P9

ここからはMI技術の蓬田からご説明します。今説明にあった添加剤の最適構造の探索にあたり、こちらに示すような材料探索サイクルを構築しています。右図に示すようにMI技術グループにて購入可能な大量の有機分子から候補構造をスクリーニングしています。その後ENSにて実験・解析を行い、検証を進め最適構造を探索します。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部分についてご説明します。

P10

添加剤に求められる2つのコンセプトを振り返ります。１つが”溶解性”を向上させることと、２つ目が、重合を阻害しないことです。この機能２つについてシミュレーションを活用して定量化していきます。

P11

まず、１つ目　重合開始前は、このように添加剤は触媒にくっついて触媒そのものの溶けやすさを向上させて重合の開始を促進します。したがって”溶けやすさ”を計算します。

P12

続いて　重合開始後は、この添加剤がこのように外れて、そのスペースにブタジエン入ることで重合が進んでいきます。そのため金属から外れて重合を阻害しないことも求められます。すなわち、添加剤がもつ”結合の強さ”も計算していきます。

P13

しかし、計算すべき対象候補が多く、従来の手法で計算すると10年程度かかります。そこでMatlantisを用いて高速化を図りました。

P14

その結果、Matlntisによりたった２週間で計算を終えております

P15

得られたシミュレーション結果について、既存の実験結果にて高性能な添加剤はこのへんにきており、左上の領域がよさそうということがわかります。

P16

この領域内を実験していただいた結果、高性能な添加剤を高確率で発見できています。右図は性能が高い材料の発見率を示していますが、MI提案では既存の実験よりも高確率でよいものが見つかり始めており、ENSの実験担当者からも費用対効果が高い提案であるとコメントいただいております。しかしながら、依然として目的の性能には届いていないため、さらなる高性能な添加剤発見に向けて検討を続けております。

P17

ここまでが、MI-実験連携による成果をご説明しました。

ここからは次世代材料の創出に向けて異なる触媒設計への取り組みをご紹介します。

P18

その取り組みとして触媒種からポリブタジエン構造を予測する技術を開発中です。ぼうとうでも説明があった通り、ブタジエンは触媒種を変えることでできあがる構造が変化し、それぞれ異なる特性を持つ材料となります。

P19

そのため新たな触媒を用いたときに生成されるポリブタジエン構造を予測することは難しく、触媒開発は勘と経験に頼ってしまっているのが現状です。本連携では、この課題をサポートできる技術の獲得を目指しています。

P20

そこで、現在構造予測に必要となる”重合シミュレーター”を開発中です。本技術を用いることで、ポリブタジエンの成長挙動をとらえ、どのように重合が進行しているのかを把握することができ、ポリブタジエン構造の予測ができるようになります。従来、こうした重合反応はシミュレーションでの取り扱いが困難とされてきましたが、ENS社の強みである触媒・高分子化学の蓄積された知見とENEOSがこれまで培った技術を基に、これら課題を克服しました。

P21

最後に重合シミュレーターを適用し反応メカニズムの解明と構造予測に成功しています。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%未満で存在しているのに対し、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な知見となります。開発した重合シミュレーターをこの反応に適用したところ、構造比率の逆転は、触媒に接近したブタジエン回転のキーメカニズムであると解明でき、得られたポリブタジエン構造も実験比率と傾向を一致させられました。今後は本技術をより洗練させ、25年度以降に製品グレード開発へ活用していきます。

P23

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。また主力製品であるSSBR重合技術の改良などに本技術を横展開していきます。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。

P24

ENEOSのMI技術グループとENSでは担当者間の密な連携により成果が生まれてきています。これから継続し、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。

P25

関連する展示の紹介です。会場の右奥にMIとENEOSマテリアルの展示ございますので、ぜひ足を運んでみて下さい。

P26

ご清聴ありがとうございました。