존에 예측하고 있는 이론들을 규명하는 데 유용하게 이용될 전망이다. 이러한 초냉각된 거대 리드버그 분자들의 영역은 최근 활발히 연구되어지고 있어 향후 10년 뒤에는 이를 이용한 많은 응용 분야들이 나타날 것이다.

4. 초저온에서 화학반응 제어

미국 콜로라도 대학교 예 그룹은 절대 영도 근처에서 화학적 반응을 관측하였다.^[16] 초저온에서의 화학 반응은 일반적인 고온에서의 경우와는 매우 다른 양상을 보여주고 있다. 기존 고온 가스 상태에서는 상상할 수 없었던 분자 냉각을 통한 단일 양자상태를 준비할 수 있었다. 원자 상호 교환에 의한 화학 반응에 의한 반응 후 발열 현상과 각운동량 장벽의 터널링을 통한 p-파가 우세한 양자 임계 충돌 현상을 관측하였다. 놀랍게도 각운동량 장벽이 없는 s-파 충돌의 경우에는 화학 반응이 10배에서 100배까지 증대되는 것을 확인하였다. 또한, 이들

연구진은 양자 역학적 충돌 현상을 이용하여 극저온에서의 반응 속도를 조절하는 것이 가능하다는 것을 보였으며, 이전에는 알려지지 않은 초저온에서 분자들이 어떻게 상호작용을 하는지를 이해할 수 있게 하였다.

냉각 분자와 냉각 원자 사이의 상호 충돌에 기인한 삼원자 분자의 형성에 대한 이론적 논거는 있으나, 초냉각 상태에서 충돌에 기인한 초냉각된 삼원자 분자 형성에 관한 충돌 반응 메커니즘의 이해와 관측은 매우 중요할 것으로 보인다. 초냉각된 분자를 이용한 가장 중요한 목표들 중의 하나는 분자들의 회전, 진동, 전자 상태들과 같은 내부 상태와 분자들의 속도와 같은 외부상태의 조절을 통해 화학결합의 인위적인 파괴와 인위적인 결합을 형성하는 것이다. 이러한 분자의 상태 조절 기술 발달은 원자에 비해 매우 어려운 기술 중의 하나이나 향후 급속히 진전이 이루어질 전망이다.

결론

원자 및 분자물리 분야에서의 극저온, 정밀 측정, 양자 제어 분야, 극저온에서의 화학 반응 동역학 등의 발전 방향들을 기술하였다. 원자 및 분자물리의 10년 후 모습은 아직도 해결하여야 할 일들이 많을 것으로 생각된다. 2500여 년 전부터 시작된 원자 및 분자물리 분야의 미래는 매우 밝으며, 원자와 분자의 냉각 및 포획 기술은 정밀측정, 제어, 새로운 물리현상 규명 등에 매우 중요한 역할을 함을 알 수 있다.

REFERENCES

- [15] J. B. Balewski, A. T. Krupp, A. Gaj, D. Peter, H. P. Büchler, R. Löw, S. Hofferberth and T. Pfau, *Nature* **502**, 664 (2013).
- [16] S. Ospelkaus, K.-K. Ni, D. Wang, M. H. G. deMiranda, B. Neyenhuis, G. Quemener, P. S. Julienne, J. L. Bohn, D. S. Jin and J. Ye, *Science* **327**, 853 (2010).