P9

ここからはMI技術グループの蓬田からご説明いたします。今、松本さんから説明がありました**添加剤の最適構造**を見つけるため、こちらに示すような材料探索サイクルを構築しました。そこでMI技術グループでは右図に示すように対象候補となる**数万構造の有機分子**の中から様々な化学的特性を考慮し、候補分子を絞っていきます。その過程で**Matlantisを始めとする計算化学的アプローチ**を活用し、スクリーニングを行いました。その構造に対して実際に**合成・評価を**行い、最適なものを探索していくといった**MI-実験連携を行い、材料探索の高速化**を図っています。次のスライドからは本検討の肝となる、**シミュレーションのアプローチに**ついてご説明いたします。

P10

今回の添加剤のコンセプトを振り返りますと**2点**ありました。1点目が触**媒の溶解性を向上**させることと、2点目が**重合を阻害しない**ことです。この2点の機能についてシミュレーションを活用し**定量化**しました。

P11

模式図で説明しますと、重合開始**前**は、このように添加剤が触媒にくっつくことで周りとの溶媒との親和性が増し、**触媒そのものの溶けやすさが向上する**ことで重合の開始を促進します。これが**1点目の溶けやすさ**です。

P12

続いて、重合開始**後**ですが、添加剤はこのように外れて[クリックx2],その空いたスペースにブタジエンが入り、重合反応が進んでいきます。したがって、**金属から外れて重合を阻害しないこと**が求められます。すなわちその添加剤の**“結合の強さ”を知る必要**があります。

P13

以上示した2つの指標について、matlantisを含むシミュレーションを活用して定量評価を行いました。まずはすでに**実験評価済み**の添加剤について計算を行いました。その代表的な点をプロットとするとこちらのようになり[クリック]、おおざっぱにではありますが、右下よりは**左上**の添加剤が高性能となることが明らかとなりました。

P14

ここで、同様の計算を今度は**未実験の**大量の候補添加剤について行うとこのようなプロットが得られました。[クリック]　実際の添加剤を含む触媒は右図に示すように[クリック]多様な方向、形の構造をとりますが、Matlantisを用いることで、それらの影響も考慮し高速に評価したことで、一般的なソフトウェアでは10年かかるところを**2週間程度**でスクリーニングすることができ、短期間で実験フェーズに移行することが可能となっております。得られたシミュレーション結果ですが、先ほどの実験済み添加剤の傾向を踏まえて左上が高性能が期待される領域と判断しいくつかの点に対して実際の合成実験に進みました。

P15

その結果平均して高い性能の添加剤が見つかり始めています。右のグラフは性能の良しあしを表す転化率と呼ばれる指標が50％をこえる材料の発見率を示しています。既存の実験では23構造中3構造のみ超えていたのに対し、今回のMIを活用した提案では9構造中すでに**4構造**が50%を越えています。ENSの実験担当者の方からも既存実験で性能の高い材料を発見するのには時間がかかっており、今回の提案は**費用対効果が高い**とコメントいただいております。しかしながら依然として目標の性能には未達であること、top性能を超える材料は残念ながら発見できていないことから、さらなる高性能材料を発見すべく検討を続けています。

P16

ここまでがMI-実験連携によるRB向け触媒スクリーニングに関する成果を報告しました。

ここからは次世代材料の創出に向けた異なる触媒設計の取り組みについてご紹介いたします。

P17

冒頭でもご説明しましたが、ブタジエンは用いる触媒や合成条件により、さまざまな製品に展開されます。

P18

不明点ＸＸＸＸ

そこでENEOSとENSで連携し、触媒種から新たなポリブタジエンの材料を創出するための予測技術を開発中です。

P19

こちらが開発中の重合シミュレーターです。触媒とブタジエンが中央で[クリック]このように重合していく様子が分かります。この計算を続けることで最終的に得られたポリブタジエンの構造予測が可能です。ブタジエンの重合反応は右上に示すように複**雑な素反応が絡み合っていますが**、ＥＮＳが保有する**触媒・高分子化学の知見**をもとに今回はシミュレーションモデルを立てています。一方で右下に示すように重合反応というのは一般的なシミュレーションスケールに対して**長時間**の現象となるため取り扱いが困難でした。そこでENEOSは大学との共同研究を進め**、重合という長時間スケールも取り扱い可能となるシミュレーション技術**を開発しました。このような**両社の強み**を生かしたコ**ラボレーションにより独自の重合シミュレーション技術**を生み出しております。

P20

こちらを適用した例になりますが、ある触媒系において**反応メカニズムの解明と構造予測に成功**しました。ブタジエンは単体で存在していると、オレンジ色で示したcisと呼ばれる折れ曲がった構造が10％以下でしか存在しませんが、とある触媒下で重合すると不思議なことにその比率が逆転します。このようなポリブタジエンは工業的に重要ではありますが、学術的にもメカニズムが不明な点が多く、こういったメカニズムを解明していくことは次世代材料の創出にも重要となります。こちらの反応系に開発した重合シミュレーターを適用した結果、触媒に接近しあとにブタジエンが回転し、比率が逆転して重合していくという**キーメカニズムを初めて解明しました**。また、生成したポリブタジエンは**実験比率と傾向が一致**しており、構造予測できていることもわかります。これらは従来のシミュレーションでは再現できていなかったことであり、今後はこの技術を洗練し精度を向上させ、来年度以降ポリマー開発に本格的に活用していきます。

Ｐ21

最後にまとめと展望です。

P22

ENEOSとENSにてポリマー開発におけるデジタル技術の連携を継続して行っております。

実験連携においては**ＭＩ活用による実験コストの削減効果**を確認できました。

また両社の強みを生かし、次世代材料創出につながる　**独自の構造予測技術**を開発し、今後活用予定です。

今後の展望ですが、

継続してMI-実験連携を推し進め、ＲＢ用触媒の**最適化、商業生産への適用**を目指します。

また本成果等を主力製品である**SSBR**重合技術の改良など横展開を進めていきます。

その他LLMなど最新技術を新材料探索などに導入、活用してまいります。

P23

最後にこちら2022年度から始まった連携ですが、ENEOSのMI技術グループとENSでは密に連携をとりながら今回紹介したような成果が生まれ始めております。これからも逐一連携をとりながら、ポリマー開発全体を加速し更なる事業拡大に貢献していきます。

##“GENEOS”にかっこいい締め方教えてもらう。

P24

＃＃月曜にやること

Ａ． 本部長の質問対策？

Ｂ. P23松本さんに見てもらう　想定質問集共有

C. ゼロカーボン、サステナブル社会実現などのワードを取り込む

D. 想定質問集を解答

E. 配位子のＭＩ検討　　　佐藤さん、小島さん　⇒　来年のテーマを抑える

F.　コストのどのくらいを占めるのか

G. RM どの分子群とは？　モンテカルロと言わずに加速手法を伝えるためにはどういう表現が適切か

H.　市林さんにLLMの展望　具体的活用先

I: GENEOSで言い回し修正

##　修正

１．材料⇒　添加剤　に置き換える

２．P14　副題を変更　大量の候補添加剤を　10年⇒2週間　でスクリーニング

３．アジェンダ　MI技術連携による成果　を　MI-実験連携による成果

４．P20　s-Cis をs-cis　に変更

５．スライド番号を /24 に変更

６．ｐ20 アニメーションの順番を変更

７．アジェンダを小島さん案に変更？

８．ｐ２４作成　2分割し、展示名を記載

９．Ｐ19の吹き出しをグレーに？

１０．P20　ある触媒系　が少し変？

１１．P48を補足スライド新しいやつに変更

１２．R7を作成して残骸をなくす

１３．P`23を中研　ＥＮＥＯＳと変更

１４．添加剤のコンセプト

１５．P14のアニメーションの順番を入れ替える

１６．P13　Matlantis等　とする

メモ：

Q.RBを混ぜるとタイヤにどんないいことがあるのか？

A．樹脂を混ぜることで、粘弾性の大幅な改善が可能となる

これまで

ゴムをベースにシリカなどの添加剤を配合　プロセス条件を変更し、周波数特性をコントロール

樹脂をまぜることで大きく粘弾性特性を変えることができる