

精密数値計算が切り拓く宇宙の量子物質科学

研究代表者	東北大学・理学研究科・教授	研究者番号：10311359
	肥山 詠美子 (ひやま えみこ)	
研究課題情報	課題番号：25A203	研究期間：2025年度～2029年度
	キーワード：有限量子多体系、精密数値計算、高密度核物質、星間分子、重元素合成	

なぜこの研究を行おうと思ったのか (研究の背景・目的)

● 研究の全体像

物理学の大きな研究目的は、宇宙における物質の形成・進化を解明することである。宇宙では図1のように、ビッグバンで生み出された素粒子クォークから陽子や中性子が作られ、これらが集まり原子核、そして電子をまとい原子や分子へと進化した。その後、様々な星が形成されるが、質量が重い恒星は超新星爆発を起こし、最終的に重力で束縛された原子核とも言える中性子星が作られる。この宇宙における物質進化の過程において、解決すべき様々な課題がある。宇宙空間での分子形成はどう進んだのか、ウランなどの重い元素はどのように作られたのか、物質進化の最終形態である中性子星の内部はどういう粒子で形成されているのか、などである。

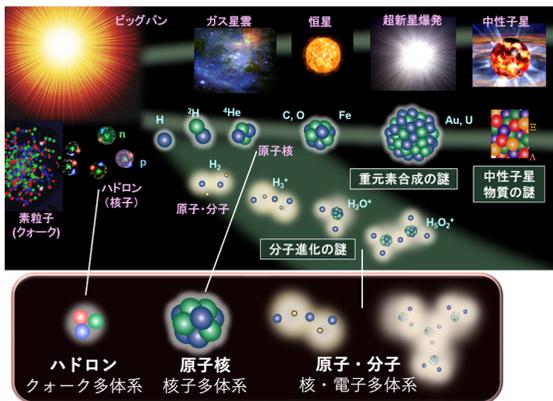


図1：宇宙空間内での物質の進化の過程のイメージ図

これらの課題は、電磁気力や核力が結びついた100体系程度までの有限量子多体系の基礎方程式(シュレディンガー方程式)を高精度で解くことができれば、一気に解決に向かう。しかし、粒子の数が増えると精密計算に必要な計算資源が膨大になるため、精密計算ではなく系の特徴を捉えた理論モデルによる計算が行われてきた。モデル内に存在するパラメータは存在する実験データを再現するよう決めているため、現状の計算手法は信頼度が低く、高精度の実験データの物理的解釈も難しいことや、実験データが存在しない対象には予言力が無いということが大きな問題であった。

そこで、我々は、原子・分子、原子核、ハドロン(クォークの多体系)までの幅広い階層に跨って適用できる画期的な高精度の有限量子多体系計算法を確立し、宇宙の量子物質の形成・進化の研究の質的変革を目指す。具体的には、図2に示すように10程度までの粒子系に適用できる厳密計算法である無限小変位ガウス・ローブ関数展開法(GEM)と、数10から100程度の粒子系に用いられる大規模殻模型(LSM)や密度汎関数理論(DFT)とを融合・統一することで、粒子数が3~100程度の量子多体系を高精度に扱う計算の統一プラットフォームを構築する。そして、この統一プラットフォームをそれぞれの階層の実験研究と組み合わせることで、中性子星内部の構造、星間分子の進化過程や重元素合成過程の解明に挑戦する。

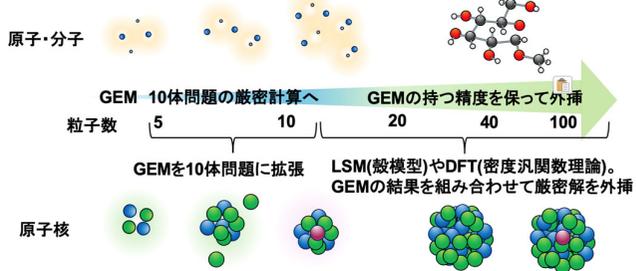


図2：GEMを起点とした有限量子多体系計算プラットフォームの概念図

図3は本領域の全体像を表している。領域の中心に数値計算理論グループ(A01,02,03)を配置し、統一プラットフォームの構築を目指す。そして、実験と共に宇宙の量子物質の進化形成の解明を目指す。

統一プラットフォームを活用した宇宙の量子物質の研究

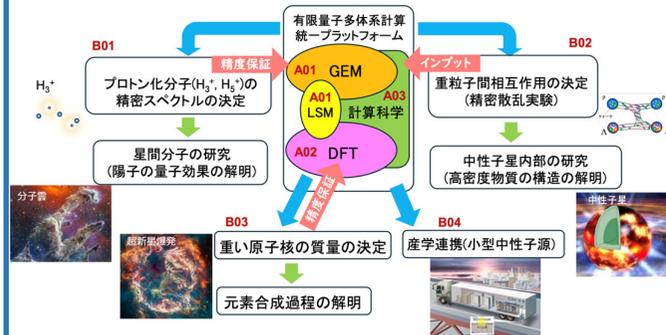


図3：本領域の全体像

B01では、プロトン化分子の精密スペクトルを決定し、星間分子の研究を実施する。B02では、重粒子間相互作用を決定し、それを用いて中性子星内部の高密度物質構造の解明を目指す。B03では、重い原子核の質量と半減期の実験値と理論を比較し、DFTの精度を検証する。そして宇宙の重元素合成過程の解明を目指す。B04は構築した計算プラットフォームの社会貢献を目指す1例として、産学連携の一環である小型中性子源開発に適用する。

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

● 有限量子多体系統一プラットフォームがもたらす変革

世界最速のスーパーコンピュータ「富岳」が登場・運用されたこと、計算アルゴリズムの進化、機械学習を用いたアルゴリズムの登場、計算コストを大幅に減らすことのできる量子アニーリングの登場など計算科学が大きく進展している。計算科学のエキスパートと協働することで、量子多体系の精密計算が現実味を帯びてきた。このような好機を生かして、GEM、LSM、DFTを融合・統一する有限量子多体系計算プラットフォームを構築する。これが、原子核、量子化学研究分野を大きく変革するだけでなく、宇宙の量子物質を取り扱う多くの分野で壁となっていた問題を解決することとなる。

● 原子核の量子効果が星間分子研究を変革

プロトン化分子と呼ばれる H_3^+ や H_5^+ は星間分子雲中に存在し、その高い反応性のために、水や炭化水素などのより複雑な分子の形成の起点になっている。この星間分子形成機構の解明には、分子内のプロトンの量子効果を陽に取り入れた計算が重要になる。本領域では、プロトン核の量子効果を取り入れた H_3^+ や H_5^+ の高精度計算と実験との比較で星間分子進化の解明を目指す。

● 中性子星内部構造の解明へ

中性子星中心部では、通常核密度の数倍以上という高密度核物質が形成されている。このような極限的な環境では、中性子以外にハイペロンと呼ばれるストレンジクォークを含む重粒子が存在すること考えられている。このように中性子星内部構造を理解するには、重粒子間相互作用の理解は必要不可欠であるが、よく分かっていない。そこで、本領域では、重粒子間相互作用の決定のための実験と理論との共同研究を実施し、さらに、重粒子を含む原子核(ハイパー核)の精密計算を実施することで、中性子内部構造の解明を目指す。

● 宇宙の重元素合成の解明へ

GEMを起点としてLSMへと精度を保証しながら、DFTへとつなげた計算法を質量数が100程度までの重い原子核の質量を計算する。一方で、実験では希土類の原子核の質量を中心に高精度で測定する予定で、実験値と理論値を比較することで、DFTの精度保証を実施する。本領域終了後には、実験で測定不可能な領域の原子核の質量をDFTで予言できるDFTの構築を目指す。数値実験で、宇宙の重元素合成の解明が究極の目的である。

● 産学連携への波及

本領域では、橋梁などの社会インフラの非破壊検査に利用できる小型中性子源にも貢献できる。低エネルギーの陽子を 9Be や 7Li に照射したときの中性子スペクトルや高速中性子と物質との反応断面積を、本領域の統一プラットフォームで高精度に求めることで、理研の小型中性子源RANS開発を後押しする。