

量子化学計算による

研究開発支援

- ・コンサルティング



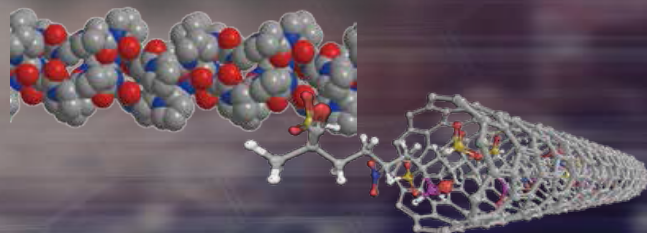
あらゆる企業を量子化学でサポート

TheoLyse

テオリーゼは量子化学計算で

化学材料メーカーの革新的材料開発をリードします。

- ・量子化学計算法による初歩的な量子化学計算の導入
- ・量子化学計算を立ち上げたい
- ・機械学習も導入し、よりの絞った材料設計を目指したい
という研究者・開発者の応援をします。



このようなご要望にお応えします

(例)

化学薬品・触媒

- ・反応メカニズムを知りたい
- ・反応 / 触媒活性を上げたい
- ・新規反応経路をデザインしたい
- ・中間体 / 遷移状態の構造を知りたい
- ・触媒の立体選択性を上げたい
- ・レアメタルの代替物質を見つけたい
- ・錯体の配位子を最適化したい

高分子材料

- ・劣化メカニズムを知りたい
- ・CO₂等小分子との反応機構を知りたい
- ・UV・IR等スペクトル同定をしたい
- ・高分子物性を知りたい(導電性・磁性・非線形光学特性等)

電子・磁性・光学材料

- ・機能性分子 / 高分子を設計したい
(導電性・磁性・光学特性など)
- ・分子ワイヤー / ナノチューブ
- ・有機 EL 材料、半導体 / 絶縁材料
- ・太陽電池 / 二次電池材料
- ・NLO 材料を設計したい

創薬・バイオ

- ・DNA/RNA/ タンパク質-リガンド相互作用
- ・タンパク質のモデル化のアドバイスが欲しい
- ・生体分子を電子材料として使いたい

テオリーゼとは

“テオリーゼ (Theolyse)” とはドイツ語の Theoretische Analyse (理論解析) の略です。我々量子化学者がドイツにおいて垣間見た、基礎研究に根付いた素晴らしい研究風土に敬意を表し、社名を「理論解析」のドイツ語から組み合わせました。シュレーディンガーやヒュッケル、福井謙一の業績に続き、現在では高度な理論計算が物性予測や創薬、新材料設計に不可欠です。ミクロな世界において、物質の本質や原理を明らかにしていくことは、新しい学術の創出につながるるとともに、産業界にも基礎に根付いた変革を与える鍵となっています。

テオリーゼの目標

大学から発祥した基礎研究が応用として役に立ち、企業での実用化に結び付く方法の開発を目指しています。基礎と応用を結び付ける方法や理論 (Theory) が実となり、やがて持続可能なサイエンスにつながることを期待しています。



ロゴマーク

電子と種の両方の意味を兼ね備えて、それが成果(木の実)に結びつくイメージ

まずはご相談
ください

テオリーゼからの提案

量子化学計算による研究開発支援

技術指導

コンサルティング

各種相談

(実験物性値と量子化学計算のマッチング等)

研修・セミナー

(オンライン / オンサイト)

量子化学計算の導入支援

受託計算

当社オリジナルの超高速・高精度計算法、相互作用解析法など

機械学習の導入支援



株式会社テオリーゼ

| | |
|------|--|
| 会社名 | 株式会社テオリーゼ HP: https://www.theolyse.com/ |
| 事務所 | 九州大学 筑紫キャンパス内 福岡県春日市春日公園6丁目-1 |
| 問合せ先 | E-mail: support[at]theolyse.com ※[at]は@に置き換えてください |
| 事業内容 | 量子化学計算による 研究開発支援、コンサルティング |