

AI を使った原子核のモデリング

～未知の原子核の形を予言～

ポイント

- ・機械学習を用いた原子核モデルの最適化に成功。
- ・経験的なパラメータチューニングなしに原子核の形を予言することが可能に。
- ・基礎物理の問題解明、社会的応用への貢献に期待。

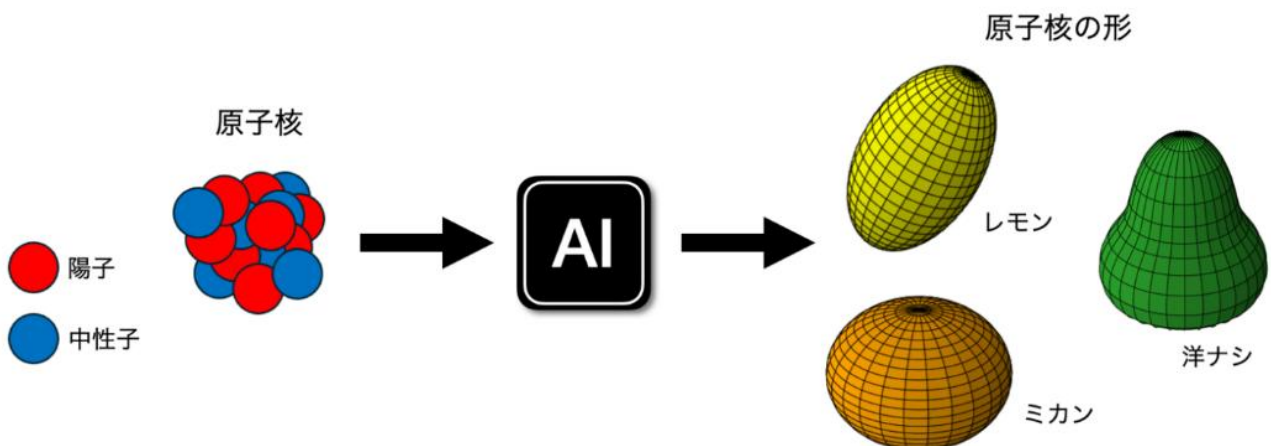
概要

北海道大学大学院理学研究院の野村昂亮准教授らの研究グループは、AI の機械学習を用いることにより、原子核の形を予言することに成功しました。

原子核は全体として変形し、振動や回転といった集団運動を起こします。原子核の形と集団運動が生じる微視的なメカニズムの解明は、現代の原子核物理学における中心的な課題です。集団運動の模型である「相互作用するボソン模型 (IBM) *1」は、原子核構造の研究に大きな成功を収めてきましたが、現象論的であり、微視的な理論による基礎づけが必要とされてきました。近年、野村准教授らが中心となって最先端の量子多体理論に基づいた IBM の定式化が行われ、未知の原子核に関する予言も含め、集団運動研究に幅広く用いられてきました。その一方、パラメータが原子核ごとに決められていたことから、その系統的な振る舞いに関して経験的知識に基づく最適化が必要になるという問題がありました。

本研究では、物理的な要請を適切に反映したニューラルネットワークを構築し、IBM のパラメータを一意に決定することに初めて成功しました。集団運動の特徴的な性質を再現することでその有効性が示され、理論研究における問題が解決されることとなりました。AI 技術を応用することでエキゾチックな原子核の形と集団運動を予測できることが本研究によって示され、原子核の全貌解明に向け大きく前進しました。今後、不安定核*2の構造と反応に関して従来よりも高い精度で理論値を提供できることが期待され、基礎物理の問題解明のみならず社会的応用への貢献も期待されます。

なお、本研究成果は、2026年5月8日(金)公開の Physics Letters B 誌にオンライン掲載されました。



原子核は陽子と中性子が相互作用することで変形し、レモン型、ミカン型、洋ナシ型などの「形」を持つ。変形した原子核は振動、回転といった集団運動を起こす。AI の機械学習を組み込んだ原子核構造計算により、集団運動を予言することに成功した。

【背景】

原子核は陽子と中性子から構成される多体系です。原子核の多くは変形しており、レモン型、ミカン型など様々な幾何学的な形状を持ちます。変形した原子核は、振動や回転といった核全体としての挙動「集団運動」を起こします。量子力学に支配される複雑な多体系である原子核が、そもそもどうして形を持ち、集団運動を起こすのか。そのメカニズムの解明は原子核物理学における難問の一つです。

集団運動のモデルである相互作用するボソンモデル (IBM) は、原子核構造の理論研究に大きな成功を収めてきました。従来の IBM を用いた研究は、実験データを再現しうるようにパラメータが決められていたことから、適用範囲が実験データの存在する原子核に限定されていました。核子の自由度から出発した、IBM の微視的な基礎づけの研究もなされてきました。特に 2000 年代後半に野村准教授らにより、核多体系の微視的理論である「密度汎関数理論 (DFT) *3」に基づいて IBM のパラメータを導く手法が提唱されました。これにより IBM に予言能力が付与され、未知の原子核に対する定量的な予言が可能となるなど、集団運動の研究の可能性が広げられてきました。その一方、パラメータの決定が原子核ごとに行われるため、核子数の関数としてパラメータが緩やかに変動しうるように、経験的な知識に基づいた最適化が必要になるという問題がありました。

近年、人工知能 (AI) が著しく発展し、日常生活にも欠かせないツールとなりました。原子核物理学の研究でも、大量に生み出されるデータを効率的に処理するために、機械学習を用いた AI の応用がなされるようになってきました。原子核の集団運動の研究にも機械学習が用いられてきましたが、教師データとして実験データを用いていたため、理論的な基礎づけがなく予言能力に限界がありました。微視的な原子核構造理論と、AI (機械学習) を融合した方法論が求められていました。

【研究手法】

本研究は、上記の DFT に基づいた IBM のパラメータ決定法を踏襲していますが、オリジナルな点はそのプロセスに機械学習を実装したことです。この方法論では、変形度の関数として定義される原子核の基底状態*4 での全エネルギー (変形エネルギー面) を DFT によって計算し、それを再現しうるように IBM のパラメータが決定されます。本研究では、DFT から得られる、多数の原子核の変形エネルギー面を教師データとし、これを再現しうるような IBM のパラメータを出力するニューラルネットワークを構築しました (図 1)。ネットワークへの入力として、価核子*5 数と、それに関連する、集団運動性の指標となるある物理量を採用しました。隠れ層には、集団運動において本質的な物理的制約をパラメータに課しました。このニューラルネットワークの画期的な点は、物理層を組み込んだことであり、出力層のモデルパラメータと入力の情報をもとに、DFT の変形エネルギー面を再現するように学習を行います。学習したモデルから得られるパラメータを用いて IBM のハミルトニアン*6 を対角化し、その結果得られるエネルギースペクトルの振る舞いを解析しました。

【研究成果】

ベンチマークとして、今回構築した物理ニューラルネットワークを、強い集団運動性を示す代表的な原子核であるサマリウム同位体*7 に適用しました。サマリウム同位体では、中性子数の増加に伴って、核の形状が球形からレモン型に遷移します。このような核構造の変化は、特定の中性子数の付近で急激に起きる場合があり、核形状の相転移*8 として知られています。形状相転移を特徴づける物理量の一例として、ここでは、基底バンドの第 1、第 2 励起状態*9 のエネルギー比を考えます。図 2 から、中性子数の増加に伴い、エネルギー比が振動極限 ($R=2$) 近傍から回転極限 ($R=3.33$) 近傍に急

激に大きくなるという、形状相転移に特有の傾向が読み取れます。

AI を実装することにより、経験的な補正を施すことなく IBM のパラメータを一意に決定することが本研究で可能となり、10 年来の理論的な困難を打破することとなりました。

【今後への期待】

原子核模型の最適化に AI 技術を用いることで、様々な可能性が開かれます。原子核にはまだ実験で観測されていないエキゾチックな形状（洋梨型、バナナ型など）が示唆されています。これらは不安定核ビームを用いた最新の加速器実験でのフロンティアであり、それに関連する理論的予言を与えることは、原子核の全貌を解明するための重要なステップとなります。長期的な観点からは、原子核構造に関する包括的な理解を深めることにより、元素合成過程で重要な原子核反応、核崩壊を精度良く予言でき、物質の起源の解明といった基礎物理の発展に貢献できることが期待されます。また、放射性崩壊や核融合などの確率を AI によって評価することで、人為的なエラーを大幅に削減できるなど、社会的な応用も期待されます。

【謝辞】

本研究は JSPS 科研費 JP25K07293 の助成を受けたものです。

論文情報

| | |
|-----|---|
| 論文名 | Microscopic derivation of the interacting boson model parameters with machine learning (機械学習を用いた相互作用するボソンモデルパラメータの微視的導出) |
| 著者名 | 小島弓空 ¹ (研究当時)、野村昂亮 ² (¹ 北海道大学大学院理学院、 ² 北海道大学大学院理学研究院) |
| 雑誌名 | Physics Letters B (自然科学の専門誌) |
| DOI | 10.1016/j.physletb.2026.140522 |
| 公表日 | 2026年5月8日(金) (オンライン公開) |

お問い合わせ先

北海道大学大学院理学研究院 准教授 野村昂亮 (のむらこうすけ)

T E L 011-706-2684 メール nomura@sci.hokudai.ac.jp

U R L <https://nt.sci.hokudai.ac.jp/nomura/>

配信元

北海道大学社会共創部広報課 (〒060-0808 札幌市北区北 8 条西 5 丁目)

T E L 011-706-2610 F A X 011-706-2092 メール jp-press@general.hokudai.ac.jp

【参考図】

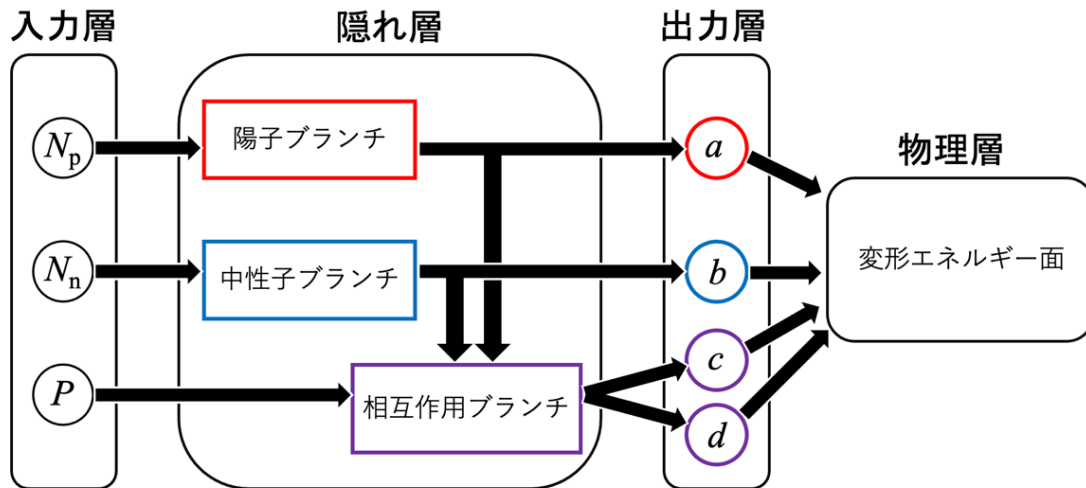


図 1. 本研究で構築したニューラルネットワークの模式図。入力は価陽子数 (N_p)、価中性子数 (N_n)、及びそれらの和と積の比として与えられる因子 $P [=N_p N_n / (N_p + N_n)]$ 。IBM には四つのパラメータ (a , b , c , d) が存在し、それらの値が出力層で得られる。隠れ層ではパラメータ a と b がそれぞれ、陽子ブランチと中性子ブランチを通して N_p と N_n にのみ依存し、残りの二つのパラメータ (c と d) は陽子、中性子、相互作用ブランチを通して N_p 、 N_n 、 P 全てに依存するという物理的制約を課した。出力層のパラメータ値によって決まる IBM の変形エネルギー面を、物理層とする。出力層の IBM のパラメータと入力層の情報をもとに、DFT の変形エネルギー面を再現するように学習を行う。

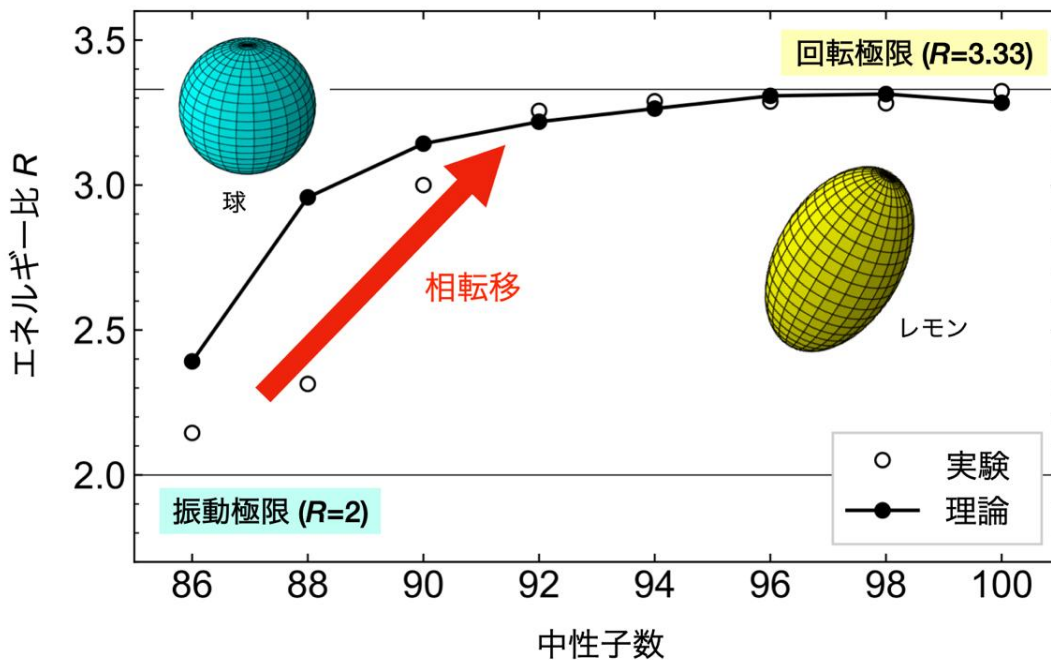


図 2. サマリウム同位体のエネルギー比 R の理論値と実験値を中性子数の関数として示した。中性子数が 86 近傍ではこの比が振動極限の 2 に近く、中性子数 92 以上では回転極限の 3.33 に近づく。その中間の 88 または 90 の中性子数では比が急激に大きくなるが、この振る舞いは、振動状態から回転状態への相転移と考えられる。振動状態にある原子核の形状は球形に近く、回転する原子核は楕円体(レモン型) 変形を呈している。

【用語解説】

- *1 相互作用するボソン模型 (IBM) … 核子のペアを仮想的なボソンと呼ばれる粒子で表すことで原子核の構造を記述する模型のこと。
- *2 不安定核 … 天然には安定に存在せず、短寿命で放射性崩壊に対して不安定な原子核のこと。
- *3 密度汎関数理論 (DFT) … 原子核の状態を、核子の密度を用いて計算する理論的手法のこと。
- *4 基底状態 … 原子核は飛び飛びのエネルギーの値を持つが、そのうちの最低エネルギー状態のこと。
- *5 価核子 … 特定の陽子数または中性子数において原子核が特に安定となり閉殻構造を持つが、その外側に存在する核子のこと。
- *6 ハミルトニアン … 量子力学において、系の全エネルギーを与える物理量のこと。
- *7 同位体 … 陽子数が共通で、中性子数の異なる原子核。
- *8 相転移 … 系のある相から、別の相に変化する現象で、様々な物理系で見られる。
- *9 励起状態 … 原子核において、基底状態よりもエネルギーの高い状態のこと。