

お詫びと訂正につきまして

2016年4月号 [1-4] 「分割統治(DC)法による $O(N)$ 電子状態計算と MD シミュレーション」 (小林正人 氏) の原稿において、p.91 と巻末(カラー図)の図1に誤り(下図の欠落)がございましたので、下記の通り修正させていただきます。この度は著者ならびに、読者の皆様にご迷惑とご不便をおかけいたしましたこと深くお詫び申し上げます。なお、J-Stage で公開予定の電子版には、修正後の原稿が公開されます。

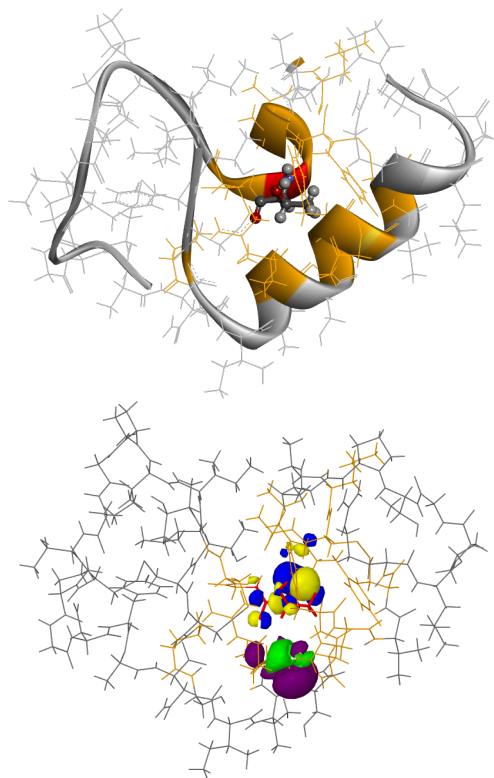


図1: (上図)DC 法における中央領域とバッファ領域の指定例。クランピンの計算で中央領域を残基ごとに分割した場合の、1つの中央領域 (Thr30: 赤色リボン, 棒球) と、 $r_b = 5 \text{ \AA}$ に対応するバッファ領域 (オレンジ色) を示した。(下図) この局在化領域の中で構築された2つの LCMO の例。

2016年5月10日

分子シミュレーション研究会会誌「アンサンブル」

編集委員会