

# 受託サービスの進め方ガイド

量子化学計算（DFT）・分子動力学（MD）・MI・AIの受託計算 / 受託研究 / 受託開発

株式会社 TS テクノロジーは、2009年創業の計算化学専門企業です。量子化学計算（DFT）・分子動力学（MD）・マテリアルズインフォマティクス（MI）・人工知能（AI）により、反応解析や材料・触媒設計の受託研究を350件超手がけています。社員の過半がPh.D.の専門集団で、産総研フェロー・山口大学名誉教授監修のもと高品質な解析を提供。計算化学をワンストップで支援します。

## 受託の流れ

お問い合わせから納品・アフターケアまで、ワンストップで対応します。

1	<b>お問い合わせ</b> フォームまたはお電話で課題をご相談ください（無料）。
2	<b>お打ち合わせ+（NDA 締結）</b> 課題を詳細にヒアリングします（電話・リモート会議も可）。必要に応じて秘密保持契約（NDA）を締結します。
3	<b>研究計画のご提案+お見積り</b> 最適な解析方針と価格・納期をご提示します。
4	<b>解析作業</b> 量子化学計算・MD計算・MI解析等を、弊社保有の計算機資源で実行します。
5	<b>ディスカッション+報告書納品</b> 弊社技術スタッフとのディスカッションを経て、報告書・出力データを納品します。
6	<b>アフターケア</b> 補足計算・追加のご質問・次フェーズのご相談まで丁寧に対応します。

### NDA（秘密保持契約）について

機密性の高い案件は、ヒアリング前に秘密保持契約（NDA）を締結できます。片務・双務いずれにも対応し、貴社書式での締結も可能ですのでご相談下さい。

※ 実際の締結条件は個別協議のうえ決定します。

## 受託できる 4 領域

<b>① 量子化学計算・DFT</b> 反応経路、活性化エネルギー、HOMO-LUMO、IR / NMR / UV-Vis スペクトル予測。Gaussian・GAMESS 等に対応。	<b>② 分子動力学 (MD)</b> ポリマー物性、接着エネルギー、輸送係数、相分離、機械的強度の予測、力場作成。GROMACS・LAMMPS・各種 MLIP に対応。
<b>③ ケモインフォマティクス/MI</b> 物性予測モデル構築、化合物スクリーニング、プロセス最適化、機械学習解析。	<b>④ ソフトウェア開発</b> シミュレーションソフトウェア、Web アプリ、データ解析・可視化ツールの開発。

## 料金目安・納期

### 料金の目安

化合物単位の物性解析 (報告書納品)	3 万円~/1 化合物
スポット受託 (ディスカッション・報告書納品)	40 万円~
FTE 契約 (1 名 + 弊社計算資源/1 ヶ月)	160 万円~

※価格は税別。案件規模・計算内容により変動します。ヒアリング後に個別お見積りをご提示します。

### 納期の目安

- 小規模 (1 化合物の物性解析) : 2~5 日
- 中規模 (反応経路解析・MD 計算) : 4~8 週間
- 大規模 (複数化合物スクリーニング・MI モデル構築) : 2 ヶ月~

## お問い合わせ先

### 株式会社 TS テクノロジー

Web からのお問い合わせ : <https://tstcl.jp/support/contact>

計算事業部 (東京本社)

TEL : 03-5357-1157 (平日 10:00-17:00)

〒102-0083 東京都千代田区麹町二丁目 10 番 2 号

Web : <https://tstcl.jp>

