

仕 様 書

1. 件名

量子化学計算用ソフトウェア

2. 研究の概要

国立研究開発法人 産業技術総合研究所機能材料コンピュテーショナルデザイン研究センターでは、計算シミュレーションで得られる材料データを構造化し、構造化された材料情報から新材料の設計ルールを導出するためのデータ駆動型材料研究を実施している。本ソフトウェアを用いてデータの良質化に取り組み、データ科学的手法を有効に活用することで環境・エネルギー問題を解決する材料探索を行うことを目的としている。

3. ソフトウェアの概要

本ソフトウェアは分子の構造、反応性、振動、電子および NMR スペクトルを正確に予測するための非経験的量子化学計算の統合パッケージである。ラップトップまたはデスクトップ、クラスター、またはスーパーコンピューターセンター上の Linux、macOS または Windows で実行することが可能なソフトウェアである。

4. ソフトウェア仕様詳細

- ①Linux OS 上で稼働ができること。
- ②LDA、GGA、メタ GGA、GGA とメタ GGA のハイブリッド、Range-Separated ハイブリッド、ダブルハイブリッド汎関数をサポートし、基底状態および時間依存 DFT による励起状態について、一点エネルギー、構造最適化、振動計算ができること。
- ③Møller-Plesset 摂動論や結合クラスター法など、電子相関効果を扱うための最新ツールが用意されており、強い相関のある系に対しては CASSCF、結合クラスター価電子結合、Selected CI、RAS-CI、Spin-Flip、V2-RDM 法などの特殊な手法が使用できること。
- ④CIS、TD-DFT、NOCI、EOM-CC、ADC といったさまざまな電子励起状態の研究手法が使用でき、分光学的特徴、電荷とエネルギーの移動、および非断熱ダイナミクスシミュレーションが可能であること。
- ⑤SM8、COSMO、C-PCM などの陰溶媒モデル、陽溶媒効果を取り扱う有効フラグメントポテンシャル法を提供していること。
- ⑥IR およびラマン分光法、UV-vis 分光法、X 線分光法、光電子分光法、NMR 分光法、非線形分光法で得られるスペクトルを計算できること。
- ⑦対称性適応摂動論およびその拡張多体系版による分子間相互作用の計算ができること。
- ⑧幾何学的最適化、ポテンシャルエネルギー曲面スキャン、遷移状態探索、固有反応座標追跡が可能であること。
- ⑨NVE および NVT サーマルサンプリングを含む第一原理分子動力学と、準古典的分子動

力学が実行できること。

⑩永続ライセンスのソフトウェアであること

⑪ダウンロード形式で納入可能なソフトウェアであること。

⑫保守

- ・保守受付時間：平日 9:00～17:30 で対応可能であること

- ・サポート形態：電話、メールにて対応可能であること。

⑬保証

- ・インストールにまつわる問題解決のサポート、マニュアルの記載内容に関するサポート、製品の不具合に関するサポートを付帯すること。

5. 納入期限および納入場所

納入期限：2025 年 2 月 28 日

納入場所：〒305-8561 茨城県つくば市梅園 1-1-1

国立研究開発法人 産業技術総合研究所 つくばセンター中央事業所 2 群
2-1D 棟 614-2 室 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター

6. 特記事項

サプライチェーン・リスクに対応するため、別紙に記載する事項に従って契約を履行しなければならない。

7. 納入物品

- ・研究用ソフトウェア 一式

- ・ダウンロードを証明する書類 一式

(ライセンス証書、受注処理完了通知、ライセンス認証通知等)

8. 納入の完了

「7. 納入物品」に記載の納入物品が過不足なく納入され、仕様を満たしていることの確認を行い、納入の完了とする。

9. 付帯事項

- ・受注者は、業務上知り得た一切を産総研の許可なく他に漏らしてはならない。また、他の目的に利用してはならない。

- ・納入された製品における能力内の使用中に発生した納入後 1 年以内の故障については、その修理、調整等責任をもって無償で行うこと。

- ・本仕様書の技術的内容に関する質問等については、調達請求者と協議すること。また、本仕様書に定めのない事項及び疑義が生じた場合は、調達担当者と協議のうえ決定する。

サプライチェーン・リスク対応に係る特記事項

1. サプライチェーン・リスクへの対応

受注者は、機器等の意図的な不正改造及び情報システム又はソフトウェアに不正なプログラムを埋め込むなど、国立研究開発法人産業技術総合研究所（以下、「産総研」という。）の意図しない変更が加えられたときに生じ得る情報の漏えい若しくは破壊又は機能の不正な停止、暴走その他の障害等の情報セキュリティ上のリスク（以下「サプライチェーン・リスク」という。）に対応するため、受注者は「IT 調達に係る国の物品等又は役務の調達方針及び調達手続に関する申合せ」（平成 30 年 12 月 10 日関係省庁申合せ）に基づく対応を図らねばならない。

2. 意図しない変更に対する対策

①受注者は、本業務の履行に際して、サプライチェーン・リスクが潜在すると知り、又は知り得べきソースコード、プログラム等（以下「ソースコード等」という。）の埋込み又は組み込みその他産総研担当者の意図しない変更を行ってはならない。

②受注者は、本業務の履行に際して、サプライチェーン・リスクが潜在すると知り、又は知り得べきソースコード等の埋込み又は組み込みその他産総研担当者の意図しない変更が行われないように相応の注意をもって管理しなければならない。

③受注者は、本業務の履行に際して、情報の窃取等により研究所の業務を妨害しようとする第三者から不当な影響を受けるおそれのある者が開発、設計又は製作したソースコード等（受注者がその存在を認知し、かつ、サプライチェーン・リスクが潜在すると知り、又は知り得べきものに限り、主要国において広く普遍的に受け入れられているものを除く。）を直接又は間接に導入し、又は組み込む場合には、これによってサプライチェーン・リスクを有意に増大しないことを調査、試験その他の任意の方法により確認又は判定するものとする。

3. サプライチェーン・リスクにかかる調査の受入れ体制

①受注者は、本業務に産総研担当者の意図しない変更が行われるなど不正が見つかったときは、追跡調査や立入検査等、産総研と連携して原因を調査し、サプライチェーン・リスクを排除するための手順及び体制を整備し、当該手順及び体制を示した書面を産総研担当者に提出しなければならない。

4. サプライチェーン・リスクを低減するための対策

①受注者は、サプライチェーン・リスクを低減する対策として、本業務の設計、構築、運用・保守の各工程における不正行為の有無について定期的または必要に応じて監査を行う体制を整備するとともに、本業務により産総研に納入する納入物品に対して意図しない変更が行われるリスクを回避するための試験を行わなければならない。当該試験の項目は、情報セキュリティ技術の趨勢、対象の情報システムの特性等を踏まえ、受注者において適

切に設定するものとする。

- ②機器の納入であり、かつ、設計、構築、運用・保守の各工程が存在しない場合は、4.
- ①の対応は不要。

5. 受注者の業務責任者等

- ①受注者は、本業務の履行に従事する業務責任者及び業務従事者（契約社員、派遣社員等の雇用形態を問わず、本業務の履行に従事する全ての従業員をいう。以下同じ。）を必要最低限の範囲に限るものとする。
- ②機器納入であり、かつ、設計、構築、運用・保守の各工程が存在しない場合は、5. ①の対応は不要。

6. 再委託

6.1 本業務の第三者への委託の制限

受注者は、産総研の許可なく、本業務の一部又は全部を第三者（再委託先）に請け負わせてはならない。ただし、6.2に定める事項を遵守する場合はこの限りではない。

6.2 第三者への委託に係る要件

- ①受注者は、本業務の一部又は全部を第三者に再委託するときは、再委託先の事業者名、住所、再委託対象とする業務の範囲、再委託する必要性について記載した承認申請書を、委託元である産総研に提出し、書面による事前承認を受けなければならない。
- ②受注者は、本業務の一部又は全部を第三者に再委託するときは、再委託した業務に伴う再委託者の行為について、全ての責任を負わなければならない。
- ③受注者は、知的財産権、情報セキュリティ（機密保持を含む。）及びガバナンス等に関して、本仕様書が定める受注者の責務を再委託先も負うよう、必要な処置を実施し、その内容について委託元である産総研の承認を得なければならない。
- ④受注者は、受注者がこの仕様書の定めを遵守するために必要な事項について本仕様書を準用して、再委託者と約定しなければならない。
- ⑤受注者は、前号に掲げる情報の提供に加えて、再委託先において本委託事業に関わる要員の所属、専門性（情報セキュリティに係る資格・研修実績等）、実績及び国籍についての情報を委託元である産総研へ提出すること。
- ⑥受注者は、再委託先において、産総研の意図しない変更が加えられないための管理体制について委託元である産総研に報告し、許可又は確認（立入調査）を得ること。

7. その他

- ①提出された資料等により産総研担当者に報告された内容について、サプライチェーン・リスクが懸念され、これを低減するための措置を講じる必要があると認められる場合に、調達担当者は受注者に是正を求めることがあり、受注者は相当の理由があると認められるときを除きこれに応じなければならない。
- ②産総研は、受注者の責めに帰すべき事由により、本情報システムに産総研担当者の意図しない変更が行われるなど不正が見つかった場合は、契約条項に定める契約の解除及び違約金の規定を適用し、本業務契約の全部又は一部を解除することができる。