

## 討論会日程表

5月18日(月)	5月19日(火)	5月20日(水)
9:00-10:00 登録受付	09:00-10:20 口頭発表 (2L01-2L04)	09:00-10:20 口頭発表 (3L01-3L04)
10:00-10:10 開会挨拶		
10:10-11:30 口頭発表 (1L01-1L04)	10:20-10:30 休憩	10:20-10:30 休憩
	10:30-11:50 ポスター発表1 (P101-P139)	10:30-11:50 ポスター発表2 (P201-P239)
11:30-12:40 休憩		
	11:50-12:50 休憩	11:50-13:00 休憩
12:40-14:00 口頭発表 (1L05-1L08)	12:50-14:20 (90分) 産学特別セッション (IL04-IL07)	13:00-14:20 ポスター発表3 (P301-P339)
14:00-14:10 休憩		
14:10-15:30 口頭発表 (1L09-1L12)	14:20-14:30 休憩	14:20-14:30 休憩
	14:30-15:50 口頭発表 (2L05-2L08)	14:30-15:50 口頭発表 (3L05-3L08)
15:30-15:40 休憩		
15:40-17:00 口頭発表 国際交流セッション1 (IL01, 1L13-1L15)	15:50-15:55 休憩	15:50-16:00 閉会挨拶
	15:55-16:55 (60分) 奨励賞受賞講演 (IL08, IL09)	
	16:55-17:00 休憩	
17:00-17:10 休憩		
17:10-18:10 口頭発表 国際交流セッション2 (IL02, IL03, 1L16)	17:00-18:00 理論化学会総会	
	18:00-18:10 移動	
	18:10-20:10 懇親会 ピーチユニオン	

## Timetable of the 28th annual meeting of JSTC

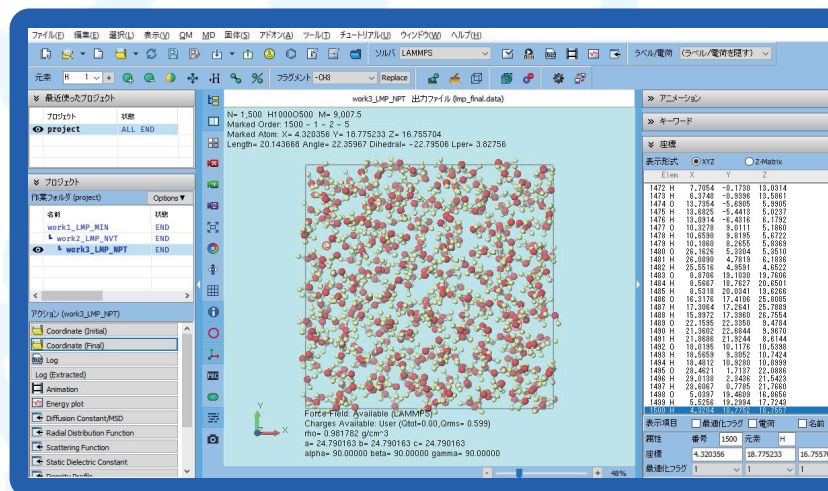
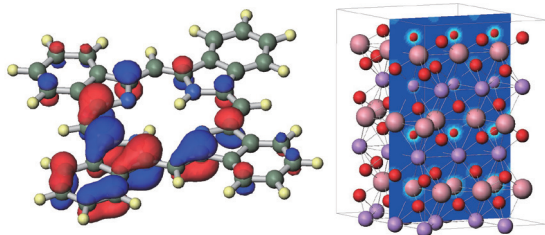
May 18 (Mon)	May 19 (Tue)	May 20 (Wed)
9:00–10:00 Registration	09:00–10:20 Oral Presentation (2L01–2L04)	09:00–10:20 Oral Presentation (3L01–3L04)
10:00–10:10 Opening		
10:10–11:30 Oral Presentation (1L01–1L04)	10:20–10:30 Break	10:20–10:30 Break
	10:30–11:50 Poster Session 1 (P101–P139)	10:30–11:50 Poster Session 2 (P201–P239)
11:30–12:40 Lunch Break	11:50–12:50 Lunch Break	11:50–13:00 Lunch Break
12:40–14:00 Oral Presentation (1L05–1L08)	12:50–14:20 Industry–Academia Special Session (IL04–IL07)	13:00–14:20 Poster Session 3 (P301–P339)
14:00–14:10 Break		
14:10–15:30 Oral Presentation (1L09–1L12)	14:20–14:30 Break	14:20–14:30 Break
	14:30–15:50 Oral Presentation (2L05–2L08)	14:30–15:50 Oral Presentation (3L05–3L08)
15:30–15:40 Break		
15:40–17:00 Oral Presentation (International Session 1) (IL01, 1L13–1L15)	15:50–15:55 Break	15:50–16:00 Closing
	15:55–16:55 Award Presentation (IL08, IL09)	
	16:55–17:00 Break	
17:00–17:10 Break		
17:10–18:10 Oral Presentation (International Session 2) (IL02, IL03, 1L16)	17:00–18:00 General Meeting of JSTC	
	18:00–18:10 Move to Banquet Hall	
	18:10–20:10 Banquet Peach Union	

# 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

## 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



弊社リサーチフェローが執筆した  
『LAMMPS による分子動力学シミュレーション』  
が出版されました。

LAMMPS の実践的な利用方法に特化した解説書となります。  
化学工業日報 8,800 円 (税込)

## 料金プラン (税別)

特定ユーザ ライセンス	民間企業 官公庁	¥ 360,000 ~
	教育機関	¥ 120,000 ~
サイト 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/>

# ULTIMATE AI & HPC

## ENGINE FOR PROFESSIONAL AI WORKFLOWS

# NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell Series

### 次世代アーキテクチャ Blackwell 採用 GPU

NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell シリーズは AI、HPC、シミュレーションやグラフィックスを扱うヘビーユーザー向けの高性能プラットフォームです。大容量メモリをはじめ、設計や科学技術計算等のプロジェクトを高速かつ正確に行う機能が搭載されており、エンタープライズグレードの信頼性で最適化されています。

### NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell Workstation Edition

ソフトウェア開発者をはじめデータサイエンティスト、デザイナーやエンジニアといったヘビーユーザーに生産性やパフォーマンス、処理速度を提供します。

### NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell Max-Q Workstation Edition

AI およびニューラルレンダリング機能を提供し、1GPUから 4GPUへとシームレスにスケールアップし計算能力を倍増させます。

### NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell Server Edition

GDDR7 96GBメモリを搭載し、エージェント AIやフィジカル AI、科学計算からレンダリング、3Dグラフィックス等幅広いユースケースに対応します

## SPECIFICATION COMPARISON

Product Name	RTX PRO 6000 Workstation	RTX PRO 6000 Max-Q Workstation	RTX PRO 6000 Server	RTX 6000 Ada
Architecture	NVIDIA Blackwell	NVIDIA Blackwell	NVIDIA Blackwell	NVIDIA Ada Lovelace
CUDA Cores	24,064	24,064	24,064	18,176
Tensor Cores	752	752	752	568
AI TOPS	4,000 AI TOPS	3,511 AI TOPS	3,700 AI TOPS	-
FP32	125 TFLOPS	110 TFLOPS	120 TFLOPS	91.1 TFLOPS
GPU memory	96 GB GDDR7 + ECC	96 GB GDDR7 + ECC	96 GB GDDR7 + ECC	48GB GDDR6 + ECC
Memory interface	512-bit	512-bit	512-bit	384-bit
Memory bandwidth	1,792 GB/s	1,792 GB/s	1,597 GB/s	960 GB/s
Multi-Instance GPU	Supported	Supported	Supported	-
Max Power Consumption	600W	300W	Up to 600W (Configurable)	300W



株式会社HPCテック

本社：〒103-0006 東京都中央区日本橋富沢町 7-13  
TEL:03-5643-2681 FAX:03-5643-2682  
大阪営業所：〒532-0011 大阪市淀川区西中島4丁目5-1  
TEL 06-6195-6464 FAX 06-6195-6468



info@hpctech.co.jp

# あなたの計算が 世界の化学を加速する

計算化学はあらゆる化学の課題を解決する可能性を持っています。  
しかし化学全体を見渡すと、計算を本格的に使っている研究はまだわずか2割程度。  
あなたの経験と知見は、化学の未来を変える力になります。  
私たちと一緒に、もっと多くの分野に計算化学を届けませんか。



## インターン募集

### 対象

- 一般的な化学・物理分野での大学学部卒の資格を持つこと
- 量子化学計算・機械学習等、何らかの計算化学を用いた研究に携わった経験があること望ましい

### 就業体験地

京都または東京 ※遠隔地の方もご相談に応じます

### 会社概要

会社名：HPC システムズ株式会社  
所在地：〒108-0022 東京都港区海岸 3-9-15 LOOP-X 8 階  
株 式：東京証券取引所 グロース市場上場  
資本金：2億3,151万円  
社員数：136名

### 募集人数

募集枠には限りがあり、応募状況によってはお断りさせていただきます場合がございます。

### お問い合わせ先

〒108-0022 東京都港区海岸 3-9-15 LOOP-X 8 階  
HPC システムズ株式会社  
採用担当 米澤／青木

**T E L : 03-5446-5530**

**メール : hpcs\_hr@hpc.co.jp**

# A Century of Scholarly Achievements

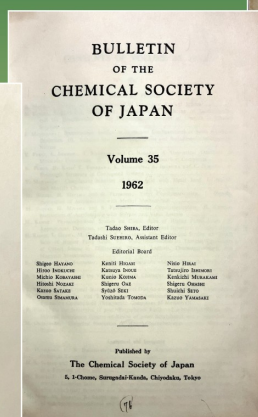
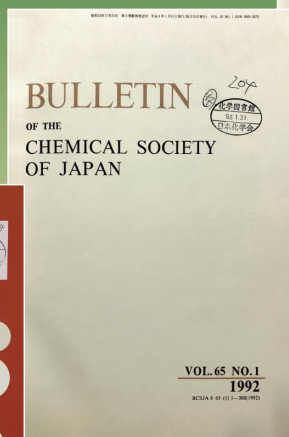
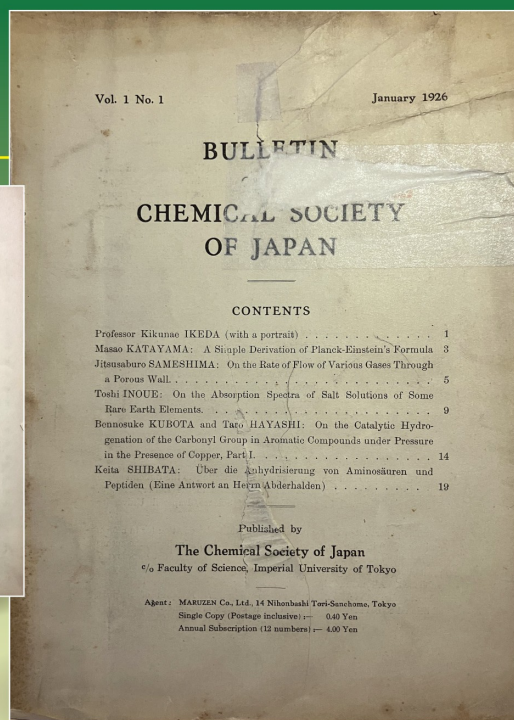
A photo of Dr. Kikunae Ikeda in the first issue of BCSJ.



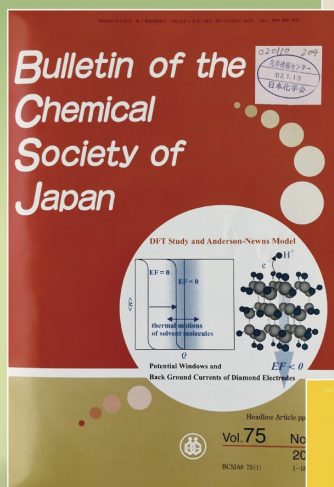
Photo: KOJI OKUMURA (Forward Stroke)

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.35/1962

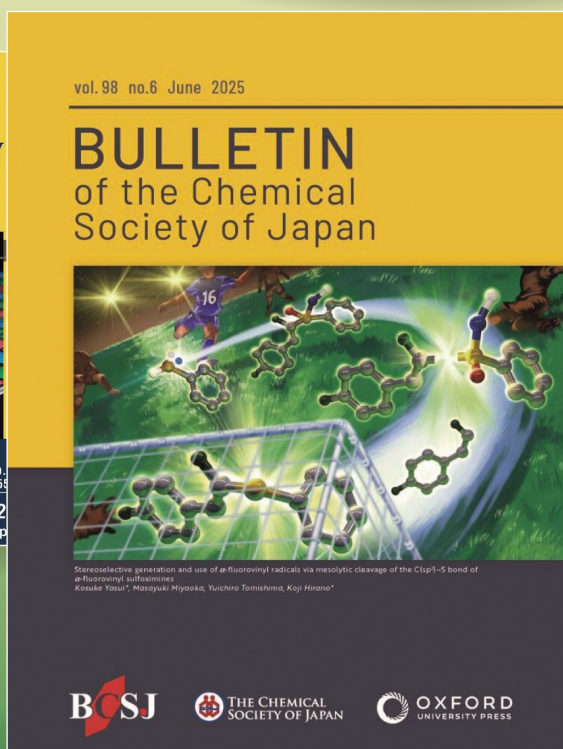


vol.65/no.1/1992

vol.75/no.1/2002



vol.95/no.3/2022



vol.98/no.6/2025

Volume 100 in  
2027!



# GPU & CPU ALL WATER COOLING SERVER RC GPU Server SAYUKI

RC水冷オリジナルユニットの進化系、GPU水冷モデルで参戦！  
消費電力500W Over製品対応の高効率、冷却性能を実現！  
性能ダウンの分岐点をクリアすることでパフォーマンスを引き出します。



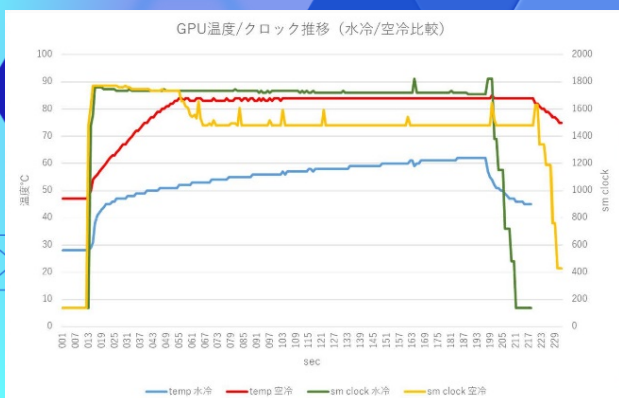
## GPU冷却ウォーターポンプユニット

GeForce系GPU専用のウォーターポンプユニットを1GPUごとに搭載可能です。  
性能ダウンの分岐点と言われている80°Cを常時下回ることにより、可能な限り最大ブースト状態をキープします。



## CPU冷却ウォーターポンプユニット

水冷静音サーバー RC CalmVシリーズ同様の水冷CPU冷却ウォーターポンプユニットを搭載。  
TDP500Wを余裕で冷却する水冷冷却システムです。



## 常時70°Cラインを目指して

12時間のフル稼働テストでは、ほとんどの稼働時間を70°C以下で運用が可能でした。  
空冷(弊社機)と比較した結果でも、高クロック維持を証明しております。

RC GPU Server SAYUKI Specification	
Case	EIA規格6Uラックマウントケース (スライドレール付属) / キャスター装着タワーケース運用可能
CPU	AMD EPYC™ / Intel Xeon® Scalable Processors 最大2基※TDP500W対応
Cooling	CPU&GPU: 水冷式 ウォータージャケット付属 Memory: 最大静圧: 16.7Pa / 音圧レベル: 23dB以下の専用冷却FAN
Memory	EPYC: MAX 24DIMM-SLOT / Xeon: MAX 16DIMM-SLOT
Storage	3.5inch HDD or 2.5inch SSD 最大4基 / 3.5inch ホットスワップベイ搭載
Network	2x 10G Base-T
Power Supply	100V/200V非冗長電源 (100V時:2400W 200V時: 4000W)
OS	Linux(各種ディストリビューション対応) / Windows 他
GPU	GeForce RTX4090 水冷エディション最大4基 ※RTX50シリーズ対応準備中
Support	1年 / 3年ハードウェアサポート(GPUはメーカーに準拠)

※RC GPU Server SAYUKIは水冷静音サーバー RC CalmVシリーズ同様の冷却方式を採用しておりますのでメンテナンスフリーになります。



リアルコンピューティング株式会社

〒135-0041 東京都江東区冬木9-13 tel: 03-5621-7211 fax: 03-5621-7212  
URL: <http://www.realcomputing.jp/> Mail: [info@realcomputing.jp](mailto:info@realcomputing.jp)