

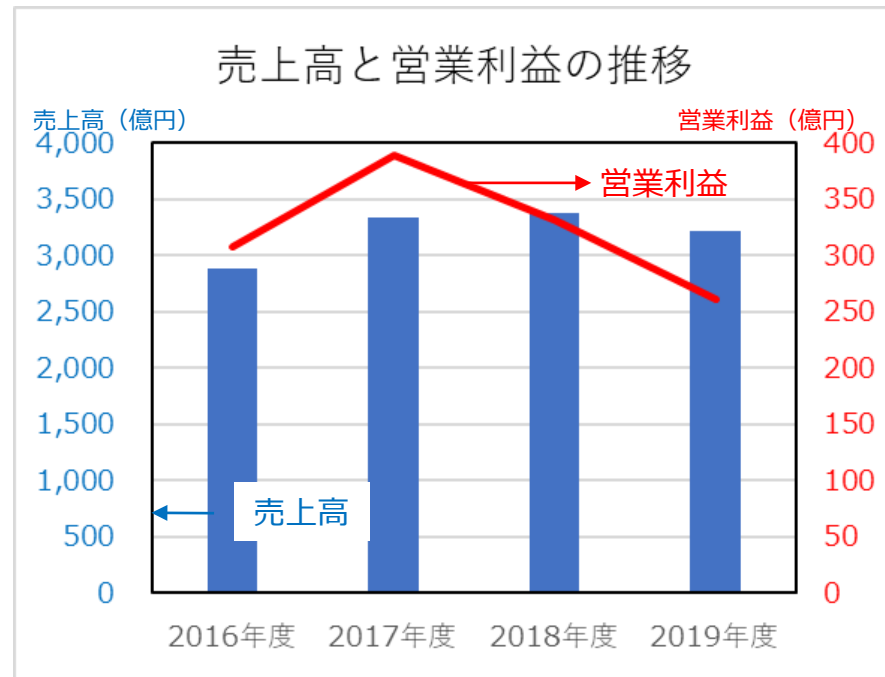
化学の力で未来を今日にする

ZEON

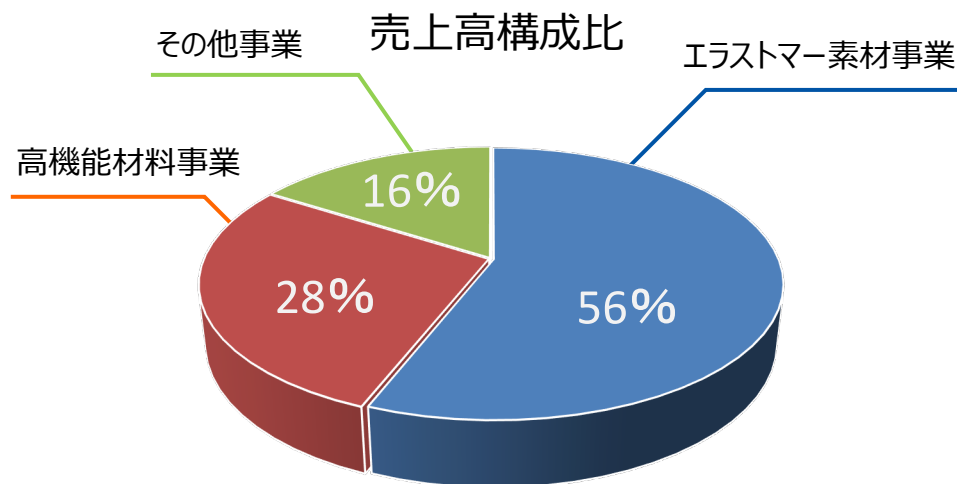
2021年6月

日本ゼオン株式会社

社名	日本ゼオン株式会社 (にっぽんぜおん) ZEON CORPORATION
設立	1950年4月12日
資本金	242億11百万円 (2020年3月末)
売上高	連結 3,219億66百万円 (2019年度)
従業員	連結 3,462名 (2020年3月末)



事業区分	主要製品等
エラストマー素材事業	合成ゴム、合成ラテックス 化成品 (C5石油樹脂、熱可塑性エラストマー等)
高機能材料事業	高機能樹脂、高機能部材 (光学樹脂、光学フィルム) エネルギー材料 (電池部材) I T 材料 (電子材料、表示材料) 化学品 (合成香料、有機合成薬品等) 医療器材、CNT材料
その他の事業	RIM配合液・成形品、塗料、加工品 ブタジエン抽出技術等



暮らしに役立つゼオンの製品群

ZEON



香水



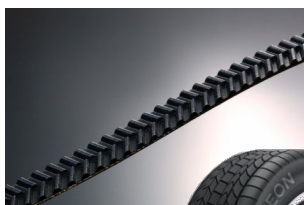
スマートフォン



医療部材



大型TV



自動車



半導体



リチウムイオン電池



デジタルカメラ



ゼオネクスの3つの特徴

優れた光学特性

不純物少

高い透明度

ZEONEX®

カメラレンズ

ZEONEX®



内蔵アンテナ

ZEONEX®



ZEONOR®

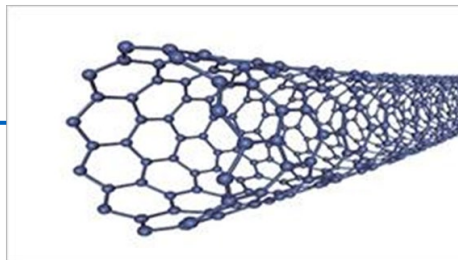
ゼオノアフィルム2つの特徴

優れた光学特性

世界初！
押し出しプロセス



SGCNT :
Super Growth Carbon NanoTube



様々な用途展開の可能性

エネルギー分野



- スーパーキャパシタ電極
- 二次電池電極材料
- 高性能熱交換器
- 太陽熱発電用熱吸収体
- 送電線

エレクトロニクス分野



- シリコン代替半導体回路
- フレキシブル電気回路
- パワー半導体用放熱体



高機能材料分野



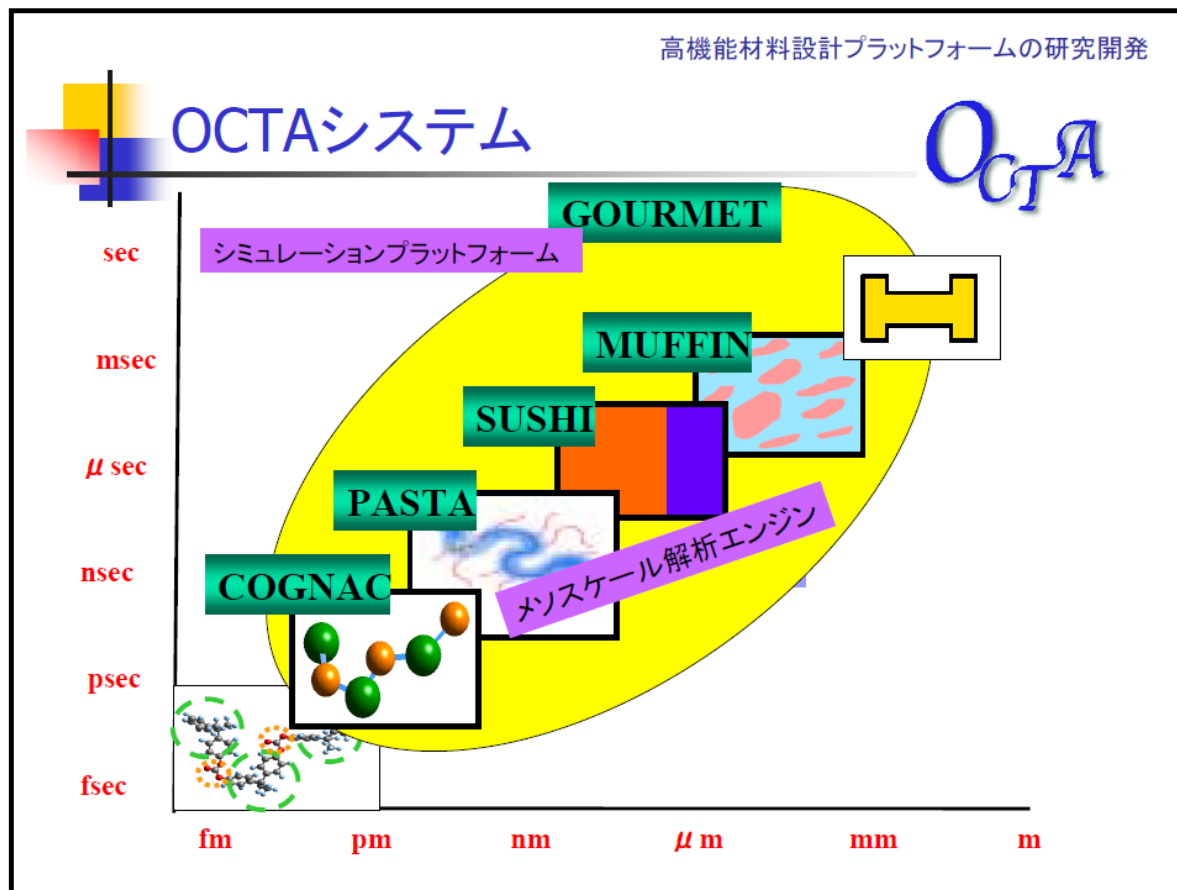
- 透明導電膜
- アクチュエーター
- 高導電性ゴムローラー
- 高温帯域粘弾性体

構造材料分野



- 自動車ボディ補強材料
- 航空機ボディ補強材料
- 風力発電用ブレード
- 高耐熱建築物免振ゴム

高分子を扱うためマイクロ⇒メソ⇒マクロと幅広く活用しています。



さらに、データサイエンス（マテリアルズ・インフォマティクス）の活用

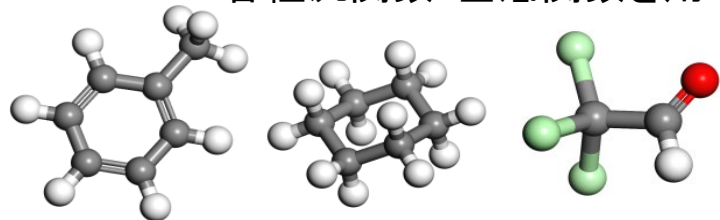
TSUBAME2.5（東工大スパコン）を用いた、量子化学計算による光学物性評価

量子化学計算とLorentz-Lorenz式より屈折率が得られる。

(L-L式)
$$\frac{n_\lambda^2 - 1}{n_\lambda^2 + 2} = \frac{4\pi \rho \cdot N_A}{3 M_w} \alpha_\lambda = \frac{4\pi}{3} \frac{\alpha_\lambda}{V_{mol}} \quad \therefore V_{mol} := \frac{V_{vdw}}{K_P}$$

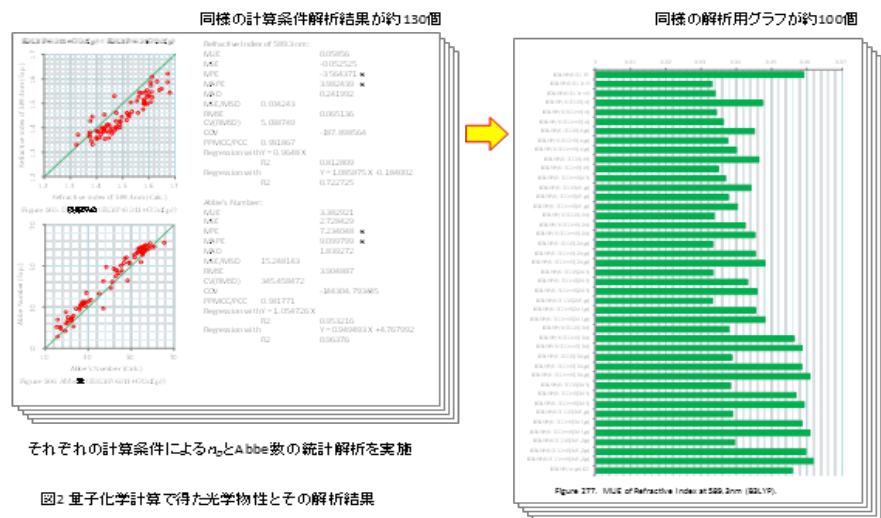
(Abbe数)
$$v_D := \frac{n_D - 1}{n_F - n_C}$$

589.3nm光の屈折率とAbbe数が知られている85化合物の最安定構造を作成、各種汎関数・基底関数を用いて計算条件の評価を試みた。



... (これら合計 85 化合物)

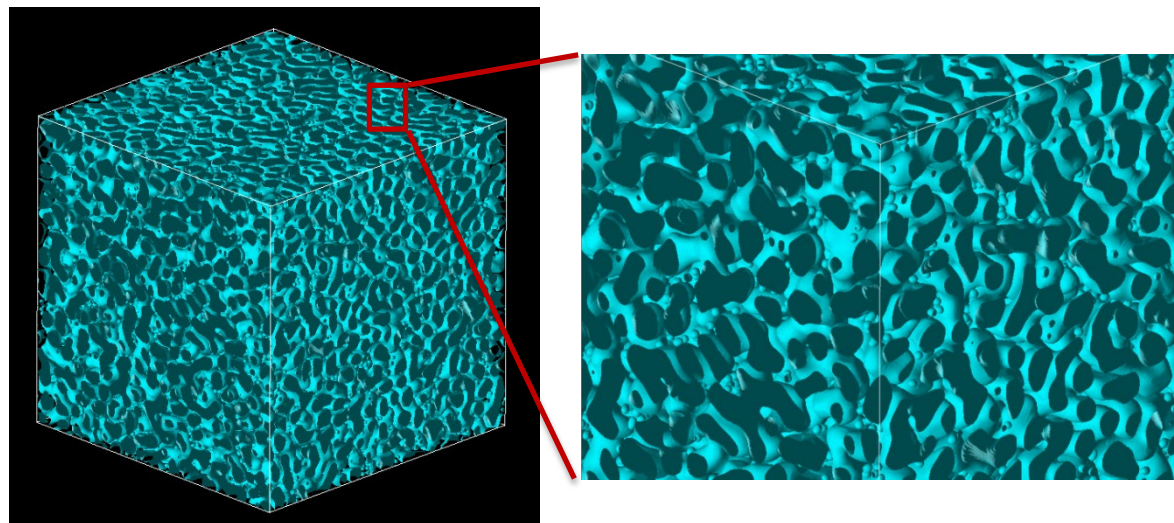
量子化学計算はGaussian09を用い、Perlにより各計算条件でのMSE, MUE, MAPE, RMSE等12種の統計指標を評価



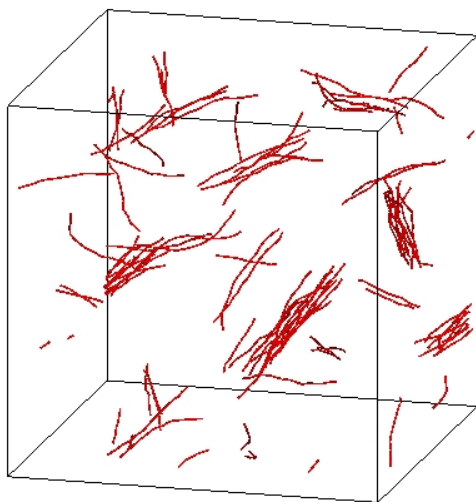
- ・合計 14,000 job以上の量子化学計算を評価、
- ・解析の結果、屈折率は±0.071、Abbe数は±5.3 (それぞれ95%信頼限界)の精度で推算可能になった

H.27 TSUBAME産業利用トライアルユース 成果報告書

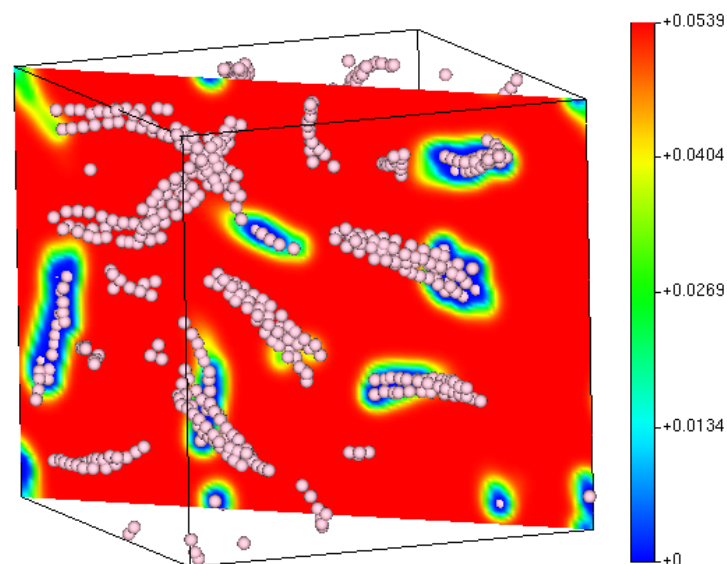
『京』を用いた、熱可塑性エラストマーの相分離構造の大規模計算

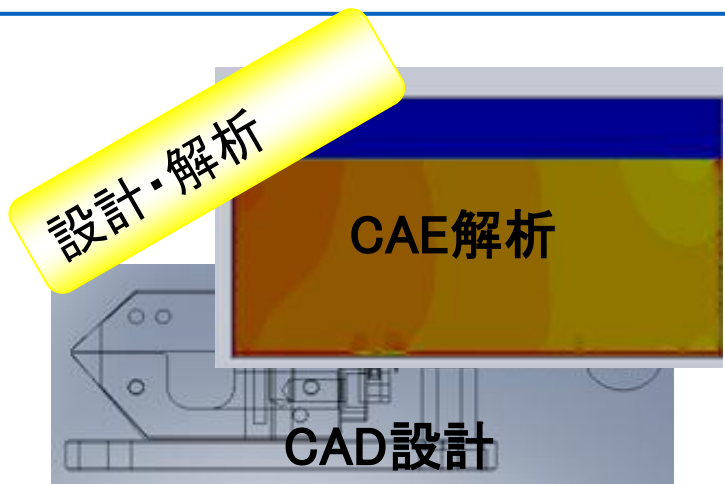


ポリマー中
CNTの分散
構造
DPD法



ポリマー溶液中
CNT周囲の
ポリマー濃度分布
DPD法+SCF法
ハイブリッド

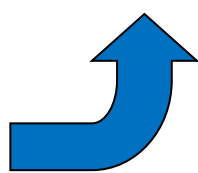
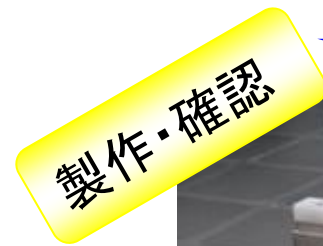
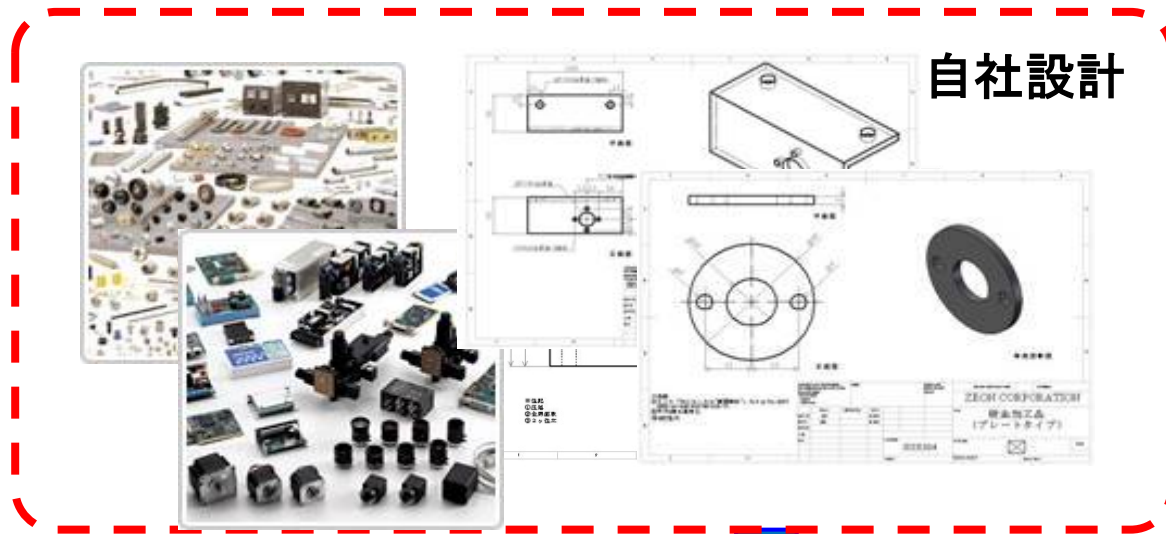
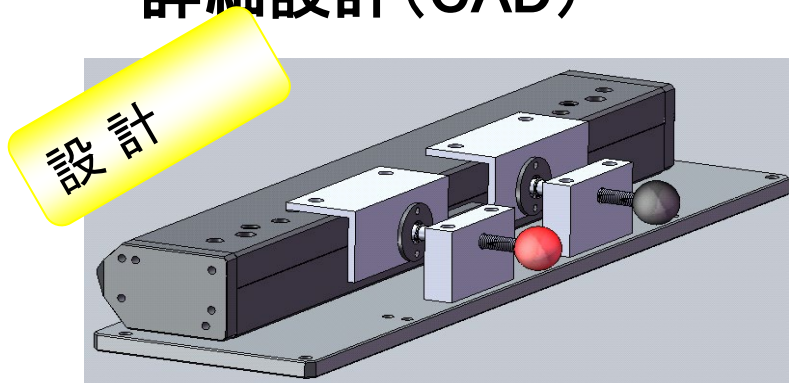




装置の基本設計



詳細設計 (CAD)



自社計算機を用いCAEを活用し成形加工プロセスを開発

少人数で多くのマシンを活用

ハードウェア

(Pythonによるプログラミング例)

```

100 DI.append(['1000000000', '-1', '0000010000' ])
101 DI.append(['1000000000', '-1', '-1' ])
102 DI.append(['null', 'null', 'null' ])
103 DI.append(['1000010000', '-1', '-1' ])
104 DI.append(['1000005000', '-1', '-1' ])
105 DI.append(['1000000000', '-1', '-1' ])
106 DI.append(['1000000000', '1000000000', '-1' ])
107 DI.append(['1000010000', '0000010000', '-1' ])
108 DI.append(['1000010000', '1000010000', '-1' ])
109 DI.append(['null', 'null', 'null' ])
110
111
112 #for n in range(0, len(DL)-1):
113 for n in range(0, len(DL)):
114     if not os.path.isdir("./+DL[n]"):
115         os.mkdir("./+DL[n]")
116         gf.write("./+DL[n]+\n")
117     if n == 0:
118         ddfn = "SV5LYP"
    
```



CPUマシン
(一部GPU)



CPUマシン
200コア



GPUマシン
2台



CPUマシン
1000コア弱

ソフトウェア

従来の計算科学用ソフト

PHASE
Gaussian
Amber
VASP
COSMOtherm
Materials Studio

MI用ソフト

R, Python (プログラム言語)

主成分分析、PLS、ランダムフォレスト、など基礎的手法
 各種有償GUIツール

研究体制の大部分が川崎の総合開発センターに集中 首都圏から通えます



- **業務内容に大きな自由度**
 - 今のご専門をベースに、個人の特徴を発揮する場があります。
- **実験との距離が近い**
 - 常時最新の実験情報に触れられ、シミュレーション研究の大きな助けになります。
 - 当社では計算屋は少数派であり、とても重宝されています。
- **計算機が豊富**
 - 一人あたりの計算機資源量が多く、マシンをほぼ占有出来ます。

- 興味ある方は、個別相談ブースにて詳しく話しましょう。
- 具体的テーマは個別相談しますが、自ら課題を設定出来る方希望します。

例えば：

- 研究開発(実験)データへのMI活用
- プロセスデータからのデータ解析用の特徴量抽出
- 計測インフォマティクス(各種スペクトルデータ、SEM画像データなどの評価・計測データの活用)
- 電子状態計算による反応機構解析

など。

シミュレーション・データ解析をメインに、具体的なテーマはご本人の希望を元に個別にじっくり相談し決めて行きます。