量子化学計算による
研究開発支援
・コンサルティング

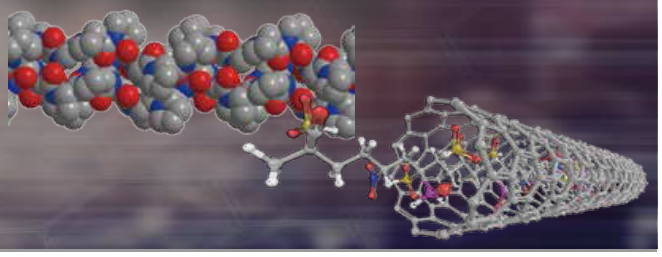
あらゆる企業を量子化学でサポート

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、より的を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
- CO_2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**

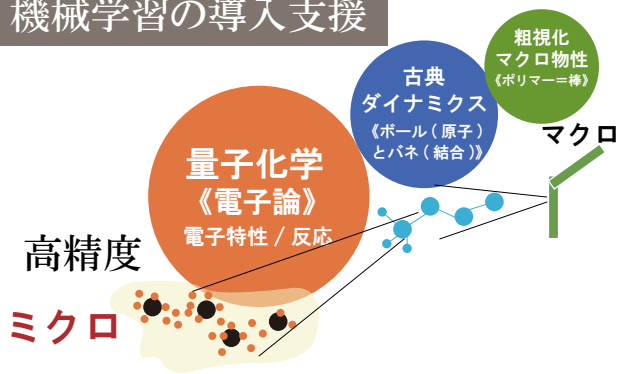
各種相談（実験物性値と量子化学計算のマッチング等）

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



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、やがてサステイナブルなサイエンスにつながることを期待しています。

TheoLyse

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

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@theolyse.com
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