

論文の内容の要旨

論文題目

Uncertainty quantification in configuration interaction methods for nuclear many-body problems

(核子多体問題のための配置間相互作用法における不定性の評価)

氏名 吉田 聡太

原子核は核子(陽子・中性子)を基本構成要素とする多体系である。原子核物理における究極の目的の一つとして、核子間に働く核力を出発点に、種々の原子核の様々な静的性質(核構造)/動的性質(核反応)を解明し、宇宙における物質創成の足跡を明らかにすることが挙げられる。この目的に向けた微視的かつ定量的な原子核の理解は依然として困難であるが、その主たる原因は核子間に働く基本相互作用である核力に係る原理的な困難と、その核力が織りなす有限核子多体問題の計算物理的側面からの困難の2点である。

核力の難しさは端的に言えば強い相互作用の基礎理論である量子色力学(QCD)が、核子の自由度が顕となるような低エネルギー領域で持つ非摂動的な性質に由来している。また、有限核子多体系である原子核は、陽子や中性子の数が1つ変わるだけで、時として予想だにしない劇的な性質の変化を見せる。このことは、原子核の性質、とくに本論文で関心のある静的性質を定量的に説明するためには、核子の自由度をある程度陽に扱った計算が必須であることを示唆している。

上記の2点に対するこの10年の進展として[QCDの持つ対称性・破れの情報を持った低エネルギー有効理論であるカイラル有効場の理論に基づく核力の記述]と、[第一原理計算の発展]の2点が挙げられ、核力に依拠した微視的な核構造の理解が得られつつある。

一方で、理論計算自体に存在する種々の不定性を評価することは、核力・多体手法への深い理解をもたらすとともに、模型に依存しない普遍的な核構造の理解へとつながる重要なトピックであるものの、これまで核力や多体手法に由来する不定性を物理量に適切に伝播したり、多体手法自体に由来する不定性を評価する方法論の研究は十分であったといえず、質量公式などの原子核のバルクな性質に対する考察に留まっていたのが実情である。

本論文では、原子核構造の理論計算において極めて重要な役割を担っている理論模型である2種類の配置間相互作用法において種々の不定性を評価する方法論を提唱し、その解析を行った。

1つは、殻模型と呼ばれる、閉殻芯を仮定することで全核子の固有値問題をバレンス核子の固有値問題に落とし込む手法に関連した不定性評価の方法論である。本文の3章を中心に、バレンス核子に働く有効核力に存在する不定性を物理量に適切に伝搬する一般的な手法を議論している。これは原子核構造の理論計算において系統的に励起スペクトル等に相互作用由来の不定性評価を与えた初めての仕事である。さらに、こうした不定性の情報が、理論自体の妥当性の指標や、核内に含まれる新奇な核構造の存在を示唆する指標として使える可能性を示した。

2つめは、閉殻芯の存在を仮定しない no-core shell model や full configuration interaction と称される第一原理計算に関連した手法である。通常この計算手法では、核子の取りうる配位を限定した計算を、条件を緩和しながら複数行い、その計算結果の点列を用いて外挿を行うことで厳密解を推定する。この外挿を実現する様々な方法が提案されてきたものの、外挿に由来した結果の不定性はほとんど議論されてこなかった。また、外挿の多くは特定の関数系を仮定することで行われるが、関数系の選択の非自明さや外れ値に対する堅牢性の乏しさなどの問題が懸念される。このことは、中性子や陽子が過剰な原子核の存在限界や核子多体系の最大の特徴である3体力の効果等を理論的に明らかにする上で致命的な問題である。そこで本論文では、ガウス過程を用いた関数生成モデルに基づく新たな外挿手法を提案している。この手法は、系統的な外挿由来の不定性評価を与えるだけでなく、比較的少数の点列を用いて外挿が可能であるなど、従来法に比べて多数の利点を有している。

上記のように本論文の主な研究対象は不定性評価の方法論であるが、そのインパクトは単に[理論予測にエラーバーをつけること]に留まらない。種々の不定性評価により核力(とくに不定性の大きな3体力)に対する重要な制限を与えたり、多体計算手法において実用的観点から導入される様々な近似(高次項の打ち切りなど)の正当性の検証にも欠かせない情報を与えると期待される。これらは、実験的検証が困難な質量領域における原子核の性質の理論予測を目指す上で不可欠なものである。