

IV. 量子物性研究部門

1. メンバー

教授	大谷 実
准教授	小泉 裕康、全 暁民
講師	前島 展也
助教	萩原 聡
研究員	石橋 章司、中西 章尊
学生	大学院生 6 名、学類生 3 名
客員教授	小野 倫也（神戸大学）

2. 概要

本部門では、超電導体や強相関物質、トポロジカル物質、電気化学系など、幅広い物質を対象に、量子力学に基づく第一原理計算手法を駆使してその性質を理論的に解明・予測しています。特に、電極－電解質界面の電子状態解析や光と物質の相互作用の実時間シミュレーション、さらには新機能材料の設計などを通じて、持続可能な社会に資する基礎科学と応用技術の橋渡しを目指しています。

3. 研究成果

[1] 二次元材料／水界面における電位応答と構造変化（大谷）

近年、温室効果ガス排出削減と再生可能エネルギーの大規模利用に向けて、二次元材料を電極に用いた次世代の電気化学デバイスや光触媒材料の開発が活発に進められている。中でも単層 MoS_2 は、その特異な電子構造と表面活性の高さから有望な候補材料として注目を集めている。しかしながら、これら電極／水界面の挙動を支配する界面水分子の動的応答や、電位と界面構造との相関については、実作動環境下（電位印加状態）における原子レベルでの直接的な解明が依然として不十分であった。

そこで本研究では、単層 MoS_2 と溶媒水から成る界面モデル（図 1:a）に対して第一原理分子動力学法（AIMD）を適用し、計算セル内の表面電荷密度（Surface Charge Density）を -10 から $+2 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ の範囲で変化させることで電極電位を制御するとともに、計算上のフェルミ準位を標準水素電極（SHE）基準と対応付ける電位制御スキームを確立した（図 1:b）。その結果、電極表面の電荷密度に応じて界面水分子がその配向を反転させる Flip 挙動を特定し（図 1:d）、これが電気二重層内の電荷遮蔽機構に直接寄与していることを明らかにした。さらに、酸素－酸素（O-O）間の動径分布関数の推移（図 1:c）や密度プロファイルが電位（電荷密度）の変化に伴い系統的に変化し、界面特有の水の構造が再編成される様子を捉えることに成功した。本研究は、電圧印加に伴う界面水のミクロな応答を原子レベルで解明したものであり、実環境下でのデバイス性能や反応効率を予測するための高度な計算基盤を構築した点で意義深く、今後の二次元材料を用いた電気化学・光触媒デバイス設計に対して重要な指針を提供するものである。

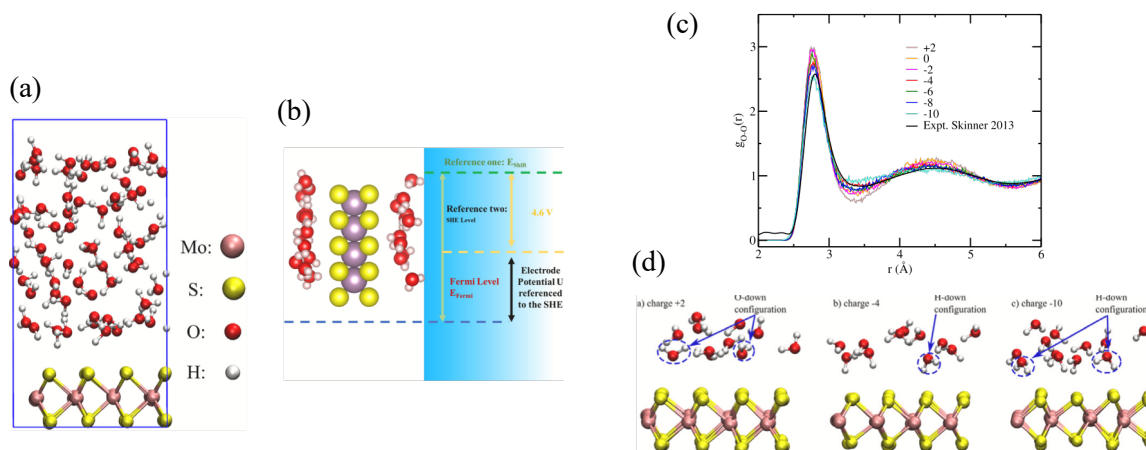


図 1: (a) 単層 MoS_2 + 水分子のシミュレーションセル スナップショット、(b) フェルミ準位と SHE 基準を対応付ける電位制御スキーム、(c) 表面電荷密度変化に伴う O-H 動径分布関数の推移、(d) 3 種類の表面電荷（正・中性・負）における MD 終了時スナップショット（Flip 挙動）。

[2] BCS 理論を包含する新しい超伝導理論（小泉）

多電子波動関数から創発されるベリー接続を取り入れた、超伝導を含む電気伝導理論を構築した。この理論は、現在の標準理論 BCS 理論を包含するより普遍的な超伝導理論となっており、長年懸案となっている銅酸化物高温超伝導の解明に導くと考えられる。本年度の成果として、この研究は量子状態の時間発展として、ユニタリ演算子による時間発展のほかに、アイソメトリ演算子による時間発展を含むことが示された。これは、純粋状態から混合状態への時間発展を可能にする。

[3] スピン渦誘起ループ電流を利用した量子ビット（高津，小泉）

上記新理論によると、銅酸化物高温超伝導は、スピン渦誘起ループ電流を生じることが示される。我々は、そのループ電流を量子ビットとした量子コンピュータを理論的に考察している。銅酸化物 $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ (Bi-2212) は、劈開により良質な CuO_2 2 重層薄膜を取り出すことができるが、その薄膜上にナノサイズの量子ビットアイランドを作成し、量子ビット基板とするアーキテクチャーについて、シミュレーションを行っている。本年度はアイランドの数を 5 にしたシミュレーションを行った。その結果、CCCCNOT ゲートなどの複雑な量子ゲートが簡単に実現できることが示された。

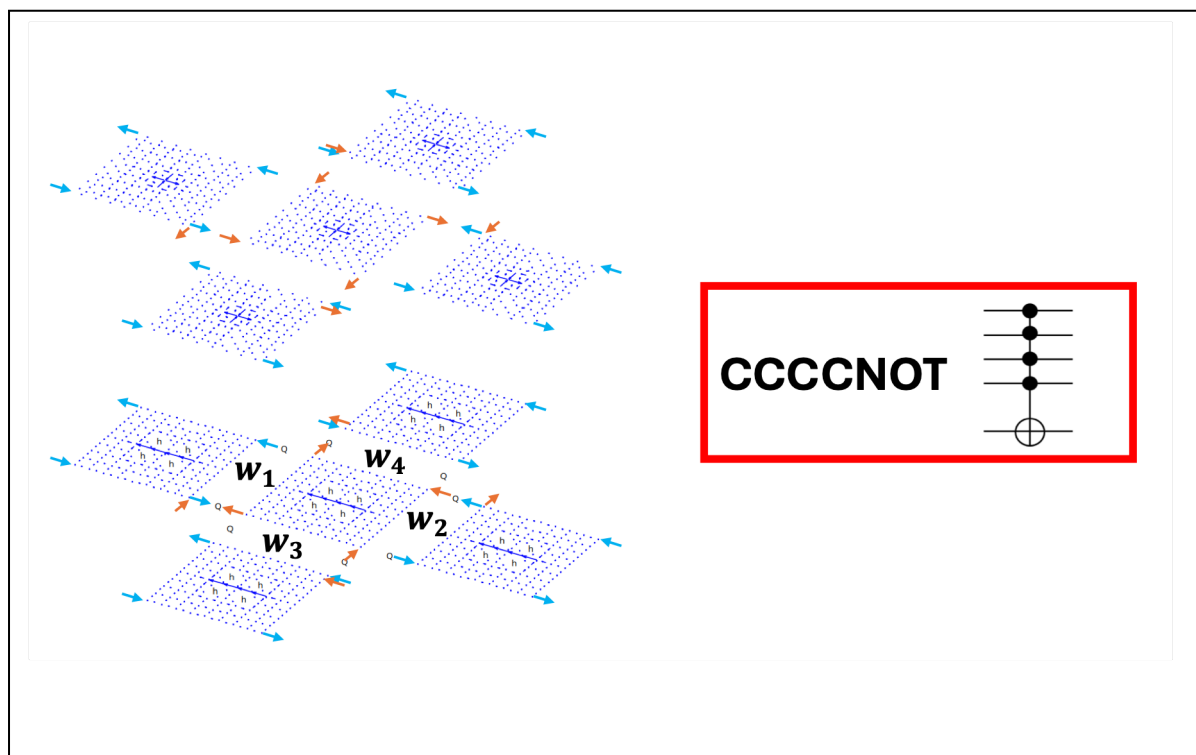


図2: 銅酸化物Bi-2212の2重層薄膜1枚からなる5つのナノアイランドとそれを繋ぐ量子ドットからなる量子ビット系。各アイランドには2量子ビット相当の量子状態が存在する。外部電流（矢印）の印加により、量子状態を制御できる。異なるアイランドに存在する量子ビットはカップリング電流（ w_1, w_2, w_3, w_4 で特徴付けられる）でカップリングのon-offが可能である。複雑なCCCCNOTゲートも比較的簡単に実現できる。

[4] 強相関物理系としての自然言語と量子コンピュータによる自然言語処理（伊禮, 堀内, Azir, Nguyen, 小泉）

量子コンピュータのキラーアプリとして量子自然言語処理について研究を行っている。特に現在の大規模言語モデルが苦手としている感情分析についての分類問題を扱っている。そして、日本語と英語を比べると文法の違いが、感情表現に影響していることが示唆される結果が得られた。日本語は、英語よりも少数の単語で、複雑な感情を表すことができている可能性がある。

[5] 電子 K X 線によるミュオン Ar イオン構造の確認 (全)

多価ミュオンイオンは、負に帯電したミュオンと少数の電子が単一の原子核に同時に結合した、ユニークな少粒子原子系である。我々は、遷移端センサーマイクロカロリメーターアレイを用いた電子 K X 線分光法により、多価ミュオンアルゴン (μ Ar) の状態選択的観測に初めて成功したことを報告する。高精度な K X 線スペクトルからは、1 個、2 個、3 個の電子を持つミュオン原子、すな

わち H 様、He 様、Li 様 μ Ar の存在が明確に示された。理論計算を用いて、図 3 のようにピーク位置が多価 Cl イオンからの X 線エネルギーと一致すること、また強度が高度に電荷を帯びた μ Ar の脱励起ダイナミクスを反映していることを確認した。本研究は国際共同研究の結果として、科学雑誌『Physical Review Letters Phys. **134**, 243001:1-7 (2025).』に発表した。

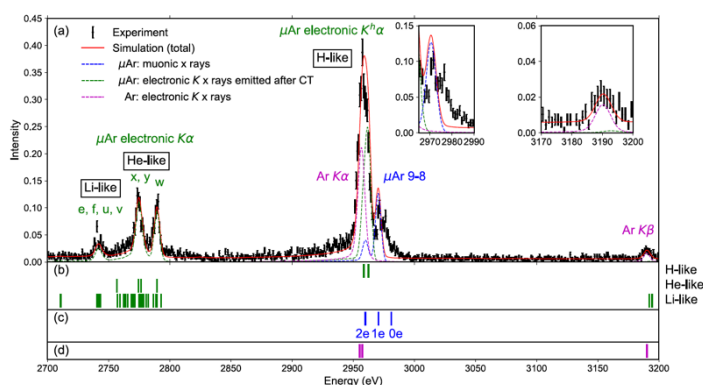


図 3: 多価ミュオンイオンにおける K X 線の観測と理論計算の比較。

[6] レーザーを用いた原子間クーロン減衰ダイナミクスの制御 (全)

クーロン減衰ダイナミクス(ICD)プロセスを初めて特定した実験研究以来、数多くの研究によってその複雑な性質が解明されてきた。X 線イオン化の後、照射された部位とその周囲環境との間の超高速な相互作用により、初期の直接イオン化電子に続いて低エネルギーの ICD 電子が生成される。X 線イオン化空孔を埋める電子が同一原子に由来し、崩壊速度が環境に本質的に依存しない、よりよく知られたオージェ緩和過程とは対照的に、ICD 過程は本質的に複雑である。したがって、低エネルギーの ICD 電子は、ICD 速度と分子核波束 (NWP) の運動との結合により、広いエネルギースペクトルを示す。ここでは、XUV 放射によって非平衡ダイナミクスを開始した後、Ar 二量体の結合切断を制御することを可能にする、価電子、リドバグ電子、および内殻価電子遷移を含む高度な制御メカニズムである、レーザー誘起 ICD (LE-ICD) プロセスを実証する。ここでは、XUV および IR パルスが ICD 反応を開始・制御する、いくつかの非平衡ダイマーダイナミクスの経路について論じる。図 4 は、二重イオン化領域付近のポテンシャルエネルギー面を示している。

XUV パルスによって開始される NWP 経路は、ポンプ用 XUV パルスによる ICD プロセスの誘発を避けるように選択された。その後、制御用 IR パルス経路を用いて、LE-ICD が始まる原子間距離を正確に設定する。また、縮小するダイマーが小さな R_s で捕捉され、元

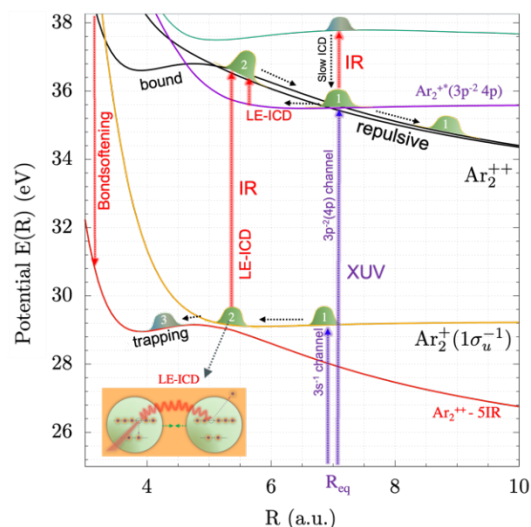


図 4: Ar_2 における XUV 誘起・IR 制御型 ICD ダイナミクス。

のダイマーサイズの半分となる準安定ダイマーが形成される仕組みについても示す。国際共同研究の結果として、国際会議に発表した。

[7] S=1/2 量子 zigzag 梯子における熱力学量の有限温度 DMRG・TEBD 計算（前島）

有限温度における密度行列繰り込み群(DMRG)、および、Time-Evolving Block Decimation (TEBD)を用い、S=1/2 量子 zigzag 梯子における熱力学的性質に対する数値解析を行った。この系は次近接相互作用 J_2 に由来するフラストレーション効果を持ち、また J_2 に加えて磁場 H を制御することで多様な量子相を実現することが知られている。弱いフラストレーションを持つ場合 ($J_2 = 0.2$)、朝永ラッティンジャー液体相(TLL1)と量子臨界相(QC)の間のクロスオーバー領域のウィルソン比 R_w に深い谷構造(値の小さい領域)が明確に現れることを見出した。この谷構造はフラストレーションの増大とともに明瞭化することが分かった(図5)。

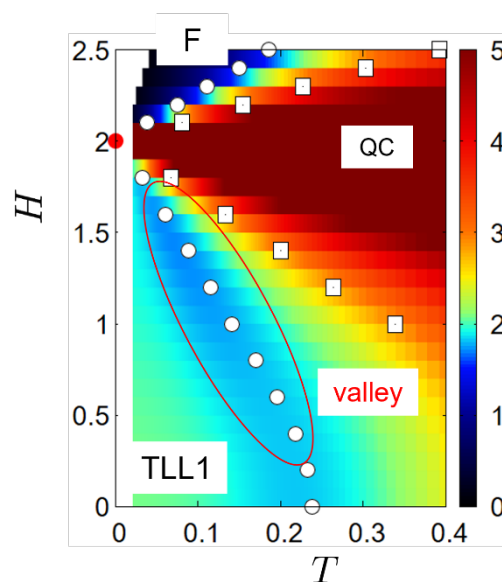


図5: S=1/2 ジグザグ梯子($J_2 = 0.2$)におけるウィルソン比 R_w 。

更に、強いフラストレーションを持つ場合(右 $J_2 = 1.0$)の各種磁場誘起相の相境界近傍において、磁気グリューナイズンパラメータ G_H が温度低下とともに相境界近傍で特異的な振る舞いを示すことが分かった(図6)。特に高磁場領域の vector chiral (VC) 相と朝永ラッティンジャー液体相(TLL2)とではスピン相関などの主要な物理量に明瞭な違いが期待できないため、 G_H は両相を区別する重要な物理量であることを見出した。

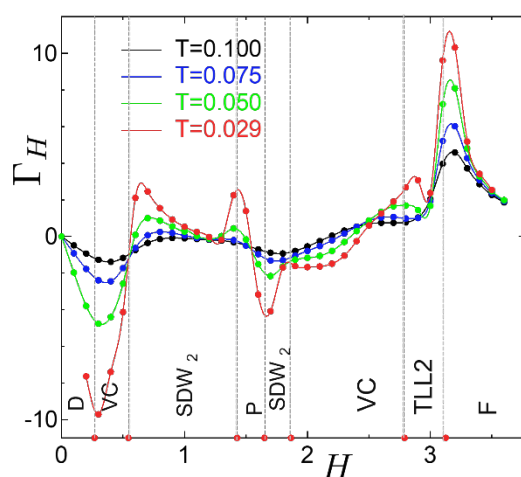


図6: S=1/2 ジグザグ梯子($J_2 = 1.0$)における磁気グリューナイズンパラメータ Γ_H 。

[8] 第一原理計算と古典溶液理論を組み合わせた電気化学界面計算手法の実装（萩原）

電極と電解液の界面で構成される電気化学界面は化学反応場として機能する。ここで起こる電気化学反応は、二次電池の充放電反応、電極触媒反応や水電解反応を利用した電気化学デバイスの機能向上のために欠かせない。本研究では、密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一

原理計算により電極と反応体を取り扱い、溶液による溶媒和環境を古典溶液理論で扱う、有効遮蔽媒質 (ESM) 法と三次元 reference interaction site model (3D-RISM) 法を組み合わせた ESM-RISM 法の再定式化と効率的な実装方法を提案し、実際の固液界面の問題へ適用した。オリジナルの ESM-RISM 法は、電極表面面内方向を周期的に扱い、電極表面垂直方向を開放端条件で扱う Laue 表示した RISM (LRISM) 方程式を解くことで半無限溶液を取り扱うことが可能である。しかし、LRISM 方程式を解く上で非物理的な近似を行うため、理論のベースである 3D-RISM 法からその結果が逸脱する点と、LRISM 方程式を愚直に解いたことによる 3D-RISM 法より高いオーダー $N^4/3$ の計算コストが必要な点に問題がある。本研究では、定式化の段階から非物理的な近似を排除し、LRISM 方程式の解き方を見直すことで、その計算コストを 3D-RISM 法と同じオーダー $M \log N$ に抑えることに成功した。再定式化した ESM-RISM 法は、DFT 計算プログラム QMAS (Quantum Materials Simulator) に実装した。

計算精度の確認のため、ESM-RISM 法と 3D-RISM 法により計算した単一の水分子に対する溶媒和自由エネルギーを比較した。オリジナルの ESM-RISM 法と 3D-RISM 法による溶媒和自由エネルギーの差は 0.1 kcal/mol のオーダーで結果がずれるのに対して、今回再定式化した ESM-RISM 法と 3D-RISM 法の差はおよそ 1×10^{-4} kcal/mol 程度であった。そのため、本研究で開発した計算精度の範囲内で十分に同じ結果に収束することを確認した。次に、燃料電池や水電解で重要となる白金電極/1.0 mol/L HCl 水溶液界面における水素原子吸着サイトの電極電位依存性を、グラントポテンシャル Ω を用いて調べた。標準水素電極 (SHE) 電位から電位を上げると、+0.5 V vs SHE 程度までは FCC hollow site が安定吸着サイトであり、それ以上の電位では、 $\text{H}_3\text{O}^+(\text{aq})$ の状態が安定であることがわかった。一方、SHE 電位から電位を下げると、-0.75 V vs SHE 程度までは FCC hollow site が安定であるが、さらに電位を下げると on-top サイトが熱力学的に安定化することがわかった。

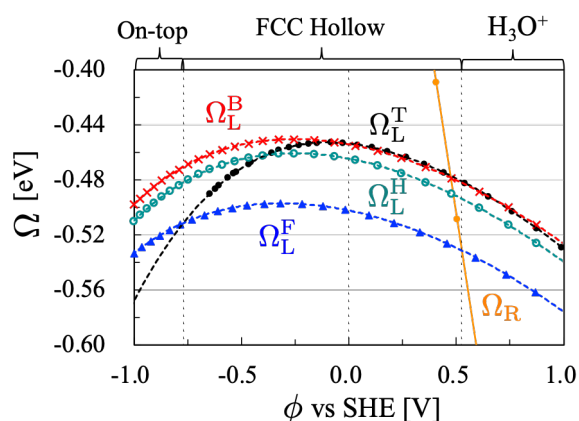


図 7: 各吸着サイトにおけるグラントポテンシャルの電位依存性。T, B, H および F は on-top, bridge, HCP hollow および FCC hollow。Ω_R は、 H_3O^+ の状態。

4. 教育

1. 坂野修也、物理学学位プログラム、“孤立原子における SCAN 系交換相関汎関数の数値解析と LDA・PBE との系統的比較”
2. 服部航大、理工学群物理学類、“第一原理計算による Si(111) 表面エネルギー収束性と bulk 参照エネルギーの取り方”
3. Muhammad Aniq Iabal Bin Muhammad Azir、総合理工学学位プログラム PBL (Project-based Learning)、“Enhancing Quantum NLP pipelines”

5. 受賞、外部資金、知的財産権等

受賞

該当なし

外部資金

1. 大谷 実、富岳成果創出加速プログラム「物理-化学連携による持続的成長に向けた高性能・長寿命材料の探索・制御」（2023-2025）直接経費 18,000 千円
2. 全 曉民、基盤研究 C、代表、令和 7 年、520 千円（総額：4160 千円）、
Coherent Control of Atomic Excitation in Strong Fields
3. 前島 展也、科研費:基盤研究(C)、代表、2024 年度(継続)、
4,680 千円(2025 年度: 700 千円)、
「光共鳴励起により誘起されるフロケワイル半金属の創成と物性の解明」
4. 萩原 聡、科研費若手「半無限固液界面における第一原理計算手法の開発とその応用」
(2022-2026) 直接経費 2,900 千円

知的財産権

該当なし

6. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. K. Nakamura, N. Takenaka, S. Hagiwara, M. Otani, and A. Yamada, “Kinetic suppression of anion intercalation into cathode conductive carbon in high-voltage lithium batteries”, ACS Applied Materials & Interfaces.17(44),61439–61444 (2025). DOI:10.1021/acsami.5c14007
2. S. Hagiwara, T. Murata, and M. Otani, “Anion Adsorption-induced Charge Separation at the Alumina/Aluminum Interface”, Corrosion Science, 256, 113150 (2025)
DOI:10.1016/j.corsci.2025.113150
3. S.-H. Pan; M. Otani; T. Miyazaki; J.-C. Jiang, “Unraveling the Nitrogen Fixation and Electrochemical Reduction to Ammonia on IrO₂ (110): DFT, ESM-RISM, and Microkinetic Simulation”, Journal of Catalysis, 453 116566 (2026). DOI:10.1016/j.jcat.2025.116566
4. F. Mortiera, D. Zhaob, M. Otani, S. Bernarda, Y. Wang, and A. Bouzid, “First-principles investigation of electrified monolayered MoS₂/water interface”, Surface Science 764, 122870 (2026). DOI:10.1016/j.susc.2025.122870
5. S. Hagiwara, and M. Otani, “An Efficient Implementation of the ESM-RISM Method for Simulating Electrode/Electrolyte Interfaces”, Journal of Chemical Theory and Computation, 22, 3633 (2026). DOI:10.1021/acs.jctc.5c01920
6. H. Taya, Y. Takatsu, H. Koizumi, “Toward the Detection of Spin-Vortex-Induced Loop Currents in a Single Bilayer Bi₂Sr₂CaCu₂O₈+ δ Thin Film and Their Possible Use as Qubits: Model Calculations for Three Nano-island Architecture”, J. Supercond. Nov. Magn. 38, 132 (2025). DOI:10.1007/s10948-025-06960-5

7. T. Okumura, T. Azuma, D. A. Bennett, W. B. Doriese, M. S. Durkin, J. W. Fowler, J. D. Gard, T. Hashimoto, R. Hayakawa, Y. Ichinohe, P. Indelicato, T. Isobe, S. Kanda, D. Kato, M. Katsuragawa, N. Kawamura, Y. Kino, N. Kominato, Y. Miyake, K. M. Morgan, H. Noda, G. C. O’Neil, S. Okada, K. Okutsu, N. Paul, C. D. Reintsema, T. Sato, D. R. Schmidt, K. Shimomura, P. Strasser, D. S. Swetz, T. Takahashi, S. Takeda, S. Takeshita, M. Tampo, H. Tatsuno, K. Tokei, X. M. Tong, Y. Toyama, J. N. Ullom, S. Watanabe, S. Yamada, and T. Yamashita, “Few-electron highly charged muonic Ar atoms verified by electronic K x rays”, Phys. Rev. Lett. 134, 243001:1-7(2025) (Editor’s Suggestion).
DOI:10.1103/PhysRevLett.134.243001
8. Yu He, Xiao-Min Tong, Shuyuan Hu, Gergana D. Borisova, Hao Liang, Maximilian Hartmann, Veit Stooss, Chunhai Lyu, Zoltan Harman, Christoph H. Keitel, Kenneth J. Schafer, Mette B. Gaarde, Christian Ott, and Thomas Pfeifer, “Bring Weak Transitions to Light”, Nature Comm. (2025) 16:5322 DOI:10.1038/s41467-025-60701-9
9. Yutaro NAGAI, Teruaki ENOTO, Masahiro TSUJIMOTO, Hiroya YAMAGUCHI, Yuto MOCHIZUKI, Ehud BEHAR, Lia CORRALES, Paul A. DRAGHIS, Ken EBISAWA, Natalie HELL, Timothy R. KALLMAN, Richard L. KELLEY, Pragati PRADHAN, Shinya YAMADA, Toshiyuki AZUMA and Xiao-Min TONG, “Energy shift of Fe-K fluorescence lines due to low ionization demonstrated with XRISM in Centaurus X-3”, accepted by Publications of the Astronomical Society of Japan, 78, 735-744(2026).
DOI:10.1093/pasj/psag015

B) 査読無し論文

該当なし

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. XM Tong, T. Károly, D. Kato, T. Okumura, S. Okada, T. Azuma, “Orbital collapse in exotic atoms”, 34th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, July 29-Aug. 5, 2025, in Sapporo, Japan.
2. H. Koizumi, “Quantum computing for natural language processing and sentiment analysis”, 2026 年 3 月 11～12 日, Edinburg-Tsukuba collaboration Meeting, Edinburg UK.

B) 一般講演

1. H. Koizumi, “Neglected U(1) phase in the Schrödinger representation of quantum mechanics and particle number conserving formalisms for superconductivity”, The 26th International Conference on the Jahn-Teller Effect, On-line, May 5-May 9
2. Y. Takatsu, H. Koizumi, “Theoretical study of application of Bi-2212 cuprate thin film to quantum devices”, The 26th International Conference on the Jahn-Teller Effect, On-line, May 5-May 9
3. Y He, XM Tong, S Hu, G D Borisova, H Liang, Y Zhang, M Rebholz, M Hartmann, V Stooss, Z Liu, C Lyu, Z Harman, C H Keitel, K J Schafer, M B Gaarde, C Ott, and T Pfeifer, “Attosecond transient absorption spectroscopy of laser-dressed dense helium: spectral lineshape modification and weak transitions brought to light”, 10th International Conference on Attosecond Science and Technology (ATTO X), July 6th to 11th, 2025 in Lund, Sweden.

4. Y. Takatsu, H. Koizumi, “Theoretical Study of Application of Bi-2212 Cuprate Thin Film to Quantum Devices”, 12th International Symposium on Metallic Multilayers, July 13-17, Leeds, UK.
5. Y He, XM Tong, S Hu, G D Borisova, H Liang, Y Zhang, M Rebholz, M Hartmann, V Stooss, Z Liu, C Lyu, Z Harman, C H Keitel, K J Schafer, M B Gaarde, C Ott, and T Pfeifer, “Bring weak transitions to light”, 34th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, July 29-Aug. 5, 2025, in Sapporo, Japan.
6. CW Hogle, L Martin, WK Peters, XM Tong, T Miteva, K Ueda, LS Cederbaum, and P Ranitovic, “Laser-Enabled Control of Interatomic-Coulomb-Decay Dynamics”, 34th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, July 29-Aug. 5, 2025, in Sapporo, Japan.
7. YN Yang, AJ David, XM Tong, IV Litvinyuk, RT Sang, “Excitation of Argon using strong-field light”, 34th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, July 29-Aug. 5, 2025, in Sapporo, Japan.
8. XM Tong and N Toshima, “Efficient way to create H 3d excited state in strong laser fields”, 34th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions, July 29-Aug. 5, 2025, in Sapporo, Japan.
9. M. Otani, M. Ibe, and F. Kuroda, “Accelerated search for C₂-selective alloy catalysts for electrochemical CO₂ reduction reaction (eCO₂RR) using evidence theory and high-throughput DFT”, Materials Research Meeting 2025, 2025 年 12 月 10 日 パシフィコ横浜
10. S. Hagiwara, and M. Otani, “An implementation of the density functional theory combined with the classical solution theory”, Materials Research Meeting 2025, 2025 年 12 月 8 日～13 日 パシフィコ横浜

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 萩原聡, “量子古典融合理論を用いた固液界面計算手法の実装とその適用”, 日本表面真空学会 若手部会研究会, 2025 年 10 月 19 日, 筑波大学

B) その他の発表

1. H. Koizumi, “Natural language as a physical system of strong-correlation, and its processing by quantum machine learning”, 第 5 回 学術変革領域「学習物理」物性関係討論会、7 月 31 日～8 月 1 日、上智大学
2. Nobuya Maeshima, Kouichi Okunishi, Toshiya Hikihara, “Magnetic and thermodynamic properties of the S=1/2 zigzag ladder at finite magnetic fields”, 基研研究会 YITP workshop, 「高次にもつれた量子相探索の展開」, 2025.09.01-03, 京都大学基礎物理学研究所
3. 奥村拓馬, 東俊行, 橋本直, 早川亮大, 加藤太治, 金子真太郎, 岡田信二, 齋藤岳志, 高橋嶺, X.M. Tong, 外山裕一, 山田真也, & HEATES collaboration, “超伝導転移端検出器を用いたミュオンキセノン原子の高分解能硬 X 線分光”, 日本物理学会第 80 回年次大会, 2025 年 9 月 16～19 日, 広島大学 東広島キャンパス

4. 萩原聡, 大谷実, “密度汎関数法と古典溶液理論を組み合わせた固液界面計算手法の実装”, 日本物理学会第 80 回年次大会, 2025 年 9 月 16~19 日, 広島大学 東広島キャンパス
5. 高津悠斗, 小泉裕康, “Bi-2212 銅酸化物薄膜における SVILC 量子ビット群の形成とその制御に関する理論”, 2026 年 3 月 23~26 日, 日本物理学会 2026 春期大会 オンライン開催
6. 小泉裕康, “ベリー接続と Isometry な量子状態の時間発展演算子の出現”, 2026 年 3 月 23~26 日, 日本物理学会 2026 春期大会 オンライン開催

(4) 著書、解説記事等

1. 小泉裕康: Mathematical Review (アメリカ数学会) のレビュー記事: MR4881034 Barthel, Thomas; Miao, Qiang Absence of barren plateaus and scaling of gradients in the energy optimization of isometric tensor network states. Comm. Math. Phys. 406 (2025), no. 4, Paper No. 86, 53 pp. 81P68 (81P45 81V70 90C48 90C90)
2. 小泉裕康: 教科書出版: 「新しい量子力学入門 上」 2026/01/21, 筑波大学出版会

7. 異分野間連携・産学官連携・国際連携・国際活動等

該当なし

8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

該当なし

9. 管理・運営

1. 大谷 実: 計算科学研究センター運営委員会委員
: 計算科学研究センター人事委員会委員
: 計算科学研究センター計算科学社会実装推進室室長
: 数理物質系物理学域運営委員
: 理工学群物理学類学務委員
: 理工学群物理学類 4 年生担任
2. 全 暁民: 総合理工学位プログラム(IDE)の運営委員、学生委員会会長
3. 前島 展也: (学内) 物性・分子工学サブプログラム数理専攻セミナー (前期) 世話人
: (学内) 全学計算機システム運用委員会(3D サテライト担当)

10. 社会貢献・国際貢献

1. 大谷 実: 一般社団法人電気化学界面シミュレーションコンソーシアム代表理事
: 東京大学物性研究所附属計算物質科学研究センター運営委員会委員
2. 全 暁民: 科学雑誌 The European Physical Journal D の Associate Editor
(任期: 2026.12.31 まで)
3. 萩原 聡: 日本物理学会 領域 9 運営委員 2024 年 10 月 1 日~2025 年 9 月 30 日.

: 国際会議 The 26th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-26) Local Organizing Committee (LOC)
2024 年 12 月～2025 年 10 月 31 日.

11. その他

該当なし