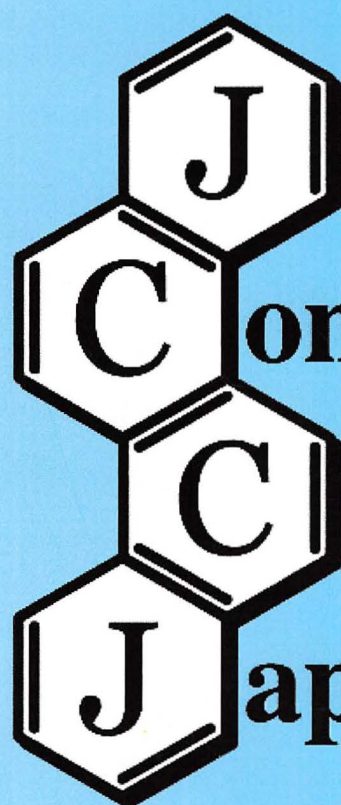


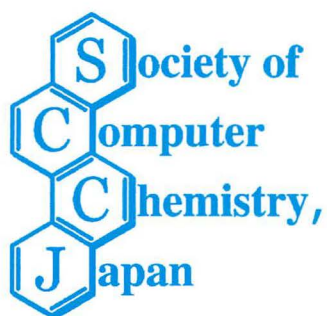
ISSN: 1347-1767

CODEN: JCCJAG



**Journal of  
Computer  
Chemistry,  
Japan**

Vol. 14, 2015 SCCJ 年次報告



日本コンピュータ化学会  
Society of Computer Chemistry, Japan

## CONFLEX&Interface 7.C

CONFLEXは、フレキシブルな分子の配座空間を探索し、化学的に重要な配座異性体の最適化構造をもれなく見つけ出します。実践的に意味のある安定な配座異性体を優先的に創出することにより、効率的な配座空間探索を実現します。

また、配座分布を考慮した基準振動解析、熱力学的諸量、円二色性スペクトル、紫外・可視光吸収スペクトル、およびNMRカップリング定数を計算により予測します。

### CONFLEX7 新機能

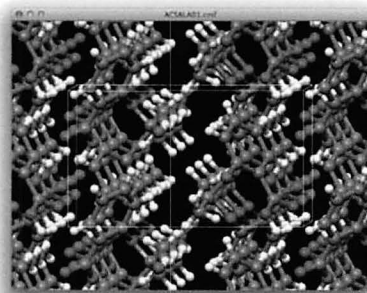
#### 結晶構造探索

分子構造データと空間群の対称性を入力することで、自動的に結晶構造を作成して構造最適化を行ない、エネルギー極小に位置する結晶構造を網羅的に算出します。

最適化した一連の結晶構造に対して、エネルギーの低い順に並べるだけでなく、あらかじめ用意した粉末回折データに近い順に並べることもできます。

#### 粉末X線回折データの出力

結晶構造の粉末回折データを算出し出力します。X線源の元素や波長を変えることも可能です。



コンフレックス株式会社

〒108-0074

東京都港区高輪3-23-17

品川センタービルディング6F

TEL : 03-6380-8290

FAX : 03-6380-8299

Email : [info@conflex.co.jp](mailto:info@conflex.co.jp)

<http://www.conflex.co.jp/>

CONFLEX USA

Email: [cust-info@conflex.net](mailto:cust-info@conflex.net)

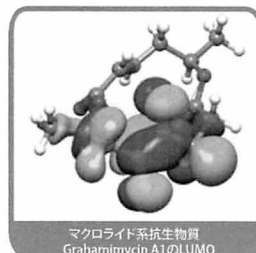
<http://www.conflex.net/>

### 新型Interface

- Interfaceが一押し、Windows、Mac、Linuxに対応しました。
- 外部プログラムとの連携が可能。例えば、Gaussianのネットワーク経由での計算実行が出来ます。

### CONFLEX 基本機能

- 配座探索
- 構造最適化と基準振動解析
- 溶媒効果
- CD/UV/Vis, NMRスペクトル解析
- 配座間遷移状態探索
- 分子オブジェクト分類法



## Gaussian09 (E.01) & GaussView5 (5.0.9)

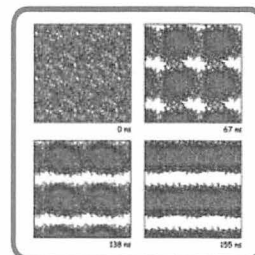
### E.01 新機能

- AVX対応のUnix版binaryがリリースされました。
- CIS計算の設定と同様に、TDHF励起状態計算でもMOを基準として用いることがデフォルトになりました。
- ECPを用いた時のLinda並列計算でのオーバーヘッドが無くなりました。
- Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods 3rd Edition 出版

## Amber14 & AmberTools15

### v14 新機能

- 新しい力場の追加: ff14SB, ff14ipq, Lipid14
- 仮溶媒および実溶媒中での定pH計算
- 自由エネルギー計算
  - EMIL法の導入
  - 自由エネルギー・ワークフローツール (FEW) による自由エネルギー計算の自動化
- 計算手法の拡張
  - ハミルトニアン・モデルの変更
  - レプリカ交換シミュレーションとの統合の強化



## ChemDraw/ChemOffice v15

~より使いやすく・より買いやすく~

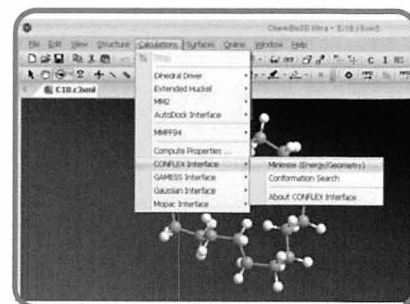
v15より以下の3製品になり、様々な不具合が修正されました。

<製品名>

- ◆ ChemOffice Professional v15 (Windows版)
- ◆ ChemDraw Professional v15 (Windows版/Mac版)
- ◆ ChemDraw Prime v15 (Windows版/Mac版)

### CONFLEXインターフェイス搭載

- Chem3D(v13以降)にCONFLEXのインターフェイスがついて  
いますので、CONFLEX(7以降)と同じPCにインストールすると  
ChemDrawで描いた構造から直接CONFLEXの実行が可能です。



## 科学を求め続ける『フォース』

豊橋技術科学大学 後藤仁志

スターウォーズ (SW) の「エピソード VII (EP-VII) /フォースの覚醒」が昨年末から公開されている。賛否両論がネットを賑わせているが、私の関心は、シリーズを通じて感じていた一つの疑問にあった。何故ジェダイの騎士はこんなにも心が弱いのか。そのことについて、精神科医の名越康文氏が教育システムの問題として指摘している[1]。興味深い論考なのでここで紹介したい。

その前に、SW 世界の教育システムを概説しておこう。フォースのライトサイドに従うジェダイ騎士は、幼い時期にジェダイアカデミーで集団教育を受け、卒業後は研修生としてジェダイの師とともに実務にあたる。その期間中に師は弟子に対して掟の順守と感情を捨てることを説く。これに対して、ダークサイドを操るシスの教育は、早い段階から師と弟子の対一教育を基本とする。師は弟子の未熟さを許容し、感情の力を使うように教育する。卒業後は単独で任務にあたり、独り己を鍛え続けることになる。

名越氏によれば、フォースは物理力ではなく、自分ではない何かと感応する力であるとするならば、そのような心の力を引き出すには個人に向き合う必要があり、師の役割はじっくりと付き合うことにある。ゆえに、人を育てるシステムとしてはシスの方が優れているかもしれないという。私なりの解釈を加えるなら、ジェダイは封建的教育法の側面を持ち、シスは動機づけを重視した現代風の寄り添う教育法と言えるだろう。

今、大学には、社会の発展に対応した新しい人材育成と、そのための教育改革が強く求められている。課題解決型学習、反転授業、アクティブラーニングなど初等中等教育で取り組まれている教授法が大学でも模索され始めている。さらに、次世代を切り開くエリートを育成するためのリーディング大学院もいくつかの大学で始まり、企業や海外の研究者の協力を得て、一人の大学院生を複数の教員が指導する協働指導体制を充実させている。それらは、どちらかと言えば、シスの教育システムに近いように思う。だからというわけではないが、『嫌な予感がする』のである。

鞭を使わない今の教育にはより甘い餌が必要なかもしれない。好奇心を喚起し、学び(探求)の動機付けをし、気づきを導く。未知と見せかけた既知の解に到達すれば喜びを与える。よく頑張ったエリートにはご褒美もある。しかし、科学には厳しい掟があり、それを理解し高度な知識と技術を体得するためには険しい道が待っている。その険しい道程に餌を並べ続けることは難しい。そうやって動機付けられた『選ばれし者』に、必ず直面する未知なる崖を登ることができるだろうか。崖の上に餌があるとは保証されていないのだ。苦勞して登ってはみたがそこに餌がなかった時、ダークサイドが近づいてくる。

個人的な見解ではあるが、ルーカス監督は冒険活劇の基本テーマを SW シリーズ全体にちりばめながらも、それを大きなテーマとして三つの三部作に分けて描こうとしていたと推察している。EP-I~IIIのテーマは「愛」である。愛ゆえにダークサイドに墮ちる物語である。EP-IV~VIのテーマは「希望」である。息子が父を救い新たな希望を銀河にもたらす物語である。そして、EP-VIIから始まった三部作のテーマは「勇気」であると思う。新しい主人公が脅威や恐怖に立ち向かう真の「勇気」を獲得していく物語になると確信している。

名越氏が言う「心の力」とは、人の内面にあるフォースであり、それこそが「勇気」で

はないだろうか。だから他者がそれを引き出すことは難しい。餌によって引き出せるかもしれないが、それは挫けてしまう原因にもなるだろう。弟子たちが険しい修行の道を正しく進むために、師はどのように「勇気づけ」していけば良いのだろうか。ルーカスから『ライトセーバー』を渡されたディズニーは、それを魅せてくれるこの上ない会社であることは疑いない。新たな SW サーガの展開を楽しみに、そして、未知なる科学に挫けずに挑戦し続けることができる若者を育てる術を学ばせてもらいたい。

『May the force be with you. フォースと共にあらんことを』

[1] Toshihiro Okamoto, Asahi Shimbun Weekly AERA, 2015, 28(56), 36-40.

## 目 次

1.	年次報告 巻頭言	S-	1
2.	会告		
2-1	事務局からのお知らせ		
	◇ 会員継続と年会費納付のお願い	S-	5
	◇ 新規会員推薦（入会金免除）制度とラボ会員の募集	S-	5
	◇ 年次報告の発行について		
	◇ ホームページのメンバーエリアについて	S-	6
	◇ SNS を使った情報発信について	S-	6
	◇ 学会論文誌 JCCJ と JCCJIE の HTML 公開	S-	6
	◇ 学会論文誌・年会予稿集のバックナンバー販売について	S-	7
2-2	編集室からのお知らせ		
	◇ JCCJ International Edition (英文論文誌) の発行		
	◇ JCCJ特集号について	S-	7
	◇ J-STAGE3 TeX 原稿受付について	S-	8
	◇ JCCJ 掲載論文ジャンル「速報」追加と年会精選論文特集号の発行	S-	9
	◇ 新シリーズハイライト SCCJ Cafe-Season5-のお知らせ	S-	10
	◇ 研究者 ID “ORCID” について	S-	10
	◇ Graphical Abstract 募集のお知らせ		
2-3	年会実行委員からのお知らせ		
	◇ 日本コンピュータ化学会 2016 春季年会発表論文と参加者募集	S-	11
	◇ 2016 年 SCCJ 奨学賞の募集について	S-	12
	◇ 日本コンピュータ化学会 2016 秋季年会の開催について	S-	12
3.	2015 年度学会活動報告		
	◇ 2015 年度 学会事業活動の一覧	S-	13
3-1	2015 年表彰		
	◇ 2014 年度 日本コンピュータ化学会学会賞 推薦書	S-	14
	◇ 2014 年度 日本コンピュータ化学会吉田賞（論文賞）推薦書	S-	15
	◇ 2015 年度 日本コンピュータ化学会奨学賞	S-	16
	◇ 2015 年度 日本コンピュータ化学会年会優秀ポスター賞	S-	16
3-2	会議報告		
	◇ 2015 年度 総会 議事録	S-	17

	◇ 2015 年度 第一回役員会 議事録	S- 18
	◇ 2015 年度 第二回役員会 議事録	S- 22
	◇ 2015 年度 第三回役員会 議事録	S- 25
3-3	会計報告	
	◇ 2014 年度 会計収支報告	S- 29
	◇ 2015 年度 予算	S- 30
	◇ 2015 年度 中間会計報告	S- 31
3-4	2015 春季年会報告	
	◇ 実施報告	S- 32
	◇ 収支報告	S- 34
	◇ 発表プログラム	S- 35
	◇ 学会賞受賞講演要旨	S- 43
	「量子化学に基づくマルチフィジックス・マルチスケールシミュレータの開発とシステム・材料設計への応用」 ○久保百司(東北大金研)	
	◇ 吉田賞(論文賞)受賞講演要旨	S- 44
	「大規模・高精度相対論的量子化学計算手法の開発:元素戦略の理論基盤確立を目指して」 ○清野淳司(早大先進理工)、中井浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB)	
3-5	2015 秋季年会報告	
	◇ 実施報告	S- 46
	◇ 収支報告	S- 47
	◇ 発表プログラム	S- 48
	◇ 特別講演 I 要旨	S- 53
	「抽象化学系による計算とその展開」 ○鈴木泰博(名古屋大学・情報)	
	◇ 特別講演 II 要旨	S- 55
	「複核錯体の磁性と分子軌道論的解釈」 ○半田真(島根大院・総合理工学)	
3-6	2015 科学コミュニケーション室活動報告	S- 56
	◇ SCCJ 秋季年会一般公開「科学発信!! Hakodate」を終えて	S- 56
	◇ イベント報告	S- 58
4.	日本コンピュータ化学会定款	S- 65
5.	投稿の手引き・投稿規定・投稿カード	S- 69
6.	日本コンピュータ化学会役員名簿	S- 81

## 2 会告

## 2-1 事務局からのお知らせ

### 会員継続と年会費納付のお願い

日本コンピュータ化学会 2015 年度会員の期間は 2015 年 12 月 31 日で満了し、2016 年 1 月 1 日からは 2016 年度会員として自動的に継続されます。会員の皆様には別便にて、新年度年会費の納付についてお知らせしております。2015 年度やそれ以前の年会費未納の会員の皆様には、未納分と合わせて新年度年会費を納付ください。

預金口座振替をご登録の方は 3 月 7 日振替予定です。預金口座振替分の領収書は 3 月中旬に発送いたします。よろしく願いいたします。

年会費の納付には預金口座振替をご利用いただけます。預金口座振替をご利用いただくと、手数料不要で毎年の振込手続きが不要になります。預金口座振替用紙は事務局までご請求ください。尚、退会を希望される方は、未納分の年会費を納付の上、事務局までご連絡ください。

### 新規会員推薦(入会金免除)制度とラボ会員の募集

日本コンピュータ化学会では、新規会員を広く募集するとともに、既会員の推薦によって入会金(1,000 円)を免除する制度を設置しています。会員の皆様には、本会にご興味を持たれている方をご存知でしたら、積極的にご推薦いただき、この制度をご利用いただきたいと存じます。

また、若手研究者・技術者の育成を目的として、ラボ会員制度を設けております。一口(1 万円)で指導教員 1 名と任意の学生 3 名の計 4 名を登録できます。原則、指導教員は個人会員として扱われ、学生は学生会員として扱われます。ただし、ラボ会員の学生は個人を特定せずに、指導教員の研究室所属の学生であればどなたでも構いません。春季年会や秋季年会に 2 名以上の学生が参加する研究室は、ぜひご検討ください。

### 年次報告の発行について

日本コンピュータ化学会では、年次報告と論文誌の合本号を年 1 回発行し、会員に配布してきましたが、昨年より、年次報告のみを発行し、配布することにいたしました。これは、論文誌のページ数が増加し、合本号の印刷と配布にかかる経費が増大したことによる措置であることを、昨年、ご報告いたしました。論文誌が充実することには喜ばしいことですが、会費収入の減収が続く中で、経費を抑えるだけでは対応できず、今後も同様な措置を継続させていただきたいと思っております。会員の皆様のご理解とご協力をお願いいたします。

## ホームページのメンバーエリアについて

日本コンピュータ化学会のホームページ（以下、「本会 HP」）「メンバーエリア」に、アクセス制限された会員限定ページを開設しております。ここでは PDF アーカイブおよびソフトウェア・アーカイブへのリンクがあり、会員限定のダウンロードサービスをご提供していますので、ご利用ください。なお、アクセスに必要なアカウントとパスワードは、別途お知らせしております。

## SNS を使った情報発信について

日本コンピュータ化学会では、Facebook や Twitter を本会 HP と連動させることで、イベント情報や論文誌公開情報などの活動を素早くお届けしています。

Twitter や Facebook のアカウントをお持ちの会員の皆様は、ぜひ下記のページにアクセスして、フォローや「いいね」、さらにはメンバー登録リクエストをして下さい。また、その他のソーシャルネットワークのご要望がありましたら、本会事務局までお知らせ下さい。

SNS	Access Information
Twitter	@sccj : <a href="https://www.twitter.com/sccj/">https://www.twitter.com/sccj/</a> Tags Used: #sccj #jccj, 他.
Facebook Page	Society of Computer Chemistry, Japan (日本コンピュータ化学会) : <a href="https://www.facebook.com/SCCJ.info">https://www.facebook.com/SCCJ.info</a>  JCCJ Editorial Office : <a href="https://www.facebook.com/JCCJ-Editorial-Office-1630162777258221/">https://www.facebook.com/JCCJ-Editorial-Office-1630162777258221/</a>
Facebook Group	日本コンピュータ化学会談話室 : <a href="http://www.facebook.com/groups/sccj.members/">http://www.facebook.com/groups/sccj.members/</a>

## 学会論文誌 JCCJ と JCCJIE の HTML 公開

日本コンピュータ化学会は、論文誌「*Journal of Computer Chemistry, Japan* (JCCJ)」に加え、英文論文誌「*Journal of Computer Chemistry, Japan -International Edition* (JCCJIE)」を J-STAGE サイトより PDF 版と HTML 版で公開しています（新しい JCCJIE については、編集室からのお知らせを参照してください）。論文の公開性の高める HTML 版は、検索エンジンを介した情報提供を強化し、キーワードから掲載論文へのアクセス性を高め、Twitter や Facebook などを使った情報共有も容易にします。SNS をご利用している会員の皆様にご利用いただけると幸いです。

## 学会論文誌・年会予稿集のバックナンバー販売について

日本コンピュータ化学会では、論文誌 (JCCJ: *Journal of Computer Chemistry, Japan*) 各号、合本号。および年会予稿集のバックナンバーを販売しております。購入を希望される方は、本会ホームページ問い合わせフォームよりお申込みいただくか、本会事務局に電子メールまたは FAX でお申し込みください。

\*\*\*\*\*

### 2-2 編集室からのお知らせ

#### JCCJ International Edition (英文論文誌) の発行

2015年12月26日に、J-STAGEで、英語版 Vol. 1を公開しました。International Editionは、Vol. (巻) だけの表記で、No. (号) はありません。1年1巻の発行になります。

【Journal 名】 *Journal of Computer Chemistry, Japan -International Edition* (ハイフンの後ろはスペースなし)

【Journal 略記】 *J. Comput. Chem. Jpn. Int. Ed.*

【Journal 略称】 JCCJIE

【J-STAGE 公開 URL】 <https://www.jstage.jst.go.jp/browse/jccjie/>

JCCJ にご投稿いただき採択になりました英語論文の中で、編集委員会の推薦を得たものを掲載いたします。玉稿をお待ち申し上げております。よろしくお願いいたします。

JCCJIE では、Graphical Abstract を採用しております。J-STAGE の機能の関係で、目次一覧にはまだ表示できませんが、各論文のタイトルのところをクリックいただくと書誌情報のページでご覧になれます。

#### JCCJ 特集号について

日本コンピュータ化学会特集号を JCCJ Vol. 14, No. 4 室蘭工業大学大学院 工学研究科 澤口直哉特集号編集委員長による「酸化物系材料物質の計算科学」として刊行しました。

2016年 Vol. 15 特集号は、横浜市立大立川仁典特集号編集委員長による「量子水素の科学 (仮題)」で12月 公開予定です。

#### 【企画趣旨】

水素は宇宙で最も豊富に存在する元素であり、宇宙の質量の3/4を占め、総量数比では全原子の90%以上となります。また我々が慣れ親しんでいる水素結合は、分子性結晶、表面反応、生体分子等、多種多様な物質系で中心的な役割を担っています。さらには水素エネルギー技術の構築は、地球環境問題やエネルギー有効利用にも大きく関連する課題でもあ

ります。一方、水素には重水素や三重水素といった同位体も知られており、構造や相転移に対する大きな同位体効果も知られています。

このように水素は、森羅万象の科学現象を担っているといっても過言ではないでしょう。しかしながら、分子レベルでの詳細は未だ十分に解明されていないのが現状です。それは、水素原子は小さく従来の測定法では十分な観測ができず、また理論面においては水素原子核自身の量子効果が大きいため、従来の計算手法では不十分な場合があるためと考えられます。

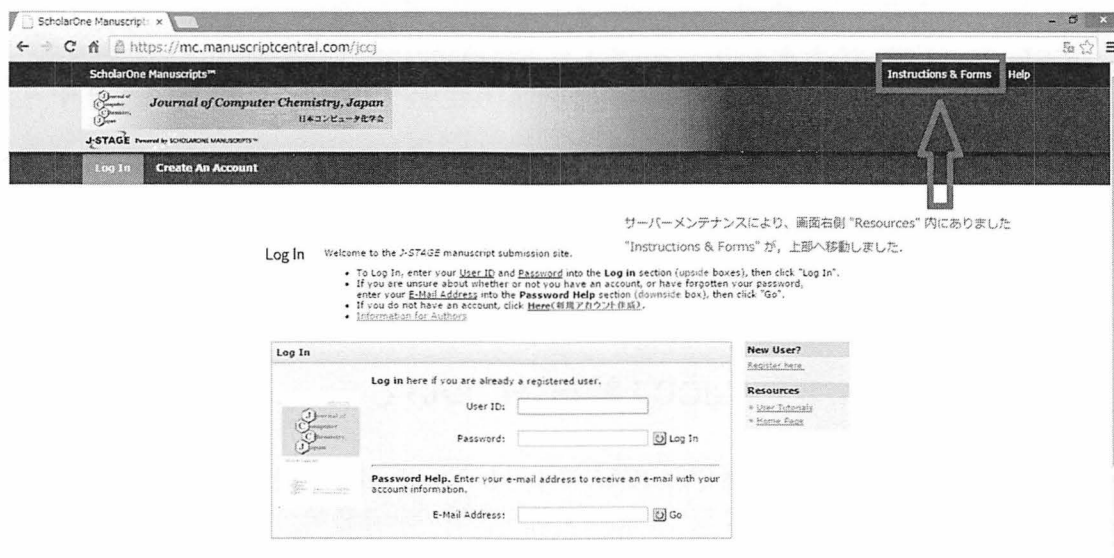
このような状況を鑑み、この度、日本コンピュータ化学会では「量子水素の科学（仮題）」という主題の特集号を企画致しました。

## J-STAGE3 TeX 原稿受付について

日本コンピュータ学会では、JST の投稿審査・公開システム J-STAGE を利用しています。

システム採用当初は TeX 原稿による投稿ができませんでしたが、2013 年 10 月より TeX 原稿による投稿ができるようになりました。それに伴い、TeX 投稿用の和・英テンプレートを作成いたしました。

ScholarOne Manuscripts (<http://mc.manuscriptcentral.com/jccj>) ”Instructions & Forms” からダウンロードしてご利用ください。マクロの使用は禁止です。よろしくお願いいたします。



ScholarOne Manuscripts

Journal of Computer Chemistry, Japan  
日本コンピュータ化学会

J-STAGE Powered by SCHOLARONE MANUSCRIPTS™

Log In Create An Account

Instructions & Forms Help

サーバーメンテナンスにより、画面右側 "Resources" 内にありました "Instructions & Forms" が、上部へ移動しました。

Log In Welcome to the J-STAGE manuscript submission site.

- To Log In, enter your User ID and Password into the **Log In** section (upside boxes), then click "Log In".
- If you are unsure about whether or not you have an account, or have forgotten your password, enter your E-Mail Address into the **Password Help** section (downside box), then click "Go".
- If you do not have an account, click [Here](#) (情報とアカウント作成).

Information for Authors

Log In

Log in here if you are already a registered user.

User ID:

Password:  Log In

Password Help. Enter your e-mail address to receive an e-mail with your account information.

E-Mail Address:  Go

New User?  
[Register here.](#)

Resources  
[User Tutorial](#)  
[Home Page](#)

採択後の最終原稿は Word 原稿でご提出をお願いしています。TeX から Word 形式への変換につきましては、編集室でお手伝いをいたしますので必要な方はご連絡ください。

## JCCJ 掲載論文ジャンル「速報」追加と年会精選論文特集号の発行

総会でのご承認を受け、年会の口頭・ポスター発表の中から、「速報」として発表内容をご投稿いただいたものを「日本コンピュータ化学会 2015 春季・秋季年会精選論文特集号」として発行いたしました。要綱は下記の通りです (JCCJ Vol. 13, No. 3 A-12 「公告」抜粋)。

記

### 精選論文特集号発刊の趣旨

日本コンピュータ化学会事務局長 後藤仁志

日本コンピュータ化学会 (SCCJ) が開催する春と秋の年会では、コンピュータ化学に関する様々な研究成果が数多く発表されます。実際のところ、予稿原稿の作成段階では十分な結果が得られないまま投稿される論文も多いのですが、年会当日の発表では、結果を精査し、きちんと考察を加えた研究成果が報告されています。また、他の参加者との活発な議論を通じて、その内容もさらに深化していくように思います。

このような状況を鑑み、SCCJでは、各年会において発表された論文を精選し、本会論文誌 (JCCJ) において特集号として公開することにいたしました。各論文は、本会理事等の推薦を受け、著者等が年会での議論を踏まえて再考した原稿を投稿し、JCCJの規定による査読を経て、原著論文 (速報) として掲載されます。したがって、単なる年会プロシーディングスではなく、学術論文としてより高いレベルの価値を持ちます。

本特集号は、その初めての試みとして、SCCJ2015春季年会で発表された精選論文を掲載しております。年会に参加されなかった本会会員におかれましては、本会の年会活動に対してご理解いただくとともに、次回以降の年会にご参加いただきたく、お願い申し上げます。

1. 特集号タイトル：2015春季年会精選論文特集号，2015秋季年会精選論文特集号
2. 投稿ジャンル：“速報(Letter)” (Selected Paper).
3. 投稿対象：春季年会，および秋季年会の口頭発表とポスター発表された論文で，日本コンピュータ化学会理事から推薦された論文であること。
4. 論文構成：本文には，英文のAbstractを冒頭に加え，目的，方法，結論，考察を記載すること（予稿集において，結論や考察を記述していない論文は注意すること）。
5. 査読：有り。
6. ページ制限：2ページ以内。制限を超える場合は通常論文として扱う場合がある。
7. 論文スタイル：投稿規程に準ずる（組版の際に修正されます）。
8. ページチャージ：10,000円（特別価格）。組上がり3ページの場合は15,000円

## 新シリーズ ハイライト SCCJ Cafe –Season 5– のお知らせ

Vol. 13, No. 4 Vol. 14, No. 5 まで, SCCJ Cafe –Season 4–では, 大阪大学蛋白質研究所 附属蛋白質解析先端研究センター蛋白質データベース開発研究室 日本蛋白質構造データバンク(PDBj) 特任研究員 工藤高裕氏の「分子のかたち」を5回シリーズでお届けしました。身近な分子の紹介や高校生・大学生にもわかる PDBj の利用方法から最新の情報までお楽しみいただけましたでしょうか。Vol.15, No. 1 からは, 茨城大学大学院理工学研究科 高妻孝光氏による SCCJ Cafe –Season 5– 「生命現象の分子科学」をお届けいたします。お楽しみに。

## 研究者 ID “ORCID” について

インターネット上で, 論文が広く参照・引用できるようになってきた現状を踏まえ, 研究者のユニーク ID に対する需要が高まっています。同姓同名による混乱を避け, 改姓されてもその前後の論文がきちんと紐つけされることが目的です,

さまざまな研究者 ID のシステムがありますが, JST が, “Open Researcher and Contributor ID (ORCID)” 導入を推奨しております。日本ではまだあまり認知度は高くありませんが, すでに一部海外 Journal では, 著者名をクリックすると ORCID 番号が表示されるようになっております。

JCCJ 編集室, 今後のユニーク ID の状況について, 研修の様子をご報告したいと思っております。ORCID についての情報は, 下記 URL をご参照下さい。

<http://orcid.org/content/about-orcid>

## Graphical Abstract 募集のお知らせ

英文論文誌 Journal of Computer Chemistry, Japan -International Edition では, Graphical Abstract を採用しています。JCCJ でも, 可能な限り, Graphical Abstract を採用していきたいと考えております。希望される著者の方は, 採択原稿提出の際に, Graphical Abstract (jpeg 推奨) – 論文内容を表す図や読者にアピールしたい図等 – を提出してください。

## 2-3 年会実行委員会からのお知らせ

### 日本コンピュータ化学会 2016 春季年会発表論文と参加者募集

日本コンピュータ化学会 春季年会実行委員会

日本コンピュータ化学会 2016 春季年会在下記の通り開催されます。みなさまのご参加をお待ち申し上げます。詳細は、学会ホームページ(イベント情報)をご覧ください。

主催: 日本コンピュータ化学会(SCCJ)

会期: 2016 年 6 月 2 日(木), 3 日(金)

会場: 東京工業大学大学院社会理工学研究科棟 大岡山西 9 号館 2 階

研究発表:

種別: 口頭発表(発表時間 20 分), ポスター発表(発表時間 90 分),

研究展示<デモ>(最大 10 件 2 日間! 先着順です)

内容: 計算化学(分子軌道法, 分子力学法, 分子動力学法, モンテカルロ法など), 理論化学(電子状態理論など), 情報化学(データベース, ケモトリックスなど), 数理化学, コンピュータ支援化学教育, その他コンピュータ化学に関する研究発表

発表申込締切: 2016 年 3 月 4 日(金)

プログラム: 3 月中旬公開予定

発表要旨締切: 2016 年 4 月 22 日(金)

企業展示: 2016 年 4 月 22 日(金)までに、学会 HP(イベント情報)よりお申込みください。

出展費用は 100,000 円(1 ブース/2 日間)となっております。

参加申込締切: 2016 年 4 月 22 日(金)(以降は当日登録となります)。

参加費:

会員種別	事前登録	(当日)
個人会員・ラボ会員教員	5,000 円	(7,000 円)
学生会員・ラボ会員学生	3,000 円	(5,000 円) ※要証明書
シニア会員	2,000 円	(3,000 円) ※要証明書
共催学会会員	5,000 円	(7,000 円)
非会員一般	10,000 円	(12,000 円)
非会員学生・シニア・障害者割引	5,000 円	(7,000 円) ※要証明書

※証明書(学生証, 免許証, 障害者手帳など)は当日の受け付けにてご提示ください。

懇親会: 6 月 2 日(木)終了後, 生協にて

参加費: 5,000 円(当日: 6,000 円)

問い合わせ: ホームページ問い合わせフォーム, または学会事務局へ電子メールでお問い合わせください。

日本コンピュータ化学会事務局 E-MAIL: [sccjoffice@sccj.net](mailto:sccjoffice@sccj.net)

ホームページお問い合わせフォーム [https://www.sccj.net/exec/sccj\\_inquiry.cgi](https://www.sccj.net/exec/sccj_inquiry.cgi)

## 2016 年 SCCJ 奨学賞の募集について

日本コンピュータ化学会では、関東以遠から春季年会に参加し、口頭発表する優秀な学生を支援するため『SCCJ 奨学賞』を設けています。資格に該当する学生は応募要領に従ってご応募ください。また、個人会員からの推薦も受け付けております。特に、大学教員の皆様には、発表を予定している学生への周知をお願いいたします。

## 日本コンピュータ化学会 2016 秋季年会の開催について

日本コンピュータ化学会 2016 秋季年会実行委員会

日本コンピュータ化学会 2016 秋季年会が下記の通り開催される予定です。皆さまのご参加をお待ち申し上げます。詳細は、後日学会ホームページ(イベント情報)に掲載いたします。

主催： 日本コンピュータ化学会(SCCJ)

会期： 2016 年 10 月 22 日(土), 23 日(日)

会場： 島根大学松江キャンパス(松江駅よりバスで 20 分程度)

実行委員会委員長： 半田 真(島根大学大学院総合理工学研究科)

### 3 2015 年度学会活動報告

## 2015年度 学会事業活動の一覧

### 1 はじめに

日本コンピュータ化学会は、コンピュータ化学に関する研究や教育を支援し、これらに関わる研究者、教育者、技術者の情報交換を促進するとともに、この分野の進展を図ることを目的として、様々な事業活動を行っています。以下の項目では、2015年度に取り組んだ事業活動の一覧を示しました。

### 2 会員サービス・インターネットサービス

2.1 FacebookやTwitterを使った情報発信

2.2 メンバーエリアとプログラム・アーカイブ

### 3 学会誌等の出版と販売

3.1 年次報告の発行

3.2 論文誌の電子出版と販売

3.3 英文論文誌の電子出版

3.4 年会予稿集の出版と販売

### 4 研究発表会の開催

4.1 2015 春季年会

4.2 2015 秋季年会

4.3 サイエンスアゴラ 2015 への出展

4.4 その他の国際会議・研究発表会・セミナー等への協賛

### 5 啓蒙活動

#### 5.1 表彰

- 日本コンピュータ化学会学会賞
- 日本コンピュータ化学会吉田賞（論文賞）
- 日本コンピュータ化学会奨学賞
- 日本コンピュータ化学会年会優秀ポスター賞

#### 5.2 科学コミュニケーション

- サイエンスセミナー in 江戸川大学への出展
- SCCJ秋季年会一般公開「科学発信!! Hakodate」
- サイエンスアゴラ 2015 への出展

### 6 学会運営

6.1 総会：1回

6.2 役員会：3回

6.3 会計報告、予算

## 2014 年度 日本コンピュータ化学会学会賞 推薦書

2015 年 1 月 31 日に開催された日本コンピュータ化学会役員会で、本年度の日本コンピュータ化学会学会賞を、東北大学大学院工学研究科教授の久保百司氏に授与することが満場一致で決まりました。ここに同氏の経歴と推薦理由を記します。

久保百司氏は平成 4 年 3 月に京都大学大学院工学研究科石油化学専攻修士課程を修了された後、平成 4 年 6 月東北大学大学院工学研究科化学工学専攻博士課程を中途退学、助手となられ、平成 11 年に博士（工学）を取得されました。平成 13 年東北大学大学院工学研究科材料化学専攻助教授に昇進され、平成 20 年東北大学大学院工学研究科附属エネルギー安全科学国際研究センター教授とされました。さらに平成 27 年 3 月からは、東北大学金属材料研究所教授になられることが決まっており、一層のご活躍が期待されております。

久保百司氏は、超精密化、超小型化が急速に進む近年のシステム技術・材料技術は、「化学反応」と「摩擦、衝撃、応力、流体、光、電子、熱、電場」などが複雑に絡みあったマルチフィジックス現象であることにいち早く着目し、従来の連続体力学に基づくマルチフィジックスシミュレーションではなく、量子化学に基づくマルチフィジックスシミュレーション技術の開発を目的とした研究を行っておられます。具体的には、開発した第一原理分子動力学法と Tight-Binding 量子分子動力学法に基づくマルチフィジックスシミュレータを用いて、燃料電池、太陽電池、トライボロジー、エレクトロニクス、マイクロマシン、電気自動車、航空・宇宙機器、クリーンエネルギー、発電プラント、水素ステーションなどエネルギー・環境に係わる広範囲な研究分野における、大規模・高精度分子シミュレーション手法の開発に対し、多くの重要な貢献をされています。

また久保百司氏は電子・原子レベルの第一原理分子動力学シミュレーション、Tight-Binding 量子分子動力学シミュレーションから、粗視化分子動力学シミュレーション、さらにはマクロスケールの連続体力学シミュレーションまでの幅広いシミュレーション技術を融合したマルチスケールシミュレーション技術の開発を推進されています。これにより、従来は不可能であった電子・原子スケールから  $\mu$ メートル・メートルスケールまでの幅広いスケールでの統合的なシステム設計・材料設計の実現を可能としています。さらに、これら研究成果をエネルギー問題・環境問題の解決、安全・安心社会の実現、さらには日本発の産業創出のために幅広く展開されています。

以上のような久保百司氏の計算化学に対する貢献に対し「日本コンピュータ化学会」は、ここに久保百司氏を本会の学会賞の受賞者とすることに決定致しました。

(文責：会長 細矢治夫)

## 2014 年度 日本コンピュータ化学会吉田賞(論文賞) 推薦書

2015 年 1 月 31 日に開催された日本コンピュータ化学会役員会で、本年度の日本コンピュータ化学会吉田賞(論文賞)を、以下の論文に授与することが満場一致で決まりました。ここに推薦理由を記します。

大規模・高精度相対論的量子化学計算手法の開発：元素戦略の理論基盤確立を目指して  
清野 淳司, 中井 浩巳

Journal of Computer Chemistry, Japan, Vol. 13(2014), No. 1, pp.1-17.

### 受賞理由

本論文は、重元素を持つ大規模な化合物を高効率・高精度に計算することを目標に、まず重元素を取り扱う際に必須な相対論的量子化学の現状を概観し、さらに目標遂行のための問題点を明らかにしている。これらの問題点に対し、著者らが開発した高効率・高精度な 2 成分相対論計算手法、無限次 Douglas-Kroll-Hess 変換に基づく局所ユニタリー変換法の理論について解説し、数値的に新たな理論の有用性を示している。また、本手法を分割統治法へと拡張することにより、計算全体の線形スケーリングを達成する手法となることを示した。本手法を用いれば、現在世界中で広く行われている非相対論的量子化学計算と同等の計算コストで(スピン非依存の) 4 成分相対論計算と同程度の精度を与えることができる。そのため従来の非相対論的な Schrödinger 方程式から相対論的な Dirac 方程式へのパラダイムシフトが可能となることを強く示唆している。

大規模・高精度相対論的量子化学計算のさらなる発展を期して本論文を吉田賞論文として推薦する。

(文責：会長 細矢治夫)

## 2015年 日本コンピュータ化学会奨学賞

日本コンピュータ化学会は、関東圏以外から SCCJ2015 春季年会に参加し発表される優秀な学生の中から、下記の者を日本コンピュータ化学会 (SCCJ) 奨学賞として表彰し、『日本コンピュータ化学会 奨学金』と『記念品 (クリスタル原子軌道)』を授与しました。

- 西田尚大 (広島大学 大学院理学研究科・化学専攻)  
2004  
液体状態における酢酸、ギ酸メチルの分子間相互作用依存性  
○西田尚大(広島大院・理)、金井清二(広島大・理)、徳島高、堀川裕加(理研/SPring-8)、高橋修(広島大・ISSD)
- 山本優也 (室蘭工業大学 大学院工学研究科)  
2005  
 $x\text{Na}_2\text{O}-(1-x)\text{SiO}_2$  ガラスに適用する原子間相互作用の考察  
○山本優也、澤口直哉、佐々木真(室工大院)
- 斎藤圭祐 (東北大学 金属材料研究所)  
2007  
高強度ゲルの破壊プロセスにおける粗視化分子動力学シミュレーション  
○斎藤圭祐(東北大金研)、樋口祐次、尾澤伸樹(東北大院工)、久保百司(東北大金研)

## 2015年 日本コンピュータ化学会年会優秀ポスター賞

日本コンピュータ化学会は、年会でポスター発表された論文に対して、ポスター賞を授与しております。2015年春季および秋季年会の受賞ポスター論文は下記のとおりです。

- SCCJ 2015 春季年会 (東工大, 目黒区)
  - ◇ 最優秀ポスター賞: 該当なし
  - ◇ 優秀ポスター賞: 該当なし
- SCCJ 2015 秋季年会 (函館市)
  - ◇ 最優秀ポスター賞: 該当なし
  - ◇ 優秀ポスター賞: 該当なし

### 3-2 会議報告

#### 2015 年度 日本コンピュータ化学会総会 議事録

開催日時: 2015 年 5 月 29 日(金) 10:30 - 11:00  
開催場所: 東京工業大学大学院社会理工学研究科棟大岡山西 9 号館 2 階  
出席者: 本会会員出席者約 55 名

#### 議 題

##### ● 報告事項

##### 1 事務局からの報告

##### 1-1 現在会員数と年度推移

会員数の現況と推移が報告された。会員数が減少傾向にあることを憂慮しつつ、財務状況の健全さを保ちつつ、より魅力的な学会へと成長するために、会員のご協力が必須であると  
の要請がなされた。会員数の現況について報告された。

(参考) 現会員数(2015 年 1 月 15 日現在)

個人会員: 382 名	ラボ会員: 4 研究室
シニア会員: 53 名	法人会員: 16 社
学生会員: 7 名	賛助会員: 7 社 11 口

##### 1-2 2014 年度会計報告(「3-3 会計報告」を参照)

2014 年度会計報告が提示され、了承された。

##### 1-3 2015 秋季年会について

函館において開催されることが報告された。

##### 1-4 2016 春季年会について

東京工業大学デジタル多目的ホールにおいて開催されることが報告された。

##### 1-5 2015 年, 2016 年秋季年会について

開催予定は HP で案内されることが報告された。

##### 2 編集室からの報告

##### 2-1 特集号について

下記のとおり報告された。

- ・ 新たな試みとして春季年会精選論文特集号 (JCCJ Vol. 13, No. 3), ならびに秋季年会精選論文特集号 (JCCJ Vol. 13, No. 6) を発行した。
- ・ 2015 特集号「酸化物系材料物質の計算科学(仮)」編集委員長: 澤口直哉氏(室蘭工大)
- ・ 2016 特集号「水素の計算科学(仮)」編集委員長: 立川仁典氏(横浜市大)  
進捗状況が報告された。

##### 3 科学コミュニケーション室からの報告

下記のイベントに出展したことが報告された。

- ・ 江戸川大学サイエンスセミナー (7/25: 流山市江戸川大学),
- ・ 2014 秋季年会一般公開 (10/19: 郡山市日本大学工学部),
- ・ サイエンスアゴラ (11/8-9: 日本科学未来館)

## 審議事項

### 2015 年度予算案について

2015 年度予算案が提示され、審議の結果、原案通り承認された。

### JCCJ International Edition 発行について

下記のような報告があり、引き続き JCCJIE の発行に向けて準備を進めることが承認された。

- ・ ISSN番号 2189-048X を仮取得した。Journal 公開後に正式に登録となる。
- ・ JSTAGE 公開利用申請を行った。今後、審査選定(優先度検討会は春秋 2 回審議される)で認められれば、利用申請書を提出し、公開準備に入る予定である。
- ・ 英語論文は、すべて JCCJIE に掲載する予定である。
- ・ JPP 佐藤氏が見本版 (Vol. 0)を作成中である。公開論文は PDF 版と HTML 版、ページ概念無のロケーションIDを使用して公開するつもりである。

### その他の新しい取り組み

会員サービスを充実させることで、会員数の減少を抑えるだけでなく、増加させたい。具体的な企画として、下記のようなことが提案された。

- ・ コンピュータ化学技術者の教育支援、教科書と問題集(初級、中級、上級者向け)
- ・ コンピュータ化学技術者の資格制度
- ・ 若手の会、夏期講習会
- ・ 春季年会の改革として、公開ミニシンポ・フォーラムや若手企画のシンポジウムの開催

以上

\*\*\*\*\*

## 日本コンピュータ化学会 2015 年度第一回役員会議事録

日 時： 2015 年 1 月 30 日(金)14:00~17:00

場 所： 埼玉大学東京ステーションカレッジ(丸の内 1-7-12 SAPIA タワー9 階)

出席役員(敬称略):平野恒夫、細矢治夫、後藤仁志、河村雄行、太刀川達也、時田澄男、船津公人、神部 順子、本間 善夫、櫻沢 繁、林 治尚、吉村忠與志、藤田眞作、(編集室)中村恵子、(事務局)和多田裕子 合計 15 名

## 報告事項

### 1. 事務局からの報告

#### 1-1 現在会員数と年度推移

会員数の現況について報告された。

(参考) 現会員数(2015 年 1 月 15 日現在)

個人会員： 382 名	ラボ会員： 4 研究室
シニア会員： 53 名	法人会員： 16 社
学生会員： 7 名	賛助会員： 7 社 11 口

#### 1-2 2014 年度会計報告(別紙)

2014 年度会計報告(別紙)が提出、報告され、原案通り承認された。

### 1-3 2015 春季年会の準備状況

下記の通り報告された。

会 期	: 2015 年 5 月 28 日(木)～29 日(金)
会 場	: 東京工業大学大学院社会理工学研究科棟 大岡山西 9 号館 2 階 デジタル多目的ホール、メディアホール、コラボレーションルーム
懇 親 会	: 28 日(木), 講演終了後, 東京工業大学蔵前会館
実行委員会	: 委員長:川内 進氏(東工大) 委 員:長嶋雲兵氏(産総研, FOCUS), 後藤仁志氏(豊橋技科大)

### 1-4 2015 秋季年会の準備状況

下記の通り報告された。

会 期	: 2015 年 10 月 30 日(金)～31 日(土)
会 場	: 函館市・まちづくりセンター
懇 親 会	: 30 日(金), 講演終了後, 会場未定
実行委員会	: 委員長:櫻沢繁氏(はこだて未来大学システム情報科学部) 委 員:松橋博美氏(北海道教育大学函館校)
特別講演	: 半田真氏(島根大)(次期秋季年会実行委員長) 鈴木泰博氏(名古屋大)(予定)

- ・一般公開は美馬のゆり氏(公立はこだて未来大学)の協力を得て進める。日程は未定。

### 1-5 2016 年, 2017 年の秋季年会について

実行委員長と開催候補地が下記のとおり確認された。

- ・2016 年秋季年会, 開催地:松江市, 実行委員長:半田真氏(島根大), 会期:10～11 月
- ・2017 年秋季年会, 開催候補地:豊橋市, 実行委員長:後藤仁志氏(豊橋技科大)

## 2. 編集室からの報告

### 2-1 JCCJ 特集号について

下記のとおり報告された。

- ・新たな試みとして春季年会精選論文特集号(JCCJ Vol. 13, No. 3), ならびに秋季年会精選論文特集号(JCCJ Vol. 13, No. 6)を発行した。
- ・2015 特集号「酸化物系材料物質の計算科学(仮)」について, 編集委員長である澤口直哉氏(室蘭工大)に代わって, 河村理事(岡山大)から報告があった。現在, 執筆予定者 10 名に依頼済みで, 原稿締切は 2015 年 3 月 27 日(金), 公開は 2015 年 10 月(JCCJ Vol. 14, No. 3)を予定している。
- ・2016 特集号「水素の計算科学(仮)」について, 長嶋副会長から編集委員長の立川仁典氏(横浜市大)が企画中であることが報告された。

### 2-2 論文投稿・審査状況(別紙)

論文投稿状況, ならびに審査状況が報告された。

## 3. 科学コミュニケーション室からの報告

### 3-1 科学コミュニケーション室の活動について

下記のイベントに出展したことが報告された。

- ・ 江戸川大学サイエンスセミナー (7/25:流山市江戸川大学),
- ・ 2014 秋季年会一般公開 (10/19:郡山市日本大学工学部),
- ・ サイエンスアゴラ (11/8-9:日本科学未来館)

## 審議事項

### 1. 事務局関連事項

#### 1-1. 2015 年度予算案について(別紙 2)

2015 年度予算案が提示され審議された。下記のような質疑応答を経て、原案通り承認された。

- ・ 過去2年においては、予算案に計上していない収入があった。2013 年会計報告では JCCJ 特集号印刷版の販売等の収入があった。2014 年会計報告では、秋季年会の剰余金を寄付金として受け入れた。
- ・ 今年度予算案の役員会経費 35 万円の内訳について質問があった。旅費や会議費の他、学会賞などの賞金も含まれることが説明された。
- ・ 事務諸経費は予備費であることが説明された。

#### 1-2. 2014 年度学会賞・功労賞・論文賞の候補者

2014 年度学会賞・功労賞・論文賞(2015 年春季年会 5/28 表彰予定)について審議された。

- ・ 学会賞に 3 名が推薦された。審議の結果、久保百司氏(東北大)に決定した。
- ・ 功労賞には推薦がなく、該当者無しとした。
- ・ 吉田(論文)賞に 2 報が推薦された。後日、メール審議を経て、下記の論文に決定した。  
清野淳司, 中井浩巳, 「大規模・高精度相対論的量子化学計算手法の開発: 元素戦略の理論基盤確立を目指して」, JCCJ, Vol. 13, No. 1, 1-17 (2014).

#### 1-3. 2015 年度奨学賞について

下記のとおり承認された。

- ・ 関東以遠から春季年会に参加する口頭発表する学生を支援するため、居住地に応じて旅費相当分(予算 20 万)を助成し、副賞(ネビュラ)を授与する。
- ・ 発表申し込みと要旨提出の締切を一週間早めて役員間で審査することとする。

#### 1-4. その他

特になし。

### 2. 編集室関連事項

#### 2-1. 巻頭言担当者について(別紙)

巻頭言担当やについて審議され、別紙のとおり決定した。また、下記のような点に留意することが確認された。

- ・ 春季年会の精選論文特集号は、毎年、春季年会実行委員長である川内先生の担当になってしまわないように、という意見が出された。

#### 2-2. 特集号編集長について(別紙 3)

別紙のとおり承認された。主に下記のような審議がされた。

- ・ Vol. 14 (2015) 特集号「酸化物系材料物質の計算科学(仮)」の特集号編集長が澤口直哉先生(室工大), Vol. 15 (2016) 特集号「水素の計算科学(仮)」が立川仁典先生(横浜市大)であることを確認し、前述の進捗状況報告と合わせて承認された。
- ・ Vol.16 (2017) 特集号について、審議された。3D プリンタ分子模型, ドッキングシミュレー

ション、多原子分子特性、神戸関連スパコン等のテーマが検討された。継続審議とした。

#### 2-3. 春季・秋季年会精選論文特集号について

春季・秋季年会口頭発表と役員の方から推薦の多かったポスター発表をもとに、春季年会精選論文集 (Vol. 13, No. 3) と秋季年会精選論文集 (Vol. 13, No. 6) において、それぞれ 20 報と 21 報公開したことが報告された。下記のような意見が出された。

- 論文数が増大したことは喜ばしいことではあるが、速報論文はほとんどが和文であるために、JCCJ 全論文数に対して英語論文比率が減少した(下表参照)。

	英文論文数/全論文数	英文論文数/速報を除く論文数
Vol. 12 (2013)	17/29 (59 %)	
Vol. 13 (2014)	13/66 (20 %)	10/24 (42 %)

- また、公開論文数が妥当かどうかについても意見交換され、今年度も、年会精選論文集を発行し、同程度の論文数を公開することとした。
- 年会精選連文集に投稿が認められるポスター発表論文選出方法について、特に、この選出に合わせて審議されるポスター賞の選考基準を明確にするために、一人当たりの持ち点制が提案された。ポスター発表件数 10 件につき、一人当たり 2 票の持ち点制とし、同じポスター発表、および共著者となっているポスター発表には投票できないとする。原則として、2 票以上の得票数を得たポスター発表論文に対して精選論文集への投稿を認めることにする。また、得票率 2/3 以上を最優秀ポスター賞、1/3 以上を優秀ポスター賞として表彰することとした(2014 年はほぼ同様に選考された)。また、口頭発表に関しては、減点制とし、-2 票以下の口頭発表は、精選論文集への投稿を認めないこととした。

#### 2-4. JCCJ International Edition 発行について

下記のとおり報告があり、JCCJIE の発行に向けて準備を進めることが承認された。

- ISSN 番号 2189-048X を仮取得した。Journal 公開後に正式に登録となる。
- JSTAGE 公開利用申請を行った。今後、審査選定(優先度検討会は春秋 2 回審議される)で認められれば、利用申請書を提出し、公開準備に入る予定である。
- 英語論文は、すべて JCCJIE に掲載する予定である。
- JPP 佐藤氏が見本版 (Vol. 0) を作成中である。公開論文は PDF 版と HTML 版、ページ概念無のロケーションIDを使用して公開するつもりである。

### 3. 科学コミュニケーション室関連事項

#### 3-1 2015 秋季年会(函館)の一般公開について

公立はこだて未来大学での秋季年会時に一般公開を実施する予定である。大学との共催という形では子どもゆめ基金の助成事業対象とはならない(子どもゆめ基金規約: 国・地方公共団体・独立行政法人との共催は不可)ことに留意する必要がある。櫻沢先生は、助成金申請を希望されているので、「公立はこだて未来大学後援」という形で申請する予定である(2015 年 6 月申請)。

#### 3-2 2015 年サイエンスアゴラ出展について

開催日は 2015 年 11 月 13 日(金)-15 日(日)。13 日は公的機関の企画展示で、一般展示は 14-15 日となる。会場は未来館を希望し、2014 年と同様に、実演スペースを広く取りたいと考えている。実演スペースが広く取れた場合は、ブース内で定時実演・発表もしたいと考

えている。具体的な実演・発表企画を募集している。

#### 4. その他の審議事項

##### 4-1 新しい取り組み

会員サービスを充実させることで、会員数の減少を抑えるだけでなく、増加させたい。具体的な企画として、下記のようなことが提案された。

- ・ コンピュータ化学技術者の教育支援, 教科書と問題集(初級, 中級, 上級者向け)
- ・ コンピュータ化学技術者の資格制度
- ・ 若手の会, 夏期講習会
- ・ 春季年会の改革として, 公開ミニシンポ・フォーラムや若手企画のシンポジウムの開催

##### 4-2 新理事について

新しい企画を推進するにあたって, 新理事が求められる。数名の候補者が推薦され, 継続審議とした。

以上

\*\*\*\*\*

### 日本コンピュータ化学会 2015 年度第二回役員会 議事録

開催日時: 2015 年 5 月 28 日(木) 12:20~13:30

開催場所: 東京工業大学大岡山キャンパス 蔵前会館 2F 大会議室

出席理事(敬称略): 平野恒夫, 細矢治夫, 長嶋雲兵, 後藤仁志, 河村雄行, 太刀川達也, 時田澄男, 波田雅彦, 林治尚, 本間善夫, 川内進, 澤口直哉, 吉村忠与志,

【オブザーバー】半田真, 中村恵子(編集室), 和多田裕子(事務局) 合計 16 名

#### 報告事項

##### 事務局からの報告

###### 1-1 現在会員数と年度推移

会員数の現況について報告された。

(参考) 現会員数(2015 年 5 月 15 日現在)

個人会員: 380 名	ラボ会員: 4 研究室
シニア会員: 46 名	法人会員: 16 社
学生会員: 5 名	賛助会員: 7 社 11 口

###### 1-2 総会資料の確認(別紙)

2015 年度総会資料が報告され, 確認された。

###### 1-3 2016 春季年会の準備状況

2016 春季年会の準備状況が下記の通り報告された。

会期: 2016/5/19,20 か 2016/6/2,3※仮予約済  
会場: 東京工業大学大学院社会理工学研究科棟 大岡山西 9 号館 2 階  
東京工業大学デジタル多目的ホール, メディアホール, コラボレーションルーム  
→他の学会イベントと重ならないか確認の上、決定することとする。

#### 1-4 2015, 2016, 秋季年会について

2015 秋季年会の準備状況が下記の通り報告された。

##### ◎2015 年秋季年会:

実行委員長: 櫻沢 繁(公立はこだて未来大学 複雑系知能学科)

委員: 松橋博美氏(北海道教育大学函館校)

会期: 2015 年 10 月 30 日(金)~31 日(土) 《高校生対象一般公開》未定

会場: 函館市まちづくりセンター(函館市)

特別講演: 半田真氏(島根大)(次期秋季年会実行委員長)

鈴木泰博氏(名古屋大)(予定)

##### ◎2016 年秋季年会:

実行委員長: 半田 真先生(島根大学)へは長嶋先生から打診

会期 10 月~11 月の予定

10/22, 23 380 人ぐらい入る大学ホール予定。ポスター・企業展示一緒の部屋が良い。パネル借用可。島根大学共催。特別講演を大学生・職員に公開。

##### ◎2017 年秋季年会:

実行委員長: 後藤仁志氏(豊橋技科大)

今後秋季年会をどうしていくか検討。

## 2 編集室から

### 2-1 JCCJ 全文 html 公開開始

JCCJ Vol. 14, No. 1 から, J-STAGE で全文html公開を開始したことが確認された。

### 2-2 JCCJ の巻頭言, 特集号について

巻頭言担当者が確認された。

特集号について、編集室より下記のとおり確認された。

2015 特集号 Vol. 14, No. 3 編集委員長 室蘭工業大学 澤口直哉先生

・テーマ: 酸化物系材料物質の計算科学 JCCJ Vol. 14, No. 4 公開予定

・依頼著者人数: 10 名 11 報 (投稿済 10 報)

・審査状況: (別紙)

2016 特集号 横浜市立大学 立川仁典先生

・テーマ: 水素の計算科学

・依頼著者数: 十数名を予定

・日程: 公開を 2016 年 11 月頃を予定

### 2-3 春季・秋季年会精選論文特集号について

JCCJ 精選論文特集号について、下記のとおり報告された。

・春季年会精選論文集 (Vol. 13, No. 3) と秋季年会精選論文集 (Vol. 13, No. 6) において、それぞれ 20 報と 21 報公開した。年会公開論文数が例年の 2 倍になり、それに伴いアクセス

数も増大した。

2-4 ポスター賞 年会精選連文集に投稿が認められるポスター発表及び口頭発表選出方法  
精選連文集への投稿が認められる論文の選出方法について説明があった。内規として下記  
のとおり定め、適正な選出方法を継続的に検討することとした。

・推薦は、ポスター発表件数 10 件につき、一人当たり 1 票の持ち点制とする。原則として、  
得票数上位 15 件のポスター発表を精選論文集へ推薦とする。得票率 2/3 以上を最優秀ポ  
スター賞、1/3 以上を優秀ポスター賞として表彰する。2015 年 春季年会はポスター発表が  
41 件なので、一人当たりの持ち点を 4 票とする。また、口頭発表に関しては減点制とし、-2  
票以下の口頭発表は、精選論文集への投稿を認めない（原則、全口頭発表が精選論文集  
掲載対象）。

2-5 投稿審査状況（別紙）

JCCJ 論文の投稿、審査、受理の状況について報告された。

3 科学コミュニケーション室から

3-1 サイエンスアゴラ 2015 出展について

今年度のサイエンスアゴラの出展が提案され、承認された。未来館での展示を希望すること、  
また、今年は国際光年であることからそれに絡めたテーマとする予定であることが報告され  
た。

日程：2015 年 11 月 14 日(土)、15 日(日)

会場：日本科学未来館 東京都江東区青海(東京台場地区周辺)

主催：独立行政法人 科学技術振興機構(JST) 科学コミュニケーションセンター

3-2 サイエンスセミナー in Edogawa について

サイエンスセミナーへの参加が提案され、承認された。

日程：2015 年 7 月 24 日(金)

会場：江戸川大学(千葉県流山市駒木 474)

主催：江戸川大学

3-3 2014 年郡山秋季年会一般公開会計報告 別紙

郡山秋季年会で開催した一般公開に関する会計について報告された。

【審議事項】

1 事務局から

1-1 学会運営に関して(合本号の印刷について)

下記のとおり提案があり、承認された。

・Vol.13 は合本号ではなく、論文抜きの「年次報告」を発行し、会員へ送付した。学会収入と  
支出を考えると、次号(Vol.14)以降も「年次報告」を発行し、送付することになる。ただし、  
国会図書館と購入希望機関に送付する分については、合本号を印刷する。

2 編集室から 2-1 JCCJ International Edition 発行について

下記のとおり説明があり、承認された。

・ISSN番号 2189-048X を仮取得。JSTAGE 公開利用申請を行ったところ、2015 年 4 月末、優  
先誌検討会議審査結果について「J-STAGE 掲載の優先誌に選定された」との連絡があり、公

開が正式に決定した。今後の予定ならびに Editorial Board 等詳細は別紙。

### 3 科学コミュニケーション室から

#### 3-1 2015 秋季年会の一般公開ならびに助成金（子どもゆめ基金）について

中村秘書より、2015 秋季年会の一般公開の実施案が示され、承認された。子どもゆめ基金の10月以降実施イベントを対象とした2次募集に申請する。

### 4 その他

#### 4-1 SCCJ 業務の分担について

学会運営に関する業務分担について、各担当者に相談・依頼することが承認された。

	担当者名	備考
事務局(秘書:和多田)		
事務局 長	後藤	総務
広報 担当	後藤, (本間)	広報(Web)
書記 担当	林	議事録の作成・校正,
渉外 担当	久保	展示・広告の依頼, 新規開拓
会計 担当	古山,	監査前の会計報告や予算案の検査
春季年会 担当	川内, 長嶋	会場準備, プログラム編成
夏の学校 担当	(石川 誠), 菊池	夏の学校, または講習会の検討, 実施
秋季年会 担当	櫻沢	会場準備, プログラム編成
編集室(秘書:中村)		
編集室 長	時田	
副編集室 長	太刀川	
国際版 担当	波田, 船津, 河村	国際版の編集, 関係学会共同出版の検討
特集号 担当	澤口, (立川)	特集号の編集
電子出版 担当	佐藤(JPP)	電子出版の準備
科学コミュニケーション室(秘書:中村)		
科学コミュニケーション室長	本間	企画
副科学コミュニケーション室長	神部	実施
人材育成・教育 担当	立川, 山下	教科書, 教材開発

#### 4-2 新理事の推薦について

本会の新たな取り組みとして、夏の学校や講習会等の企画・実施、およびコンピュータ化学の教科書等の開発を推進するため、新たな理事が推薦された。次回役員会の検討事項とした。

#### 4-3 JCCJ, International Edition について

JCCJIE の創刊にあたり、多くの理事に Advisory Board への参画が要請され、認められた。今後1年間に少なくとも1報を投稿することも要請された。

以上

\*\*\*\*\*

## 日本コンピュータ化学会 2015 年度第三回役員会 議事録

開催日時:2015 年 10 月 31 日(土)12:00~13:00

開催場所:函館市地域交流まちづくりセンター会議室

(日本コンピュータ化学会 2015 秋季年会)

出席理事(敬称略):細矢治夫, 長嶋雲兵, 後藤仁志, 久保百司, 太刀川達也, 時田澄男,  
波田雅彦, 船津公人, 神部順子, 林治尚, 本間善夫, 櫻沢 繁, 澤口直哉, 中田吉郎,  
半田真(オブザーバー), 中村恵子(編集室), 合計 16 名

● 議題

1. 報告事項(事務局)

1-1 2015 年度中間会計報告(別紙 A), 2015 春季年会収支報告(別紙 B)

2015 年度中間会計、2015 年度春季年会収支について報告された。

1-2 会員数報告(2015 年 10 月 5 日現在 )

会員数の現況について報告された。

個人会員.....375 名

シニア会員.....50 名

学生会員.....13 名

ラボ会員.....4 口

法人会員.....16 社

賛助会員.....7 社 11 口

1-3 入退会、未納者状況/2015 年 10 月 5 日現在

入会者・退会者の現況について報告された。

1-4 2016 春季年会について

2016 春季年会の準備状況が下記の通り報告された。

会期: 2016 年 6 月 2 日(木)~3 日(金)

会場:東京工業大学デジタル多目的ホール, メディアホール, コラボレーションルーム

実行委員長:川内進先生(東京工業大学大学院理工学研究科有機・高分子物質専攻)

プログラム作成、座長依頼=長嶋雲兵先生

発表申込締切:2016 年 3 月 4 日(金)、プログラム:3 月中旬までに公開

発表要旨, 企業展示, 参加申込締切:2016 年 4 月 22 日(金)

1-5 2016 秋季年会について

2016 年秋季年会の準備状況が下記の通り報告された。

2016 年秋季→実行委員長:半田真先生(島根大学大学院総合理工学研究科)

日程:2016 年 10 月 22 日(土)~23 日(日)

会場:島根大学松江キャンパス(松江駅よりバスで 20 分程度)

大学ホール(380 人収容)、大学会館 3 階(ポスター会場)を仮予約済

1-6 2017 秋季年会について

2017 年秋季年会の準備状況が下記の通り報告された。

2017 年秋季→実行委員長:後藤仁志先生(豊橋技科大)

会期 10 月~11 月の予定 ※長崎や熊本開催を検討する。

## 2. 報告事項(編集室)

### 2-1. 特集号について

下記のとおり発行, および発行予定であることが報告された。

- ・春季年会精選論文集 (Vol. 14, No.. 3) 発行済み
- ・特集号「酸化物系材料物質の計算科学」(Vol. 14, No.. 4) 発行予定。

### 2-2 JCCJ-International Edition の創刊について

2015 年 11 月に JCCJIE を創刊(公開)する予定であることが報告された。

### 2-2. 投稿審査システム利用について

平成 27 年度以降の投稿審査システムの継続利用希望を提出したことが報告された。

### 2-3 SCCJCafe Season 5 執筆者

茨城大学大学院理工学研究科応用粒子線専攻の高妻孝光先生に依頼したことが報告された。

### 2-4. JCCJ Vol. 15 特集号について

Vol. 15 特集号は, 横浜市立大学の立川仁典先生を特別編集長とし, 特集号テーマ「水素の計算科学(仮)」とすることが, 報告された。

### 2-5. 投稿論文状況

JCCJ 通常号, 特集号の投稿論文の審査状況について報告された。また, JCCJIE の創刊時に公開する予定の候補論文について報告された。審査状況や著者等の希望によっては, 通常号に回る可能性もあることが示唆された。

## 3. 報告事項(科学コミュニケーション室)

### 3-1 サイエンスカフェ in Edogawa

第 3 回サイエンスカフェ in Edogawa(7 月 25 日実施)について報告された。

### 3-2 科学発信! Hakodate について

31 日午後から明日まで開催する一般公開の準備状況について報告された。

### 3-3 サイエンスアゴラ 2015 出展について

11/14-15 お台場日本科学未来館。両日ブース展示。

11/15 (日)トーク:細矢治夫先生・久保百司先生。

サイエンスアゴラ 2015 の準備状況について報告された。

## 4. 審議事項

### 4-1. 今年度年次報告の発行について

昨年(2014 年度)は合本号ではなく, JCCJ タイトルのみを掲載した年次報告を発行し, 会員に送付した。合本号の印刷と送付にかかる経費は, 一般会員の会費とほぼ同額がそれ以上になることから, 財務状況を考えると, 今年(2015 年度)も昨年と同様に, 年次報告を発行し, 配布することが提案され, 承認された。

ただし, 国立国会図書館への献本と, 購入希望機関に配本するため, 昨年は合本号を 10 冊作成したが, 今年は必要十分な 5 冊だけを印刷することが提案され, 承認された。

### 4-2. 学会賞, 功労賞, 吉田賞の候補者推薦について(2016 年春表彰)

学会賞, 功労賞, 吉田賞(論文賞)について審議した。新たな意見として, 2 年後を目途に自薦他薦を含む会員公募を実施することが提案された。継続審議とし, 2016 年表彰分については次回(2016 年第一回)役員会において決定することとした。

- 4-3. 2016JCCJ 奨学賞について  
来年の奨学賞について、昨年と同様の基準(関東圏以外、旅費相当分の副賞)とす。
- 4-4. 次期秋季年会について  
今後の開催地について 2016 年秋までに議論することとした。
- 4-5. ポスター賞について  
秋季年会ポスター賞、および JCCJ 精選論文特集号への推薦に関する審査が、年会に参加している理事に依頼された。
- 4-6. JCCJ 巻頭言執筆について  
JCCJ 巻頭言の執筆予定者を確認し、予定どおり依頼することとした。
- 4-7. 2017 年 特集号 (Vol. 17) について  
特別編集長および特集号テーマについて、継続審議することとした。
- 4-8. サイエンスアゴラ 2016 出展について  
昨年と同様、サイエンスアゴラ 2016 に出展することとした。
- 4-9. その他
- 1) 次回役員会について  
日程を調整した。
  - 2) SCOPUS, EBSCO等の文献データベースへの登載申請について。  
編集室を中心に申請準備を進めることとした。
  - 3) Web of Science への登載。  
新規の学術雑誌の登載条件が緩和されたことから、状況を見てできるだけ早くJCCJIEの登載申請をすることとした。
  - 4) 都立戸山高校からの協力要請について  
都立戸山高校の教諭から、下記のような要請があり、今後、検討することとした。
    - ・高校 (SSH 校) でコンピュータ化学を実感できる講座の開講
    - ・高校生のためのコンピュータ化学に関する研究発表会の開催
    - ・高校生のためのコンピュータ化学研究を支援するサイエンスメンターの斡旋など
    - ・高校生による科学研究に対する助言と指導。

以上

\*\*\*\*\*

## 3-3 会計報告

2014年度会計収支報告書  
(2014年1月1日～12月31日)

収入の部		
費 目	金 額 (円)	
会費収入		2,588,500
個人会員 (5,000円×356人)	1,645,000	
シニア会員 (2,000円×30人)	60,000	
学生会員 (3,000円×3人)	9,000	
ラボ会員 (10,000円×0口)	0	
法人会員 (20,000円×16法人)	320,000	
賛助会員 (50,000円×11口)	550,000	
入会金ほか (1,000円×4件)	4,500	
(内: 前受年会費)	1,112,000	
論文誌掲載料		880,000
書籍等販売等 (学術著作権)		160,963
春季年会繰入		396,260
学会誌広告		250,000
寄付金		540,000
利息		306
当期収入合計		4,816,029
支出の部		
費 目	金 額 (円)	
事務局事務委託費		1,000,000
編集室編集委託費		1,300,000
HP管理費		609,942
印刷費		1,494,309
秋季年会補助金		200,000
科学コミュニケーション室経費		85,404
役員会経費		343,281
事務消耗物品費		23,987
学会誌発送代		58,515
奨学賞		110,000
通信費(電話代、請求書切手代)		65,180
振込手数料		27,286
当期支出合計		5,317,904
当期収支差額		-501,875
前期繰越収支差額		5,750,456
次期繰越収支差額		5,248,581

上記報告のとおり相違ありません。

日本コンピュータ化学会  
日本コンピュータ化学会会 長  
監 査2015年1月30日  
細 矢 治 夫  
西 克 也

## 2015 年度 予算

収入の部		各年度の会計報告	
費 目	金 額 (円)	2014 年度	2013 年度
会費収入	2,517,000	2,588,500	2,789,000
前受年会費	-1,112,000		1323000
論文誌掲載料	1,730,000		985,000
書籍等販売等	40,000	160,963	935,891
春季年会収入	200,000	396,260	608,589
広告収入	150,000	250,000	200,000
寄付金	0	540,000	102,000
利息	0	306	514
当期収入合計	4,637,000	4,816,029	6,943,994

支出の部		各年度の会計報告	
費 目	金 額 (円)	2014 年度	2013 年度
事務局事務委託費	1,000,000	1,000,000	1,000,000
編集室編集委託費	1,300,000	1,300,000	1,300,000
HP サーバ運営費	693,000	609,942	593,000
	100,000		
印刷費	1,150,000	1,494,309	1,673,406
	250,000		
	900,000		
	0		
秋季年会補助金	200,000	200,000	200,000
科学コミュニケーション室経費	200,000	85,404	174,570
役員会経費	350,000	343,281	384,183
事務消耗物品費	50,000	23,987	174,060
学会誌発送代	100,000	58,515	79,015
奨学賞	200,000	110,000	135,000
事務諸経費	50,000	0	0
通信費	70,000	65,180	77,366
振込手数料	30,000	27,286	28,140
当期支出合計	5,393,000	5,317,904	5,818,740

当期収支差額	-756,000	-501,875	1,125,254
前期繰越収支差額	5,248,581	5,750,456	4,625,202
次期繰越収支差額	4,492,581	5,248,581	5,750,456

## 2015年度 中間会計報告(2015年10月5日現在)

収入の部			
費 目	金 額 (円)		
	予算	10/5 現在	差額
会費収入	2,517,000	1,851,000	666,000
論文誌掲載料	1,730,000	615,000	1,115,000
書籍等販売, 広告収入等	190,000	174,607	15,393
春季年会繰入	200,000	477,005	-277,005
中間収入合計	4,637,000	3,117,612	
学会誌広告		60,000	-60,000
別刷り収入, 年会費		500,000	-500,000
当期収入合計(予定)	4,637,000	3,677,612	
支出の部			
事務局事務委託費	1,000,000	1,000,000	0
編集室編集委託費	1,300,000	1,300,000	0
電子出版経費		0	0
科学コミュニケーション室経費	200,000	11,796	188,204
奨学賞	200,000	149,720	50,280
HP サーバ運営費	693,000	350,742	342,258
印刷費	1,150,000	883,440	266,560
秋季年会補助金	200,000	200,000	0
役員会経費	350,000	235,473	114,527
事務消耗物品費	50,000	26,784	23,216
事務諸経費, 振込手数料	80,000	25,908	54,092
郵送費, 通信費	170,000	65,279	104,721
中間支出合計	5,393,000	4,257,677	
電子出版(組版, J-STAGE 他)		300,000	-300,000
役員会経費(会議費, サイエンスアゴラ)		390,000	-390,000
HP 管理費		252,000	-252,000
当期支出合計(予定)	5,393,000	5,199,677	
当期収支差額(予定)	-756,000	-1,522,065	
前期繰越収支差額	5,248,581	5,248,581	
次期繰越収支差額	4,492,581	3,716,516	

## 日本コンピュータ化学会 2015 春季年会実施報告

2015 春季年会実行委員長  
東京工業大学 川内 進

日本コンピュータ化学会 2015 春季年会は、2015 年 5 月 28、29 日の二日間、東京工業大学大岡山キャンパス大岡山西 9 号館において開催されました。

年会には、131 名の方々にご参加いただきました。ありがとうございました。残念ながら昨年より 6 名の減となりました。発表件数は、受賞講演 2 件、奨学賞講演 3 件を含めた口頭発表 23 件、ポスター発表 40 件であり、ほぼ例年通りでした。企業展示は、菱化システム様、東京工業大学様、コンプレックス様、TS テクノロジー様、クロスアビリティ様に出席していただきました。毎年ご協力いただき深く感謝いたします。

今年度も多くの学生に参加していただきました。今年の奨学賞は、西田尚大（広島大学）、山本優也（室蘭工業大学）、斎藤 圭祐（東北大学）の三氏が受賞されました。受賞された学生をはじめとして、多くの学生が優れた研究発表を行い、活発な議論を行いました。来年はさらに進展した研究成果を報告していただけることを期待しております。

残念ながら、今回のポスター賞の該当者はございませんでしたが、得票の多かった発表ならびに理事推薦の口頭発表を中心として「2015 春季年会精選論文特集号」として発刊することといたしました。別途発刊される特集号をご高覧ください。次の年会でも引き続きポスター賞を目指して挑戦して下さいますようお願い申し上げます。

今年度の SCCJ 学会賞は、東北大学金属材料研究所教授の久保百司氏に授与されました。「量子化学に基づくマルチフィジックス・マルチスケールシミュレータの開発とシステム・材料設計への応用」という題名で受賞講演をしていただきました。久保先生は、「化学反応」と「摩擦、衝撃、応力、流体、電位、電熱」などが複雑に絡み合ったマルチフィジックス現象を取り扱うため、第一原理分子動力学法、Tight-Binding 量子分子動力学法に基づくマルチフィジックスシミュレータを開発し、エネルギー・環境に係わる広範囲な研究分野に適用されてきました。また、これらのシミュレーション技術に加え、粗視化分子動力学シミュレーション、連続体力学シミュレーションも融合したマルチスケールシミュレーション技術の開発も推進してこられました。これらのシミュレータを応用した研究例を中心にご講演いただきました。このように、久保先生は、機械分野に量子化学を導入するというユニークな研究をされてきており、日本コンピュータ化学会をはじめとするコンピュータ化学分野の発展に大きく寄与されています。

SCCJ 吉田賞（論文賞）には、「大規模・高精度相対論的量子化学計算手法の開発：元素戦略の理論基盤確立を目指して」（JCCJ, Vol. 13, No. 1, pp.1-17 (2014)に掲載）に与えられ、執筆者の一人、清野 淳司氏（早稲田大学）にご講演いただきました。本論文は、執筆者らが提案した大規模・高精度相対論的量子化学計算手法を用いることで、非相対論的量子化学計算と同等のコストで 4 成分相対論と同程度の精度を与えることを示したものです。これまで、相対論の寄与を取り扱うには計算負荷がかかりましたが、執筆者らが主張しているように、本手法によって従来の非相対論的 Schrödinger 方程式から相対論的 Dirac 方程式へのパラダイムシフトが期待されます。

懇親会は、初日の講演終了後に蔵前会館ロイヤルブルーホールで行いました。来年も、年会、懇親会を通して、本学会らしいオープンな議論を交わしましょう！

最後になりますが、受け付けや会場係をお手伝いしていただいている室蘭工業大学、早稲田大学、東京工業大学の学生の皆様、学会事務局に御礼申し上げます。皆さんのおかげで、発表が滞りなく進行し、活発な議論が行えました。来年もよろしく願いたします。

2016年春季年会は、6月2、3日に同じ会場で開催される予定です。多くのSCCJ会員の皆様に参加していただけるようお願いいたします。

## 日本コンピュータ化学会 2015 春季年会収支報告

会期：2015年5月28日（木）～29日（金）

会場：東京工業大学大学院社会理工学研究科棟 大岡山西9号館2階

参加人数：個人会員（共催会員含む）73名，シニア会員14名，学生会員13名，  
非会員16名，招待他15名 合計131名

発表件数：受賞講演2件，口頭発表23件（内奨学賞講演3件），ポスター発表40件

展示企業：5社

懇親会参加者：75名（スタッフ、招待含，二次会50名）

会計報告：収入1,481,000円，支出1,004,065円（差額476,935円）

以下2015年春季年会の主なデータと収支をご報告いたします。

収入の部			支出の部	
事前個人	5,000×45	225,000	懇親会	206,299
事前シニア	2,000×6	12,000	二次会	129,570
事前学生	3,000×9	27,000	小計	335,869
事前非会員学生	5,000×1	5,000	人件費	180,000
事前非会員	10,000×5	50,000	会場費	177,684
当日個人	7,000×28	196,000	予稿集	147,150
当日学生	5,000×4	20,000	賞状作成費	4,740
当日非会員学生	7,000×1	7,000	副賞	130,000
当日シニア	3,000×8	24,000	振込み手数料	1,620
当日非会員	12,000×9	108,000	コピー・文具等	10,970
事前懇親会	5,000×41	205,000	雑費	11,820
当日懇親会	6,000×23	138,000	送料	4,212
返金調整		-36,000		
小計		981,000		
企業展示	100,000×5	500,000		
企業広告	0	0		
小計		500,000	支出 B	1,004,065
収入 A	合計	1,481,000	当期差額 A-B	476,935



## 日本コンピュータ化学会 2015 年春季年会プログラム

3 月 18 公開 決定版

### ■主催

日本コンピュータ化学会(SCCJ)

### ■共催・協賛

化学工学会, 高分子学会, 触媒学会, 日本化学会, 日本薬学会, 分子科学会, 分子シミュレーション研究会, CBI 学会

### ■会期

2015 年 5 月 28 日(木)~29 日(金)

### ■会場

東京工業大学大学院社会理工学研究科棟 大岡山西 9 号館 2 階

1 日目 5 月 28 日(木)

### ■09:00 受付開始

### ■09:30 - 10:30 口頭発表 20 分 3 件

座長 1: 渡邊寿雄(東工大)

1001	分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学(DC-DFTB-MD)法の最近の展開 ○西村好史、海寶丈彰、中井浩巳(分子研・早大理工研、早大先進理工、早大先進理工・早大理工研・JST-CREST・京大 ESICB)
1002	積分で表わされる関数の高精度数値計算法 —量子力学の数値解析から数学・数値解析へのフィードバック— ○石川英明

1003	数値基底を用いた磁気遮蔽テンソルの計算と NMR 化学シフトの評価 ○中川克己(MO BASICS Research)
------	--

■10:30 - 11:50 口頭発表 20 分 4 件

座長2: 石元孝佳(九大)


1004	量子化学計算による気体分子の溶解度: 調和溶媒和モデルによる検討 ○石川 敦之(早大 理工研)、鎌田 将宏(早大 先進理工)、中井 浩巳(早大 先進理工、早大 理工研、JST-CREST、京大 ESIGB)
1005	炭化水素系の汎用状態方程式 ○片岡洋右(法大生命) 山田祐理(東電大理工)
1006	複数結合ポーズ系の標準自由エネルギー計算 ○谷田義明、松浦東(富士通研)
1007	3Dプリンタ用分子モデルの製作と、触って見る分子モデル教育の実践 ○吉村忠与志、吉村三智頼(福井高専名誉教授、敦賀気比高校)

■11:50-12:15 展示会プレビュー 各社 5 分

座長3: 田島澄恵(株式会社ヒューリンクス)

企業展示

CX01	株式会社クロスアビリティ	
CX02	株式会社菱化システム	
CX03	株式会社 TS テクノロジー	
CX04	コンフレックス株式会社	

CX05	東京工業大学 学術情報センター	
------	-----------------	--

■12:15-13:30 昼休み

■13:30 - 15:00 ポスター発表(20件)

1P01	コレスキ分解型 MP2,MP3 計算の Xeon Phi での性能評価 山崎大、齊藤天菜、○望月祐志(立教大)、梅田宏明、重田育照(筑波大)
1P02	カルコゲンを含む多重結合分子のモデル計算 川田修太郎、中野克洋、○望月祐志(立教大)
1P03	不斉有機触媒によるエナンチオ区別[2+2]光付加反応の MOPAC-PM6 法でのシミュレーション ○染川賢一(鹿児島大名誉)
1P04	キラルな二核亜鉛錯体によるペプチド加水分解反応の立体選択性 ○崎山博史(山形大理)
1P05	公開データを利用するオレフィン重合触媒の構造活性相関(QSAR) ○志賀昭信(ルモックス技研)
1P06	ホルムアミジナートイオンとシクロオクタジエンが配位したロジウム(I)二核錯体の構造と電子状態 井手雄紀、池上崇久、井上諒子、吉岡大輔、御厨正博、片岡祐介、○半田 真(島根大院総合理工、関学大理工)
1P07	天然ゴムの配座探索と構造解析 ○秋山和輝、河原成元、内田希(長岡技科大)
1P08	白金触媒上における 二酸化炭素還元 の分子軌道法を用いた研究 ○向剛志、北川貴大、内田希、白仁田沙代子、梅田実(長岡技科大)
1P09	ベンズアニリド誘導体及びフェニルアセトアミド誘導体における安定構造の理論的研究 ○須田岬(城西大院理)、島野洋祐(城西大院薬)、高山淳(城西大院薬)、坂本武史(城西大院薬)、寺前裕之(城西大院理)
1P10	陽電子消滅に関する理論的研究: $\gamma$ 線スペクトル半値幅の系統的解析 ○岩撫徹(早大先進理工)、五十幡康弘(早大先進理工)、中井浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB)
1P11	分割統治型自己無撞着場計算における収束性の改善 野中佑太郎 <sup>1</sup> 、○吉川武司 <sup>1</sup> 、中井浩巳 <sup>1-4</sup> (早大先進理工 <sup>1</sup> 、早大理工研 <sup>2</sup> 、JST-CREST <sup>3</sup> 、京大 ESICB <sup>4</sup> )

1P12	ジグザグ型 CNT の電子構造のチューブ長依存性とチューブ径依存性 ○森川大、野村泰志、溝口則幸(信州大、明葉大)
1P13	TD DFT 法による分子内プロトン移動反応の理論的研究(3) ○新井健文(城西大院理)、長岡伸一(愛媛大理)、長嶋雲兵(産総研)、寺前裕之(城西大院理)
1P14	分子軌道法プログラムでの利用に向けた ACP 通信ライブラリによる集団通信の実装 ○本田宏明、森江善之、南里豪志、稲富雄一、高見利也(九大情基セ)
1P15	OpenFMO における 4 中心クーロン相互作用項計算の GPGPU 化の試み ○梅田宏明、塙敏博、庄司光男、朴泰祐、重田育照(筑波大、東大)
1P16	二電子 Fock 行列の原始基底計算アルゴリズムの提案 ○今村憲亮、本田宏明、稲富雄一、南里豪志(九大シス情、九大情基セ、JST-CREST)
1P17	生体分子シミュレーションの拡張現実型提示 ○森下裕介、北原格、大田友一(筑波大)
1P18	NiPt ナノ粒子における Pt 拡散特性の分子動力的解析 ○長尾歩(滋賀県立大院工)、石元孝佳、古山通久(九大稲盛セ、JST-CREST)、宮村弘、ジョン・クヤ、パラチャンドラン・ジャヤデワン(滋賀県立大工)
1P19	分子動力学法を用いた 2Na-Ca 置換に伴う Na <sub>2</sub> O-CaO-SiO <sub>2</sub> 系ガラスの構造解析 ○岩田 一徳、澤口 直哉、佐々木 眞(室工大院) 大川 政志(沼津高専)
1P20	YbFe <sub>4</sub> Sb <sub>12</sub> の格子振動・熱伝導解析 ○澤口直哉、中村法仁、佐々木眞(室工大院)
1P21	EXCEL による分子動力学 ○片岡洋右(法大生命)、山田祐理(東電大理工)

■15:00-16:00 口頭発表 20 分 3 件

座長4: 林 治尚(兵庫県立大)

1008	シアン化水素における陽電子親和力の H/D 同位体効果の理論的解明 ○浦川海尋、北幸海、立川仁典(横市大院・生命ナノ)
1009	金属ナノ粒子の物性発現機構に関する理論解析 ○石元孝佳、稲富雄一、本田宏明、古山通久(九大稲盛セ、九大シス情、九大情基セ、JST-CREST)
1010	C60 多段階環化付加反応に対する振電相互作用密度解析 ○春田直毅、佐藤徹、田中一義(京大院工、京大触媒電池)

■16:00-17:40 口頭発表 20分5件

座長5:川内進(東工大院理工)

1011	オゾン酸化したポリイソプレンの応力下における切断・結合反応 ○樋口祐次 1,2、尾澤伸樹 1、佐藤弘一 3、久保百司 4 (1 東北大院工、2JST さきがけ、3 ブリヂストン中研、4 東北大金研)
1012	Koopmans の定理と時間反転対称性を同時に考慮した相対論的開殻 Hartree-Fock 法 ○中村亮太 1、中野匡彦 1、清野淳司 1、中井浩巳 1-4 (1 早大先進理工、2 早大理工研、3JST-CREST、4 京大 ESICB)
1013	シクロパラフェニレンにおける擬 Jahn-Teller 効果と構造制御 ○佐藤徹、亀岡優一郎、田中一義(京大院工)
1014	経路積分分子動力学法を用いたミュオニウム化アセトンの解析 ○大場優生、河津励、立川仁典 (横市大院・生命ナノ)
1015	血液凝固因子 Xa とリガンドとの相互作用解析 ○佐藤博之、松浦東(富士通研)

■18:00 懇親会

蔵前会館 1F「ロイヤルブルーホール」にて <http://www.somuka.titech.ac.jp/ttf/access/index.html>

2日目 5月29日(金)

■09:00 受付開始

■09:30 - 10:30 口頭発表 20分3件

座長6:佐々和洋(福井高専)

2001	スケーリングによるダイナミクスと構造・熱力学量・分子間力の関係 -液晶相を中心に- ○佐藤克彦(大阪産業大)
2002	分子動力学法及び量子力学の理解のための Excel を用いた教材開発 ○成島和男、岩武 澄、川上侑作(宇部高専)
2003	大域的ポテンシャル表面の量子化学自動探索に基づく埋蔵分子の発掘 ○大野公一、佐藤寛子、岩本武明(量子化学探索研、東北大院理、国立情報研)

■10:30 - 11:00 総会(30分)

司会:会長 細矢治夫

■11:00 - 11:40 表彰 10分および受賞講演 30分

座長7:善甫康成(法政大)

2A01	学会賞	量子化学に基づくマルチフィジックス・マルチスケールシミュレータの開発とシステム・材料設計への応用 ○久保百司(東北大金研)
------	-----	--

■13:30-15:00 ポスター(20件)

2P01	分子動力学法による単層カーボンナノチューブに内包されたアルカリハライドの構造と物性評価 ○横倉 瑛太、片岡 洋右、緒方 啓典(法大生命, 法大マイクロ・ナノテクセンター)
2P02	分子動力学シミュレーションによるカーボンナノチューブに内包されたカルコゲンの構造および物性評価 ○佐藤豊、片岡洋右、緒方啓典(法大生命, 法大マイクロ・ナノセンター)
2P03	InfiniBand ループ接続を用いた並列計算システム ○北山清章、猪俣健輔(シミュラティオ)、二川潤(インテグシステム)、善甫康成(法大情報)
2P04	Mathematica による分子動力学 ○山田祐理(東電大理工)、片岡洋右(法大生命)
2P05	分子軌道法を用いたチタニア共析めつき機構の研究 島崎峻州、○宮井菜月、内田 希(長岡技科大)
2P06	分子軌道法を用いたシリカフェームを含む耐火物の反応の研究 高野滉一、○内田 希(長岡技科大)
2P07	最大エントロピー法におけるラグの選択法に関する考察 ○遠越光輝、狩野覚、善甫康成(法大情報)
2P08	金属表面での分子種の吸着挙動の比較 ○猪俣 健輔(シミュラティオ)、善甫 康成(法大情報)
2P09	実空間実時間の TDDFT における様々な交換相関汎関数による効果 ○田中志歩、遠越光輝、善甫康成(法大情報)
2P10	放射性 plume 軌跡のためのシミュレータ開発 ○青山智夫、若月泰孝(筑波大・アイソトープ環境動態研究センター)

2P11	固体酸化物形燃料電池の界面におけるカチオンの拡散経路の理論解析 ○林敬堂(九大院工、JST-CREST)、石元考佳、古山道久(九大稲盛セ、JST-CREST)
2P12	二核イリジウム有機金属錯体の構造と電子状態 ○片岡祐介、川本達也、半田 真 (島大院総合理工、神奈川大院理)
2P13	「埋蔵分子」発掘プロジェクト:量子化学に基づくグローバル反応マップデータからの発見 ○佐藤寛子(国立情報研)、小田朋宏((株)SRA)、中小路久美代(京大大学際融合)、宇野毅明(国立情報研)、岩田覚(東大情報理工)、大野公一(東北大院理、量子化学探索研)
2P14	振電相互作用密度解析によるルブレンの再配列エネルギー制御 ○須田翔大(京大院工)、佐藤徹(京大院工、京大 ESICB)、田中一義(京大院工)
2P15	3級芳香族アミンにおける蛍光性発現と振電相互作用 ○松本潮、佐藤徹、田中一義(京大院工、京大触媒電池)
2P16	-
2P17	カーボンナノチューブの芯へセレン、テルルらせんを入れた系の電子状態計算 ○夏目雄平(千葉大)
2P18	ケクレン骨格での置換基効果解析 ○藤山亮治(高知大理)
2P19	リガンドドッキングのための高速動力学法の開発 ○佐伯敬志、小畑繁昭、後藤仁志(豊橋技科大院、豊橋技科大次世代シム)
2P20	Web ページ「Jmol トピックス」による分子関連ニュースの発信 ○本間善夫(ecosci.jp)

■15:00-15:30 受賞講演 30分

座長 8: 後藤仁志(豊橋技科大)

2A02	吉田賞(論文賞)	大規模・高精度相対論的量子化学計算手法の開発:元素戦略の理論基盤確立を目指して ○清野淳司(早大先進理工)、中井浩巳(早大先進理工、早大理工研、JST-CREST、京大 ESICB)
------	----------	--

■15:30-17:10 口頭発表 20分 5件

座長 9: 八木徹(江戸川大)

2004	液体状態における酢酸、ギ酸メチルの分子間相互作用依存性 ○西田尚大(広島大院・理)、金井清二(広島大・理)、徳島高、堀川裕加(理研/SPring-8)、高橋修(広島大-ISSD)
------	--

2005	xNa <sub>2</sub> O-(1-x)SiO <sub>2</sub> ガラスに適用する原子間相互作用の考察 ○山本優也、澤口直哉、佐々木真(室工大院)
2006	量子分子動力学シミュレーションによるLi空気電池の負極材料と電解液の反応の解析 ○渡辺敬太、樋口祐次、尾澤伸樹(東北大院工)、久保百司(東北大金研)
2007	高強度ゲルの破壊プロセスにおける粗視化分子動力学シミュレーション ○齋藤圭祐(東北大金研)、樋口祐次、尾澤伸樹(東北大院工)、久保百司(東北大金研)
2008	分子動力学シミュレーションによるイオン液体中におけるフラーレンの結晶成長に関する研究 ○IB Hendra P.、樋口祐次、尾澤伸樹(東北大院工)、久保百司(東北大金研)

2A01

## 量子化学に基づくマルチフィジックス・マルチスケール シミュレータの開発とシステム・材料設計への応用

○久保百司

東北大学金属材料研究所 (〒980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1)

### 【緒言】

近年のナノテクノロジーの発展により、ナノスケールで起こる「化学反応」がマクロスケールでの機械特性・性能に大きく影響を与えるようになり、重厚長大な機械システムといえども「化学反応」の電子レベル制御が必須となってきた。さらに、機械システムは、「動き」によって初めて機能が発現することから、「化学反応」と「摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱」などが複雑に絡み合ったマルチフィジックス現象の電子レベルでの深い理解とそれに基づく設計が重要課題となっている。

これまで機械分野においては、マルチフィジックス現象の理論的検討には、有限要素法、流体力学などの連続体理論が活用されてきた。しかし、「化学反応」の解明には電子を取り扱うことが必須であり、電子を考慮していない連続体理論をいくら発展させても、「化学反応」を含むマルチフィジックス現象の解明は不可能である。そこで著者らは、機械分野に量子化学を導入するという異分野融合の発想に至り、第一原理分子動力学法、**Tight-Binding** 量子分子動力学法に基づくマルチフィジックスシミュレータの開発を進めてきた(図)。また、開発した第一原理分子動力学法と **Tight-Binding** 量子分子動力学法に基づくマルチフィジックスシミュレータを用いて、燃料電池、太陽電池、トライボロジー、エレクトロニクス、マイクロマシン、電気自動車、航空・宇宙機器、クリーンエネルギー、発電プラント、水素ステーションなどエネルギー・環境に係わる広範囲な研究分野において、システム・材料設計を実現してきた[1-7]。

さらには、上記の第一原理分子動力学シミュレーション、**Tight-Binding** 量子分子動力学シミュレーションに加え、粗視化分子動力学シミュレーション、連続体力学シミュレーションまでの幅広いシミュレーション技術を融合したマルチスケールシミュレーション技術の開発を推進してきた。本講演では、「化学反応」と「摩擦、衝撃、応力、流体、電位、伝熱」などが複雑に絡み合ったマルチフィジックス現象・マルチスケール現象に対して、上記で開発したシミュレータを応用した研究例について紹介する。

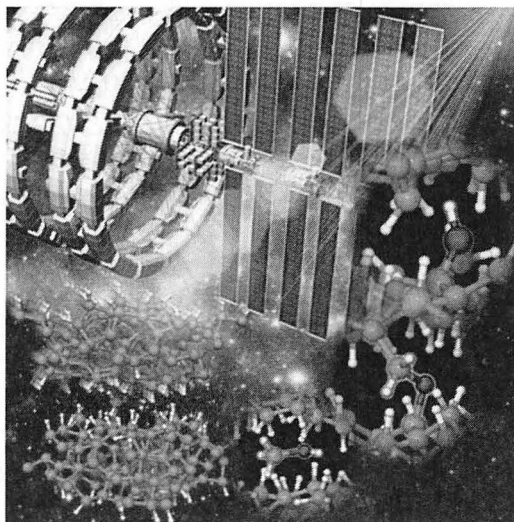


図 機械分野におけるマルチフィジックスシミュレーションのコンセプト図(論文[7]の表紙絵に採択)

- [1] T. Kuwahara, M. Kubo et al., Sci. Rep., 5 (2015) 9052.
- [2] H. Ito, M. Kubo et al., J. Phys. Chem. C, 118 (2014) 21580.
- [3] T. Onodera, M. Kubo et al., J. Phys. Chem. C, 118 (2014) 11820.
- [4] S. Bai, M. Kubo et al., RSC Adv., 4 (2014) 33739.
- [5] T. Onodera, M. Kubo et al., J. Phys. Chem. C, 118 (2014) 5390.
- [6] T. Kuwahara, M. Kubo et al., J. Phys. Chem. C, 117 (2013) 15602.
- [7] K. Hayashi, M. Kubo et al., Faraday Discuss., 156 (2012) 137.

2A02

## 大規模・高精度相対論的量子化学計算手法の開発：

## 元素戦略の理論基盤確立を目指して

○清野 淳司<sup>1</sup>、中井 浩巳<sup>1,2,3,4</sup><sup>1</sup>早稲田大学 理工学研究所 (〒169-8555 東京都新宿区大久保 3-4-1)<sup>2</sup>早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科 (〒169-8555 東京都新宿区大久保 3-4-1)<sup>3</sup>JST-CREST (〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)<sup>4</sup>京都大学 ESICB (〒618-8520 京都府京都市西京区京都大学桂)

【緒言】 Schrödinger 方程式を基礎とする非相対論的量子化学は約 90 年の歴史において大いに発展した。特に 1990 年代以降はコンピュータの飛躍的な発展に伴い、大規模化・高精度化・高機能化が進み、今日では理論化学者のみならず実験化学者でもブラックボックスとして計算が可能になった。このように量子化学は一見成熟期に差し掛かったかのように見えるが、周期表のあらゆる元素を扱うためには现阶段の量子化学理論は不十分な点を抱えている。それは相対論効果が無視されている、もしくは十分に考慮されていない点である。特に現在推し進められている元素戦略の視点に立った場合、希少元素や規制元素の特性を理解し、革新的な機能を持つ物質・材料を設計するためには、定性的・定量的観点からも緻密な相対論効果の取り扱いは不可欠である。

これらの状況を踏まえ、我々は大規模分子系も取り扱える高精度な相対論的量子化学計算手法の構築を行ってきた<sup>[1]</sup>。本講演では最近の進展も含め、手法全体をまとめて報告する。

【全過程における線形スケールリング手法】 本研究では 4 成分 Dirac-Coulomb ハミルトニアン  $\mathbf{H}_4^{\text{DC}}$  に対してユニタリー変換  $\mathbf{U}$  を施す高精度 2 成分相対論の一つ、無限次 Douglas-Kroll-Hess (IODKH/IODKH) 変換<sup>[2],[3]</sup>を用いる。

$$\tilde{\mathbf{H}}_4^{\text{DC}} \approx [\dots \mathbf{U}^\dagger(j) \mathbf{U}^\dagger(i) \dots] \left[ \sum_{i>j} \mathbf{H}_4^{\text{DC}}(i,j) \right] [\mathbf{U}(i) \mathbf{U}(j) \dots] = \sum_i \begin{pmatrix} \mathbf{h}_2^+(i) & 0 \\ 0 & \mathbf{h}_2^-(i) \end{pmatrix} + \sum_{i>j} \begin{pmatrix} \mathbf{g}_2^{++}(i,j) & \mathbf{g}_2^{+-}(i,j) \\ \mathbf{g}_2^{-+}(i,j) & \mathbf{g}_2^{--}(i,j) \end{pmatrix} \quad (1)$$

ここで  $\mathbf{h}_2^+$  ( $\mathbf{h}_2^-$ ) と  $\mathbf{g}_2^{++}$  ( $\mathbf{g}_2^{--}$ ) は 1 電子、2 電子演算子の電子 (陽電子) 成分である。IODKH/IODKH 法は 4 成分 Dirac-Coulomb ハミルトニアンによる結果を原子番号 100 番以上の超重原子においても高精度に再現するが、計算コストに問題があるため、大規模分子系に適用するには効率的な手法の開発が不可欠である。そこで我々は IODKH/IODKH 法などの 2 成分相対論に対する線形スケールリング変換手法である、局所ユニタリー変換 (LUT) 法<sup>[4],[5]</sup>を提案した。

LUT 法では全系に対する 1 電子ユニタリー変換  $\mathbf{U}$  を部分系に対するユニタリー変換の直和で近似する。このとき、それぞれの部分系を原子  $A$ 、 $B$ 、 $\dots$  として、

$$\mathbf{U} \approx [\mathbf{U}^A \oplus \mathbf{U}^B \oplus \dots] \quad (2)$$

となる。さらに他の原子の情報を含まない運動エネルギー項と電子間反発項に関しては各原子のみの IODKH 変換を行う。一方、核-電子引力項は他の原子の情報を含み原子間の効果も重要となるため、カットオフ半径を導入して、この半径以内の相互作用に関して変換を行う。

本研究ではさらに Hartree-Fock (HF) および電子相関計算の線形スケールリングを実現するため、分割統治 (DC) 法へと拡張した<sup>[6],[7]</sup>。この拡張において非相対論 (NR) で用いられる一部の 1 電子、2 電子積分を LUT 法による IODKH 変換された積分に置き換えることで計算が実現される。

本手法全体の手続きと計算スケールリングを Figure 1 に示す。通常法では、1 電子、2 電子積分にかかるコストは、それぞれ  $O(n^2)$ 、 $O(n^4)$  であるが、DC 法により  $O(n^2)$  になる。さらに SCF 計算の際、高速多重極展開法 (FMM) などで長距離のクーロンおよび交換項計算を削減することにより  $O(n^1)$  となる。また、1 電子と 2 電子積分における相対論的な変換に要する計算コストは、通常それぞれ  $O(n^3)$ 、 $O(n^5)$  であるが、LUT 法により、各部分系と近距離の相互作用の変換のみとなり、 $O(n^1)$  が達成される。SCF 計算ではフォック行列の生成・対角化でそれぞれ  $O(n^4)$  と  $O(n^3)$  の計算コストを要するが、DC 法を適用することで  $O(n^2)$  と  $O(n^1)$  となり、さらに FMM などを用いることで共に  $O(n^1)$  が達成される。MP2、CCSD、CCSD(T) の計算コストは通常それぞれ、 $O(n^5)$ 、 $O(n^6)$ 、

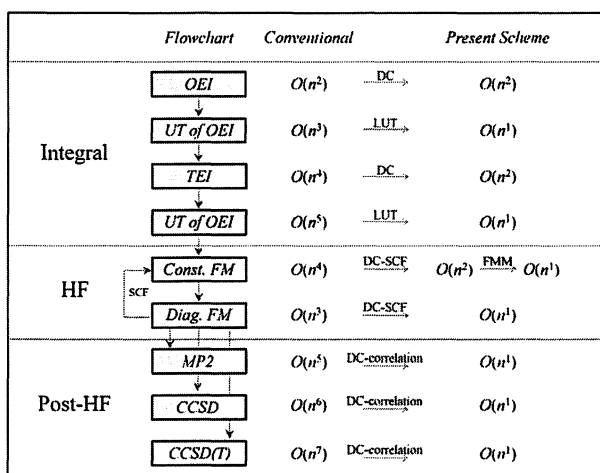


Figure 1. Diagrammatic representation and theoretical scaling of the calculation of the conventional and DC-based HF, MP2, CCSD, and CCSD(T) methods using IODKH Hamiltonian with/without LUT scheme.

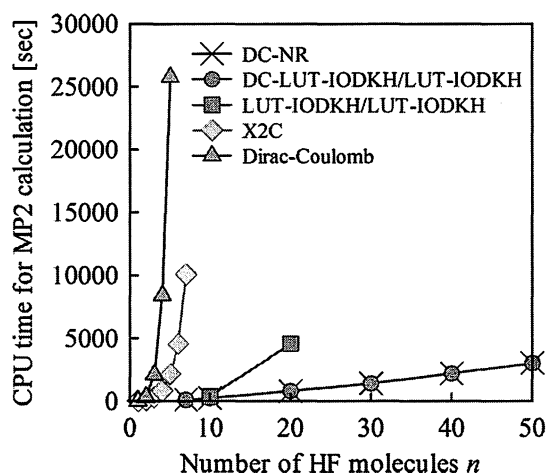


Figure 2. Comparison of CPU time (sec) for (DC-)MP2 method combined with NR, LUT-IODKH/LUT-IODKH, X2C, and Dirac-Coulomb Hamiltonian in (HF) $_n$ .

$O(n^7)$ であるが DC 電子相関法により、全ての手法で  $O(n^1)$ が達成される。このように本手法は計算過程全体の線形スケーリングを達成する方法となる。

LUT 法に基づく電子相関計算に関して、4成分 Dirac-Coulomb 計算や4成分相対論と等価な X2C 計算による計算時間との比較を行った。Figure 2 に鎖状フッ化水素  $n$  量体 ( $n = 10-50$ ) の MP2 計算に要する計算時間を示す。用いた手法は NR とスピンフリー (SF) 型の LUT-IODKH/LUT-IODKH ハミルトニアンによる、通常の MP2 および DC-MP2 であり、また X2C と Dirac-Coulomb 法に関しては SF 型の通常の MP2 計算の結果である。この結果、LUT-IODKH/LUT-IODKH 計算は X2C や Dirac-Coulomb 計算と比較して大きく計算時間が削減されることが確認された。さらに DC 法を適用することにより、線形スケーリングが達成され、その計算時間は NR と同等であることが示された。なお計算精度は通常法に比べて  $1 mE_h$  以下の誤差であった。

【凍結ポテンシャル法】 上記の手法により従来の高精度相対論計算に比べて、計算時間のプレファクター、オーダーともに大きく削減された。しかし、重元素を多数含んだ大規模分子を計算する場合、あらわに取り扱う電子の多さは計算の大きなボトルネックとなる。そこで我々は、内殻電子をポテンシャルとして扱う手法と相対論的な全電子計算手法をスムーズに結合する、凍結ポテンシャル (FP) 法を提案した<sup>[8]</sup>。本手法により LUT-IODKH/IODKH 法の精度を保ったまま、SCF 計算の大幅な高速化が達成された。

【重元素化合物のための高速な電子間反発積分手法】 LUT-IODKH/IODKH 法により、量子化学計算のボトルネックの一つである積分計算の律速が、NR と同様の多中心の電子間反発積分 (ERI) にシフトする。特に重原子化合物の基底関数は角運動量の高い軌道や長い縮約を多数含み、多くは一般縮約 (GC) 型で構築されているため、従来の軽元素化合物で使われている ERI 計算アルゴリズムを用いると、計算コストは劇的に増加する。そこで我々はこのような基底関数に特に有効となる随伴座標展開—漸化関係式 (ACE-RR) 法を進展させ、移項関係式 (TR) の導入と GC へのアルゴリズムの最適化を行う、GC-ACE-TRR 法を開発した<sup>[9],[10]</sup>。本手法は重元素を多数含む系において現状世界最速の ERI 計算アルゴリズムであることが示された。

【参考文献】 [1] J. Seino and H. Nakai, *J. Comput. Chem. Jpn.* **13**, 1 (2014). [2] M. Barysz and A. J. Sadlej, *J. Chem. Phys.* **116**, 2696 (2002). [3] J. Seino and M. Hada, *Chem. Phys. Lett.* **461**, 327 (2008). [4] J. Seino and H. Nakai, *J. Chem. Phys.* **136**, 244102 (2012). [5] J. Seino and H. Nakai, *J. Chem. Phys.* **137**, 144101 (2012). [6] J. Seino and H. Nakai, *J. Chem. Phys.* **139**, 034109 (2013). [7] J. Seino and H. Nakai, *Int. J. Quant. Chem.* **115**, 253 (2015). [8] J. Seino, M. Tarumi, and H. Nakai, *Chem. Phys. Lett.* **592**, 341 (2014). [9] M. Hayami, J. Seino, and H. Nakai, *J. Comput. Chem.* **35**, 1517 (2014). [10] M. Hayami, J. Seino, and H. Nakai, *J. Chem. Phys.* submitted.

## 日本コンピュータ化学会 2015 秋季年会 実施報告

2015 秋季年会実行委員長  
公立ほこだて未来大学 櫻沢 繁

日本コンピュータ化学会 2015 秋季年会は、一般公開も含め 2015 年 10 月 30 日（金）から 11 月 1 日（日）の 3 日間、北海道函館市の函館市地域交流まちづくりセンター及び五稜郭タワーアトリウムにおいて開催されました。函館では 9 年前に北海道教育大学・松橋博美先生が開催されて以来、2 度目となりました。観光地中心の函館市地域交流まちづくりセンター（大正 12 年に建築された洋風を基調とした「近世復興式」の建物）を会場とし、参加者 93 名、発表件数 51 件（特別講演 2 件、口頭発表 16 件、ポスター発表 33 件）、企業展示は 3 社と、ほぼ例年並みの規模で開催することができました。

本学会にて「化学」と「計算」を新たな視点から融合した概念を創出する試みとして、「自然計算」の専門家である名古屋大学の鈴木泰博先生に、また 2 日目は、次期秋季年会的実行委員長である島根大学の半田真先生にそれぞれ特別講演をいただきました。また懇親会は、赤レンガ倉庫群の中のレストラン「みなとの森」にて参加者 56 名で開催されました。北海道が誇るウイスキー「余市」の原酒はとても好評で、歓談が始まると人だかりとなり、空瓶も含めてすぐになくなりました。その後、バスで函館山からの夜景を観光して、2 次会は活イカなど海鮮料理を堪能していただきました。

一般公開は、学会誌編集室の中村恵子さんのご尽力で「子どもゆめ基金助成活動」に採択され、また公立ほこだて未来大学やサイエンスサポートほこだてなどの支援を受け、「科学発信！！Hakodate」と題して開催されました。31 日は年会終了後引き続き、イグノーベル賞受賞の公立ほこだて未来大学・高木清二先生、サイエンス漫画家・はやのんさん、ほこだて国際科学祭主催者の公立ほこだて未来大学・美馬のゆり先生により講演や鼎談が行われました。11 月 1 日の一般公開イベントは五稜郭タワーアトリウムで市内高校の科学部を含めた 15 のブース展示、ステージ上では吉本興業・黒ラブ教授のライブ、サイエンス漫画家・三上いすずさんのトークショー、ベビーダンスサークル キラニコ smile のベビーダンスなど、多彩な催しが開催されました。函館市内の幼児から高校生、教員・保護者、観光客など非常に多くの方々にご参加いただきました。これらの様子は FM いるか、函館新聞、北海道新聞、日本工業新聞などで大々的に報道され、一般市民に広く伝えられました。

実行委員長の準備不足や力不足により随所で皆様にご迷惑をおかけいたしました。ご参加いただきました皆様のご協力のおかげで何とか終了することができました。企業展示では、株式会社クロスアビリティ様、九州大学情報基盤研究開発センター様、東京工業大学学術国際情報センター様からご協力をいただきました。また、本年会開催にあたり、函館市から助成をいただきました。他にも各方面の様々な方々から、ご協力を賜りました。本当にありがとうございました。御礼申し上げます。

来年の秋季年会は、10 月 22～23 日に島根大学総合理工学部・半田真先生が実行委員長となり島根で開催されるとのことです。春季年会と合わせ、また皆様にお会いできますことを楽しみにしております。

## 日本コンピュータ化学会 2015 秋季年会収支報告

2015.10.30-11.1 於:北海道函館市

参加人数 正会員 36 名 シニア会員 9 名 学生会員 14 名  
 共催会員 15 名 非会員 7 名 非会員シニア・学生 9 名 企業展示スタッフ 3 名  
 合計 93 名

発表件数 特別講演 2 件, 口頭発表 16 件, ポスター発表 33 件

展示企業 3 社

懇親会参加者 56 名

会計報告 収入 1,373,000 円, 支出 1,007,405 円 (差額 365,595 円)

以下2015年秋季年会の主なデータと収支をご報告いたします。

収入の部		金額	支出の部		金額
事前正会員(共催)	5,000 × 33	165,000	会場費		73,000
事前シニア	2,000 × 8	16,000	印刷製本費		84,264
事前学生	3,000 × 14	42,000	講師謝金		110,000
事前非会員	10,000 × 5	50,000	広告宣伝費		11,800
事前シニア・学生	5,000 × 7	35,000	人件費		186,000
当日正会員	7,000 × 15	105,000	事務・雑費		81,639
当日シニア	3,000 × 1	3,000	通信費		25,404
当日学生会員	5,000 × 0	0	懇親会		447,098
当日共催会員	7,000 × 3	21,000			
当日非会員一般	12,000 × 2	24,000			
当日非会員学生	7,000 × 2	14,000			
事前懇親会一般	5,000 × 38	190,000			
当日懇親会一般	6,000 × 18	108,000			
小計		773,000			
企業展示	100,000 × 3	300,000			
学会からの補助金		200,000			
函館市からの補助金		100,000	小計		1,007,405
小計		600,000	繰越金 A-B		365,595
収入 A	合計	1,373,000	支出 B		1,373,000

## 日本コンピュータ化学会 2015 年秋季年会プログラム

- 主催 日本コンピュータ化学会 (SCGJ)
- 共催 日本化学会, 日本薬学会
- 後援 公立はこだて未来大学, サイエンスサポートはこだて
- 協力 五稜郭タワー株式会社, 東京エレクトロン株式会社, 株式会社タロウ
- 会期 2015 年 10 月 30 日(金) ~ 31 日(土)  
(一般公開: 10 月 31 日(土) ~ 11 月 1 日(日))
- 会場 函館市地域交流まちづくりセンター  
北海道函館市末広町 4 番 19 号  
TEL: 0138-22-9700

### 1 日目 10 月 30 日(金)

- 10:00 受付開始
- 11:00-11:10 開会の挨拶 実行委員長 櫻沢繁
- 11:10-12:00 特別講演① 50 分  
座長: 櫻沢繁(公立はこだて未来大学・システム情報科学)

1A01	抽象化学系による計算とその展開 ○鈴木泰博(名古屋大学・情報)
------	------------------------------------

- 12:00-13:00 昼休み
- 13:00-14:20 口頭発表① 20 分 4 件  
座長: 寺前 裕之(城西大学・理)

1001	高分解能赤外スペクトルの帰属用 VB プログラムの開発 ○堀合公威(城西大院・理学), 栗原照子(城西大・非常勤), 高田大樹(大阪市立難波特別支援学校), 石塚雅直(城西大院)
1002	弱酸水溶液を対象とした軟 X 線発光分光の pH 依存性に対する理論研究 ○西田尚大(広島大院・理), 堀川裕加(山口大院・理), 徳島高(理研 SPring-8 センター), 高橋修(広島大・ISSD)
1003	比較的大きな分子に対する内殻二重正孔分光 ○高橋修(広島大)
1004	高い三重項状態を経由する熱活性型遅延蛍光 ○佐藤徹(京大院工, 京大 ESICB)

- 14:20-15:20 口頭発表② 20 分 3 件  
座長: 長嶋雲兵(FOCUS)

1005	分子モデルによる荷電コロイド分散系の構造(v2) ○片岡洋右(法大)
1006	全原子モデルを用いた 4-n-alkyl-4'-cyanobiphenyl(nCB)の分子動力学シミュレーション ○高橋祐貴, 石川良(東京工業大学)川内進(東京工業大学, JST)
1007	多成分分子軌道-NEB 法の開発と応用計算 ○宇田川太郎, 橋本茉莉名, 鈴木机倫, 立川仁典(岐阜大工, 横浜市大院・生命ナノ)

■ 15:20-15:40 企業展示プレビュー 各社 5分以内  
座長:棟方渚(北海道大学大学院・工学研究科)

CX01	九州大学 情報基盤研究開発センター	
CX02	株式会社クロスアビリティ	
CX03	東京工業大学 学術国際情報センター	

■ 15:40-16:00 ポスター1 日目概要説明 各ポスター1分以内  
座長:棟方渚(北海道大学大学院・工学研究科)

■ 16:00-17:30 ポスター発表 90分

1P01	生分解性キレート剤が作る金属錯体の構造予測 大友秀一, ○崎山博史(山形大理)
1P02	白金触媒による二酸化炭素還元分子軌道法を用いた研究 ○向剛志, 北川貴大, 内田希(分子機能シミュレーション研究室), 白仁田沙代子, 梅田実(ケミカルデバイス研究室)
1P03	ジシランによる二酸化炭素の還元反応の理論的予測 ○羽田野智也, 駒崎弘樹, 棗田貴文, 林慶浩, 川内進(東工大大院理工)
1P04	分子軌道計算と浸漬熱測定を用いたナノダイヤモンドの表面評価 ○宮井菜月, 松原浩, 内田希(長岡技科大)
1P05	分子動力学法を用いたナトリウムケイ酸塩ガラスの修飾イオンとネットワーク構造の関係 ○山本優也, 澤口直哉, 佐々木真(室工大院)
1P06	金属ナノ粒子に対する大規模第一原理計算 ○石元孝佳, 古山通久(九大稲盛セ, JST-CREST)
1P07	アルカリ・アルカリ土類イオン混合ケイ酸塩ガラス/融体の分子動力学計算 ○岩田一徳, 澤口直哉, 佐々木真(室工大院), 大川政志(沼津高専)
1P08	フタロシアニンを使用した有機薄膜太陽電池における励起電子移動効率の解析 ○樋岡慎一郎(野村研)
1P09	RuO 錯体によるアルコール酸化反応に関する理論的研究 ○塩田淑仁, 小島隆彦, 吉澤一成(九大先導研, 筑波大)
1P10	密度汎関数法を用いた Fe-Al 複核錯体の構造解析 ○大嶋正人, 大石理貴(東工芸大工, 東工大工)
1P11	結晶構造予測法を用いた有機半導体結晶の圧力誘起造変化:ルブレンを中心に 小畑繁昭(豊橋技科大, 産総研), 後藤仁志(豊橋技科大), ○下位幸弘(産総研)
1P12	YbCo <sub>4</sub> Sb <sub>12</sub> の熱振動への Yb 充填率の影響 ○橋本怜奈, 澤口直哉, 佐々木真, 関根ちひろ(室工大院)
1P13	量子モンテカルロ法による多原子分子の非調和振動解析 ○北幸海, 藤岡蔵, 立川仁典(横市大院・生命ナノ)

1P14	天然ゴムの配座探索と構造解析 ○秋山和輝, 内田希, 河原成元(長岡技科大)
1P15	水中の散乱光構造を可視化する一方式 ○神部順子(江戸川大), 八木徹(江戸川大), 長嶋雲兵(FOCUS), 青山智夫(筑波大)
1P16	デジタルカメラを用いた SPM 分光分析の基礎的検討 ○八木徹(江戸川大), 神部順子(江戸川大), 長嶋雲兵(FOCUS), 青山智夫(筑波大)

■18:00-懇親会    ベイサイドレストラン みなとの森  
北海道函館市豊川町 11 番 5 号  
TEL:0138-21-1181

2 日目 10 月 31 日(土)

■8:30 受付開始

■9:00-10:00 口頭発表③ 20 分 3 件

座長:立川 仁典(横浜市大院・生命ナノ)

2001	2-アザスピロ環化合物における閉環反応の理論的研究 ○寺前裕之, 須田岬, 湯川満(城西大理), 林浩輔, 高山淳, 坂本武士(城西大薬)
2002	Ru(0)触媒による共役ジエンとスチレンのクロスカップリング反応における置換基効果の理論的解明 ○出口光(東工大院理工), 大槻恒太(東工大院理工), 中村沙季(東工大院理工), 平野雅文(東農工大院工, JST), 川内進(東工大院理工, JST)
2003	共役ポリエンの家系図についての検討 ○細矢治夫(お茶大, 名誉)

■10:00-11:00 口頭発表④ 20 分 3 件

座長:石元孝佳(九州大学・稲盛フロンティア研究センター)

2004	NMR 分子構造解析システム CAST/CNMRにおける対称性が高い構造の自動構造推定について ○小市俊悟, 越野広雪, 佐藤寛子(南山大, 理研, 情報・システム研究機構)
2005	reduced,HOMO-LUMOGap を用いた CNT の電子構造の炭素数依存性の解析 ○森川大, 野村泰志, 溝口則幸(信州大, 明薬大)
2006	混合溶媒中の歯車状両親媒生分子とそのナノキューブに関する理論的研究 ○増子貴子, 平岡秀一, 長嶋雲兵, 立川仁典(横浜市大院・生命ナノ, 東大院・総合, FOCUS)

■11:00-11:10 休憩 10 分

■11:10-12:00 特別講演 50 分

座長:後藤仁志(豊橋技科大院・工学)

2A01	複核錯体の磁性と分子軌道論的解釈 ○半田真(島根大院・総合理工学)
------	--------------------------------------

■12:00-13:00 昼休み (運営会議)

■13:00-14:00 口頭発表⑤ 20 分 3 件

座長:松橋博美(北海道教育大学)

2007	Photoactive, Yellow Protein に現れる低障壁水素結合の理論的解析 兼松佑典, ○立川仁典(横浜市大院・生命ナノ)
2008	Sb および Te 化合物のリガンド交換・リガンドカップリング反応メカニズム ○小林正人, 黒田悠介, 秋葉欣哉, 武次徹也(北大院理, 北大院総化, 広島大名誉, 早大理工研)
2009	ある荷電空間 ○鳴海英之, (元北大院)

■ 14:00-14:10 休憩 10分

■ 14:10-14:30 ポスター2 日目概要説明 各ポスター1 分以内

座長: 高木清二(公立はこだて未来大学・システム情報科学)

■ 14:30-16:00 ポスター発表 90分

2P01	FMO 法を用いた分子性結晶の扱い ○川田修太郎(立教大理), 藤田貴敏(京大理), 望月祐志(立教大理)
2P02	ベンズアニリド誘導体におけるシス・トランス型構造の理論的研究 ○須田岬(城西大院理), 林浩輔(城西大院薬), 高山淳(城西大院薬), 坂本武史(城西大院薬), 寺前裕之(城西大院理)
2P03	粒子法を用いた電子状態計算 ○善甫康成, 遠越光輝(法大 情報)
2P04	TD,DFT 法による OHBA の吸光・発光スペクトルの理論的研究 ○新井健文(城西大院理), 長岡伸一(愛媛大理), 長嶋雲兵(FOCUS), 寺前裕之(城西大院理)
2P05	CUDA によるケモメトリックス計算の高速化 ○齋藤健悟, 山形暢, 吉村季織, 高柳正夫(東農工大院農)
2P06	実空間実時間の TDDFT によるレチナールの光吸収スペクトルの解析 ○田中志歩, 遠越光輝, 善甫康成(法大情報)
2P07	時系列データの繰返しと位相導入による最大エントロピー法の改良と発光吸収スペクトル解析 ○遠越光輝, 狩野覚, 善甫康成(法大情報)
2P08	並列分子科学計算プログラムの電力制約下における性能最適化 ○稲富雄一, 井上弘士(九大, CREST)
2P09	二電子 Fock 行列の原始基底計算アルゴリズムの実装ならびに性能評価 ○今村憲亮(九大シス情), 本田宏明(九大情基セ, JST-CREST), 稲富雄一(九大シス情, JST-CREST), 南里豪志(九大情基セ, JST-CREST)
2P10	ガウス型基底関数の s 型関数による再展開 ○渡邊寿雄(東工大), 稲富雄一(九大, 東工大), 梅田宏明(筑波大), 本田宏明(九大), 長嶋雲兵(FOCUS), ○大嶋正人, 大石理貴(東工芸大工, 東工大工)
2P11	LRnLA アルゴリズムによる差分法シミュレーションの最適化 ○Anastasia PEREPELKINA, 善甫康成 (法大), Vadim LEVCHENKO (KIAM)
2P12	ACP 通信ライブラリを用いた OpenFMO プログラムの実装 ○本田宏明, 稲富雄一, 森江善之, 南里豪志, 高見利也(九大情基センター, 九大シス情, JST-CREST)

2P13	GPGPUによるハートリーフォック交換項の高速計算プログラムの開発 ○長代新治, 安田耕二(名大院)
2P14	スマートフォン対応のAR分子グラフィックス表示アプリの開発 ○宇野健, 佐々和洋, 林治尚, 中野英彦(県立広島大, 福井高専, 兵庫県立大)
2P15	化学教育のためのWebサイト運営20周年を前に ○本間善夫(ecosci.jp)
2P16	限られたアミノ酸のみからなる原始タンパク質の立体構造の推定 ○小田彰史, 仲吉朝希, 福吉修一(金沢大院医薬保, 阪大蛋白研)
2P17	フラグメント間相互作用エネルギーを用いたPLS回帰によるCDK2/9阻害剤の3次元定量的構造活性相関 ○吉田智喜, 小澤新一郎, 中込泉, 山乙教之, 広野修一(北里大薬)

■16:00 年会終了

■16:00-18:00 一般公開イベント(前夜祭)

16:00-16:05 開会の挨拶 細矢治夫(日本コンピュータ化学会会長)

16:05-16:40 真正粘菌, 計算がちょっと得意な単細胞  
高木清二(公立はこだて未来大学)

16:40-17:10 「科学をもっと身近に感じてもらうには？」漫画でサイエンスコミュニケーション  
はやのん(はやのん理系漫画制作室)

17:15-18:00 サイエンストーク

美馬のゆり(公立はこだて未来大学), 高木清二, はやのん

### 3日目 11月1日(日)

■10:00-15:00 一般公開イベント

場所:五稜郭タワーアトリウム

北海道函館市五稜郭町43-9 五稜郭タワー

TEL:0138-51-4785

内容:一般・高校生向けトークセッション及び科学展示

トークセッションプログラム

10:00-10:10 開会の挨拶

細矢治夫(日本コンピュータ化学会会長)

10:10-10:40 & 13:00-13:30 学んでお笑いトーク 研究者は何をやっているのかな? 計算  
化学とスーパーコンピュータライブ

黒ラブ教授(吉本興業, 国立科学博物館認定サイエンスコミュニケーター)

13:35-13:55 函館市内の科学子育て

三上いすず(いすず制作室)

14:00-14:30 ベビーダンス

ベビーダンスサークル キラニコ smile

## 抽象化学系による計算とその展開

○鈴木 泰博

名古屋大学情報文化学部 (〒464-8603 名古屋市千種区不老町)

### 【緒言～抽象化学系とは】

抽象化学系とは、たとえば化学式のような、化学反応系を抽象化したものの総称である。「計算」の枠組みでは、計算モデル、反応拡散系によるパターン形成やシステム生物学などでのシミュレーションなどさまざまに展開されている。本講演では、「抽象化学系（相互作用系）による計算」を提案する。

計算とは“処理の順序（アルゴリズムとよばれる）とその観測”であるが、アルゴリズムの概念を拡張し、アルゴリズム的に「環境と協調して計算を行うための“とっかかり”」をつくり、このとっかかりをつかって環境と協調的に計算を行うパラダイムである“ハーネス”の提唱をおこなう。

### 【自然と計算】

私たち人間のみならず、自然を構成しているモノコトはすべて自然系について不可知である。そのため、各モノコトはそれぞれ自らの世界観にたつて、全知の立場からすれば擬似的な、不可知なる全知の世界をつくり存在している。私たち人間の場合、デジタル的世界観とアナログ的世界観の2つの世界観を用いている。デジタル的世界観とは「その世界の中では排中律（A である、もしくは A ではない）が成立する」とする世界観であり、アナログ的世界観とは「排中律がからずしも成立しない」とする世界観である[2,3]。

デジタル的世界観の場合には認識する対象が不可知であっても背理法により、不可知なままで認識をおこなうことができる。だがアナログ的世界観では背理法が成立しない。この場合、計算（アルゴリズム＝処理の順序）により（全知なる）世界のなかに不可知なる世界を再構成し、再構成されたものが認識対象と等価であるかを私たちが不可知なままで判断することで認識をおこなう[2,3]。

### 【計算と観測】

計算は処理の順序（以下ではアルゴリズムとよぶ）とその観測からなる。アルゴリズムを変更することをプログラミングとよぶ。アルゴリズムを実行すると時間が生じ、その時間の発展とともに計算も発展し、計算によってはやがてある種の定常状態に到達する（これを正規型とよぶ）。一方、計算を行う際にはあらかじめ解の集合を設定する（これを解集合とよぶ）。計算が正規型に到達した場合に、その正規型が解集合に含まれるか“観測”を行い、もし解集合に含まれていればそれらを解とよぶ。解については複数のアルゴリズムを用いるか、複数の観測者による観測を行って正当性の検証が行われる（正当性の検証が行われない場合には、得られた解は独我的な解になる恐れがある）[2,3]。

### 【マルチ集合論的な認識と反応速度論的世界仮定】

マルチ集合とは $\{a, a, b, b, c\}$ のように同一の要素の重複を許す集合である。このマルチ集合をもちいて世界をマルチ集合として認識する。そのためマルチ集合上に相互作用計算系, Abstract Rewriting System on Multisets, ARMS を構成する。ARMS とは状態  $S$  (例えば  $s_0 = \{a, a, b, b\}$ ), とマルチ集合の変換規則集合  $R$  (例えば  $r_1: a, a \rightarrow b, c$ ,  $r_2: b, c \rightarrow a, b$ ) による付く  $\langle S, R \rangle$  により定義される。ARMS は変換規則の左辺がマルチ集合に真に包含された場合にそれらを変換規則の右辺に書き換えることにより時間発展する。よって  $S_0$  は  $r_1$  により  $\{a, a, b, b\}$  から  $\{b, b, b, c\} = s_1$  に書き換えられ、さらに  $r_2$  により  $\{a, b, b, b\} = s_2$  に書き換えられる。 $S_2$  には適用可能な変換規則がないため、この状態が定常状態、つまり正規型となる（この例の場合には解集合があたえられていないため、この正規型が解なのかはわからない）。

ARMS 一般の場合、ある状態に複数の変換規則が適用可能な場合がある。その場合、たとえば反応速度論的世界仮定を行う。この仮定は反応規則の選択は要素の種類（濃度）と反応速度定数により与えられる。

たとえば、Lotka Volterra, LV 方程式で記述されるような、肉食 - 草食動物の個体群生態学の場合、この仮定は有効である。草食動物の個体群数が一定のまま、肉食動物の個体群が増加すれば、草食動物と肉食動物の遭遇する確率は高くなる。そして、捕食により草食動物の個体群数が減少すれば、遭遇の確率は減少して肉食動物は餓死していくことになる。よってこの仮定は化学反応以外にも応用可能である。

LV 方程式:  $d[\text{草食動物}]/dt = k_1[\text{草食動物}][\text{肉食動物}]$ ,  $d[\text{肉食動物}]/dt = k_2[\text{草食動物}][\text{肉食動物}] - k_3[\text{肉食動物}]$ はこの仮定のもと、草食動物 → 草食動物, 草食動物, 草食動物, 肉食動物 → 肉食動物, 肉食動物, 肉食動物 → out と書き下すことができる。

ARMS として記述された LV 系では反応速度定数が決められておらず、反応速度定数によってはさまざまな時間発展が生じる。解集合が与えられていない場合には、数多の正規型のうちでどれが解がわからない。LV はよく知られた個体群動態の方程式であり、その解は振動することが知られている（生態学的な傍証からも）。そこで LV 系の解集合を“振動解”とすれば、無限の組み合わせの反応速度定数のうちで、定常的に振動を示すものが解となる（ここまで読まれた方はお気づきだと思うが...この枠組みはまさに抽象化学系である）[2,3]。

### 【アルゴリズムからハーネスへ】

計算系を構築する際には、自然のなかに恣意的に境界をつくる必要がある。そして、システムの境界の外部（環境）からの“ノイズ”を可能な限り遮断する。だが本質的に連続している自然系に明確な境界を引くことは困難であり、また、系外に未知なる有用な相互作用が潜んでいる可能性も高い。そこで、明確な境界を引かず、自然系のもつ潜在能力を引き出すことによる計算系を、“ハーネス計算系”とよび提案してきた [1, 2,3]。

ハーネスは、明確に概念化されてこなかったが、さまざまな分野で用いられてきている。たとえば牧羊を行う際の羊の群れの操作は、各々の羊の自由度を制限するのではなく、羊の群れの一部に制約を与え、その制約解消のメカニズムをつかって群れの制御をおこなっている。

これまでのアルゴリズムは主に電子計算機を念頭においたものであったが、近年、計算のメディアは電子計算機から DNA 分子などの生体分子や細胞、新素材、インフォモーシオン（大規模センサー&アクチュエータ群 [2]）ほかの自然のメディアをもちいた計算へと移行している。かかる新しい計算系は、これまでの「計算機」とは異なり、素材やメディアそのものが“計算機”に相当する。

本講演では、ハーネスの立場から、こうした「あたらしい自然計算」の枠組みについても考察していきたい。

### 謝辞

本研究は新学術領域「分子ロボティクス： 知能分子ロボット実現に向けた化学反応回路の設計と構築 (No.24104003)」から助成をうけた。

### 参考文献

[1] yasuihiro SUZUKI, Harness the nature for computation, Natural Computing and Beyond Volume 6 of the series Proceedings in Information and Communications Technology pp 49-70 (open access)

[2] 鈴木泰博, 自然計算の基礎, 近代科学社 (近刊)

[3] 鈴木泰博, 計算の哲学, 人工知能辞典, 人工知能学会編 (近刊)

[4] 矢野智昭, 大岡昌博, インフォモーシオン工学の提案, 近畿大学次世代基盤技術研究所報告 Vol. 6 (2015) 97-100

2A01

## 複核錯体の磁性と分子軌道論的解釈

○半田 真

島根大学大学院総合理工学研究科 (〒690-85047 松江市西川津町 1060)

図1に示すアルコキシ架橋二核銅(II)錯体 $[\text{Cu}_2^{\text{II}}(\text{R}-m-n)_2\text{X}_2]$ のように、架橋酸素の存在により金属イオンは分子内で連結され複数の金属イオンを含む錯体が得られる。アルコキシ酸素の他、フェノキシ酸素あるいはヒドロキシ酸素もそのような金属イオンの架橋を容易に行うことができる。また、銅(II)イオンは、 $dx^2-y^2$ 軌道に不対電子を1つだけ有す電子配置であり、架橋酸素を介した磁氣的相互作用に関する研究がなされてきた。二核銅(II)錯体のヒドロキシ酸素を介した磁氣的相互作用を拡張Hückel分子軌道法により、1975年に初めて理論的に解釈したのが、Hoffmannらのグループであり、Cu-O-Cu結合角が大きいほど、反強磁性的相互作用が大きいというそれまでの実験結果を見事に説明した [1]。演者を含むグループは、図1に示すアルコキシ架橋銅(II)二核錯体を中心に実験結果を蓄積し、その磁氣的性質を解析するためにメトキシ架橋のモデル錯体 $[\text{Cu}_2^{\text{II}}(\text{OMe})_2(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ について、Yamaguchiらのスピン相互作用に関する理論式[3]を用いてAb Initio分子軌道計算を行い、アルコキシ架橋銅(II)二核錯体についてもヒドロキシ架橋二核錯体と同様にCu-O-Cu結合角が大きいほど、反強磁性的相互作用が大きいという実験結果を理論的に確認した[2]。この研究で、磁氣的相互作用のパラメーター $J$ の値を銅(II)二核錯体について初めて直接見積もり、Cu-O-Cu結合角との関係を説明したことは意義深いことであった。しかし、 $J$ 値とCu-O-Cu結合角の傾向は説明できても、 $J$ の実験値を計算で再現することはできなかった。30年近く経ち、分子軌道論的手法は、大きく進歩した。今回、DFT計算により、 $J$ 値を見積もってみたので、その結果を報告する。また、最近、図2に示す常磁性のランタン型ルテニウム(II,III)二核錯体 ( $\text{Bu}_4\text{N}[\text{Ru}_2^{\text{II,III}}(\text{O}_2\text{CCH}_3)_4\text{Cl}_2]$ ) のNMRスペクトルにおける架橋酢酸イオンのカルボニル炭素のシグナルが-763 ppmと高磁場シフトするのは ( $\text{Ru}_2^{\text{II,III}}$ ) からスピン密度の非局在化によることをDFT計算で確認し[4]、さらに、平面型フタロシアニン銅(II)二核錯体 $[\text{Cu}^{\text{II}}\text{Pc}]_2$ において、フタロシアニン環の中心の銅(II)イオン間の距離は10Å以上あるにもかかわらず、 $J \approx -2\text{cm}^{-1}$ と反強磁性的相互作用が働いていることを実験およびDFT計算結果から確認しているので[5]、これらの結果も併せて発表する。

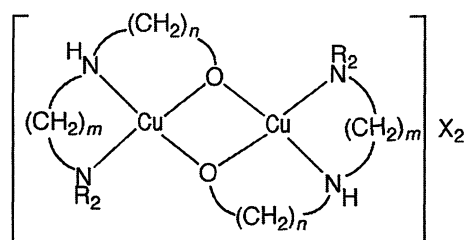


図1  $[\text{Cu}_2^{\text{II}}(\text{R}-m-n)_2\text{X}_2]$  ( $\text{X} = \text{ClO}_4^-$ ,  $\text{BF}_4^-$ )の構造

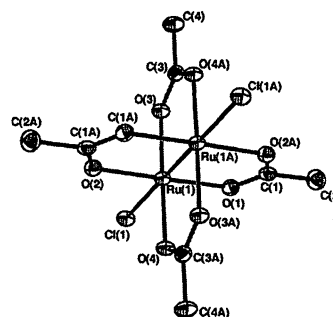


図2  $[\text{Ru}_2^{\text{II,III}}(\text{O}_2\text{CCH}_3)_4\text{Cl}_2]$ の構造

[1] P. J. Hay, J. C. Thibeault, R. Hoffmann, *J. Am. Chem. Soc.*, **1975**, *97*, 4884.

[2] K. Yamaguchi, H. Fuki, T. Fueno, *Chem. Lett.*, **1986**, 625.

[3] M. Handa, N. Koga, S. Kida, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, **1988**, *61*, 3853.

[4] Y. Hiraoka, T. Ikeue, H. Sakiyama, M. Mikuriya, Y. Kataoka, M. Handa, et al., *Dalton Trans.*, **2015**, *44*, 13439.

[5] T. Ikeue, M. Mikuriya, Y. Kataoka, M. Handa, et al., *J. Porphyrins Phthalocyanines*, **2014**, *18*, 708.

## 日本コンピュータ化学会秋季年会一般公開 「科学発信!! Hakodate」を終えて

日本コンピュータ化学会 秋季年会一般公開担当  
中村恵子

「少年よ、大志を抱け!!」の言葉で知られているクラーク博士の教え子で、氏が来日するきっかけを作った日本人、新島襄が海外へ向けて出港した地、函館。

海外への渡航が禁止されていた時代に、強い信念を持ち周りの協力を得ながら目的を達成した新島の実行力もさることながら、彼を支え、若者の背中を押す力が函館の街にはあったのではないかと想像しています。今回日本コンピュータ化学会の秋季年会イベントの準備をしながら、函館には「志ある若者が育つ街」という歴史が脈々と続いているという印象を強く持ちました。

函館で、サイエンスの土壌をたがやし種を蒔き続けているのが、サイエンス・サポート函館（美馬のゆり代表 公立はこだて未来大学教授）です。9日間にわたるサイエンスフェスティバル「はこだて国際科学祭」を2009年から毎年実施し、市民のサイエンス意識を高めています。

今回、その豊かなサイエンスの土壌で、日本コンピュータ化学会も秋季年会一般公開「科学発信!! Hakodate」で計算化学の種を蒔くことができました。

「コンピュータ化学を市民の方々に知ってもらおう」「若い世代に研究の楽しさ、奥深さを感じてもらおう」ことを目標に10/31には秋季年会のポスター発表を市民に公開し、その中で地元高校生によるポスター発表や著名な方々の講演・サイエンストーク、11/1には明るい光あふれる五稜郭タワーアトリウムでトークショーや体験型のブース展示を実施し、多くの若い世代に化学を堪能してもらうことができました。最先端の化学から笑って学べる企画まで盛りだくさんの内容は大変好評で大盛況でした。

その中でも、ハピネット mama による「ベビーダンス」は、「一般公開とはいえ、学会のイベントでベビーダンスなんて斬新!!」と言われるほど、驚きの企画でした。赤ちゃんは子供になり、中学生になり、高校生になり…ということを考えると、赤ちゃんのころからサイエンスの空気に触れることは、とっても良いことかもしれないと感じました。ステージで踊っているママと赤ちゃんの姿をニコニコ見ているパパさんたち。その姿を見ていたら、なんだかとっても嬉しくなりました。何よりも、ママがサイエンスを好きになってくれたら、サイエンスが好きな子供が沢山増えてくれることでしょう。提案してくださった函館在住の三上いすず氏（はやのん理系漫画室/いすず制作室）と 三木洋子氏（ハピネット mama 代表）に心から感謝しています。

最先端の科学技術紹介漫画を新聞に連載しているはやのん氏（はやのん理系漫画室）には、中・高生に興味のあるマンガで科学を伝える手法を講演していただき、三上いすず氏には、ポスター製作からラジオ番組での広報など、はこだて国際科学祭の経験を活かして絶大なるサポートをいただきました。

この企画への助成をしてくださいました「子どもゆめ基金」の独立行政法人 国立青少年教育振興機構様、日々積み重ねた研究成果を発表していただきました。函館市立西高等学校、遺愛女子中・高等学校、函館大学付属有斗高等学校、函館大学付属柏稜高等学校の指

導の先生方と生徒の皆さま、「計算化学」という難しいテーマをお笑いに取り込んで高校生や研究者の笑いの涙を誘っていた黒ラブ教授（吉本興業）、函館での開催ということで駆けつけてくださった長尾輝夫先生、本来は研究者対象の秋季年会ではありますが、その準備の他に一般公開用に中学生・高校生にも分かるような展示をと工夫して時間をかけて準備してくださいました日本コンピュータ化学会 細矢治夫会長はじめ理事・会員有志の先生方、そして何よりも会場に足を運んでくださいました参加者の皆様、たくさんの方々のお力で大盛況のうちにイベントを終えることができました。この場を借りて深く感謝申し上げます。有難うございました。

最後に、講義・校務・秋季年会準備と超多忙な日程の中、どうしたら来場者に喜んでもらえる一般公開になるかと心を砕き、学術的に質の高いセンス溢れる一般公開になるようにと多大なアイデアとご尽力をくださいました秋季年会実行委員長 櫻沢繁 准教授をはじめ櫻沢研究室の学生・院生の皆さま、研究・校務で大変お忙しい中、企画に参加下さいました美馬のゆり教授・高木清二准教授、非常にタイトな日程の中、素敵な看板と各ブース展示用のバナーを作成くださいましたグラフィックデザインご専門の原田泰教授と研究室の皆さま、企画の段階から広報・会場設営・運営に全面的にご協力くださった金森晶作氏へこの場を借りて御礼申し上げます。公立はこだて未来大学の先生方の存在無くしては、今回のイベントの成功はあり得なかったと心から感謝しています。有難うございました。

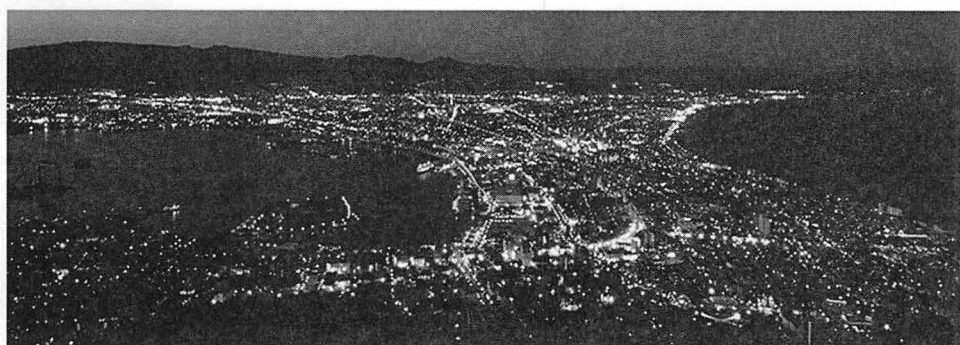
函館を科学の街にしたいと、「サイエンス・サポート函館」を作り育ててきた美馬のゆり先生から、その精神となった言葉を教えていただきました。

「8年前、この活動を始めようとしたときに理想とした姿に、1758年のジャンジャック・ルソーが演劇について論じた言葉があります。彼のそのままの言葉ではありませんが、以下のような内容でした。まるで今の日本を言い表しているようです。劇場をつくるよりは、祭をつくりなさいと。科学館をつくるのではなく、祭をつくる。様々な背景を持った人が演者になる。」

-----

劇場をつくること、それを維持すること、それを取り壊すことには、多大な費用がかかる。劇場をつくり、プロの演者を雇い、演劇を見せることは市民にとって意味がない。演劇に代わるべき、市民にふさわしい催しは祭である。まちなかに杭を打ち、そこに花を飾れば、人が集まり、祭となる。祭では、観衆を見せること、彼ら自身を登場人物にすることによって、すべての人がいっそう強く結ばれる。

-----

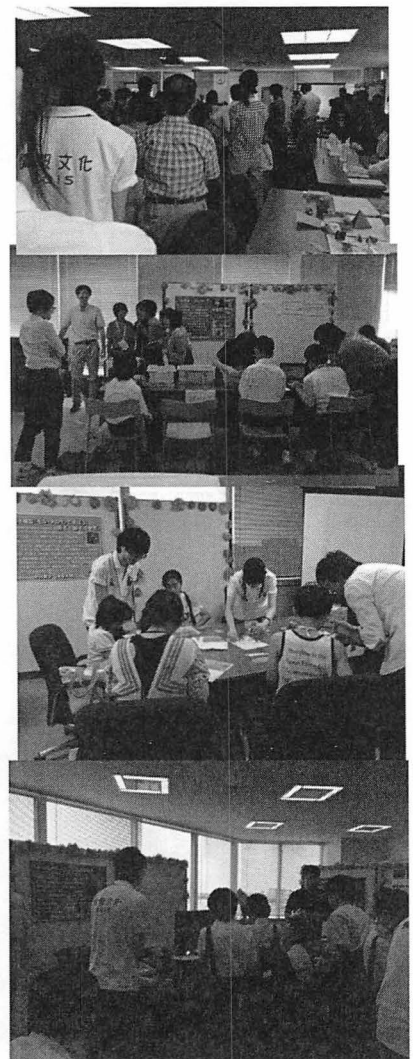


イベント名 江戸川大学サイエンスセミナー 2015  
 主催・場所 江戸川大学・千葉県流山市  
 形式 ブース展示・トークイベント  
 対象 児童生徒・大学生・一般  
 来場者人数 来場者 300名  
 参加スタッフ 【日本コンピュータ化学会】(主) 主催者担当  
 敬称略 細矢治夫, 長嶋雲兵, 後藤仁志, 本間善夫,  
 時田澄男, 吉村忠与志, 神部順子 (主),  
 八木徹 (主), 渡邊寿雄, 中村恵子  
 【江戸川大学】松村豊子, 玉田和恵, 古里靖彦  
 【特別ゲスト】高妻孝光 (茨城大学), 山口敏和  
 (東京大学), ティー・オー・エス  
 【学生スタッフ】江戸川大学学生スタッフ,  
 横浜市立大学大学院生スタッフ  
 後援 日本コンピュータ化学会・  
 流山市/柏市/松戸市/教育委員会  
 私立大学情報教育協会  
 協力 千葉県内中学校・高等学校科学部他

日時 2015年7月24日(金)  
 時間 13:00~17:00  
 天気 曇り  
 記入者 中村恵子  
 資料 チラシ(江戸川大学 古里先生 製作)



内容 【ブース展示】  
 10:00~12:00: 会場準備, 12:00~13:00: 昼食  
 13:00~17:00: 開講式・公開・閉講式  
 「折り紙で学ぶ分子の構造」細矢治夫  
 「見えないタンパク質の拡張現実」後藤仁志  
 「原子軌道のガラス彫刻」時田澄男・長嶋雲兵・増子貴子  
 「極小物質から生命のナゾにせまる」本間善夫  
 「空と海の色の秘密にせまろう」神部順子・八木徹  
 「3Dプリンタで化学する」吉村忠与志・八木徹  
 「みんなのスパコンTSUBAME」渡邊寿雄  
 「光で飛ぶ?! 未来のロケット!」山口敏和  
 「海の神秘に迫ろう!」高妻孝光  
 「モルタロウで学ぼう!! 原子・分子の世界」中村恵子  
 「時計反応と振動反応」石井和成 (県立我孫子高校)  
 「ロボカップについて」福永安祐子 (松戸市立小金中学校)  
 「宇宙ステーションに乗り込もう・ARジェットコースター」  
 (ティー・オー・エス)  
 【トークイベント】15:00~16:00  
 「科学マジック・科学クイズ」葛谷信治 (県立東葛飾高校)  
 2013・2014年のサイエンスセミナーに続き, 中学校や高等学校の科学部や顧問の先生方の参加協力もあり, 大変盛況なセミナーとなりました. 各ブースにお手伝いとして入ってくださった江戸川大学の学生さんも同様のイベントを何度か経験してきていて, 一昨年・昨年・今年と回数を重ねるごとに, 指導力を向上させていました. いつも気持ちよくお手伝いくださる学生さんの姿やスムーズな運営に, 先生方の日頃のご指導の賜物といつも感激しています. 参加者が年々飛躍的に増加している様子から, この科学イベント実施において先生方が地域との連携を重視し, 協力体制を築いていることを強く感じました.



感想

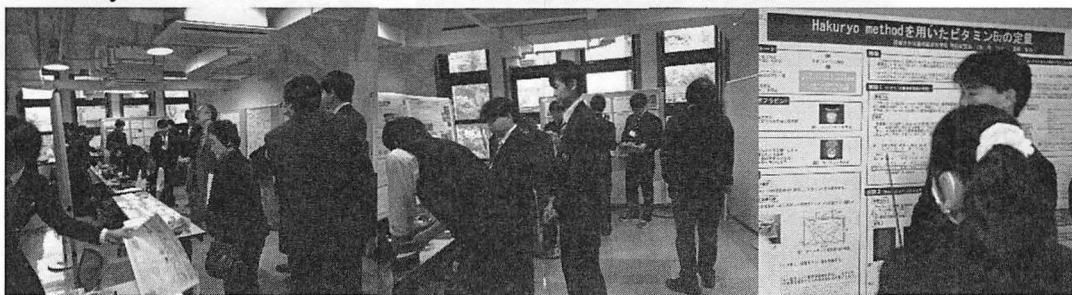
日本コンピュータ化学会 2015年度 イベント報告>>

**イベント名** 秋季年会一般公開「科学発信!!Hakodate」  
**主催** 日本コンピュータ化学会  
**場所** 函館市まちづくりセンター (10/31 北海道函館市)  
 五稜郭タワーアトリウム (11/1 北海道函館市)  
**形式** トークイベント・ブース展示・  
**対象** 児童生徒・大学生・一般  
**来場者人数** 講演会 50名 (10/31)  
 一般公開 500名 (参加延べ人数 1500名) (11/1)  
**参加スタッフ** 【日本コンピュータ化学会】(主) 年会実行委員  
**敬称略** 櫻沢繁 (主: 秋季年会実行委員長),  
 細矢治夫, 後藤仁志, 本間善夫, 神部順子, 八木徹, 太  
 刀川達也, 中村恵子  
**ゲスト** 【講演等】高木清二 (公立はこだて未来大学),  
 はやのん (はやのん理系漫画制作室),  
 美馬のゆり (公立はこだて未来大学),  
 黒ラブ教授 (吉本興業), 三上いすず (いすず制作室), ハ  
 ピネット mama,  
 【ブース展示】千田範夫, 渡邊寿雄, 大嶋正人 (以上  
 SCCJ), 長尾輝夫, 増子貴子 (横浜市立大学)  
 函館市内高等学校 教諭・生徒  
 【大学スタッフ】金森晶作(公立はこだて未来大学/サイ  
 エンス・サポート函館)・櫻沢研究室 院生/学生スタッフ  
 (坂本勝成・樋山貴洋・吉田彩乃 公立はこだて未来大学  
 大学院)/ (長谷川慎哉 公立はこだて未来大学)  
**後援** 公立はこだて未来大学・サイエンス・サポート函館, 五  
 稜郭株式会社・  
**協力** 原田泰・原田研究室 (三野宮定里/八城朋仁 公立はこだ  
 て未来大学), 東京エレクトロン株式会社, (株)タロウ  
 子どもゆめ基金 (子どもゆめ基金助成事業)

**日時** 2015年10月31日 (土)  
 14:00-18:00  
 2015年11月1日 (日)  
 10:00-15:00  
**天気** 晴れ  
**記入者** 中村恵子  
**資料** ポスター・チラシ  
 (はやのん理系/漫画制作室  
 三上いすず/いすず制作室)



**内容** 【10月31日】函館市まちづくりセンター  
**10/31** 13:30 ~ : 一般公開受付準備  
**ポスター発表**・ 14:10 ~ : ポスター概要説明  
**講演** 14:20 ~ : 秋季年会参加者と高校生によるポスター発表  
 a. 「樹皮上のトビムシの生活史と季節変化」函館市立西高等学校  
 b. 「大森浜の海岸浸食」遺愛女子中・高等学校  
 c. 「ムペンバ効果の成功条件について」函館大学附属有斗高等学校  
 d. 「Hakuryo methodを用いたビタミンB<sub>2</sub>の定量」函館大学附属柏稜高等学校



高校生ポスター発表への年会参加者の感想

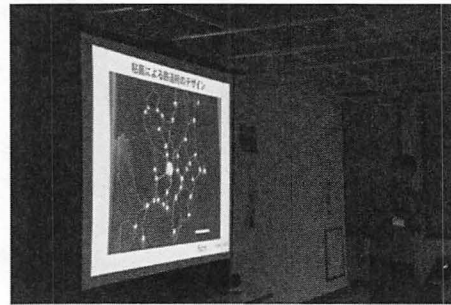
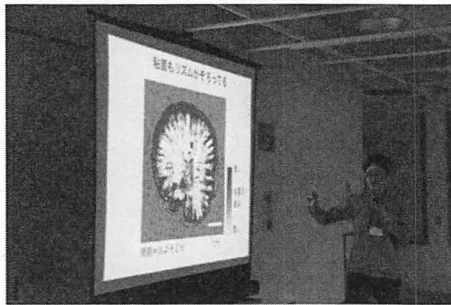
- 地元の様子に関心を持ち丁寧に観察されていると思います。
- 大変長期間の観察が必要であり、貴重なデータだと思います。是非継続してください。
- 再現性がないとはいえ、面白い現象に取り組みましたね。再現性のないことがむしろ何らかの複雑な要因が関係しているとしており、面白い。
- UVランプでの定量法を工夫され立派な装置を作りましたね。

16:00 ～：講演

「真正粘菌ー計算がちょっと得意な単細胞」

高木清二先生 (公立はこだて未来大学)

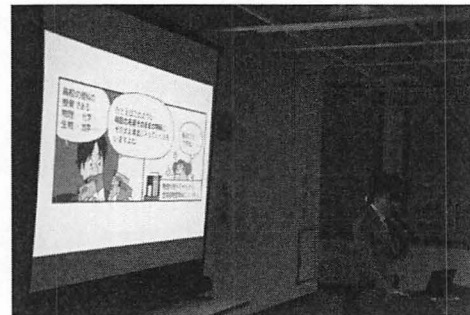
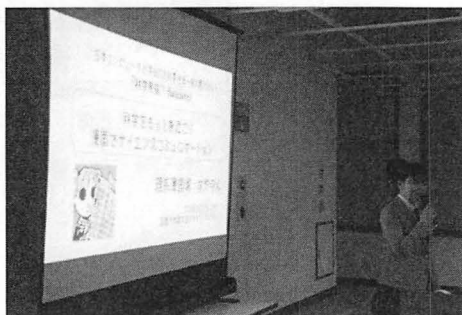
2010年イグノーベル賞受賞「粘菌がネットワークをつくる仕組み」をわかりやすく解説。



「科学をもっと身近に! 漫画でサイエンスコミュニケーション」

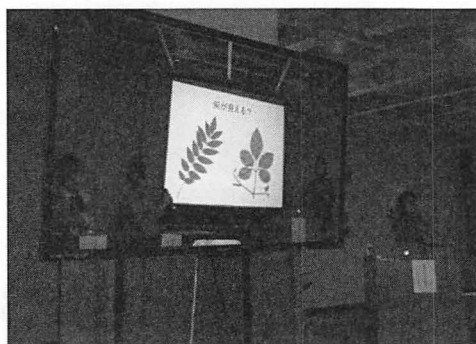
はやのん氏 (はやのん理系漫画制作室)

高校生を対象として、理系進路を選択した理由や科学を漫画で紹介しようと思ったきっかけなどを交えて、難しいことをわかりやすく伝えることの大切さを力説。



17:15 ～：サイエンストーク

公立はこだて未来大学 美馬のゆり先生と講演者によるサイエンストーク



11/1

トーク・ライブ  
イベント

【11月1日】五稜郭タワーアトリウム

9:00～：会場準備

【トーク・ライブイベント】

10:00～15:00,

「学んでお笑いトーク 研究者は何をやってるのかな? 計算化学とスーパーコンピュータ」

黒ラブ教授 (吉本興業)

ライブ・トーク: 「函館の科学子育て」三上いすず (いすず制作室)

「ベビーダンス」(ハピネット mama)

【ブース展示】

10:30～15:00

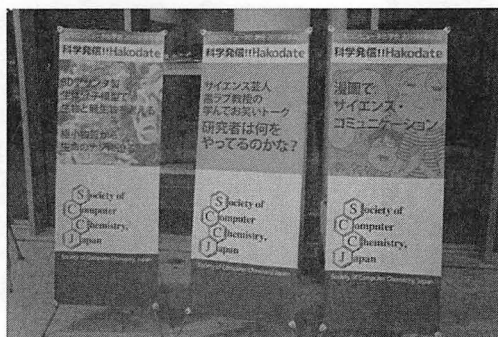
「変な生き物 真正粘菌」高木清二

「筋肉の化学反応をコンピュータでみてみよう!」櫻沢繁・櫻沢研究室 学生/院生

「漫画でサイエンスコミュニケーション」はやのん・三上いすず

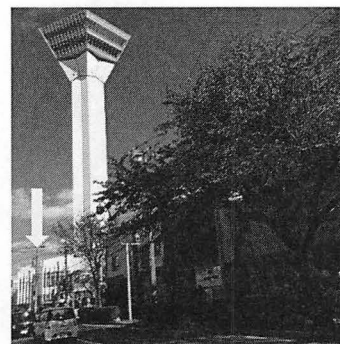
「折り紙で学ぶ分子の立体構造」細矢治夫

「見えないタンパク質の拡張現実 (AR)」 後藤仁志  
 「原子軌道のガラス彫刻」 (時田澄男・時田那珂子提供)・増子貴子  
 「3Dプリンタ製生体分子模型で生物と無生物を考える」 本間善夫  
 「空の色の秘密にせまろう」 神部順子・八木徹  
 「3Dプリンタ実演」 (吉村忠与志プログラム 提供) 八木徹  
 「モル・タロウ分子模型組立体験と周期表」 太刀川達也, 大嶋正人  
 「スーパーコンピュータ」 渡邊寿雄  
 「タブレットでできる3D分子モデル」 千田範夫  
 「物質構造の表示を透明物質の内部に再現し、実体化する！」 長尾輝夫  
 「モル・タロウ分子模型展示」 櫻沢繁  
 「樹皮上のトビムシの生活史と季節変化」 函館市立西高等学校  
 「ひかりのまち・函館の星空マップ」 「函館市の海岸浸食」 遺愛女子中・高等学校



← ブースには、  
 公立はこだて未来大学原田先生  
 製作のバナーが  
 並びました。

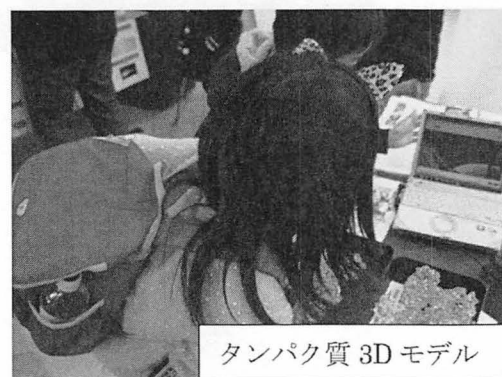
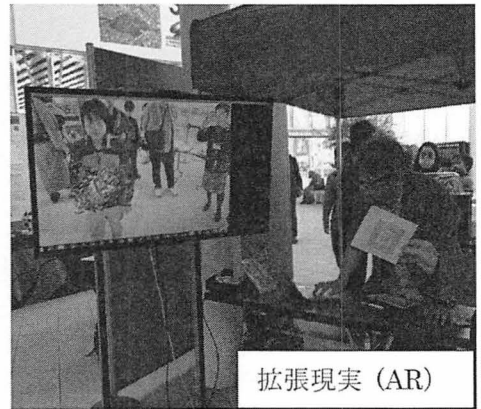
五稜郭タワー  
 アトリウム →



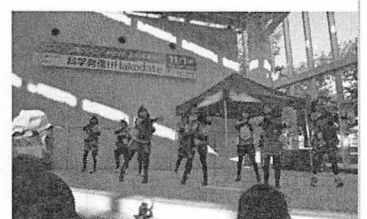
黒ラブ教授のライブ: 「学んでお笑いトーク 研究者は何をやってるのかな? 計算化学とスーパーコンピュータ」

▽ (ナブラ)?, 波動方程式?? こんなライブ  
 見たことない!! 計算化学のトーク, ちょっと難しい  
 けど... 面白い. 子供たちも興味津々.





左：分子と原子軌道 3D ガラス彫刻 2 種，中：タブレット 3D モデル，右：ベビーダンス





13 2015年(平成27年) 11月6日 (金曜日)

# 最新研究成果など紹介

## 「科学発信ハコダテ」にぎわう

多くの市民に科学と触れ合う機会を提供するイベント「科学発信ハコダテ」(日本コンピュータ化学会主催)が1日、五稜郭タワーアトリウムで開かれ、多くの親子連れや学生などの市民にぎわった。

(井澤孝平)

同学会秋学年会の一環。昨しほが、助例の働きに科学子育てをテーマにし、秋の科学展開催を目的として助例が進められてきたトクショー(トクショー)が会場目録が、公立はたて未来に「一箱盛出す」なびが米を盛り上げた。

大とサイエンス・サポーター、観望の性目を集めていた。北緯原小5年の青原利雄医師の協力を得て、初めて、ステージでは、お笑い松君(松君)は「助例の働きに一般公開した。

2010年に真正科学の「イラストレーター」に上りすたので、これから調べてい研究アゲ・ノベル感を「医師内のきたい」と話していた。

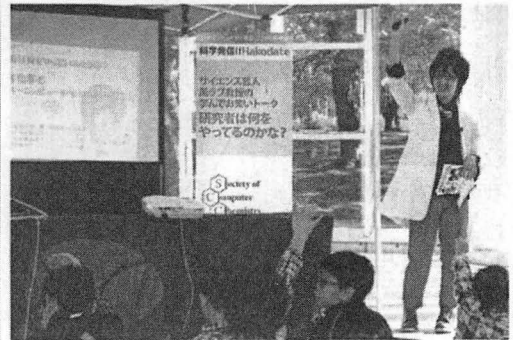
## お笑いで親しむ科学

### コンピュータ化学会が催し

日本コンピュータ化学会(会長・細矢治夫教授)は函館市内で行った「2015秋学年会」に合わせて、10月31日と11月1日、公開イベント「科学発信Hakodate」を開催した。講演や展示などを通じて家族連れなど市民が科学に親しんだ。

31日は函館市地域交流まちづくりセンター、1日は五稜郭タワーで開催。1日のイベントでは、科学を題材にした活動する芸人「黒ラブ教授」がトークショーを開催した。日本のスーパーコンピュータ「京」について「計算が速いだけでインターネットは遅い。現実はだたネットが速い。でもね」と言った。研究者は多分振り向いて笑った。と話し、会場の笑いを誘った。

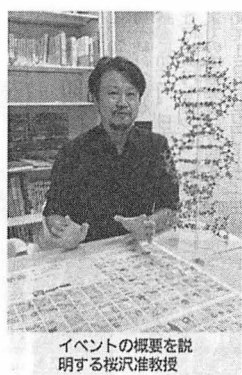
実行委員長の櫻沢繁・公



芸人「黒ラブ教授」が講義形式で行ったトークショー

育の活性化にもつながれば」と期待した。同学会は年2回の年会のうち、毎年秋は地方都市で開き、函館では2006年以来2回目。30、31日に同センターで行い、全国の研究者約90人が集った。(黒野真)

函館新聞 2015年10月28日付 14面  
『科学の魅力知る2日間』  
10/31,11/1イベント紹介記事と写真



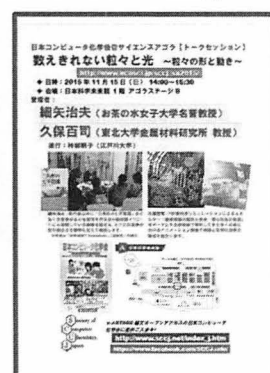
イベントの概要を説明する桜沢准教授

【イベント紹介マンガ】  
掲載媒体：日刊工業新聞掲載  
掲載日：2015年11月16日(月)  
作品タイトル：『キラリ研究開発』  
サブタイトル：「市民と学会をつなぐ！  
「科学発信!!Hakodate」」  
著者：はやのん理系漫画制作室

日本コンピュータ化学会科学コミュニケーション室  
[http://www.ecosci.jp/sccj\\_sc/](http://www.ecosci.jp/sccj_sc/)

**イベント名** サイエンスアゴラ 2015  
**主催・場所** 日本科学未来館 1F,  
**主催担当者** 独立行政法人 科学技術振興機構 (JST)  
 科学コミュニケーションセンター  
**形式** ブース展示・トークショー  
**対象** 児童・生徒・学生・一般  
**来場者人数** 来場者 9145名 ブース来場者 約 300名  
 トーク来場者 約 60名  
**参加スタッフ** 【日本コンピュータ化学会】  
**敬称略** 細矢治夫, 長嶋雲兵, 後藤仁志, 本間善夫,  
 久保百司, 太刀川達也, 吉村忠与志,  
 神部順子, 八木徹, 山口敏和, 千田範夫,  
 和多田裕子, 中村恵子  
**【学生スタッフ】**  
 江戸川大学学生スタッフ,  
 横浜市立大学大学院生スタッフ

**日時** 2015年11月14, 15日 (土, 日)  
**時間** 10:00 ~ 17:00  
**天気・気温** 晴れ・18℃  
**記入者** 中村恵子  
**資料** 出展案内チラシ  
 (チラシ: 本間善夫理事 製作)



**ホームページ** [http://www.ecosci.jp/sccj\\_sa2015/](http://www.ecosci.jp/sccj_sa2015/)

**【ブース展示】** 数えきれない粒々と光  
 日程: 11月14日 (土), 15日 (日)  
 場所: 日本科学未来館 1F  
 9:00~10:00: 会場準備  
 10:00~17:00: 一般公開  
 「分子や結晶の多面体を作ろう」 細矢治夫  
 「見えないタンパク質の拡張現実」 後藤仁志  
 「原子軌道のガラス彫刻」 時田澄男(提供)・  
 長嶋雲兵・増子貴子  
 「極小物質を数千万倍してみれば」  
 本間善夫 (企画・運営全般)  
 「空と海の色の秘密にせまろう」 神部順子  
 「3Dプリンタ実演」 吉村忠与志・八木徹  
 「タブレットで分子」 千田範夫  
 「鑑定士に挑戦!! 水晶の鑑定」 太刀川達也・  
 和多田裕子・中村恵子

**【トークセッション】**  
 日程: 11月15日 (日) 14:30~16:00  
 場所: 日本科学未来館 1F  
 細矢治夫氏『折紙で立体化学』  
 久保百司氏『計算科学シミュレーションによる  
 エネルギー・環境問題の解決と安全・安心社会の実現』  
 講演の中で、実際に折紙を折ったり、○×クイズを実施したりと、講演者・参加者が  
 一体となって化学を楽しみました。



日本コンピュータ化学会のブースは  
 毎年大盛況です。  
 函館の秋季年会  
 一般公開でお世話に  
 なった「サイエンス  
 サポート函館」も出展。



※なお、サイエンスアゴラ開催10周年を記念して発行される冊子「サイエンスアゴラ10年の歩み」に、本間理事の『サイエンスアゴラを通して多くの方に原子や分子、計算科学に興味を持ってもらいたい』が出展者インタビューの1つとして掲載予定である。

#### 4 日本コンピュータ化学会定款

# 日本コンピュータ化学会定款

## 第1章 総則

### 第1条 名称

本学会は日本コンピュータ化学会 (Society of Computer Chemistry, Japan, 略称 SCCJ) と称する。

### 第2条 目的

本学会は、計算・理論・数学・統計学・情報処理等の手段を用いる化学の研究及び教育に関わる研究者・技術者・教育者の情報交換を促進し、この分野の進展を図ることを目的とする。

### 第3条 事業

本学会は前条の目的を達成するため、次の事業活動を行う。

- (1)研究発表会・講演会・講習会等の開催
- (2)学会誌の発行
- (3)コンピュータ化学に関連するプログラムの交換
- (4)国内外の関連他機関との連絡調整
- (5)上記に関する実績の表彰
- (6)その他、目的達成のために必要と認められる事項

## 第2章 会員

### 第4条 会員

会員は次の6区分とする。

#### (1)個人会員

当該分野の研究・教育に関心ある個人

#### (2)学生会員

当該分野の研究・教育に関心ある高専、短大、大学(含放送大学)、大学院の在学者

#### (3)シニア会員

当該分野の研究・教育に関心ある満65歳以上の個人

#### (4)ラボ会員

当該分野の研究・教育に関心ある大学等教育機関に所属する教員個人と、その教員が直接指導する学生

#### (5)法人会員

当該分野の研究・教育に関心ある企業等の事業所

#### (6)賛助会員

当該分野の研究・教育に関心ある企業等の団体

### 第5条 会員の入会・退会・除名

(1)会員として入会を希望するものは所定の申込書を提出し、役員会の承認を経なければならない。

(2)会員で退会を希望するものは理由を付して退会届を提出し、会費の未納がある場合はこれを完納しなければならない。

(3)会員が次のいずれかに該当するときは、役員会の議決を経て、会長がこれを除名することができる。

①会費を滞納したとき

②学会の名誉を傷つけ、または学会の目的に反する行為のあったとき

### 第6条 会員の権利・義務

学会員は年会費納入の義務と本定款に定める事業活動に参加する権利を有する。

### 第7条 会員の協力

学会の会長は各種事業の実施にあたり、必要に応じて会員に協力を要請することができる。

### 第8条 会員への公知

事業計画、予算案、事業報告、決算報告等は総会及び学会誌にて会員に公知する。

## 第3章 組織

### 第9条 組織

本定款第3条に定めた事業活動を行うために学会に次の組織を置く。

(1)総会

(2)役員会

(3)実行委員会

(4)事務局

#### 第 10 条 総会

総会は年 1 回以上開催し、会長がこれを召集する。

#### 第 11 条 総会に付議する事項

総会では次の事項について承認を得なければならない。

- (1)事業計画
- (2)予算案
- (3)事業報告
- (4)決算報告

#### 第 12 条 役員会

役員会は年 2 回以上開催し、会長がこれを召集する。

#### 第 13 条 役員会に付議する事項

役員会では次の事項について審議する。

- (1)本定款の制定・改定
- (2)事業計画
- (3)予算案
- (4)事業報告
- (5)決算報告
- (6)役員および実行委員の選出

#### 第 14 条 役員

学会に次の役員をおく。

- (1)会長 1 名
- (2)副会長 若干名
- (3)監査 若干名
- (4)理事 数名
- (5)顧問 数名

#### 第 15 条 役員の職務

役員の職務は次のとおりとする。

- (1)会長は学会を代表し、学会の運営一切を統括する。
- (2)副会長は会長を補佐する。
- (3)監査は会計を監査する。
- (4)理事は学会の運営に参画する。

(5)顧問は学会の運営を支援する。

#### 第 16 条 役員の選出および任期

(1)役員の選出（初年度）

初年度の役員は学会設立発起人会において発起人の互選によって決める。

(2)役員の選出（次年度以降）

前年度の役員会において後任の役員を選出する。選出方法は別に定める。

(3)役員の任期

役員の任期は 1 月 1 日から翌年の 12 月 31 日までの 2 年とする。

#### 第 17 条 欠員

役員が欠け、学会の運営に支障をきたす恐れがあるときには、役員会において後任の役員を選出する。ただし、後任者の任期は前任者の残存期間とする。

#### 第 18 条 実行委員会

実行委員会は学会が行う事業の企画、実施に係る業務を担当し、会は必要に応じて適時開催する。

#### 第 19 条 実行委員

実行委員は役員会が学会の役員、会員に委嘱、依頼または推薦により選出する。

#### 第 20 条 事務局

事務局は学会の事業活動全般の運営機関であり、機能等を次のように定める。

- (1)事業の企画・立案
- (2)会員の入会・退会処理
- (3)会計・経理事務一般
- (4)学会誌の発行
- (5)プログラムの登録・頒布・管理
- (6)ホームページの管理・運営
- (7)関連他機関との連絡調整
- (8)その他、必要と認められる業務

#### 第 21 条 事務局長

事務局長は役員会が役員の中から任命する。

## 第4章 会計

### 第22条 会計年度

学会の会計年度は毎年1月1日に始まり、同年12月31日に終わる。

### 第23条 収入

学会の経費には次の収入をもって充てる。

- (1)年会費収入
- (2)研究発表会・講演会・講習会等の参加費収入
- (3)学会誌の別刷り収入・広告収入
- (4)その他の収入

### 第24条 年会費

当該年度の年会費は原則として、前年度末に請求書を発行することにより徴収し、既納の会費は理由のいかんにかかわらず返還しない。会費の区分は次のとおりとする。

- |          |    |   |
|----------|----|---|
| (1)個人会員  | 1人 | 5,000円                                      |
| (2)学生会員  | 1人 | 3,000円                                      |
| (3)シニア会員 | 1人 | 2,000円                                      |
| (4)ラボ会員  | 1口 | 10,000円（但し、<br>教員1名と学生3人で一口、<br>学生4人毎に一口追加） |
| (5)法人会員  | 1口 | 20,000円                                     |
| (6)賛助会員  | 1口 | 50,000円                                     |

### 第25条 予算・決算

事務局長は役員会において当該年度の会計報告を行わなければならない。

(1)予算は事務局が事業計画とともに立案し、役員会の承認を得なければならない。

(2)決算は1年間のすべての財源および使途、現在の経理状況を示す内容を役員会に報告し、承認を得なければならない。

### 第26条 決算報告の認証、審査

前条の決算報告は会長の認証を得、かつ監査の審査を受けたものでなければならない。

## 第5章 定款の改正

### 第27条 定款の改正

本定款の改正は、役員会の議決により会長の承認を経て行うものとする。

### 付 則

(1)本定款は2002年1月1日付けで発効する。

(2)2009年1月31日付けで第4条第3項にラボ会員を追加、第24条第3項にラボ会員年会費（10,000円）を追加した。

(3)2010年5月21日付けで第4条第3項にシニア会員を追加、第24条第3項にシニア会員年会費（2,000円）を追加した。

(4)2014年5月30日付けで第14条第5項と第15条第5項に顧問を追加した。

(5)2012年3月25日付けで、第20条に定める事務局を東京都台東区東上野2-1-13藤和ハイタウン上野607に置く。

(6)2014年5月30日付けで第14条第5項と第15条第5項に顧問を追加した。

## 5 投稿の手引き・投稿規定・投稿カード

# 学会誌(Journal of Computer Chemistry, Japan; JCCJ)投稿の手引き

## (2016年度 電子投稿用)

### 1. 論文の投稿

#### 1.1 論文の種類

##### 1.1.1 論文

- (1) **研究論文 (General Paper)**: コンピュータ化学に関連する研究および教育に関するもので、独創性のある未発表のもの。
- (2) **ノート (Note)**: コンピュータ化学に関する断片的ではあるが、創造的な内容を持つ論文。刷り上がり4ページ以内。
- (3) **技術論文 (Technical Paper)**: コンピュータ化学に関するアイデア・提言や、教材・教具の開発、事例研究などを内容とし独創性のある未発表のもの。
- (4) **総説 (Review)**: ある特定の分野の関連論文を網羅的に紹介し、啓発的な示唆に富んだ内容の論文。
- (5) **総合論文 (Account)**: 著者の研究を中心として、その分野の研究について総合的観点から新しい論評を加えた論文。
- (6) **速報 (Letter)**: コンピュータ化学に関連する研究および教育に関するもので、独創性のある未発表のもの。原則2ページとする。速報として投稿した論文は、上記(1)～(5)のカテゴリに再投稿できる。春季年会・秋季年会の”Selected Paper”のみ。

##### 1.1.2 記事

- (a) **解説 (Commentary)**: コンピュータ化学分野の相互理解を深めるための原稿として、著者の専門分野の研究について、啓発的に理解しやすく平易な表現で解説したもの(著者の成果を中心とする概説は解説ではなく総合論文とする)。新規性は問わないが、有用性のあるものとする。
- (b) **コンピュータ化学ハイライト (Highlights in Computer Chemistry)**: 注目研究・最新研究の紹介。成果・背景・現状・新技術・興味の焦点・近い将来の問題などについて自由に記載したもの。
- (c) **ソフトウェア・レビュー (Software News and Reviews)**: コンピュータ・アプリケーション・ソフトウェアの紹介(4頁以内)。業者可。広告を別に出してもらえれば、ページチャージなしとする。ただし、本文は広告になっていないこと。

「記事」は、通常の学術論文としての査読はないが、編集室での審査を経て掲載とする。

### 1.2 使用用語

原稿は、英語か日本語を用いて専門外の人にもわかるように執筆する。特に、カタカナによる表現はなるべく避け、文献や注なども活用してわかり易い文章で記述する。

### 1.3 投稿手続き・投稿カード・審査

原稿は、オリジナルなもの(他で発表されておらず、発表予定もないもの)に限る。電子投稿は、下記 URL から行う。

ScholarOne Manuscripts (<http://mc.manuscriptcentral.com/jccj>)

### 1.3.1 アカウントの作成

ScholarOne Manuscripts メニュー画面の “If you do not have an account, click [Here](#). “ をクリックする。氏名・e-mail アドレス・所属・住所を記入した後、ログイン ID と PW の設定と会員番号を入力する。

### 1.3.2 投稿

ID・PW を使用して JCCJ ログイン後、個人用アカウントの “Author Center” からログインする。画面の手順に沿って、原稿種別・タイトル・キーワード・カテゴリ・著者情報を入力する。共著者がいる場合は、共著者の氏名・e-mail アドレスを入力する。その後、審査員を2名以上推薦する（審査を希望しない審査員の記入は任意）。

編集室宛のコメントがあれば、カバーレターに記入する。

次の4点について確認し、チェックをいれる。「投稿の手引き」に沿って作成されているか。「SCCJ への著作権委譲について同意するか。」「発行時にページチャージが課金されることを確認したか」「他で発表されておらず、発表予定もないものであるか。」

CD 送付先（ページチャージ請求先）を入力する。日本国内の場合は、日本語で入力とする。

画面指示に従って、原稿ファイル（MS-Word 形式）をアップロードする。その際、アップロードするファイルの属性（本文・Table・Figure・その他）をダウンリストから選択する。アップロード可能なファイルについては、資料を参照のこと。なお、アップロードされたファイルは、自動で PDF ファイルと html ファイルに変換される。

最後にチェックリストが表示される。全て緑色のチェックがついていれば、投稿準備完了となる。必須項目の記載漏れには赤い×がついている。特に、自動変換されたファイルの確認をしていない場合は、Step7. Review and Submit の項目に赤の×が付くので注意。html, pdf それぞれのボタンをクリックして、ファイルを開き確認する。

Submit ボタンで投稿する。保存して後で作業を続行することも可能である。

### 1.3.3 審査

受理された論文は、審査員による審査の後、審査結果が e-mail で送られる。回答書ならびに修正は、上記投稿画面にて投稿と同様に行う。

## 1.4 出版形態

学会誌（JCCJ）に掲載可となった論文は、英文校正を行う。英文修正依頼の e-mail が届いたら、英文修正を行った後、最終稿を上記投稿画面にてアップロードする。最終稿は、PDF ファイルと電子出版のための Word 形式（.doc）ファイルが必要となる。図やグラフなど.doc ファイル以外のファイルも追加で添付できる。TeX 等アップロードできないファイルについては、下記アドレス宛別途相談する。

日本コンピュータ化学会電子出版室 e-mail : [jccjoffice@sccj.net](mailto:jccjoffice@sccj.net)

学会誌（JCCJ）に印刷、または、印刷予定の論文は、インターネット WWW（World Wide Web）を通じて読むことが出来る。ただし、回線の事故など不測の事態によりこのサービスが停止されても、本学会は一切の義務を負わない。学会誌のインターネット・アドレスは、次の通りである。

URL <https://www.jstage.jst.go.jp/browse/jccj/-char/ja/>

日本コンピュータ化学会の会員は、学会誌（JCCJ）を無料で配布される。入会申込は、

学会の事務局（下記）への問い合わせ，あるいは，本学会のホームページ(URL <http://www.sccj.net>) へのインターネット・アクセスによって行うことができる。

【日本コンピュータ化学会事務局】

〒110-0015 台東区東上野 2-1-13

藤和ハイタウン上野 607

株式会社ベストシステムズ内

電話：080-2388-0894 FAX：03-5830-3922

e-mail：sccjoffice@sccj.net

### 1.5 ページチャージ

論文投稿者は，受理論文が印刷された時点で，表 1 に示すページチャージを支払わなければならない。著者には，WEB 公開されている著者論文の入った CD-R を郵送する。

「速報」は，別途ページチャージを定める（2 頁 10000 円，3 頁 15000 円）。

表 1. Page Charge / in Japanese Yen

Pages	1-2	3-4	5-6	7-8	9-10	over 11 pages
Charge for Japanese paper	15,000	25,000	35,000	45,000	55,000	10,000 per 2 pages

### 1.6 著作権

Copyright Transfer Form をオンライン原稿校正時に送付するので，必要事項を記入してスキャン原稿の PDF 添付または，別途郵送する。

郵送先：〒338-8570 さいたま市桜区下大久保 255 埼玉大学大学院理工学研究科

応用化学コース 太刀川達也研究室気付 日本コンピュータ化学会 JCCJ 編集室。

Facsimile, スキャン原稿によるメール添付も可。

新規開発のソフトウェアに関する報告の時は，プログラム添付の有無，日本コンピュータ化学会の SCCJ 登録ソフトウェアとして登録可能かどうかも記載する。学会誌に掲載された著作物の著作権（著作財産権）は，本学会に帰属する。ただし，著者は，学会から許可を得なくても，論文の PDF ファイルを著者自身または著者が属する組織の WEB サイトに公開することができる。その際，下記の内容を論文の最初のページに明記する必要がある。

Copyright 20xx (year) Society of Computer Chemistry, Japan. : 最初のページの右ヘッダー。

DOI: 10.2477/jccj.MSNo. 全ての奇数ページの左フッター。

Vol. 7, No. 3 以降は，必要事項が WEB 公開されている論文に記載されているが，それ以前の論文については，日本コンピュータ化学会 HP から申し込むと Copyright ならびに DOI の記載された論文が著者の元に送付される。

## 2. 原稿のまとめ方

### 2.1 原稿の体裁 (電子投稿・郵送共通)

- (a) 原稿は、A4 版 (21.0×29.6 cm)とし、下記の要領で作成する。原稿の上下に各 3.0 cm、左右に各 2.0 cm 以上の余白をとる。
- (b) 論文題名は、2 行の空白行の後、左右 3.0 cm の余白、文字サイズ 16 ポイント、中央揃えで (センターリングして)、Times bold (日本語論文では明朝体太字) で印字する。句読点は、「,」、「.」を用いる。同じ幅で、著者名 (12 ポイント) と研究の行われた場所 (10 ポイント) を書く。字体はいずれも Times font (明朝体) とする。著者名と研究の行われた場所の対応を示すには、a, b, c... などの上つき文字をカッコをつけずに用いる。上つき、下つきの文字は、少なくとも 2.2 mm 以上の文字高となるように印字する。主著者には \*印 を付け、e-mail アドレスをイタリック体で記す。
- (c) この下に受理日付等を編集委員会が記入するので、3 行の空白行を入れる。
- (d) 論文の概要は、2.5 cm の左右の余白で、9 ポイントの文字サイズで Times font (明朝体) で印字する。行間隔は 1 行とする。概要は、読者が本文を読まなくても、その目的、方法、結論を理解できるように書く。必要ならば、本文中の化合物番号や図、表の番号を引用する。ただし、文献番号を引用してはならない。
- (e) キーワードを書く。2.5 cm の左右の余白、9 ポイントの文字サイズで、Times font で印字する。例えば、以下のように書く。

キーワード : Crystal structure, Molecular orbital, Curve fitting, Multimedia, Chemical education

- (f) 本文は、2 段組で 2.0 cm の左右の余白、9 ポイントの文字サイズで、Times font (明朝体) で印字する。行間隔は 1 行とする。本文は、10 ポイントの文字サイズで、研究目的、方法 (使用機器、オペレーション・システム など)、結果と考察、結論 (Introduction, Method (instruments, operation system, etc.), Results and Discussion, Conclusion) 等の適当な見出しをつけて書く。謝辞は、見出しなしで簡潔に書く。
- (g) 文献および注は、本文中で連続した番号で以下のように引用する。Hosoya *et al.* [1, 2], Yoshimura [3 - 6], Newbold [7], and Hirano [8]. 本文の後に参考文献 (および注) の見出しをつける。雑誌の引用法は、著者名 (細矢治夫, Tadayosi Yoshimura, Brian T. Newbold, and Kazutoshi Tanabe 等)、雑誌名、巻数、頁、発行年の順とする。雑誌の略記法は、できるだけ Chemical Abstracts の形式を用いる。ibid や idem は使用しない。雑誌のタイトルはイタリックで、巻数はゴシック体で印字し、発行年は、括弧で囲む。巻数のない雑誌では、発行年を括弧なしで、巻数の場所に移動してゴシック体で記す。引用文献が投稿中または印刷中の場合、その原稿かゲラ刷りのコピーを添付する。
- (h) 本文中で使用したプログラムは、その入手方法を必ず記載する。新規に開発したプログラムは、その配布方法を記載する。
- (i) 日本語で書かれた原稿の最後には、英文の要旨をつける。ここには、英語の題名、著者名とその所属、主著者の電話番号、ファクシミリ番号、電子メールアドレスを記載する。英文の要旨は、表や図の番号を引用して内容が分かり易く伝わるように工夫する。
- (j) Reference に和文表記がある場合は、全てローマ字で表記すること。ローマ字表記とは、和文を英語に翻訳することではなく、日本語読みのままローマ字で表記することである。欧文誌名を定めている場合は、必要があれば丸括弧に入れてローマ字誌名の後に付記する。欧文誌名を定めていないものに、欧訳誌名を付けてはならない。  
例 Kagaku To Kogyo (Chemistry and Chemical Industry)

- (k) 速報の Abstract は英文とする。末尾に、目次用にタイトル・著者名・所属機関・住所の英文をつける。

## 2.2 化合物の命名法

化合物の命名法は、IUPAC 命名法に従う。単位は、なるべく SI 単位を使用する。

参考：産業技術総合研究所 計量標準総合センター「国際単位系は (SI) は、世界共通のルールです」<https://www.nmij.jp/public/pamphlet/si/SI1002.pdf>

丸善「化学便覧 基礎編」

## 2.3 表, 図, 構造式

表, 図, 構造式については、英文の投稿規定を参照して作成する。なお、図や表の説明文およびこれらの中に書き込む文字は、日本語の論文でも英語で記し、これらの番号を英文要旨でもなるべく引用する。図には、横軸・縦軸のタイトルと単位を明記する。カラーの図面も受け付ける。ただし、カラーでの公開は電子出版のみで、印刷は白黒となる。したがって、カラー原稿を白黒でコピーしたときに、細部が明瞭に判る図を作成する。

## 2.4 電子付録

補足資料(付録)は全て電子付録とする。文献の後に電子付録(Supplementary Materials)の見出しをつけて、その名称を一覧表示する。補足資料は、pdf ファイルであることが望ましく、Figure S1, Table S1, Video S1 などの名称をつける。補足資料の最初のページには、論文タイトル、著者名を示す。CGI その他のアプリケーションのように機種に依存するものは補足資料(電子付録)とせず、継続的に公開可能なサーバー上に公開して、その URL を引用する。映像、音声、動画、大型図版、JAVA アプレットなどの www (Plug-in を含む) で動作可能な補足資料は、それぞれ別ファイルとする。なお、ファイル名にはスペース、/, -, ", ' を用いない。ファイル数は 1 論文あたり最大 5 ファイルまでとし、ファイルサイズは 1 論文あたり最大 10MB とする。なお、補足資料は、審査期間中審査員や編集委員が利用可能でなければならない。

※投稿は、原則として電子投稿のみで受け付けます。郵送での投稿を希望される場合は、下記までご連絡ください。なお、郵送による投稿の場合は、オリジナル原稿 1 部・コピー 2 部の計 3 部と投稿カードが必要になります。

〒338-8570 さいたま市桜区下大久保 255 埼玉大学大学院理工学研究科

応用化学コース 太刀川達也研究室気付 日本コンピュータ化学会 JCCJ 編集室

TEL 048-858-9063; FAX 048-858-9274 ; e-mail: jccjoffice@sccj.net

## Information for Authors, 2016

### *Journal of Computer Chemistry, Japan and Journal of Computer Chemistry, Japan –International Edition*

#### 1. Submission of Manuscripts

##### 1.1 Manuscripts and Articles

###### 1.1.1 Manuscripts

The *Journal of Computer Chemistry, Japan* (JCCJ) will publish the following kinds of contributions.

**General Papers:** Complete reports of original work on computational methods, hardware and/or software for chemical research or chemical theory or development or applications in the broadest sense.

**Notes:** Brief reports of novel developments or applications (maximum length : 4 journal pages).

**Technical Papers:** Reports of technically original work, for example, the implementation of a program for wider applicability.

**Reviews:** Creative reviews on timely topics in areas appropriate to the Journal.

**Accounts:** Concise and objective reviews, the contents of which are largely from the author's own laboratory.

**Letters:** Selected Papers from the Annual Spring (Autumn) Meeting.

###### 1.1.2 Articles

**Commentary:** Expressions of opinions or explanations about computer chemistry. It should be written in an accessible, non-technical style and does not normally contain primary research data, although it may present 'sociological' data.

**Highlights:** Brief descriptions of outstanding part of a notable study in computer chemistry.

**Software News and Reviews:** Reviews of computer applications software. It may be accepted when written by application dealers. No page charge will be requested when the author puts an advertisement in the journal.

#### 1.2 Electronic Submission Instructions

All manuscripts should be submitted using the *Journal of Computer Chemistry, Japan* (JCCJ) web-based manuscript submission and handling system at the URL below.

**ScholarOne Manuscripts Online Submission System for JCCJ.**

ScholarOne Manuscripts (<http://mc.manuscriptcentral.com/jccj>)

The following electronic files should be prepared for each electronic submission:

- **Main Document** file (MS-Word recommended) containing title page, abstract, text, references, figure legends, and table captions.
- Figures and/or tables (**Illustration** and **Table** files).
- Supplementary material (**Supplementary Files**).

(See Appendix 1 for available files).

**ScholarOne Manuscripts** will automatically convert these uploaded files into single PDF and HTML documents so that they can be viewed and printed for peer reviewing. Authors must verify that the PDF and HTML files are satisfactory and complete.

Authors should enter the supporting information the follows:

• Supporting Information :

Information about manuscript (issue type, kind of paper), Title, Information about authors (Corresponding author's name, full mailing address, telephone number, facsimile number and e-mail address), Membership No. (One of the authors must be a member of SCCJ).

1.2.1 Submitting Process:

Your will follow the submission steps:

- (1) Enter manuscript information such as title etc.
- (2) Upload manuscript file(s).
- (3) Edit your input if necessary.
- (4) Confirm your input.

When the information for your submission is saved, a manuscript number is automatically generated.

Using your ID and a Password, you can log onto your page at any time.

After you have received e-mail for corrections, you must resubmit via the Website within two weeks. Each revised manuscript must be accompanied by a covering letter that addresses each of the comments of reviewer (s) and explains all changes made in the earlier version.

1.3 Hardcopy Submission Instructions

Authors are encouraged to submit using the *Journal of Computer Chemistry, Japan* (JCCJ) web-based manuscript submission and handling system **ScholarOne Manuscripts**. However, conventional, hardcopy submissions are also acceptable.

Postal address:

Tatsuya Tachikawa (Ph. D.), JCCJ Editorial Office,  
Course of Applied Chemistry, Programs in Chemistry, Graduate School of Science and Engineering,  
Saitama University,  
255 Shimo-Ohkubo, Sakura-ku, Saitama, Saitama, 338-8570 JAPAN  
Please contact us if you have any questions. e-mail: [jccjoffice@sccj.net](mailto:jccjoffice@sccj.net)

1.4 Publication

After proofreading, each manuscript that is accepted for publication will be published electronically through the Internet prior to the conventional publication in printed form. All the articles appearing in *Journal of Computer Chemistry, Japan* are to be made available through international network WWW (World Wide Web). In case of problems, the *Society of Computer Chemistry, Japan* has no responsibility to continue this service.

Members of *Society of Computer Chemistry, Japan* may share their subscriptions in conventional printed form without further cost. Member and subscription services are available from the following.

Society of Computer Chemistry, Japan  
2-1-13-607 Higashiueno, Taito-ku, Tokyo 110-0015 JAPAN  
TEL080-2388-0894 ; FAX 03-5830-3922 ; e-mail : [sccjoffice@sccj.net](mailto:sccjoffice@sccj.net)  
URL: <http://www.sccj.net>

### 1.5 Page Charges

To defray some of the cost of conventional publication, a payment (shown in Table 1) is required. On payment of the page fee, authors receive CD-R without further charge.

Table 1. Page Charge / in Japanese Yen

Pages	1–2	3–4	5–6	7–8	9–10	over 11 pages
Charge for Japanese paper	15,000	25,000	35,000	45,000	55,000	10,000 per 2 pages

### 1.6 Copyright

The JCCJ Copyright Transfer Form (JCCJ CTF) is found at the end of this section. The Editorial Office will send the JCCJ CTF to principal author before advanced publication. The JCCJ CTF must be completed and signed for each submitted manuscript. No substitute forms or attachments are acceptable. The signed form have to be sent to the Editor assigned to the manuscript by mail, facsimile or attached scanned file with e-mail.

**Postal address:** Tatsuya Tachikawa (Ph. D.), JCCJ Editorial Office,  
Course of Applied Chemistry, Programs in Chemistry, Graduate School of Science and Engineering,  
Saitama University, 255 Shimo-Ohkubo, Sakura-ku, Saitama, 338-8570 JAPAN

**facimile:** +81-48-858-9274

**e-mail:** jccjoffice@sccj.net

No paper is released for publication until an author's corrected proof has been returned. The copyright of papers accepted for publication in *Journal of Computer Chemistry, Japan* belongs to the *Society of Computer Chemistry, Japan* (SCCJ). The transfer of copyright from author to the Society must be explicitly made to enable the Society to ensure maximum dissemination of the author's work.

The author(s) may, without seeking permission from JCCJ, make available the PDF (Portable Document Format by Adobe Systems Inc.) of the paper via personal website(s) of the author(s) or via the Internet of the organization(s) where the author(s) work(s) providing that the following statement appears on the first page, or screen, of the Paper as posted on the server:

Copyright 200x Society of Computer Chemistry, Japan. : The right header of the first page.

DOI: 10.2477/jccj.MSNo. : The left footers of all odd pages.

## 2. Preparation of Manuscripts

We have not prepared a template for Electronic Submission. Please write your manuscript in accordance with this guideline.

### 2.1 General Instructions

- (a) The entire manuscript must be submitted on good quality A4 (21.0 x 29.6 cm) paper with 3.0 cm top and bottom margins, if submitted as Hardcopy.
- (b) The title should have a column width of 15 cm (margins of 3.0 cm on the right and left sides) with a character size of 16 points in Times bold. The title of the article should be centered, in capitals for the first letter of each word except for articles, conjunctions, and prepositions. The names of the authors (12 points) and addresses (9 points) at which the research was done should appear under the title and have a column width of 15 cm in a Times font. Use the letters a, b, c..., as superscripts to link authors to their addresses and an asterisk to indicate the author(s) to whom correspondence should be addressed. Complete addresses should be given, including

postal zip codes. The e-mail address of the author to whom correspondence should be addressed should be given in italics.

- (c) The date received is the day on which the editor receives the article. The Editorial Office enters the date received after the addresses.
- (d) The abstract (column width of 16 cm (margins of 2.5 cm on the right and left sides)) and text (column width of 17 cm (margins of 2.0 cm on the right and left sides)) must have single spacing, full justification, and a character size of 9 points. A Times font is recommended. Superscript and subscript letters or numbers must be at least 2.2 mm high. Indent the first sentence several spaces. The abstract should be written so that readers can understand the purpose, methods and conclusions without referring to the text. Do not use a heading in the abstract. When a compound, Table or Figure number is cited in the abstract, such numbers should be identical with those used in the text. After writing several keywords (for example, Keywords : Crystal structure, Molecular orbital, Curve fitting, Multimedia, Chemical education), begin the text. The first sentence is written in two-step sets, after the title, names, affiliations, abstract, keywords of the head. Use headings for Introduction, Method (instruments, operation system, etc.), Experimental Part, Results and Discussion, Conclusion, etc. Expressions of thanks should be brief and placed before the References and Notes section, but with no heading. All pages should be numbered consecutively.
- (e) The references to the literature and footnotes (except those in Tables) should be numbered in the text in one consecutive series. For example: Hosoya *et al.* [1, 2] by Yoshimura [3 - 6], Newbold [7], and Yoshino [8]. The list of literature cited and footnotes should be headed by the phrase References and Notes and numbered 1, 2, 3, *etc.*, according to the numbers used in the text. Journals should be abbreviated as in Chemical Abstracts. The use of "ibid." and "idem" in references is not allowed. In references, the journal title and the volume number (or year, if there is no volume number) should be typed in italics and bold-face, respectively. If reference is made to a paper submitted for publication or in press, authors are required to enclose a copy of the manuscript or galley proof.
- (f) A statement of the availability or the manner of distribution of each program appearing in the text is required.
- (g) The title in English, authors and their affiliations, telephone and facsimile numbers, e-mail address of the principal author and abstract in English are to be placed at the end of each manuscript written in Japanese.

## 2.2 Nomenclature, Symbols, Units, and Abbreviations

Nomenclature should conform as closely as possible to the rules established by IUPAC. Symbols and units should conform as closely as possible to SI units. The preferred forms for a few of the commonly used abbreviations and units are mp, bp, s, min, h, g, mg, m, cm, nm, Hz, ppm, MOPAC, AM1, PM3, TLC, NMR, UV, and IR.

[SI Units: Bureau International des Poids Mesures (BIPM)]: <http://www.bipm.org/en/si/>

[A conversion tables from non SI to SI]:

[http://www.bipm.org/en/si/si\\_brochure/chapter4/table6.html](http://www.bipm.org/en/si/si_brochure/chapter4/table6.html)

## 2.3 Tables, Figures, and Illustrations

- (a) Tables and Figures must have a width of 17 cm (full column) whenever possible. The citations of figures should be made in accordance with the following examples: Figure 1; Figures 1, 2, and 3. "Figure" should be spelled out instead of being written "Fig." For Tables and Figure captions, a Times font with a character size of 9 points is recommended. Standard abbreviations should be used in Tables. For "Table" in headings and "Figure" in captions, a Times bold font is recommended: for example: Table 2.; Figure 1. Footnotes in Tables are indicated by the letters a, b, c, etc. as superscripts and without parentheses. For footnotes in Tables and Figure captions, a character size of 9 points and single spacing may be used. Mathematical and chemical equations should be arranged to occupy a single column. Authors using computer graphics and desktop-publishing software are encouraged to incorporate Formulas and Schemes in the text (one column) where they are to appear.
- (b) Structural or displayed formulas must be accurately drawn or typed. The illustrations should be clear enough for photographic reproduction.

Color illustrations are acceptable providing that their black-and-white images give sufficient information. They will be published electronically in color; however, in the form of conventional printing, they will be published only in black-and-white.

## 2.4 Supplementary material

Supplementary material may be submitted for online-only publication if it adds value for potential readers. However, it must not contain material critical to the understanding of the manuscript. The hard copy of the manuscript should stand alone, but it should be indicated at an appropriate point in the text that supplementary material is available online. In addition, the availability of supplementary material should also be indicated in the manuscript by a section headed 'Supplementary material' with a brief description of these data to appear before the Acknowledgements and References. If possible, the best format to present these data is a single PDF file. Please include the manuscript title and list of authors on the first page, and whenever possible include the figure legends. Supplementary material should be named and cited within the manuscript as Figure S1, Table S1, Video S1, etc. Supplementary material is available to reviewers and editors during the review process. If images are supplied as .GIFs or .JPEGs, the minimum acceptable resolution for viewing on screen is 120 dpi.

## ScholarOne Manuscripts

## Files Available for uploading

Kind of file/extension	© : ScholarOne Manuscripts will automatically convert these uploaded files into single PDF and HTML.	
	Japanese	English
Word (doc)	©	©
Word (docx)	©	©
pdf	©	©
rtf	©	©
odt	○	○
txt	△	©
LaTeX (Template) (Not allowed using macros)	○	○
tif	©	©
gif	©	©
jpg	©	©
eps	©	©
psd	©	©
png	©	©
Postscript	©	©
PICT	©	©
Excel (xls)	©	©
Excel (xlsx)	©	©
PowerPoint (ppt)	©	©
The others	Image: bmp, ai etc. Animation: OK	

*Journal of Computer Chemistry, Japan* Submission / Copyright Transfer Form  
Manuscript No. :

Authors' Names, Affiliations and Addresses

Corresponded author's e-mail address

Dates received and accepted

I / We submit to *Journal of Computer Chemistry, Japan* the manuscript specified below. I / We certify that the work reported here has not received prior publication and is not under consideration for publication elsewhere in any medium.

Type of Paper/ Article: General Paper \_\_\_\_\_, Note \_\_\_\_\_, Technical Paper \_\_\_\_\_, Review \_\_\_\_\_, Account\_ Commentary \_\_\_\_\_, Highlights \_\_\_\_\_, Software News and Reviews \_\_\_\_\_, Letter \_\_\_\_\_

Number of manuscript pages: \_\_\_\_\_, Page charge: \_\_\_\_\_ (Japanese Yen)

Original Source Program File: Enclosed \_\_\_\_\_ Not enclosed \_\_\_\_\_

Do you want to distribute any programs appearing in the manuscript by way of the *Society of Computer Chemistry, Japan* (SCCJ)? Yes \_\_\_\_\_ No \_\_\_\_\_

\*\*\*\*\*COPYRIGHT TRANSFER\*\*\*\*\*

I / We agree to transfer to *Society of Computer Chemistry, Japan* (SCCJ) the copyright of the above-mentioned manuscript, when the manuscript is accepted for publication in The Journal in any form.

Author's signature \_\_\_\_\_ Date \_\_\_\_\_

The author(s) may, without seeking permission from JCCJ, make available the PDF (Portable document format from Adobe Systems Inc.) of the Paper via personal website(s) of the Author(s) or via the Internet of the organization(s) where the Author(s) work(s) providing that the following statement appears on the first page, or screen, of the Paper as posted on the server:

Copyright 200x Society of Computer Chemistry, Japan. : The right header of the first page.

DOI: 10.2477/jccj.H\*\*\*\* (manuscript No.) : The left footers of all odd pages.

This paper was published in "x. xxxx, x. xxxx and x. xxxxx (author's name (s)), *J. Comput. Chem. Jpan.*, xx (Vol. No.), xxx-xxx (pages), xxxx (year). The internet address of the above Journal is as follows:


[https://www.jstage.jst.go.jp/browse/jccj/v5\(Vol. No.\)/n3\(issue No.\)/a12\(article No.\)/document.pdf](https://www.jstage.jst.go.jp/browse/jccj/v5(Vol. No.)/n3(issue No.)/a12(article No.)/document.pdf).

## 6 日本コンピュータ化学会役員名簿

日本コンピュータ化学会役員名簿 (24名/2016年1月現在 音順)

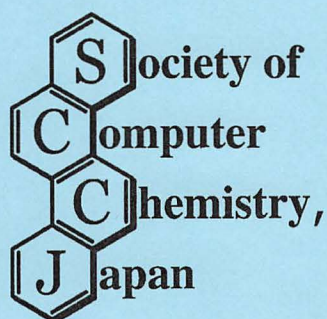
名誉会長	平野 恒夫	お茶の水女子大学名誉教授
会長	細矢 治夫	お茶の水女子大学名誉教授
副会長	長嶋 雲兵	公益財団法人 計算科学振興財団 FOCUS
事務局長	後藤 仁志	豊橋技術科学大学院工学研究科情報・知能工学専攻
理事	川内 進	東京工業大学大学院理工学研究科有機・高分子物質専攻
理事	河村 雄行	岡山大学大学院環境学研究科資源循環学専攻
理事	神部 順子	江戸川大学 メディアコミュニケーション学部情報文化学科
理事	菊池 真美	株式会社クレハ 医薬品信頼性保証部
理事	久保 百司	東北大学金属材料研究所
理事	古山 通久	九州大学稲盛フロンティア研究センター
理事	櫻沢 繁	公立はこだて未来大学複雑系知能学科
理事	澤口 直哉	室蘭工業大学工学部材料物性工学科
理事	太刀川達也	埼玉大学大学院理工学研究科
理事	時田 澄男	埼玉大学名誉教授
理事	波田 雅彦	首都大学東京大学院理工学分子物質化学専攻
理事	林 治尚	兵庫県立大学 学術総合情報センター
理事	本間 善夫	ecosci.jp
理事	船津 公人	東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻
理事	山下 晃一	東京大学工学部化学システム工学専攻
顧問	中田 吉郎	群馬大学名誉教授
顧問	中野 英彦	兵庫県立大学名誉教授
顧問	藤田 眞作	湘南情報数理化学研究所
顧問	吉村忠与志	福井工業高等専門学校物質工学科
監査	西 克也	株式会社ベストシステムズ

ONLINE ISSN: 2189-048X



**J**ournal of  
**C**omputer  
**C**hemistry,  
**J**apan  
International Edition

Vol. 1, December, 2015



日本コンピュータ化学会  
Society of Computer Chemistry, Japan

# Journal of Computer Chemistry, Japan -International Edition

Vol. 1, December 2015

## Contents

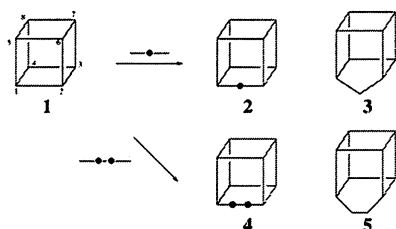
### Foreword

Inauguration of Journal of *Computer Chemistry, Japan -International Edition*

Haruo HOSOYA..... A1

### General Papers

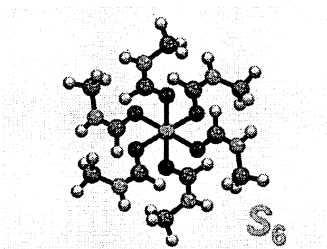
Cage-Shaped Molecules Derived by Applying the Edge Strategy to a Cubane Skeleton



Shinsaku FUJITA ..... 1



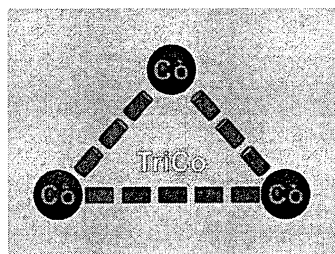
Conformational Analysis of Hexakis-N-Methylformamide Nickel(II) Complex on the Basis of Computational Group Theory and Density Functional Theory



Hiroshi SAKIYAMA, Katsushi WAKI..... 5



Development of MagSaki(Tri) Software for the Magnetic Analysis of Trinuclear High-spin Cobalt(II) Complexes



Hiroshi SAKIYAMA..... 9



## Foreword

# Inauguration of Journal of Computer Chemistry, Japan: International Edition

**President of SCCJ Haruo HOSOYA**


We are proudly declare the inauguration of an internet journal, “Journal of Computer Chemistry, Japan -International Edition (JCCJIE)” in this winter. The Society of Computer Chemistry, Japan (SCCJ) has been publishing an internet journal, JCCJ, for more than thirteen years, and has acquired good reputation in the area of computer chemistry including applied mathematics and life science. However, the majority of the papers were written in Japanese language, though English abstract was obligatorily attached, through which the access from oversea researchers are beginning to increase.

Now the International Edition of our journal will carry only scientific papers in English to be aimed to supply an active agora for the scientists not only in Japan but also in the world-wide countries working in the wide area spanning computer chemistry, life science, applied mathematics, and the related science education.

Although the number of the members is as few as a few hundreds, our society, SCCJ, is organizing two symposia every year, and publishing an internet journal, JCCJ, which is occasionally devoted to some special topics. In 2014 we could succeed in publishing a special issue\* on relativistic quantum chemistry (RQC) contributed mostly by the group of theorists of chemistry in Japan, but Professor Pekka Pyykkö willingly wrote the preface. We are boastly proud of this project demonstrating the high level and ability of the researchers in this country, and are planning to publish other special issues of our new JCCJIE, solely in English but by international authors this time.

Please, join and help JCCJIE to get high impact factor. J-Stage (Japan Science and Technology Information Aggregator, Electronic) will also help us.

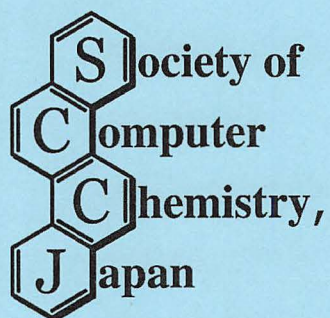
ISSN: 1347-1767  
CODEN: JCCJAG



**J**ournal of  
**C**omputer  
**C**hemistry,  
**J**apan

Vol. 14, No. 1–No. 6 (2015)

目次・巻頭言



日本コンピュータ化学会  
Society of Computer Chemistry, Japan

# *Journal of Computer Chemistry, Japan*

Vol. 14, No.1, March 2015

## Contents

### *Foreword*

#### **What is Science Literacy ?**

Hitoshi GOTO

A1

### *Highlight*

#### **SCCJ Cafe – Season 4 – Shape of Protein Molecules (3) "Application of Molecular Structures"**

Takahiro KUDOU

A3

#### **Visualization of Orbitals (2)**

#### **Probability Density Distribution in the Three**

#### **Dimensional Representation of a Hydrogen 1s Orbital in a Glass Block**

Sumio TOKITA

A6

### *General Papers*

#### **Implementation of Pair Interaction Energy Decomposition Analysis and Its Applications to Protein-Ligand Systems**

Takayuki TSUKAMOTO, Koichiro KATO, Akifumi KATO, Tatsuya NAKANO, Yuji MOCHIZUKI,  
Kaori FUKUZAWA

1

#### **A Universal Equation of State for Hydrocarbons**

Yosuke KATAOKA, Yuri YAMADA

10

### *Technical Paper*

#### **Molecular Dynamics by EXCEL**

Yosuke KATAOKA, Yuri YAMADA

18

# *Journal of Computer Chemistry, Japan*

Vol. 14, No.1, March 2015

## 目 次

### 巻頭言

論文不正問題と研究者倫理

A1

後藤 仁志

### ハイライト

**SCCJ Cafe –Season 4–**分子のかたち(3)「分子構造の活用」

A3

工藤 高裕

電子を描く(2) — 確率の雲の正体

A6

時田 澄男

### 研究論文

相互作用エネルギー成分分割解析機能 **PIEDA** の実装とタンパク質-リガンド間の相互作用解析

1

塚本 貴志, 加藤 幸一郎, 加藤 昭史, 中野 達也, 望月 祐志, 福澤 薫

**A Universal Equation of State for Hydrocarbons**

10

Yosuke KATAOKA, Yuri YAMADA

### 技術論文

**EXCEL** による分子動力学

18

片岡 洋右, 山田 祐理

## 巻頭言

## 論文不正問題と研究者倫理

豊橋技術科学大学大学院 情報・知能工学専攻 後藤 仁志

STAP細胞問題は、2014年12月26日、理化学研究所調査委員会の記者会見と、同日公開された「研究論文に関する調査報告書」[1]を以て終焉を迎えた。報告書の結論は、概ね予想していた通りである。STAP幹細胞に関する論文は、『ES細胞の混入に由来する、あるいはそれで説明できること』が科学的に確認されたことから、ほぼすべて否定されたことになる。日本中を騒がせたこの騒動は、今後いろいろな処で燻り続けるとは思いますが、学術的にはこれで事後処理を完了したと言って良いだろう。ここでは、この問題を私なりに消化し、今後の糧とするために、調査報告書を読んで感じたこと、考えたことを少し記しておきたい。

個人的に早い段階から感じていたことは、小保方氏が研究者として未熟ではないかという点である。そのことは、野依理事長が記者会見で指摘していたことでもある。弁護士から公開された稚拙な実験ノート、小保方氏が語ったオリジナルデータのいい加減な管理方法や不適切な論文図表の取り扱い、さらに、インターネット(ブログ)で指摘された学位論文のコピペ問題など、研究者倫理の教科書に「やってはいけないこと」として載っているような事例が、まるで当たり前であるかのように行われていたことが明らかになった。これまで学術上の不正問題が起こる度に、大学や研究機関は不正再発防止策を強化せよという通達を受け、倫理規定を改定し、リテラシー教育を必修科目として実施してきた。そうした取り組みは一体何だったのか。最先端の研究機関で全く生かされなかったことが残念である。

未熟さに由来する不正が起こる背景の一つに、インターネットとデジタル技術の発達がある。以前はとも時間がかかっていた文献調査や情報検索が、素人には不可能だった高度な画像編集技術が、今では誰でも簡単に活用できるようになったからである。また、指導者がこうした時代の進化についていけないことも要因の一つである。今回の騒動を踏まえ、「実験ノートの正しい書き方」や「正しいコピペ引用の方法」など、これまでも大学教育の中で実施してきたはずのことを、再度、徹底させられることだろう。しかし、今どきの研究開発は、短い研究サイクル、膨大な文献情報、大量で多様な形式の実験(測定)データなど、一昔前とは全く異なる環境で行われていることを考えれば、紙媒体で記録し、管理することが今後ますます困難になることは明らかである。それにもかかわらず、未だに実験ノートを電子化しようという動きが、この日本ではあまり広がらないのが不思議でならない。

最近、多くの大学において、不正再発防止策の一つとしてコピペ発見ソフトの導入が進められている。大学教員にとって、インターネットという優等生に全面的支援を求めようとする学生の悪癖に対処するための必須ツールとなるだろう。しかし、そこで学生にコピペをさせない抑止効果を期待するだけでは、『責任ある研究』とは何かということを教える機会を逸してしまうことに注意しておくべきである。

では、『研究における責任ある行動』をどのようにして教育していけばよいのだろうか。そのことに関して、前述の調査報告書は次のように指摘している：『小保方氏が実験記録を残さず、過失が非常に多いことを見逃した理由の一つは、プログレスレポートのあり方など、研究室運営のやり方に問題があったためではないだろうか。』よく考えてみればわかるように、コピペ対策をしても、研究者倫理を必修科目にしても、目の前の実験を公正に行うことを教えるのは難しく、まして、ネガティブな結果を明日報告するための勇気を与えられるわけでもない。研究室内で行われるセミナーや報告会、学会主催の討論会などの研究発表の場における真摯なディスカッションが教育的(威圧的ではない)雰囲気の中で行われることによって、日々少しずつ形成されていくものなのだと改めて気づかされる。

調査報告書では、今回の論文不正問題がここまで大きくなった要因として、共著者が不正や捏造を見抜けなかった責任も強く指摘され、研究の中身への注意がおろそかになったのは論文発表を焦ったからではないかと推察されている。そして、次のような示唆もある：(研究者倫理教育の)『基礎となるのは、論文のインパクトファクターでも、獲得研究費の額でも、ノーベル賞の獲得数でもなく、自然の謎を解き明かす喜びと社会に対する貢献である』と。もちろん、高額な研究費を獲得するために著名な学術雑誌に掲載しなければならないという最先端研究の責任者にかかるプレッシャーは理解できる。しかし、もし本当に論文発表を焦ったことが原因だったとするならば、研究者倫理を学び直さなければならないのは、共著者として名を連ねた未熟ではない研究者等の方であると思う。

2012年に人への感染を可能にするインフルエンザウイルスの作成方法の論文公開に関して、60日間研究を停止し、医学的進歩とバイオテロの可能性についてコミュニティで話し合うことが提案されたことがある。その時は、科学の発展が人類にもたらす功罪という観点から研究者倫理を考える機会になったが、同時に、この分野における研究競争の熾烈さにも驚かされた。その意味で、今回のSTAP細胞問題では、ES細胞のトップ研究者を亡くしてしまっただけでなく、数か月もの間、「悪魔の証明」のために日本の最先端研究者等の貴重な研究時間を浪費してしまった。また、再生医療の発達を待ち望む人々の失望は計り知れない。分野は違うとはいえ研究者コミュニティの一員として、それら失ったものを何らかの形で取り戻すために、微力ながら貢献していきたいと考えている。

直接面識があったわけではないが、笹井芳樹博士は若手研究者が活躍できる研究所を作ろうと尽力されていたと聞く。彼の御冥福をお祈りいたしたいと思う。

## 参考文献と Web サイト

- [1] 桂敷, 五十嵐和彦, 伊藤武彦, 大森一志, 久保田健夫, 五木田彬, 米川博通, 「研究論文に関する調査報告書」, 独立行政法人理化学研究所 研究論文に関する調査委員会, 2014年12月26日. <http://www3.riken.jp/stap/j/c13document5.pdf>

2014 特別合本号「合本号巻頭言」からの転載

# *Journal of Computer Chemistry, Japan*

Vol. 14, No.2, July 2015

## Contents

### *Foreword*

- Miscellaneous Thoughts on Mathematical Chemistry** A11  
Koichi YAMASHITA

### *Book Review*

- Intermolecular Forces of Organic Molecules: Analysis of Intermolecular Interaction Energy by *Ab Initio* Molecular Orbital Calculations (in Japanese)** A12  
Umpei NAGASHIMA

### *Highlight*

- SCCJ Cafe – Season 4 – Shape of Protein Molecules (4)  
“Description of Molecular Structural Information in PDB”** A13  
Takahiro KUDOU

- Visualization of Orbitals (3)  
Probability Density Distribution in the Three Dimensional Representation of Hydrogen s Orbitals in a Glass Block** A17  
Sumio TOKITA

### *General Papers*

- Structural Investigation of Four Dinuclear Iron(III) Complexes Relevant to Renal Injuries** 23  
Keita ABE, Hiroshi SAKIYMA, Yuzo NISHIDA

- Theoretical Study on Reaction Mechanism of Lutidine Derivative Formation** 30  
Ryo ISHIKAWA, Yasuko Y. MARUO, Keiji KOBAYASHI, Hiroyuki TERAMAE

- A Material Design on Radioactive Cesium Adsorbent:  $Cs_{1-x}Na_xMn^{II}(CN)_3$  Prussian Blue Analogue** 36  
Taku ONISHI

# Journal of Computer Chemistry, Japan

Vol. 14, No.2, July 2015

## 目 次

### 巻頭言

数理化学雑感

山下 晃一

A11

### 書評

書評：有機分子の分子間力—*Ab Initio* 分子軌道法による 分子間相互作用  
エネルギーの解析—

A12

長嶋 雲兵

### ハイライト

SCCJ Cafe —Season 4—分子のかたち(4)「PDB のデータ書式」

A13

工藤 高裕

電子を描く(3) —いろいろな s 軌道

A17

時田 澄男

### 研究論文

**Structural Investigation of Four Dinuclear Iron(III) Complexes Relevant to  
Renal Injuries**

23

Keita ABE, Hiroshi SAKIYAMA, Yuzo NISHIDA

ルチジン誘導体生成の反応機構に関する理論的研究

30

石川 諒, 丸尾 容子, 小林 啓二, 寺前 裕之

**A Material Design on Radioactive Cesium Adsorbent: Cs<sub>1-x</sub>Na<sub>x</sub>Mn<sup>II</sup>(CN)<sub>3</sub>  
Prussian Blue Analogue**

36

Taku ONISHI

## 巻頭言

## 数理化雑感

大学院工学系研究科 化学システム工学専攻 山下 晃一

近頃、数学と材料科学が蜜月状態であるというようなことを良く耳にする。数学者の思考実験に材料科学が何らかの手がかりを与えるようだ。トポロジカルに基づいて全く理論的に、非自明相の存在が予言され、それが実験的に検証されている。米国物理学会でトポロジカル絶縁体・超伝導体に関連したセッションの多さに驚いたのも記憶に新しい。より化学に近い材料科学では離散幾何学が活躍する。炭素はダイヤモンド、グラフェン、カーボンナノチューブ、フラーレンと様々な構造をとるが、数学的には炭素原子と炭素-炭素結合のネットワークからなる離散曲面の曲率で分類できる。カーボンナノチューブとフラーレンは非負曲率炭素構造に対応する。負曲率炭素構造も予言されているが、これまでそのような構造は発見もされていないし、合成にも成功していないようだ。

こんなことを考えていたら、若き日の数学への憧憬がよみがえってきた。シュレディンガー方程式には愛(i)があるということで、複素関数には結構お世話になった。虚時間発展の経路積分法、複素回転座標による共鳴状態計算、複素ポテンシャルによる波束の吸収、複素古典軌道によるトンネル経路の探索、非平衡グリーン関数法による電子輸送など。もう20年くらい以前であるが、量子カオスが盛んに研究されていた当時、多次元空間での複素古典軌道について物理の若手研究者と話していたら、それをやるなら、まずヘルマンダーの多変数複素関数論の教科書を読破しないと、と言っていた彼は神田の古本屋で同書の日本語訳を見つけたと喜んでいて、数年前に英語の改訂版が出版されたので、懐かしい思いでページをめくってみたが、バリアの高さに、やはり勉強は若い時にやるものだとの反省。それでも定年退職後にはチャレンジしようと購入。最近、多変数複素関数論の日本の生みの親ともいえる岡潔に関する本をよく目にする。多変数複素関数論は数学の分野でもブームなのだろうか。

2003年ロシアの数学者ペレルマンが、100年間未解決であったポアンカレ予想をインターネット上で公開した論文で解決した。2006年のフィールズ賞を拒否し、クレイ研究所の100万ドルの賞金にも興味を示さなかったということで、テレビでも特集が組まれペレルマンの人となり注目された。ポアンカレ予想は純粋に数学的問題であるが、ペレルマンの用いた解決法、リッチフロー方程式が統計力学や宇宙論で応用されている。リッチフロー方程式は、多様体のリーマン計量とリッチテンソルで与えられる非線形発展方程式であるが、これでブラックホールが崩壊する過程が追えるようである。リーマン計量といえば、学生時代、福井謙一先生の極限反応座標に関する研究をしていたことを思い出す。化学反応を、化学種からなる単位胞の集まりと、それらの間の熱やエネルギーの移動と考えて、これらの単位胞をリーマン多様体だとするとリッチフロー方程式は,,,,,

日々、出口志向の研究であくせくしている今日この頃。現実逃避からくる妄想であった。忙中の閑。

# *Journal of Computer Chemistry, Japan*

*Vol. 14, No.3, September 2015*

## Contents

### *Foreword*

#### **Positive Thoughts in Our Rresearch and Life**

A21

Yasunari ZEMPO

### *Letters (Selected Papers)*

#### **Recent Advances in Divide-and-Conquer Density-Functional Tight-Binding Molecular Dynamics Simulations (DC-DFTB-MD)**

43

Yoshifumi NISHIMURA, Takeaki KAIHO, Hiromi NAKAI

#### **Highly Accurate, Numerical Method for Calculating Mathematical Functions Defined by Integrals: Feedback from Numerical Analysis for Quantum Mechanics to Mathematics and Numerical Analysis**

47

Hideaki ISHIKAWA

#### **Calculation of NMR Shielding Constants with Optimized Numerical Basis Function**

50

Katsumi NAKAGAWA

#### **Parallel Performance Analysis for Electronic Structure Calculation of Metal Nanoparticles**

52

Takayoshi ISHIMOTO, Yuichi INADOMI, Hiroaki HONDA, Michihisa KOYAMA

#### **FMO Analysis for Intermolecular Interaction Energy between Human Coagulation Factor Xa and Four Ligands**

54

Hiroyuki SATO, Azuma MATSUURA

#### **Spreadsheet-based Learning Material Development for Understanding Molecular Dynamics and Application to Quantum Mechanics**

57

Kazuo NARUSHIMA, Toru IWATAKE, Yusaku KAWAKAMI

#### **Molecular Interaction Dependence of Liquid Acetic acid and Methyl Formate**

60

Naohiro NISHIDA, Seiji KANAI, Takashi TOKUSHIMA, Yuka HORIKAWA,  
Osamu TAKAHASHI

## Contents

<b>Interatomic Potential for <math>x\text{Na}_2\text{O}-(1-x)\text{SiO}_2</math> Glasses</b>	63
Yuya YAMAMOTO, Naoya SAWAGUCHI, Makoto SASAKI	
<b>Stereoselectivity in Peptide Hydrolysis by Chiral Dizinc Complexes</b>	67
Hiroshi SAKIYAMA	
<b>GPU-accelerated FMO Calculation with OpenFMO: Four-Center Inter-Fragment Coulomb Interaction</b>	69
Hiroaki UMEDA, Toshihiro HANAWA, Mitsuo SHOJI, Taisuke BOKU, Yasuteru SHIGETA	
<b>Optical Spectral Analysis of Real-Time TDDFT Using Maximum Entropy Method - Effect of Repeated Time-Series Data and Phase Shift -</b>	71
Mitsuki TOOGOSHI, Satoru S. KANO, Yasunari ZEMPO	
<b>Development of Trajectory Simulator for Radioactive Plumes</b>	74
Tomoo AOYAMA, Yasutaka WAKAZUKI	
<b>"Maizo"-chemistry Project: toward Molecular- and Reaction Discovery from Quantum Mechanical Global Reaction Route Mappings</b>	77
Hiroko SATOH, Tomohiro ODA, Kumiyo NAKAKOJI, Takeaki UNO, Satoru IWATA, Koichi OHNO	
<b>Binding Free Energy Calculation of Small Molecules to Rna with Multiple Binding Poses</b>	80
Yoshiaki TANIDA, Azuma MATSUURA	
<b>Molecular Dynamics Study on Diffusion Property of Pt Atoms in Ni-Pt Nanoparticle</b>	83
Ayumu NAGAO, Takayoshi ISHIMOTO, Michihisa KOYAMA, Hiroshi MIYAMURA, Jhon CUYA, Balachandran JEYADEVAN	
<b>The Tube Length and Diameter Dependence of Electronic Structures in Zigzag Carbon Nanotubes</b>	85
Dai MORIKAWA, Yasushi NOMURA, Noriyuki MIZOGUCHI	

## Contents

<b>Study of the Eutectoid Mechanism of Composite Plating of TiO<sub>2</sub></b>	88
Natsuki MIYAI, Takakuni SHIMAZAKI, Nozomu UCHIDA	
<b>The Conformation Search and Structural Analysis of Natural Rubber</b>	90
Kazuki AKIYAMA, Seiichi KAWAHARA, Nozomu UCHIDA	
<b>Theoretical Analysis of Cation Diffusion Pathway in SOFC Electrolyte</b>	92
ChingTang LIN, Takayoshi ISHIMOTO, Michihisa KOYAMA	
<b>Development and Application of a Double-Network Gel Modeling Method for Fracture Processes Using a Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation</b>	94
Keisuke SAITO, Yuji HIGUCHI, Nobuki OZAWA, Momoji KUBO	

# *Journal of Computer Chemistry, Japan*

Vol. 14, No. 3 September 2015

## 目 次

### 巻頭言

研究するということと楽しむこと	A21
善甫 康成	

### 速報

分割統治型密度汎関数強束縛分子動力学 (DC-DFTB-MD)法の最近の展開	43
西村 好史, 海寶 丈彰, 中井 浩巳	

積分で定義される関数の高精度数値計算法：量子力学の数値解析から 数学・数値解析へのフィードバック	47
石川 英明	

<b>Calculation of NMR Shielding Constants with Optimized Numerical Basis Function</b>	50
Katsumi NAKAGAWA	

<b>Parallel Performance Analysis for Electronic Structure Calculation of Metal Nanoparticles</b>	52
Takayoshi ISHIMOTO, Yuichi INADOMI, Hiroaki HONDA, Michihisa KOYAMA	

血液凝固因子 <b>Xa</b> とリガンドとの <b>FMO</b> 相互作用解析	54
佐藤 博之, 松浦 東	

分子動力学法理解のための <b>Excel</b> を用いた授業実践と量子力学への応用	57
成島 和男, 岩武 澄, 川上 侑作	

液体状態における酢酸, ギ酸メチルの分子間相互作用依存性	60
西田 尚大, 金井 清二, 徳島 高, 堀川 裕加, 高橋 修	

## Contents

<b><math>x\text{Na}_2\text{O}-(1-x)\text{SiO}_2</math> ガラスに適用する原子間相互作用の考察</b>	63
山本 優也, 澤口 直哉, 佐々木 眞	
<b>キラルな二核亜鉛錯体によるペプチド加水分解反応の立体選択性</b>	67
崎山 博史	
<b>OpenFMO における 4 中心クーロン相互作用項計算の GPGPU 化の試み</b>	69
梅田 宏明, 塙 敏博, 庄司 光男, 朴 泰祐, 重田 育照	
<b>最大エントロピー法による発光吸収スペクトルの解析 - 時系列データの繰返しと位相の導入 -</b>	71
遠越 光輝, 狩野 覚, 善甫 康成	
<b>放射性 plume 軌跡のためのシミュレータ開発</b>	74
青山 智夫, 若月 泰孝	
<b>"Maizo"-chemistry Project: toward Molecular- and Reaction Discovery from Quantum Mechanical Global Reaction Route Mappings</b>	77
Hiroko SATOH, Tomohiro ODA, Kumiyo NAKAKOJI, Takeaki UNO, Satoru IWATA, Koichi OHNO	
<b>複数結合ポーズ系の標準自由エネルギー計算</b>	80
谷田 義明, 松浦 東	
<b>Ni-Pt ナノ粒子における Pt 拡散特性の分子動力的解析</b>	83
長尾 歩, 石元 孝佳, 古山 通久, 宮村 弘, ジョン クヤ, バラチャンドラン ジャヤデワン	
<b>ジグザグ型 CNT の電子構造のチューブ長依存性とチューブ径依存性</b>	85
森川 大, 野村 泰志, 溝口 則幸	

## Contents

分子軌道法を用いたチタニア共析めっき機構の研究 宮井 菜月, 島崎 峻州, 内田 希	88
天然ゴムの配座探索と構造解析 秋山 和輝, 河原 成元, 内田 希	90
固体酸化物形燃料電池の電解質におけるカチオンの拡散経路の理論解析 林 敬堂, 石元 孝佳, 古山 通久	92
粗視化分子動力学法におけるダブルネットワークゲルのモデリング手法 の開発と破壊プロセスへの応用 斎藤 圭祐, 樋口 祐次, 尾澤 伸樹, 久保 百司	94

## 巻頭言

## 研究することと楽しむこと

法政大学 情報科学部 善甫 康成

最近の計算機の進歩には驚かされることが多い。もう限界だといわれていても数年すると、またその限界を超える技術革新が起こっている。さすがにムーアの法則を維持することは難しいようであるが、「限界」と言われると技術者・研究者は、その魂に火が付くのかもしれない。例えばPCを見ると、CPUはマルチコアになり、GPUなどが使われていたり、一世代前のEWSやスパコンをはるかに凌ぐ性能を示している。またソフト面でも高度な解析が可能なプログラムがインターネット上に多数公開されており無料で利用できる。私の知合いは量子化学のプログラムをスマートフォンに入れ画面をタップしながら計算を楽しんでいる。

これは限界を超えようとする気持ちと超えたときの感動が研究を進める原動力になるということである。研究で壁にぶつかると、基本に戻り鍵となる要因を探り、そこから様々な方向性を考えていくものである。私は物理屋であるせいか、「すべての物理量は基礎方程式から計算できる」という言葉に納得してしまう。不要なものをそぎ落とし、とにかく単純化して、ものを考えてみるのが大好きである。自分の専門分野のシミュレーションをしているとき、計算手順通りに計算して、予想通りの値が出ると嬉しくなるものである。一度味わうと忘れられない感動である。たぶん知らないうちに一人で微笑んでいるのだろう。いつもと変わらないつもりなのに、周囲から何故か妙な顔で見られることがある。

プログラムを書くときも、壁にぶつかると基本に戻るのが鉄則である。小さなプログラムに戻り、本来どう動かすかを解決する鍵となる要因を探り、その積み上げで大型のプログラムに仕上げていく。このような試行錯誤の繰り返しである。皆さんもご存じの通り、計算機も構造が大きく変わり並列型が主流となってきた。一方で並列化の技術なども比較的普及し、簡便にできる時代となってきた。このスピード感も一度味わうと忘れられないくらいの感動だ。スパコンなど速い計算機を使うと、そのスピードが気分を和ませてくれ、更にもっとスピードを上げたい。少々工夫すると1桁2桁スピードアップすることもあり、そんな時は自転車から一気にレーシングカーをフルスロットルで運転しているような爽快な気持ちになる。

しかし、この感動に至るまでには、その何倍も苦しんでいることが多いようにも思う。計算機を使い始めてかなりの経験がある方だと思っているが、未だにプログラムを書くとき必ずバグも一緒に書いてしまっている。諸先輩方もこれには苦勞をされていたようで、共同でプログラムを作っている時など、次のような言葉が矢継ぎ早に出てくる。「設計をきっちりやらないと後が困るぞ」、「変数名は統一しろ」とか、「インターフェースは同じものが良い」、「データフォーマットを合わせないか」などである。これら多くのアドバイスを受けると、気分は被告席に座っているようになり、先輩たちが雄弁な検察官や弁護士に見えてくることもある。また、検討した結果をまとめ雑誌へ論文を投稿したときは悦に入っているが、雑誌を読んでいて先を越されたと思うような論文が出ていたりすると、「ああ、もう嫌だ」と何度も大きな声を上げたい。時には査読者から「そりゃ、あんたが間違っている」と裁定をいただくこともある。急上昇と急降下の繰り返しである。

私は常々思っていることがある。壁にぶつかったときは、それに続く苦勞を予想するのではなく、限界を超えた時の感動を想像しながら研究を進めると、自然と道が拓けるのではないかとということである。それが楽しみながら研究を進めていく秘訣なのではないだろうか。皆さん、試してみませんか。

# *Journal of Computer Chemistry, Japan*

Vol. 14, No.4, November 2015

## Contents

### *Foreword*

- Computational Science for Oxide Materials** A23  
Naoya SAWAGUCHI

### *Software News and Review*

- Rocks : An Open Source Linux OS for Building a PC- Cluster Environment** A25  
Shigeru SUEHARA

### *General Papers*

- Melting Point and Thermal Conductivity of  $\text{UO}_2\text{-ZrO}_2$  Solid Solution:  
Molecular Dynamics Simulation** 97  
Tatsumi ARIMA

- Molecular Dynamics Simulation Studies on Thermal Expansion Behavior of  
Siliceous Faujasite** 105  
Masashi OOKAWA, Ryo TSUTSUMI, Shunsuke OISHI, Yasunobu MATSUMOTO,  
Tsutomu YAMAGUCHI

- Molecular Dynamics Simulation of the Behavior of Beryllium Diffusion in  
Corundum** 111  
Jun KAWANO, Muneyuki OKUYAMA, Takeshi MIYATA

- Frenkel Defects and Interstitial Atoms in Periclase (MgO) at High  
Temperature by Molecular Dynamics Simulation** 117  
Yasuhiro UEDA, Akira MIYAKE

- The Nature of Si-O-Si Bonding via Molecular Orbital Calculations** 124  
Fumiya NORITAKE, Katsuyuki KAWAMURA

- Molecular Dynamics Simulation of Layered Double Hydroxide (LDH) Mineral:  
Hydrotalcite and Water Systems** 131  
Katsuyuki KAWAMURA

- Interatomic Potential Model for Molecular Dynamics Simulation of  
Lithium Borate Melts/Glasses** 139  
Naoya SAWAGUCHI, Kakeru YAMAGUCHI, Makoto SASAKI, Katsuyuki KAWAMURA

### *Technical Paper*

- Development of Visualization and Analyzing Software "MDVIS" for Molecular  
Dynamics Simulation Program MXDORTO** 147  
Shunsuke OISHI, Masashi OOKAWA

### *Note*

- Interlayer Bonding Energy of Mg-Chlorite: A Density Functional Theory Study** 152  
Hiroshi SAKUMA

# *Journal of Computer Chemistry, Japan*

Vol. 14, No.4, November 2015

## 目 次

### 巻頭言

特集号「酸化物系材料物質の計算科学」に寄せて A23  
澤口 直哉

### ソフトウェアニュースとレビュー

PC クラスタ構築のためのオープンソース Linux OS : Rocks A25  
末原 茂

### 研究論文

UO<sub>2</sub> - ZrO<sub>2</sub> 固溶体の融点および熱伝導率の分子動力学解析 97  
有馬 立身

分子動力学法による SiO<sub>2</sub> 組成フォージャサイトの熱膨張変化の研究 105  
大川 政志, 堤 涼, 大石 駿介, 松本 泰誠, 山口 力

**Molecular Dynamics Simulation of the Behavior of Beryllium Diffusion in Corundum** 111  
Jun KAWANO, Muneyuki OKUYAMA, Takeshi MIYATA

**Frenkel Defects and Interstitial Atoms in Periclase (MgO) at High Temperature by Molecular Dynamics Simulation** 117  
Yasuhiro UEDA, Akira MIYAKE

**The Nature of Si-O-Si Bonding via Molecular Orbital Calculations** 124  
Fumiya NORITAKE, Katsuyuki KAWAMURA

**Molecular Dynamics Simulation of Layered Double Hydroxide (LDH) Mineral: Hydrotalcite and Water Systems** 131  
Katsuyuki KAWAMURA

**Interatomic Potential Model for Molecular Dynamics Simulation of Lithium Borate Melts/Glasses** 139  
Naoya SAWAGUCHI, Kakeru YAMAGUCHI, Makoto SASAKI, Katsuyuki KAWAMURA

### 技術論文

分子動力学プログラム MXDORTO 用可視化ソフトウェア MDVIS の開発 147  
大石 駿介, 大川 政志

### ノート

**Interlayer Bonding Energy of Mg-Chlorite: A Density Functional Theory Study** 152  
Hirosaki SAKUMA

## 巻頭言

## 特集号「酸化物系材料物質の計算科学」に寄せて

室蘭工業大学 もの創造系領域 澤口 直哉

筆者は今日までの量子化学計算や分子シミュレーションの適用対象を有機物と無機物に二分すると、有機物への適用が圧倒的に多いのではと推しはかり、その理由を考えることがままある。もし有機物が“数”で無機物を凌駕しているならば、それぞれに計算科学を適用した研究数は単に母数の差に由来するかもしれない。研究者数にも差があるならば、それも係数として掛け合わせると、一層説明的な解析になるのでは、と考える。その一方で、単に人気の差の現われではないかという気もしなくはない。その検証は保留し、何をもちいて無機物の“数”とするかを契機に、少し無機物について考えてみたい。

凝集系の無機物について考えてみる。無機物は元素の組み合わせの自由度が高く、様々な物質あるいは元素を基本組成にし、それらの混合系を形成できる。筆者の研究対象を例にひくと、化学式(組成式)  $x\text{Na}_2\text{O}-(1-x)\text{SiO}_2$ と表わされる物質は、 $x$ が0から約0.4の範囲でガラスとなる。これを $x$ 値に関係なく一つの物質と捉えるのは、物性が $x$ によって変化することを知ってしまうと、無理がある。結晶であれば  $A_xB_{1-x}O_2$  ( $0 \leq x \leq 1$ )のような固溶体も置換量 $x$ で物性が変わる。固溶体を形成せずに、 $x$ によって異なる結晶を形成するため相図上に複数の相が存在する系もあり、金属材料やセラミックス材料の多くがこれらのいずれかに該当している。加えて、金属やセラミックスの材料特性は組織構造の影響も受けるので、結晶の物性だけからは捉えきれない。このように組成と組織の自由度を併せもつ無機固体は、見かけの系の数からでは計り知れない多様性を有しているといえるだろう。

酸化物に絞ると、さらに研究例は減ってしまう。しかし、藍色細菌が吐き出した酸素により原始地球を構成していた太陽系始原物質由来の元素が徐々に酸化され、現在の大气中の酸素分圧に至る過程で酸化されるものはすっかり酸化物となり地殻やマントルを形成していることを思えば、酸化物の重要性を侮るわけにはいかない。実際、我々は採掘した多様な酸化物を組み合わせることで建築に利用し、便利な日用品を造り、新たな電子デバイスを開発してきた。けれども、我々が酸化物を十分に掌握しているかといえば、そうは思えない。例えば、酸化物や金属を焼結させる工場の中には熟練工が欠かせない現場があると聞く。機械化・自動化に必要な形式化に成功していない技術要素が残っているからであろう。国内の人口が減少し続けるならば、現場であまねく熟練工が活躍している未来像を描くのは無理がある。とすれば、熟練工の技術や知識を理学・工学を学んだ者が理解し使えるものへ移換していかなければならないのではないか。研究者がこの作業に積極的に携ることが重要となるだろう。そして、この移換を支援するツールの一つとして計算科学を有意義なものに発展させる、そのような仕事があって良いはずだ。

そもそも、酸化物の結晶構造や基本的な物性については、未解明なことが多く残っており、その理由として思い当たることがある。酸化物材料の製造は、液相反応を利用するため、あるいは固相中の原子の拡散能を高めるために、1000 K、2000 Kなどの高温状態を経ることが多い。しかし、高温状態の直接観察は容易ではなく、揺らぎも大きい。また、酸化物が含有する不純物原子や高温で増加する点欠陥などが、酸化物材料の特性に無視できない影響を及ぼすと判っていても、これらの同定が常に可能な状況は希である。データおよび知見の蓄積がままならないのである。

酸化物の特性に影響する不純物や点欠陥の存在は計算科学にとってもやっかいである。不純物の濃度を現実に合わせてようとすると数百万の原子からなるモデル系が必要となったり、分子動力学シミュレーションで酸化物中の原子の拡散を扱おうとすると、拡散が遅いために多大なステップ数が必要となったりする。酸化

物ガラスの構造を調べるには、高温状態からの冷却過程を辿る分子動力学シミュレーションが必要となり、計算資源の制約内でいかにして有意義な情報を引き出すかに腐心することになる。結果としてこのような系には、古典的分子動力学法が適切であることが多々ある。一方で、酸化物の電子状態を知ること、酸化物の構造や物性を理解する上で重要となっている。典型元素の酸化物ならば電子は概ね化学結合部分に局在していると考えられるため分子軌道法が適しているが、酸化物結晶の周期性に着目すれば、密度汎関数法の適用も考えられる。どちらを選び、どのソフトウェアを利用するかをその都度検討している現状は、研究分野として未熟である故とも捉えうるだろう。この分野に関わる研究者が増え、情報交換が活発になることを期待したい。

本特集号には酸化物に携っておられる材料化学や鉱物学の専門家に寄稿していただいた。その内訳は、まず各々に個性的な酸化物を取り上げた分子動力学シミュレーションおよび量子化学計算による研究報告である。酸化物の結晶構造そのものについて、あるいは結晶中のイオンの拡散などが扱われている。そして、酸化物に適用できる可視化ソフトウェアの開発報告と並列計算に関わる技術解説も寄稿いただいた。紹介されているソフトウェアや技術は適用を酸化物に限ってはいない。しかし、酸化物の計算科学に必要となる多大な原子数や、凝集連続体を扱うための周期境界条件などがこれらの必要性を派生していることをお伝えしておきたい。個々の内容紹介は割愛させていただくが、是非目を通し、取り上げられている物質・材料の“出所”を含め、酸化物の多様性を感じていただければ幸いである。

最後に、本特集号へ快くご寄稿下さった著者の皆様、そして著者が編集業務の何たるかを仰ぎ、多大なご協力を賜った編集室の皆様に、あらためて厚くお礼を申し上げる。

# *Journal of Computer Chemistry, Japan*

Vol. 14, No.5, December 2015

## Contents

### *Foreword*

#### **Communication Ability**

A33

Mami KIKUCHI

### *Highlight*

#### **SCCJ Cafe – Season 4 – Shape of Protein Molecules (5) ”Molecular Viewer”**

A34

Takahiro KUDOU

#### **Visualization of Orbitals (4)**

#### **Probability Density Distribution in the Three Dimensional Representation of Hydrogen $p_z$ , $d_{3z^2-r^2}$ , or $f_{5z^3-3zr^2}$ Orbitals in a Glass Block**

A38

Sumio TOKITA

### *General Papers*

#### **Effects of Water Molecules and Configurations of Neighboring Amino Acid Residues Surrounding DsRed Chromophore on Its Excitation Energy**

155

Masataka SAKAGUCHI, Yuji MOCHIZUKI, Chiduru WATANABE, Kaori FUKUZAWA

#### **Molecular Analysis of Electrolyte for Lithium-Air Battery by MD Simulations**

164

Suguru UEMURA, George OCHIAI, Katsuyuki KAWAMURA, Shuichiro HIRAI

### *Technical Paper*

#### **Molecular Dynamics by *Mathematica***

172

Yuri YAMADA, Yosuke KATAOKA

# *Journal of Computer Chemistry, Japan*

Vol. 14, No.5, December 2015

## 目 次

### 巻頭言

伝えるチカラ

A33

菊池 真美

### ハイライト

SCCJ Cafe – Season 4 – 分子のかたち(5) 「分子閲覧ソフト」

A34

工藤 高裕

電子を描く(4) –  $p_z$  軌道,  $d_{3z^2-r^2}$  軌道,  $f_{5z^3-3zr^2}$  軌道

A38

時田 澄男

### 研究論文

赤色蛍光タンパク質 **DsRed** の色素部周辺における水分子ならびに  
隣接アミノ酸残基の構造の励起エネルギーへの影響評価

155

坂口 正貴, 望月 祐志, 渡邊 千鶴, 福澤 薫

**MD** を用いたリチウム空気電池電解液の分子挙動解析

164

植村 豪, 落合 譲司, 河村 雄行, 平井 秀一郎

### 技術論文

*Mathematica* による分子動力学

172

山田 祐理, 片岡 洋右

## 巻頭言

# 伝えるチカラ

株式会社クレハ医薬品信頼性保証部 菊池 真美

我が家では、数年前から、飼い主がいない犬を自宅で預かり、新しい飼い主さん探しをするボランティアをやっています。入れ替わり立ち替わりやってくる犬との生活は面白く、また新しい飼い主さんも素敵なお家族ばかりで、楽しく続けています。

仲間のボランティアと飼い主さんを見ていると不思議なことに気づきます。ボランティアごとに、その家から犬を迎える飼い主さんの傾向があるようなのです。明るくてアクティブなお家族、まじめでしっかり者のお家族、おっとりのんびりしたご家族、といった具合です。飼い主さんを決める時に、いくつかの条件でお断りすることはありますが、基本的にボランティアは受け身ですから積極的に飼い主さんを選んでいるわけではありません。それなのに、なぜ?と思考してみたのですが、もしかしたら、各ボランティアが担当している、「飼い主募集」の文章が影響しているのかもしれないとの考えに至りました。それぞれの犬の募集記事や、日々の生活を紹介するブログ記事は、一緒に生活しているボランティアが、素敵な飼い主さんがみつかりますように!との思いを込めて書いています。その文章を読んで、その犬に興味を持ち、この犬と生活したいと思った方が飼い主さんになってくださるので、一人の人の言葉に共感する人達は、限られているのかもしれないと思うのです。

職場でも似たようなことがあります。あの人の話は面白いからたくさんの人に知って欲しいと思い、「ぜひ、聞いてみたらどうでしょう。」と紹介しても、「あれは、いいね。とても面白かったよ。」という人、「あれは、ダメだね。何を言いたいのかよくわからなかったよ。」という人、様々であることがよくあります。あれ?と思い、どこがよかったか、どこがダメだったかを聞いてみると、実は、同じことを言っているけれど、大事だと思うポイントがそれぞれ違っていたり、ほんの少しのわからなかったポイントが全体評価に繋がってしまっていたり、ということが大部分です。

専門分野、特に理論化学や計算機シミュレーションといった高度に専門的な知識を必要とする分野の話は、企業において大部分の人から、「ああ、あの難しいやつね。」と初めからあまり聞きたくない顔をされてしまいがちです。専門家どうしの会話で、大いに興味を持ってもらえて、熱い議論の対象となった方法論や、検証過程の話は、それ以外の人にとっては完全に外国語どころか宇宙語であると認識した方がよいのではないのでしょうか。私達は計算結果から得られた成果を実際の形にするために、様々な人に伝える必要がありますので、宇宙語ではなく日本語(または英語)で伝える努力をしなくてはなりません。優れた専門家の話は、専門外の多くの人々の興味を引くことから考えれば、難しいけれど可能であることは明白です。お話しする相手とお会した時に、「ああ、面白い話が聞けそうだな。」という顔をしてもらえようになりたいと、しみじみ思うこの頃です。

# *Journal of Computer Chemistry, Japan*

*Vol. 14, No.6, 2015 (January 2016)*

## Contents

### *Foreword*

**Time to Spin Empirical World** A43

Shigeru SAKURAZAWA

### *Letters (Selected Papers)*

**Analysis of the Genealogy of Conjugated Polyenes** 177

Haruo HOSOYA

**An Electric Space** 179

Hideyuki NARUMI

**Effects of Content of Network-Modifying Ion and Network Structure of Sodium Silicate Glasses by Molecular Dynamics Simulation** 181

Yuya YAMAMOTO, Naoya SAWAGUCHI, Makoto SASAKI

**Molecular Structure Prediction of Iron(III) Complexes with a Biodegradative Chelating Agent** 184

Shuichi OTOMO, Hiroshi SAKIYAMA

**An Analysis of the Carbon Number Dependence of Electronic Structures in Carbon Nanotubes by Means of Reduced HOMO-LUMO Gap** 186

Dai MORIKAWA, Yasushi NOMURA, Noriyuki MIZOGUCHI

**Fluorescence via Reverse Intersystem Crossing from Higher Triplet States** 189

Tohru SATO

**Handling of Highly Symmetric Molecules for Chemical Structure Elucidation in a CAST/CNMR System** 193

Shungo KOICHI, Hiroyuki KOSHINO, Hiroko SATOH

## Contents

<b>Development of AR Molecular Graphics Display Application for Smartphone</b>	196
Takeshi UNO, Kazuhiro SASA, Haruhisa HAYASHI, Hidehiko NAKANO	
<b>Mechanisms of Ligand Exchange and Ligand Coupling Reactions of Sb and Te Compounds</b>	199
Masato KOBAYASHI, Yusuke KURODA, Kin-ya AKIBA, Tetsuya TAKETSUGU	
<b>Performance Optimization Under Power Constraint for Molecular Science Applications</b>	201
Yuichi INADOMI, Koji INOUE	
<b>Real-space and Real-time TDDFT Analysis for Optical Properties of 11-<i>cis</i> Retinal</b>	203
Shiho TANAKA, Mitsuki TOOGOSHI, Yasunari ZEMPO	
<b>Double-core-hole Electron Spectroscopy for Relatively Large Molecules</b>	206
Osamu TAKAHASHI	
<b>TD DFT Study of Intramolecular Proton Transfer by Absorption and Emission Spectra of <i>o</i>-Hydroxybenzaldehyde</b>	209
Takefumi ARAI, Shin-ichi NAGAOKA, Umpei NAGASHIMA, Hiroyuki TERAMAE	
<b>Molecular Dynamics Simulation of 4-<i>n</i>-alkyl-4'-cyanobiphenyl (nCB) Using a Full-atom Model</b>	211
Yuki TAKAHASHI, Ryo ISHIKAWA, Susumu KAWAUCHI	
<b>Theoretical Study on The Aromatic Oxidative Cyclization of N-methoxy-N-prenylbenzamide</b>	213
Hiroyuki TERAMAE, Misaki SUDA, Mitsuru YUKAWA, Kousuke HAYASHI, Jun TAKAYAMA, Takeshi SAKAMOTO	
<b>Theoretical Clarification of Substituent Effects in the Cross-Coupling Reaction between Conjugated Diene and Styrene by Ru(0) Catalyst</b>	215
Hikaru DEGUCHI, Kouta OOTSUKI, Saki NAKAMURA, Masafumi HIRANO, Susumu KAWAUCHI	

# *Journal of Computer Chemistry, Japan*

Vol. 14, No. 6 2015 (January 2016)

## 目 次

### 巻頭言

- 経験世界を紡ぐ「時間」 A43  
櫻沢 繁

### 速報

- 共役ポリエンの家系図についての検討 177  
細矢 治夫

- ある荷電空間について 179  
鳴海 英之

- 分子動力学法を用いたナトリウムケイ酸塩ガラスの修飾イオンとネットワーク構造の関係 181  
山本 優也, 澤口 直哉, 佐々木 眞

- 生分解性キレート剤が作る鉄(III)錯体の構造予測 184  
大友 秀一, 崎山 博史

- Reduced HOMO-LUMO Gap** を用いた CNT の電子構造の炭素数依存性の解析 186  
森川 大, 野村 泰志, 溝口 則幸

- Fluorescence via Reverse Intersystem Crossing from Higher Triplet States** 189  
Tohru SATO

- Handling of Highly Symmetric Molecules for Chemical Structure Elucidation in a CAST/CNMR System** 193  
Shungo KOICHI, Hiroyuki KOSHINO, Hiroko SATOH

## 目次

スマートフォン対応の AR 分子グラフィックス表示アプリケーションの開発 宇野 健, 佐々 和洋, 林 治尚, 中野 英彦	196
<b>Sb</b> および <b>Te</b> 化合物のリガンド交換・リガンドカップリング反応メカニズム 小林 正人, 黒田 悠介, 秋葉 欣哉, 武次 徹也	199
並列分子科学計算プログラムの電力制約下における性能最適化 稲富 雄一, 井上 弘士	201
実空間実時間の TDDFT による 11- <i>cis</i> 型レチナールの光吸収スペクトルの 解析 田中 志歩, 遠越 光輝, 善甫 康成	203
比較的大きな分子に対する内殻二重正孔分光 高橋 修	206
TD DFT 法による OHBA の吸光・発光スペクトルの理論的研究 新井 健文, 長岡 伸一, 長嶋 雲兵, 寺前 裕之	209
全原子モデルを用いた 4- <i>n</i> -alkyl-4'-cyanobiphenyl (nCB) の分子動力学 シミュレーション 高橋 祐貴, 石川 良, 川内 進	211
2-アザスピロ環化合物における閉環反応の理論的研究 寺前 裕之, 須田 岬, 湯川 満, 林 浩輔, 高山 淳, 坂本 武史	213
<b>Ru(0)</b> 触媒による共役ジエンとスチレンのクロス カップリング反応におけ る置換基効果の理論的解明 出口 光, 大槻 恒太, 中村 沙季, 平野 雅文, 川内 進	215

## 巻頭言

## 経験世界を紡ぐ「時間」

公立ほこだて未来大学・システム情報科学部・複雑系知能学科 櫻沢 繁

今、なんとか締め切りに間に合わそうと、徹夜覚悟でこの原稿を書いていたら居眠りをしてしまった。私は居眠りをした間に何があったか全く知らない。だが、私が居眠りをしていた間ずっと起きていた人は、私が大いびきをかいて時々呼吸が止まって苦しそうにしていた事を知っている。

ここで私は、きっと私の存在とは無関係に流れる「時間」というものがある、私が寝ていた間にもいつものように時間が流れていた、と経験世界の外の事を想定している。おそらくこれは私だけに限った話ではなく、皆そのような想定のもとに日々暮らしていることだろう。

でも、なぜ、私たちはこのように経験の外に「時間」などというものを用意する必要があるのだろうか。それはつまり、そうしないと他者の経験世界との間に色々な不都合が生ずるからだ。周りに何もなくて誰もいないのならば何の問題もないのだが、他者と諍いを起こすことなく相互作用せざるをえない（さもなければ存在を許されない）私たちは、互いの存在とは全く無関係に全てを見渡せる超越的な流れとしての「時間」を想定して互いの経験世界に生ずる矛盾を調停する。すなわち、個人それぞれが構える視座によって個々の経験世界は異なりながらも、それら経験世界の間を矛盾を紡ぎ合わせるプロセスとして「時間」は生み出されている。

私たちはデカルト座標系によって時間と空間を表現し、物体の運動を記述する。しかし上述のような因縁により生み出される「時間」は、それとはいささか事情の異なるもののように思われる。20世紀半ばになって、時間はデカルト座標系によって用意されるようなものではないと言い出した心理学者がいる。アフォーダンスを唱えたJ. J. Gibsonである。Gibsonの論説は非常に難解であり、しかも新しい概念を打ち出す奇抜さ故に、現在においても大きな誤解を受けたうえで批判されている。それまで整然と系統立てられてきた心理学の学派の中では特に批判された。しかし、批判している者の中にGibsonの論を理解している者はほとんどいなかった。一方で、最先端の理論物理学者や認知・人口知能の研究者の中にそのGibsonの論を理解した上で盛んに議論しようとする者が現れ、全くの異分野においてその論は一気に展開された。

さて、日本コンピュータ化学会 2015 秋季年会において、初日の特別講演は実行委員長を務めさせていただいた私が「化学反応による計算」をテーマとしてオーガナイズさせていただいた。ここに込めた私の想いとは、上述のようなデカルト座標系によらない「時間」が化学において如何に展開されるか、との問題意識であった。化学反応に寄与する分子は、相互に安定性を求めて不均衡を解消するための調停を行っている。であるが故に、化学反応は、我々が特にフレームを与えることなくプロセスが進み、まるで我々の人生と同じように開かれている。すなわち、定義域がはっきりとした構造化されている問題の解決はチューリングマシンを基本とする現在の計算機が得意とするものであるが、定義域の開かれた問題を如何に調停すべきか、といった状況において便利な計算機が化学反応系ではないだろうか。粘菌によるネットワーク問題の解決も然り、がん治療のように複雑に入り組んだ生体系に生ずる問題の解決も然り、ここには生命系における動的な問題に対する新たなアプローチの可能性がある。

私が日本コンピュータ化学会 2015 秋季年会において行ったいくつかの試みは、門外漢ながらも、この学会から新しい芽を出すチャンスを作ることはできないかと、ささやかながら想いを込めてみたものであった。

## 編集後記

会員の皆様もますますご健勝のことと拝察しておる所存でございます。日本コンピュータ化学会の編集室に関わる 2015 年度の出来事といたしまして、JCCJ の International Edition の発刊があります。Web を通じて世界各国から容易に情報が得られるようになった現在、英語で書かれた論文誌を発行することは世界中の研究者に日本コンピュータ化学会での活動を知らしめるために重要であり、会員の皆様にもご投稿いただければと考えております。また、学会に遅れましたが編集室でも facebook を開設いたしました。是非アクセスいただければと思います。JCCJ Editorial Office facebook で検索いただければ見つかります。

皆さまに年次報告をお届けできて嬉しく思いますと共に皆様のご多幸をお祈りしております。また、皆様から熱い玉稿を投稿頂けますようお願い申し上げます。

JCCJ 編集室 太刀川達

也

複写をされる方に

本誌に掲載された著作物を複写したい方は、(社)日本複写権センターと包括複写許諾契約を締結されている企業の方でない限り、著作権者から複写権等の行為の委託を受けている次の団体から許諾を受けて下さい。著作物の転載・翻訳のような複写以外の許諾は、直接本会へ御連絡下さい。

〒107-0052 東京都港区赤坂 9-6-41 乃木坂ビル (中法) 学術著作権協会

TEL : 03-3475-5618, FAX : 03-3475-5619 e-mail : jaacc@mtd.biglobe.ne.jp

アメリカ合衆国における複写については、次に連絡して下さい。

Copyright Clearance Center, Inc., 222 Rosewood Drive, Danvers, MA 01923, USA

TEL : 1-978-750-8400, FAX : 1-978-646-8600

## *Journal of Computer Chemistry, Japan Vol. 14, (2015)*

発行日 2016年2月25日

発行人 後藤仁志

TEL 080-2388-0894 FAX 03-5825-0654

発行所 日本コンピュータ化学会

郵便振替番号 00140-2-89762 番

〒110-0015 台東区東上野 2-1-13-607

日本コンピュータ化学会事務局

e-mail: sccjoffice@sccj.net URL: <http://www.sccj.net>

編集室 時田澄男

太刀川達也

TEL 048-858-9063

〒338-8570 さいたま市桜区下大久保 255 埼玉大学大学院理工学研究科

太刀川研究室気付 日本コンピュータ化学会 JCCJ 編集室

e-mail: tachikaw@apc.saitama-u.ac.jp, jccjoffice@sccj.net

電子出版 佐藤博

TEL 03-6457-5903 FAX 03-6457-5904

〒162-0834 東京都新宿区北町 29 日本プリプレス株式会社

e-mail: hirosi-s@jprepress.jp

印刷所 田端印刷株式会社

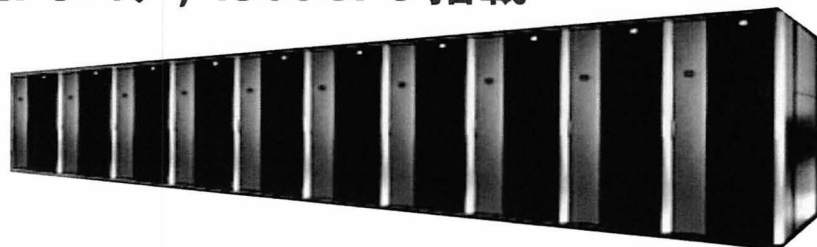
TEL 022-762-5312 FAX 022-762-5313

〒984-0002 仙台市若林区卸町東 5 丁目 7-20

e-mail: net@tabata-1.co.jp

# 東京工業大学 学術国際情報センター 『みんなのスパコン』 TSUBAME 共同利用

世界トップレベルの東京工業大学のスパコン TSUBAME 2.5  
ピーク性能5.7PFlops, 18000CPUコア, 4300GPU 搭載  
その圧倒的な計算性能を  
皆さまに提供いたします。  
ペタスケールの性能を  
ご体験ください。



※ TSUBAMEの利用によって得られた知的財産は、原則として利用者に帰属します。

## 学術利用向け資源提供

- HPCI (革新的ハイパフォーマンスコンピューティングインフラ)
- JHPCN (学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点)
- TSUBAME共同利用サービス (学術利用)

## 産業利用向け資源提供

- HPCI (革新的ハイパフォーマンスコンピューティングインフラ)
- TSUBAME共同利用サービス (産業利用)

## TSUBAME 利用区分および料金

利用区分	利用者	制度	募集時期	申請および審査	成果公開	料金 (税別)	
学術利用	他大学 または 研究機関等	HPCI	年1回 10月頃	HPCI運用事務局 (高度情報科学技術研究機構)	公開	無償	
		JHPCN	年1回 1月頃	JHPCN拠点事務局 (東京大学 情報基盤センター)	公開	無償	
		TSUBAME学術利用	随時 募集中	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	1口: 120,000円	
産業利用	民間企業	HPCI	実証利用	年1回 10月頃	HPCI運用事務局 (高度情報科学技術研究機構)	公開	無償
			トライアルユース	随時 募集中			
		TSUBAME産業利用	随時 募集中	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	1口: 120,000円	
					非公開	1口: 480,000円	

## TSUBAME 利用実績

利用区分		2007年度	2008年度	2009年度	2010年度	2011年度	2012年度	2013年度	2014年度	2015年度	合計	
学術利用	HPCI	-	-	-	-	-	6	5	10	14	35	
	JHPCN	-	-	-	4	6	5	11	10	10	46	
	有償利用	-	-	1	4	9	14	17	22	23	90	
産業利用	無償利用	11	15	15	8	10	12	21	17	13	122	
	有償利用	成果公開	-	-	3	6	7	9	8	10	8	51
		成果非公開	-	-	2	7	6	4	10	12	10	51

## お問い合わせ

東京工業大学 学術国際情報センター 共同利用推進室 e-mail: kyoyo@gsic.titech.ac.jp Tel. 03-5734-2085 Fax. 03-5734-3198  
詳しくは <http://www.gsic.titech.ac.jp/kyoyo> をご覧ください。



# Winmostar

## XA-CHEM-SUITE



2016年2月13日

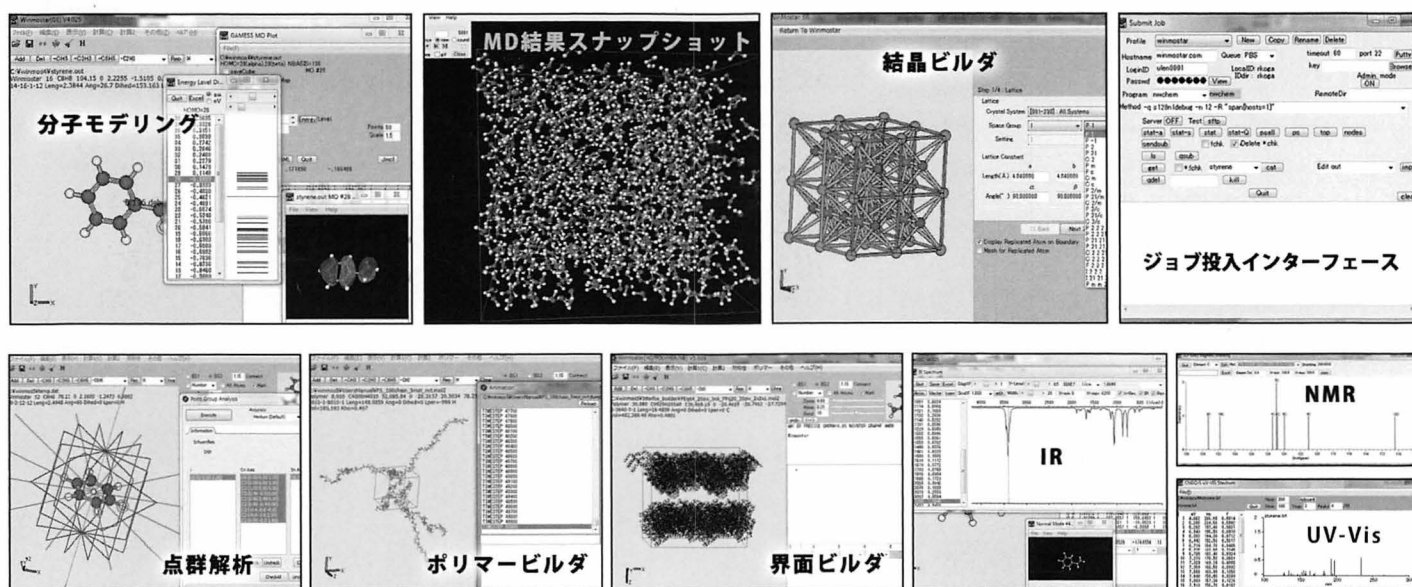
ユーザビリティ／ロープライスを追求した計算化学／固体物理計算プリポストです。

Winmostar™は、分子モデリングから量子化学計算／分子動力学計算／固体物理計算の実行、計算結果の表示までをPC上で軽快かつ直感的に実現するパッケージソフトウェアです。

# p2n, pdb, cif, mol/mol2, sdf, gjf等の基本入力フォーマットに対応

**無償版：**基本モデリング機能、30原子MOPAC6, 配座探索(Balloon)およびUV/Vis(CNDO/S)内蔵、点群解析、結晶ビルダ等  
**ベーシック：**無償版の機能に加え、原子数制限なしMOPAC6、GAMESS/Firefly, Gaussian, NWChemの量子化学計算のI/F、ジョブマネージャ、ジョブ投入インターフェース等

**MDオプション：**Gromacs/LAMMPSのI/F、ポリマービルダ、界面ビルダ、自由エネルギー計算(ER,BAR)、DPD法等



### ■動作OS

Windows Vista/7/8/10 (VirtualBox/VMware fusion on Mac OSXも動作確認済)

### ■分子モデリング機能

- 原子単位の追加・変更・移動・削除、置換基の追加、クリーン(分子力学による簡易構造最適化)、配座探索、SMILES入力
- 部分回転・移動・削除・複製、Z-Matrix編集
- 結晶ビルダ、ポリマービルダ、界面ビルダ

### ■計算機能

- 内蔵：MOPAC6, Balloon(配座探索), CNDO/S(UV/Visスペクトル)
- 入力データ作成と起動：MOPAC, Gaussian, GAMESS/Firefly, NWChem, Gromacs, LAMMPS ※ジョブマネージャ及びジョブ投入機能搭載
- 分子表面積/体積/卵形度計算、アスペクト比/慣性半径計算、Sterimol/パラメータ、PIO解析、自由エネルギー(ER法, BAR法)、DPD法

### ■可視化機能

- エネルギー準位/分子軌道/電荷、双極子/遷移モーメント、反応座標解析
- UV/Vis, NMR, RAMAN/IRスペクトル、分子軌道表示、点群解析、Gromacs各種MD解析ツール起動(LAMMPSコンバータ付)
- プレゼンテーション機能：3Dプリンタ(OpenSCAD)、レイトレーシング(POV-Ray)、GIFアニメーション、特許出願資料用表示

### ■価格 ※3ヶ月間のフル機能トライアル版あり

- シングルライセンス(1年保守) 民間企業・官公庁 ¥90,000～ 教育機関 ¥45,000～ 個人 ¥22,500～ 学生 ¥4,500～ (学生証要)
- 年間ライセンス(年間使用权+保守) 企業・官公庁サイト、キャンパス、学科・専攻、研究室 ¥90,000～
- #年間ライセンスについては、5年分を3年分費用の一括支払でまとめ購入が可能です。
- #全事業所で有効になるコーポレートライセンス(年間使用权+保守)は、会社規模に応じて見積もりいたします。



株式会社クロスアビリティ 〒113-0033 東京都文京区本郷4-1-5 石渡ビル3階  
<https://winmostar.com/> E-Mail: [question@winmostar.com](mailto:question@winmostar.com)