

## Guidelines for the 27<sup>th</sup> meeting of Japan Society of Theoretical Chemistry

### Oral presentations

- Dates: Tuesday, July 22 – Thursday, July 24, 2025
- Venue: Kyushu University Nishijin Plaza, 2<sup>nd</sup> floor
- Face-to-face

### Poster presentations

- Dates: Wednesday, July 23 – Thursday, July 24, 2025
- Venue: Kyushu University Nishijin Plaza, 1<sup>st</sup> floor exhibition area
- Face-to-face

### Speaker guidelines

- Oral presentations will be held face-to-face only.
- Timeslot for presentation: 20 minutes (15 minutes talk, 4 minutes Q&A, 1 minute for presenter change)
- Please connect your own laptop for presentation.
- Only HDMI cable is available for projector connection. Online broadcasting using Zoom, etc. will not be used.
- Please check the connection between your laptop and projector in advance during the break before the session. Please bring your own adapter from HDMI output Type A, if required. Note that VGA adapter for mini D-sub 15 pin and USB-C port are not provided.
- When using .ppt slides, please use presenter mode during presentation. Please switch slides by yourself.
- The microphone will be provided for presenters.
- Please follow the chairperson's instructions for the time progress of session.
- There is no need to submit slides in advance, but you may save your presentation file and bring it on a USB memory stick in case of any problem.
- The recommended aspect ratio for slides is 16:9.

### Poster guidelines

- The size of a poster should be A0 (841 mm × 1,189 mm).
- Posters should be placed on the designated poster board before the poster session starts on the day of the presentation.

- The presentation number tags will be posted and pins for attaching will be provided by organizers.
- Poster presentations are freely performed during the session.
- Please remove your poster after the session ends. Remaining posters will be removed and disposed by organizers.

#### **About the venue**

- Wireless LAN is available at the meeting venue.
- Eating and drinking are prohibited in the conference rooms.

#### **About the reception**

- The registration desk is on the 2<sup>nd</sup> floor of Nishijin Plaza near the lounge space.
- Pre-registered participants will receive a participation certificate (name tag) and a receipt (for the registration fee and banquet fee) at the desk.
- Participants who register on the day of the event must complete the registration procedures at the registration desk.
- The reception and cloakroom are open from 9:00 to 18:30 on July 22<sup>nd</sup>, from 8:45 to 17:30 on July 23<sup>rd</sup>, and 8:45 to 16:30 on July 24<sup>th</sup>.
- We can store your luggage at the reception and cloakroom on the days of the event only. Please keep all valuable items with you.
- The cloakroom will be carefully watched, but there is still a possibility that the luggage may be lost, damaged, or soiled. Please understand that in such unlikely event the organizers will not held responsibility.
- The reception and cloakroom will be closed during banquet on July 23<sup>rd</sup>. Please collect any luggage you have left at the cloakroom before banquet begins.

#### **About the banquet**

- Only registered participants who have completed the payment can attend.
- The venue is the exhibition area on the 1<sup>st</sup> floor of Nishijin Plaza.
- Attendees must have their participation certificate (name tag).

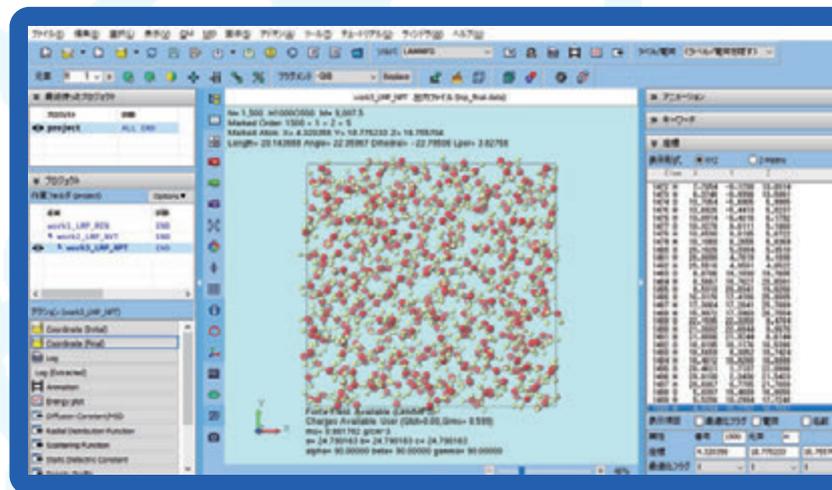
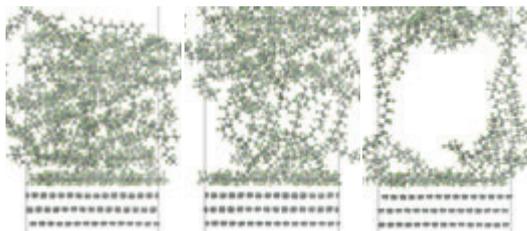
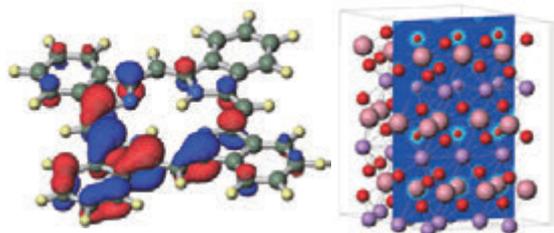
If you have any questions, please contact us at [theochem27@jstc.org](mailto:theochem27@jstc.org)

# winmostar

Winmostar は、MO、DFT、MD などのシミュレーション環境を提供する統合 GUI ソフトウェアです。  
20 年以上の歴史を持ち、現在もなお進化を続けています。

## 主な機能

- 1 様々な原子・分子構造の作成  
分子、錯体、液体、アモルファス、  
ポリマー、結晶、表面、界面など
- 2 シンプルかつ柔軟な計算条件の設定  
GAMESS、Gaussian、LAMMPS、  
Gromacs、Quantum ESPRESSO などに対応
- 3 様々な計算リソースのシームレスな切り替え
- 4 膨大なファイル・プロセスの自動管理
- 5 シミュレーションデータの変換
- 6 計算結果の解析・可視化、各種物性算出  
45 種類以上の物性に対応



## 特徴

- ▶ 主要なシミュレーション手法を Winmostar だけで網羅
- ▶ 基礎原理の学習から受託計算まで充実したサポートで初心者でも安心
- ▶ 長年の開発・サポート実績を活用し高いコストパフォーマンス
- ▶ 実用的な入力ファイルを生成するのでソルバの学習に有用

## 最新バージョン V11 の新機能 (2022 年 4 月リリース)

- ・連続計算&ファイルとジョブの自動管理
- ・複数のパラメータまたは構造への一括計算
- ・一部機能の高速化 など 155 点以上の改良

## 導入実績 (2022 年 10 月 4 日現在)

- ・メーカー 160 社、研究機関 26 機関、教育機関 105 機関で導入
- ・93 本の学術論文と 13 社の特許で引用
- ・74 の大学で授業・実習に利用、公的機関の講習会で採用

## 料金プラン (税別)

|                 |               |             |
|-----------------|---------------|-------------|
| 特定ユーザー<br>ライセンス | 民間企業<br>官公庁   | ¥ 180,000 ~ |
|                 | 教育機関          | ¥ 60,000 ~  |
| サイト<br>ライセンス    | ¥ 1,440,000 ~ |             |

全機能を 1 ヶ月間利用可能な無料トライアルと、  
機能を限定した学生版および無償版を  
Web から無料でダウンロードできます。

各ライセンスの詳細、ダウンロード、注文見積もりも Web にてご確認ください

winmostar

GET STARTED



株式会社クロスアビリティ

東京都文京区本郷4-1-5 石渡ビル3階

<https://x-ability.co.jp/>

## Winmostar のターゲットとなる材料

|                  |                   |
|------------------|-------------------|
| 有機化合物            | 冷媒、蓄熱材            |
| 触媒（錯体、微粒子）       | 二次電池、燃料電池、太陽電池    |
| 有機半導体材料（OLED など） | 電解液、ポリマー電解質、固体電解質 |
| 塗料、色素            | 電子材料              |
| 薬剤               | パワー半導体            |
| 有機・無機ナノ複合材料      | 熱電材料              |
| ゴム、樹脂、フィルム、液晶    | 鋼材                |
| カーボン材料（CNT など）   | 無機ガラス材料           |
| 潤滑油              | 多孔質体、MOF など       |

## Winmostar で計算できる原子・分子構造

|                    |                   |
|--------------------|-------------------|
| 有機分子               | 気液、液液、固気、固液、固固界面  |
| 錯体                 | 分子結晶、無機結晶         |
| 液体・アモルファス・ガラス      | 点欠陥、不純物置換した結晶、固溶体 |
| ポリマー（ホモ・ブロック・ランダム） | スラブ（表面）、粒界        |

## Winmostar で計算できる物性

|                      |                            |
|----------------------|----------------------------|
| IR、ラマンスペクト           | 液体・アモルファスの動径分布関数、散乱関数      |
| UV-Vis スペクトル、蛍光波長    | 拡散係数・イオン伝導度                |
| NMR、XANES スペクトル      | 粘度・熱伝導度・誘電率・誘電正接           |
| 熱力学量                 | 表面張力・吸着量・吸着エネルギー           |
| 比熱、自由エネルギー           | 融点・沸点・蒸気圧・平衡密度             |
| 生成熱、活性化エネルギー、遷移状態の構造 | S-S 曲線、熱膨張率、ガラス転移温度、弾性率    |
| 分子軌道エネルギー、イオン化ポテンシャル | 蒸発熱、溶解度パラメータ、 $\chi$ パラメータ |
| 静電ポテンシャル、状態密度、バンド構造  | 誘電関数、仕事関数                  |
| 分子・結晶の安定構造           | ゼーベック係数、電気伝導率、電子熱伝導率 など    |

# ベンガラから始まる歴史。 創業以来 200 年培われた技術を“今”に活かす。

未来を支える粒子になる。



## 戸田工業グループの歴史と技術

戸田工業の歩みは、磁器の絵付けや、歴史的建造物の彩色等に欠かせない人類最古の顔料「ベンガラ」を手工業として製造した1823年から始まります。それから200年を越え、時代の波にもまれながらも今日まで歩むことができたのは、常に化学素材の新たな可能性を切り開き、時代の要請に応えた製品を作り続けてきたことにあります。

公害が社会問題になった時代には、環境にやさしい製造方法を生み出し、またビデオテープ、カセットテープ用磁気記録材料が当社の主力製品であった時代では、いつかはデジタルの時代がやってくると、時代の変化を見据えて新しい事業分野の開拓に取り組んできました。当社グループの製品は、ルーツである顔料だけではなく、自動車、ICT、スマートフォンや家電等の最先端分野にも用いられています。そして、創業以来200年培った技術により生まれた化学素材は、国内のみならず世界中のマーケットに広がっています。

1823 年  
創業

建材・陶器着色




岡山県井原市にて創業  
ベンガラ製造を家業とした

1933 年  
会社設立

ベンガラ  
機能的顔料

船舶輸送が物流中心に




広島工場（現：広島市安佐北区）  
戸田工業株式会社を設立  
広島市にベンガラの製造販売を事業目的として会社設立

1960 年代

船舶塗料  
機能的顔料




偏向ヨーク用材料  
軟磁性材料

モノクロTV 普及  
第1次TVブーム（皇太子殿下ご成婚）  
第2次TVブーム（東京オリンピック）

1970 年代

自動改札機



オーディオ・ビデオテープ普及



磁気切符



磁気記録メディア



1980 年代

モーター需要の拡大



プリンター、複写機の普及



家電モーター用磁石材料  
磁石材料

トナー、キャリア  
電子印刷材料

1990 年代

環境意識の高まり



燃焼触媒用酸化鉄活性  
フェロキサイド  
「TIC」



可燃物ごみ袋



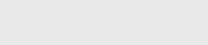
ハイドロタルサイト



鉛フリー  
強化ビニル安定剤



農業用ポリオレフィン  
フィルム保温剤



磁気記録材料

環境関連材料

2000 年代

リチウムイオン電池製品の普及



IT社会の進展



正極材料、負極材料  
リチウムイオン  
電池用材料

金属対応フェライト  
ICタグ/NFCタグ



フレキシブル  
フェライトシート



2010-2020 年代

自動車の電動化、ICTの進展



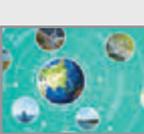
自動車、家電等向け  
モーター・センサー用材料  
磁石材料



積層セラミック  
コンデンサー用  
チタン酸バリウム  
誘電体材料



CO<sub>2</sub>固体回収材  
環境関連材料



2023 年  
—創業200周年—

大阪・関西万博 出展  
CO<sub>2</sub> 分離回収技術



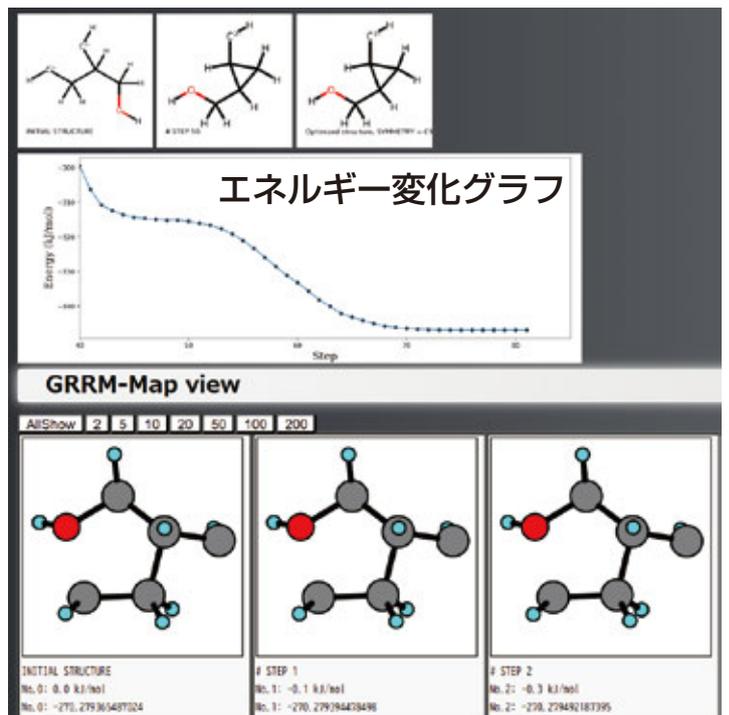
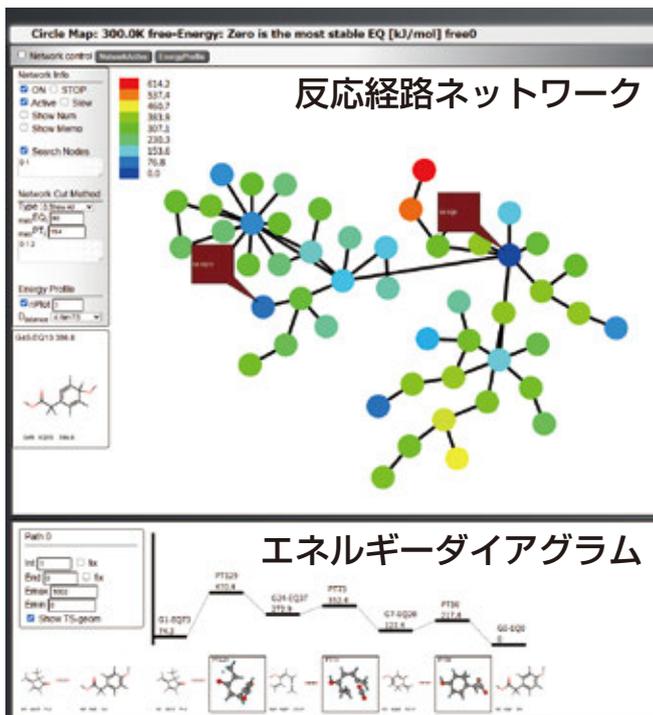
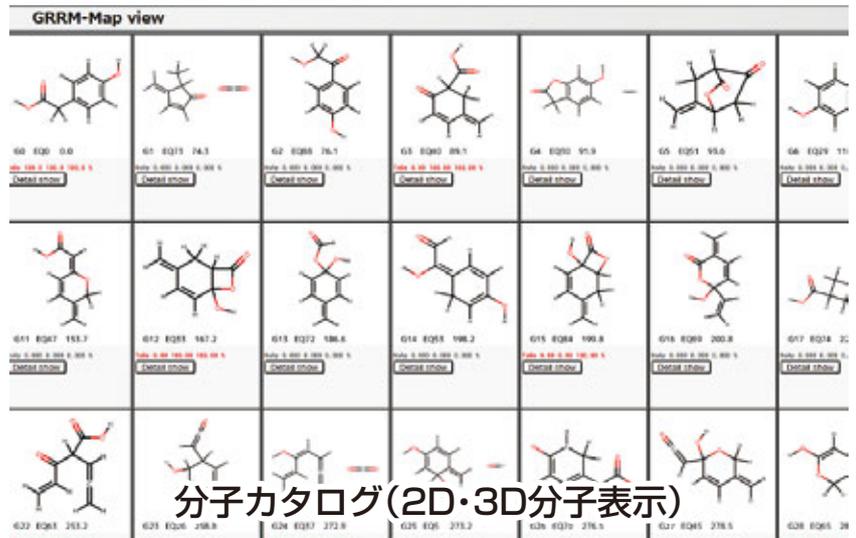
# GRRMmap

GRRM 用可視化・解析ソフトウェア



## GRRMの計算結果を効率よく解析できます

GRRMmapは、北海道大学 原 渕 祐 特任教授によって開発された、GRRM用ポスト処理プログラムです。GRRMmapは、GRRMの探索結果からユーザーが必要とする情報に短時間で視覚的にアクセス可能とします。GRRMmapの出力の形式はHTMLやJavaScript等を用いたWebページ形式となっており、Google Chrome等のWebブラウザで閲覧しやすくなっています。



# 量子化学計算による

## 研究開発支援

- ・コンサルティング



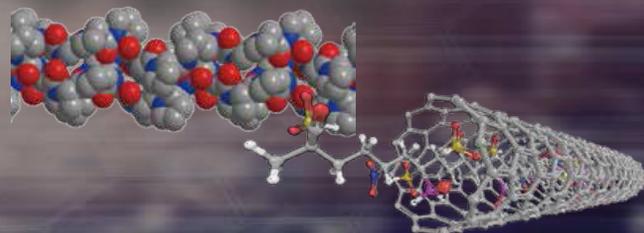
あらゆる企業を量子化学でサポート

# 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
- ・CO<sub>2</sub>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。



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<br>HP: <a href="https://www.theolyse.com/">https://www.theolyse.com/</a>           |
| 事務所  | 九州大学 筑紫キャンパス内<br>福岡県春日市春日公園6丁目-1<br>総合研究棟(C-CUBE)602号室                                       |
| 問合せ先 | TEL: (092)583-8889<br>E-mail: <a href="mailto:support@theolyse.com">support@theolyse.com</a> |
| 事業内容 | 量子化学計算による<br>研究開発支援、コンサルティング   |

# BCSJ 100th Anniversary

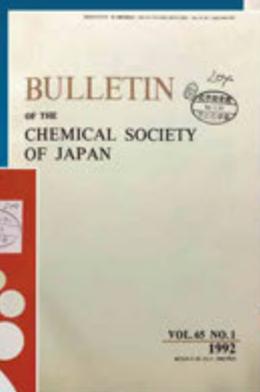
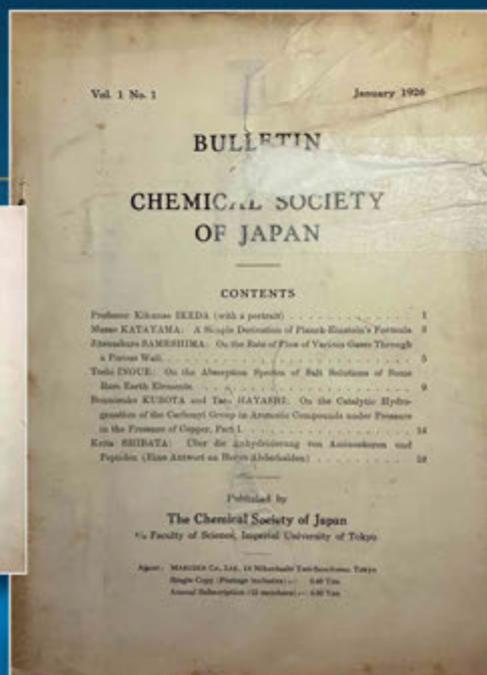
A photo of Dr. Kikunae Ikeda in the first issue of BCSJ.



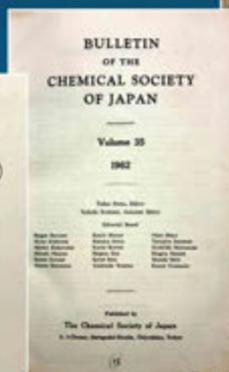
Photo: KOJI OKUMURA  
(Forward Stroke)

The Bulletin of the Chemical Society of Japan (BCSJ) was founded in 1926 as a pioneering chemistry journal publishing in both English and German. Since then, BCSJ has been publishing significant work spanning various fields of chemistry, except for the years 1945 and 1946. The 100th volume will appear in 2027.

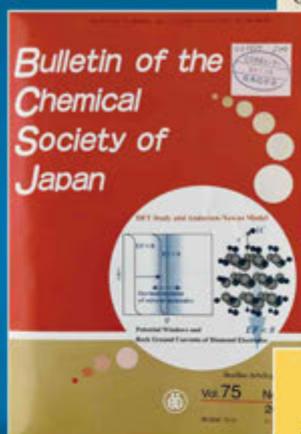
## First Issue 1926



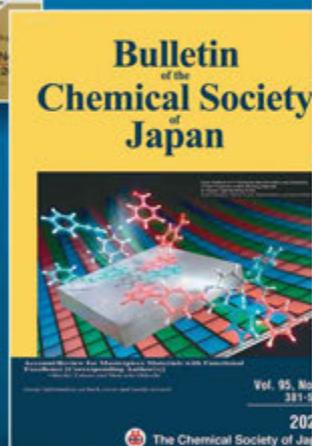
vol.45/no.1/1992



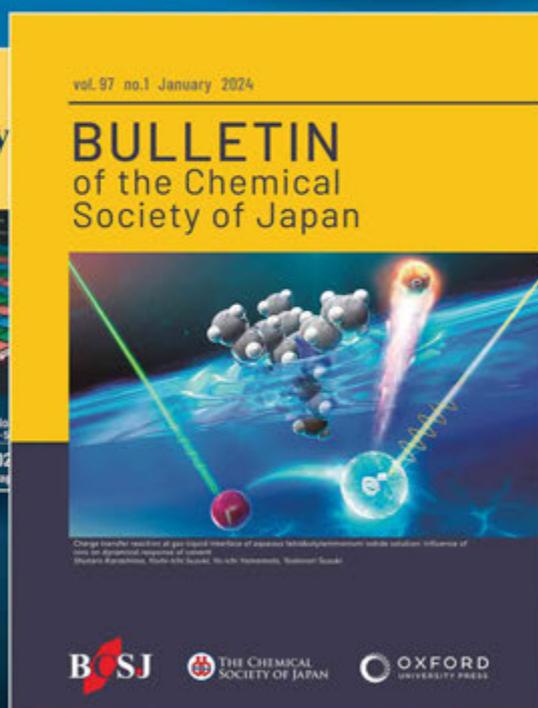
vol.35/1962



vol.75/no.1/2002



vol.95/no.3/2022



vol.97/no.1/2024

## 100th anniversary in 2025!

