

参照触媒のデータ集積

片 田 直 伸*

「参照触媒利用の手引第5版」には参照触媒を利用した論文発表などのデータシートが附属し、所望の測定値が記載された文献を探することができる。本解説では(1)その利用方法の案内、(2)情報提供の呼びかけ、(3)データから見た参照触媒の貢献、を記す。

1. 参照触媒制度におけるデータ集積の意味

触媒学会の参照触媒は世界に類を見ない制度で、会員は無償で配布を受けることができる。利用者が物性値などを発表するので、同じ触媒の物性値などを文献から参照できる。このためには、価値のある触媒の品揃えと、物性値などの情報を集め、提供することが必要である。情報提供の側面が忘れられがちであるが、本稿ではその重要性と方法を解説する。

1979年、日揮(当時)の松本英之博士の提案¹⁾で参照触媒制度が始まった。当時発表され、いまま変わらぬポリシーを引用する。

「…当分の間は、サンプルの郵送費等一切無料で行います。…利用の目的は参考程度にお知らせ下されれば結構です。ただし利用された方は、本結果を発表される際に、触媒学会参照触媒を使用したことを明示願います。それ以外に特にオブリゲーションをつけません…この制度は、会員の皆様が、それぞれいろいろな角度から実験をやって情報を出しあうことで、意義がでてくるものでありますので、発足にあたり皆様の積極的な活用とご理解、ご協力をお願いいたしておきます。…委員会では、こうして集められた情報をまとめて、データ集を編集していく予定です。」²⁾

以来32年間、無償で配布を継続できた背景には、つぎの寄与があった。

(1) 触媒工業協会、大倉理研(現ヘンミ計算尺)からの強力な財政支援

(2) 「参照触媒利用の手引」の売上

これらによって参照触媒部会は支出を上回る収入を上げ続けており、試料配布やプロジェクト活動の経費を賄うば

かりか触媒学会本体に事業収入をもたらしている。

(2)の収入をもたらす「手引」について解説する。参照触媒そのものは無償で配布されるが、「手引」は有償である。ただし成果を報告すると次版の「手引」が無償で配布される。「手引」には原則としてデータそのものは載っていない。代わりに参照触媒を利用した論文のリストがキーワードとともに記載され、読者はこれを利用して元の測定値にアクセスできた。このための成果報告もデータそのものではなく、発表した論文の書誌事項などを報告してもらってきた。このデータと成果報告の形式が「手引第5版」(2011年3月発行)³⁾から大きく変わった。筆者は参照触媒部会の幹事として使用申込や成果報告をオンライン化し、「第5版」のデータシートの編集に携わったので、解説するとともに利用を呼びかけたい。

2. データの探し方

「第5版」付録CD-ROMのindex.htmlというファイルを開くと、Fig. 1の画面が現れる。このページを下へたどってゆくとFig. 2のようになり、一番下に「参照触媒を用いた論文・発表 データシート」へのリンクが現れる。ここをたどってゆくとFig. 3のようなMicrosoft Excel 2003形式のファイルが現れる。同じ内容のテキストファイルもある。

この表の左から6列は書誌事項で、著者、題目、雑誌名、巻、ページ、西暦年の順に並んでいる。最初の状態では雑誌名のアルファベット、巻、ページの優先順位でソートされている。右へゆくと登場する参照触媒が記録されている。ただしその触媒が登場する場合には該当する欄に「1」の数字が入っている。さらに右にゆくとFP列(172列目)に「掲載されている触媒反応、キーワードなど」が現れる。この欄には、触媒反応のデータがある場合に反応の名前が文字列として記録されている。続いて「掲載されているキャラクターゼーション、測定」が記録されている。例えばFQ列(173列目)は「XRD」で、XRDの結果が収録されている論文には該当する欄に「1」が記されている。キャラクターゼーション・測定の種類はICP, AAS…酸性性質、塩基性質、OH基まで続き、やや内容が異なるが乾



* NAONOBU KATADA

鳥取大学教授(正会員)

〔最終学歴〕1990年名古屋大学工学研究科博士前期課程修了。博士(工学)。〔専門〕固体触媒化学。〔趣味〕工作、旅行、料理、百人一首。〔連絡先〕〒680-8552 鳥取市湖山町南4-101 Fax: 0857-31-5684 E-mail: katada@chem.tottori-u.ac.jp(勤務先)

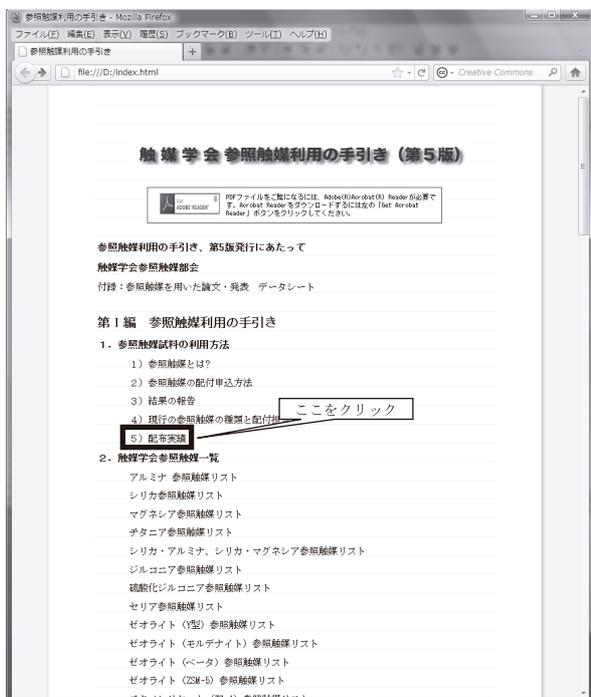


Fig. 1 The first page of the guidebook of reference catalyst, 5th edition. The entrance of datasheet of distribution record is shown.

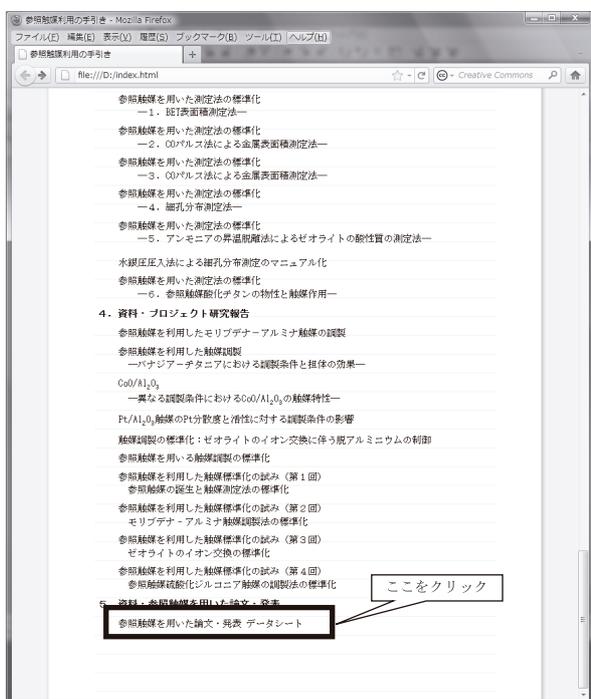


Fig. 2 The bottom of first page of the guidebook of reference catalyst, 5th edition. The entrance of datasheet of publications is shown.

Fig. 3 Table of publications including information on reference catalysts.

Table 1 Words which can be used as keywords for finding a specific datum.

XRD, ICP, AAS, XRF, XPS, XAFS, XANES, SAXS, NMR, TG, DTA, DSC, Raman, UV-vis, SEM, TEM, EPMA, CO IR, NH₃ IR, NO IR, ピリジンIR, その他IR, Ar吸着, CO吸着, H₂吸着, N₂吸着, NO吸着, O₂吸着, 炭化水素吸着, ベンズアルデヒド吸着, ベンゼンフィルドポア, その他吸着, 粒子径, 表面積, 細孔容積, 細孔径, 拡散, 形状選択性, 外表面積, 金属表面積, 金属分散度, 触媒有効係数, 耐熱性, 活性劣化, 担体露出表面積, BAT法, H₂TPR, CO TPR, その他TPR, NH₃ TPD, CO₂ TPD, Ar TPD, H₂TPD, O₂TPD, その他TPD, TPO, NH₃カロリメトリー, その他カロリメトリー, NH₃吸着熱, その他吸着熱, 酸化状態, 酸性質, 塩基性質, OH基, 乾燥, 高温焼成, 前処理, 還元, 酸化, 不純物, 含浸法, CVD, イオン交換, 担体

Fig. 4 Found papers including “JRC-ALO-4” and “surface area”.

燥, 高温焼成など処理による変化, CVD, イオン交換, 担体など特定の用途における結果も記されている (Table 1). 最後にその他のキャラクターゼーションがあれば文字

で記されている。最後の欄には、2010年3月以前に記録されていたキーワードもそのまま記載されている。また、例えばNH₃ TPDが収録されている場合には原則として「NH₃

TPD」欄と「酸性質」欄の両方に「1」が記されている（原則を外れた記載も少なくないが）、ふつうNH₃ TPDは酸性質の測定のために行う実験であり、どちらのキーワードで検索しても行き当たるようにするためである。

所望のデータにたどり着くのは簡単である。例えばJRC-ALO-4の表面積を知りたかったら、データ全体を選択し、GX列「表面積」を第一、K列「JRC-ALO-4」を第二の鍵としてソートする。するとFig. 4の4～12行に記した9つの論文が該当することがわかる。

これらの基となったデータについて記す。2010年3月以前のデータについては、書誌事項とキーワードが参照触媒部に報告されており、以前の「手引」に表として掲載されていた。これらのデータを今回の改訂にあたって筆者がデータシートに入力し直した。ただし「掲載されているキャラクターゼーション、測定」はキーワードなどから推測して入力した。2010年3月以後に報告されたものは、後述のようにweb上の成果報告フォームから報告者自身によって選択入力されたものである。したがって情報に抜け落ちがあると思われるが、今後、発表者自身による報告が増えるにしたがって正確さが増すはずである。

3. 成果報告の方法と呼びかけ

前項のような検索方法をより役に立つようにするためには、皆さんの報告が不可欠である。今版の改訂に備えてwebページから気軽に報告できる方式をスタートし、既に案内した。報告は「手引」の改訂のタイミングに合わせる必要はなく、いつでも受け付けているので、論文などが発表されたら忘れずに報告願いたい。

報告はhttp://www.shokubai.org/com/sansyo/rep1.htmlから行う。ここを開くとFig. 5の画面が表示され、報告者の氏名などと書誌事項を入力できる。

報告者の氏名などは、報告された方に次版の「手引」を無料で提供するために記入してもらうもので、義務ではない。また、論文の著者本人だけが報告できるわけではなく、どなたでも参照触媒について書かれた文献を目にした方が端から入力して下さってかまわない。

書誌事項のうち、雑誌名(学会名)は選択式で、並んでいる選択肢からチェックして選ぶ。

下に移るとFig. 6のようになっており、登場する参照触媒を選ぶ。検索でなるべく行き当たるように、少しだけ出

Fig. 5 First part of the report submission form.

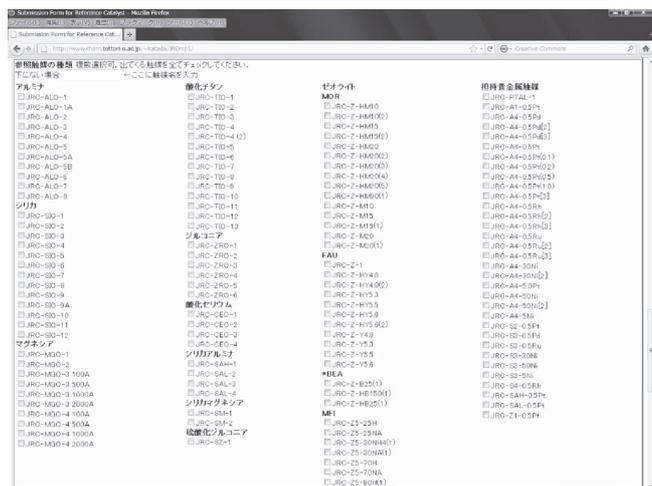


Fig. 6 Second part of the report submission form.



Fig. 7 Third part of the report submission form.

てくるだけでも記入してほしい。

さらに下に移ると触媒反応とキャラクターゼーションなどデータの種類を入力する画面 (Fig. 7) となる。触媒反応は多岐に渡るので、文字で入力する。キャラクターゼーションなどは選択肢から選ぶようになっている。これも該当する項目は全て記入してほしい。

以上のように、文字の入力が必要な箇所はごくわずかで、ほぼクリックと数字の入力だけで完了するようになっている。このようなシステムやデータベースの整備を、我々はボランティアで行ってきた。データの報告は参照触媒利用者の唯一の義務であり、また参照触媒制度を有意義なものとする重要なステップなので、論文が出版されたら必ず報告願いたい。

4. 配布実績と研究成果

「手引第5版」付録CD-ROMの目次の「配布実績」(Fig. 1) をクリックすると、記録が残っている限りの各種触媒の配布件数の一覧が現れる。同じものはweb⁴⁾からも得ら

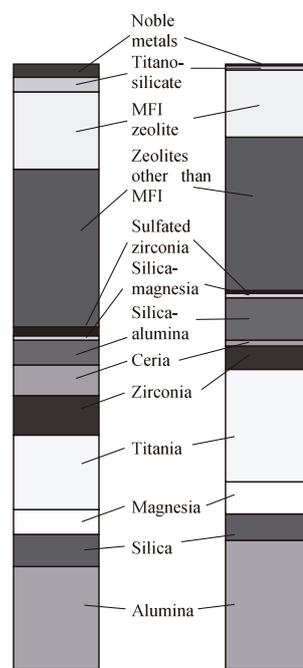


Fig. 8 Relative numbers of distributed reference catalysts (left) and reports dealing with them (right) during 2000-2010.

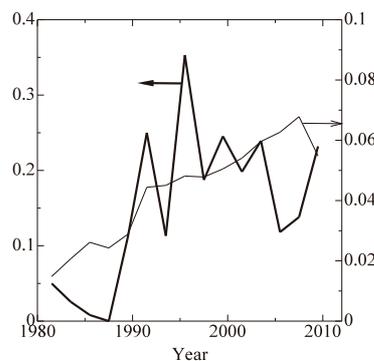
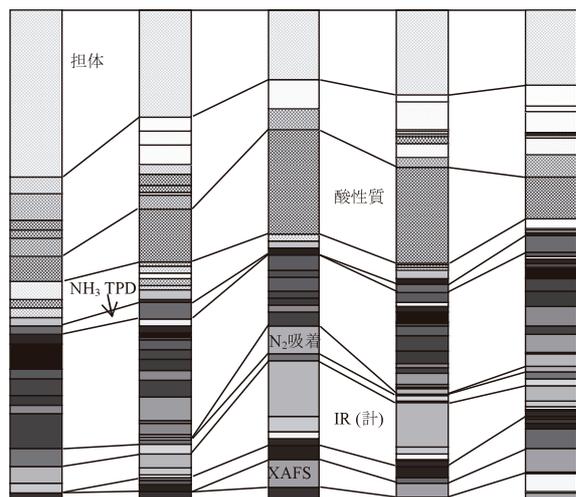


Fig. 9 Ratio of numbers of reported data about titania/all reference catalysts (thick line). The ratio of numbers of scientific literatures about titania/catalysts based on Web of Science is overlapped (thin line).

れる。1999年以前の記録には抜けているところがあるが、2000年以後については記録が完全である。近年は年間200~400件の配布が行われている。2000~2010年の配布件数の割合を物質別に示すと (Fig. 8, 左), ゼオライト, アルミナ, 酸化チタンが非常に多い。

一方、同時期に発表された研究成果の件数を「参照触媒を用いた論文・発表 データシート」から抽出するとFig. 8 (右) のようになり、アルミナや酸化チタンについては配布件数の割合以上に盛んに成果が発表され、かつ正しく報告されていることがわかる。他の分野の研究者にも積極的な発表と報告をお願いしたい。

Fig. 9には発表されたデータのうちで酸化チタンに関するものが占める割合の推移を太線で示した。1990年代前



1980-1984 1985-1989 1990-1994 1994-1999 2000-2004

Fig. 10 Relative numbers of reported data in different fields.

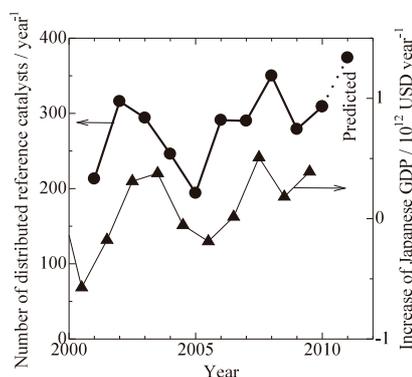


Fig. 11 Number of distributed reference catalysts (●) and increase rate of gross domestic product (GDP) of Japan (▲). ● shows the number of catalysts only for usual purposes, but exceptional distributions for joint research projects are excluded. ● at 2011 is the value extrapolated from the number of distribution from January to August of 2011.

半に最大値を示した。一方、世界の触媒に関する文献中の酸化チタンに関するものの割合⁵⁾を細線で示すと最大値は2000年代後半に現れた。図示は省略するが、アルミナやゼオライトでも参照触媒での最大値が数年早く現れた。それぞれの触媒の初期の研究に対する参照触媒の貢献を示

している可能性がある。

Fig. 10にはキャラクターゼーション・測定などの件数の割合の推移を示した(最近の6年間はデータ収集方法の変更による影響が大きいため省いた)。1980年代後半にNH₃ TPD, 1990年代前半にXAFSの発表が目立ち、1990年代に酸性質とIRの研究が盛んであったことになる。またメソポーラス物質の研究がポピュラーになる直前の1990年代前半に決して少なくないN₂吸着のデータが報告されている。一部について文献検索と比較したところ、これらの動向はそれぞれの文献数の推移と似ているようである。

最後に根拠は薄い前向きな考察を示す。Fig. 11に参照触媒の配布数(●)と日本の年間GDPの増加額の推計値の一つ(▲)⁶⁾を重ねてプロットした。●と▲は同じような傾向を示しており、参照触媒の利用が盛んであるとき、景気の上昇が同時に起きるようである。研究開発投資が本当に参照触媒の利用に反映しているかも知れない。●の最後の一点は2011年1月1日から8月20日までの配布件数を外挿した、2011年の配布数の予測値である。史上最高の配布件数となることが予測される。

文 献

- 1) 松本英之, 触媒, 20, 348 (1978)
- 2) 触媒学会参照触媒委員会, 触媒, 21, 62 (1979)
- 3) 触媒学会参照触媒部会, 参照触媒利用の手引第5版, 触媒学会 (2011)
- 4) <http://www.shokubai.org/com/sansyo/jisseki/>
- 5) Web of Scienceにて, catalystをキーワードとして抽出される文献数を分母に, その中でtitaniaで抽出される文献数を分子とした。
- 6) 世界銀行, <http://data.worldbank.org/>

Data Collection of Reference Catalysts. Naonobu KATADA (Department of Chemistry and Biotechnology, Graduate School of Engineering, Tottori University, 4-101 Koyama-cho Minami, Tottori 680-8552, Japan)

A datasheet is attached to "Guidebook of Reference Catalyst, 5th edition". It contains a list of publications dealing with the reference catalysts. One can easily obtain the paper which describes necessary information about the reference catalysts using this datasheet. This article introduces a method to use it. The reference catalyst division invites the readers to report their publication records to improve the data. Contributions of the reference catalysts to the society are also explained.

Key-word: Reference catalyst

(©2011 Catalysis Society of Japan)