

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

1.3.1 アカウントの作成

[ScholarOne Manuscripts](http://mc.manuscriptcentral.com/jccj) 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

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、以下の通りである。

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出来る。

【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)。

Table 1. Page Charge / in Japanese Yen

Pages	1-2	3-4	5-6	7-8	9-10	over 11 pages
Charge for paper	15,000	25,000	35,000	45,000	55,000	10,000 per 2 pages
Charge for Member (IE)*	20,000	30,000	40,000	50,000	60,000	10,000 per 2 pages
Charge for Nonmember (IE)	25,000	35,000	45,000	55,000	65,000	10,000 per 2 pages

* International Edition

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 Society of Computer Chemistry, Japan. : 最初のページの右ヘッダー。

DOI : 10.2477/jccj.Hxxxx : 全ての奇数ページの左フッター (Hxxxx は、原稿番号)。

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。

2.5 Graphical Abstract

最終原稿には、Main Document の最終ページに Graphical Abstract 用の図をつける。論文中の図を使用しても良いし、論文全体を表す図を新たに作成してもよい (JCCJ 任意, JCCJIE 必須)。

※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; ; 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) and *Journal of Computer Chemistry, Japan – International Edition* (JCCJIE) 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) (<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

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
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 paper (JCCJ)	15,000	25,000	35,000	45,000	55,000	10,000 per 2 pages
Charge for Member (JCCJIE)	20,000	30,000	40,000	50,000	60,000	10,000 per 2 pages
Charge for Nonmember (JCCJIE)	25,000	35,000	45,000	55,000	65,000	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.Hxxxx : 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

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.

2.5 Graphical Abstract

When you upload the final manuscript, please add a Figure to the end of main document for a "Graphical Abstract". The Graphical Abstract is a visual summary of the main findings of the article. This could either be the concluding figure from the article or a figure that is specially designed for the purpose.

ScholarOne Manuscripts

Files Available for uploading

	© : ScholarOne Manuscripts will automatically convert these uploaded files into single PDF and HTML.	
Kind of file/extension	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/14 \(Vol. No.\)/5_\(issue No.\)/****\(article No.\)/](https://www.jstage.jst.go.jp/browse/jccj/14 (Vol. No.)/5_(issue No.)/****(article No.)/)