

| | | |
|-----------------------------------|---|--|
| 発表題目 | C1 触媒反応データベース 工業触媒反応のデータベース化 | |
| 発表者 (所属) | 佐々木 基・伊藤 建彦・濱田 秀昭 (工業技術院 物質工学工業技術研究所) | |
| 連絡先 | 〒305-8565 つくば市東 1-1 物質工学工業技術研究所 TEL 0298-61-4684 FAX 0298-61-4487 (代表) E-mail m.sasaki@home.nimc.go.jp | |
| キーワード | Database, catalyst reaction, C1 chemistry | |
| 開発意図 適用分野 期待効果 特徴など | C1 触媒反応データベースを構築し, 触媒反応結果のデータベース化の有用性および課題などを明らかにする. | |
| 環境 | 適応機種名 | |
| | OS 名 | |
| | ソース言語 | |
| | 周辺機器 | |
| 流通形態 (右のいずれかに をつけて ください) | <ul style="list-style-type: none"> ・化学ソフトウェア学会の無償利用ソフトとする ・<u>独自に頒布する</u> ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 ・未定 | <p style="text-align: center;">具体的方法</p> |

1. はじめに

近年のコンピュータ及び理論化学の進展に伴い、材料のデータベース化についてはかなり研究が進んでいる。また、反応のデータベース化に関しても、特に薬品開発などの分野での進展はめざましい。しかしながら、触媒反応のデータベース化に係る研究は、一部で動きはあったが現在にいたるまであまり進展していない。その原因としては、触媒反応に関する理論的解明が、特に不均一触媒反応では対応する実験データを定量的に示せるまでには進展していないこと、反応条件が複雑なため網羅的にデータを集める方法および必要性がなかったこと及びノウハウ等の知的財産権の問題があって得られたデータの公開が困難であることなどによると考えられる。本研究は通商産業省の大型プロジェクト「一酸化炭素を原料とする基礎化学品の製造方法」(S55～61FY)において取得された各種触媒反応データ及び関連資料をデータベース化し、インターネット上で公開することを目的とした、触媒反応に関する初めての大規模公開データベースである。この開発にあたっては、インターネットの普及により、容易にデータを公開できる状況が整ったこと以外に、ノウハウ等の知的財産権保持の必要性が年月経過により薄れてきたことも背景にある。

本プロジェクトは石炭等を原料として容易に得られる合成ガスからの基礎化学品の新合成体系の確立を目指して発足したものであり、その開発にあたってのキーテクノロジーはそのような新規プロセスに対応できる触媒の開発であった。C1 化学に関する研究は、本プロジェクト終了後一時的に縮小に向かう傾向はあったが、資源再生・劣悪資源の有効利用等の観点から、現在再び脚光を浴びつつあり、本プロジェクトの成果を波及すべき研究開発が今なお数多く存在する。

2. 概要

触媒反応の解析には、通常の化学反応で考慮される原料組成・反応温度等の反応に関する条件以外に、触媒調製条件、前処理条件、流速・装置形式等々の物理的・システムのなパラメータ、及び経時変化等を考慮する必要がある。本データベースで取り扱った反応は、

- ・合成ガスからのエチレングリコールの合成（均一系触媒）
- ・合成ガス及びメタノールからのエタノールの合成（均一系及び不均一系触媒）
- ・合成ガスからの酢酸の合成（不均一系触媒）

のわずか3種類（原料では2種類）であるが、図1に示すような多岐に渡る反応条件の検討が必要であり、結果として約37,700件の実験が登録されている。本データベースは26枚のテーブルからなる関係データベースとして構築し、

均一触媒反応と不均一触媒反応のようにまったく性格の異なる反応を、1つのデータベースの中に保存することが可能。生成物の種類が異なる反応について、データベースの構造を変更することなく処理可能。特に副生物に関しては1つの反応で多いもので70種類の生成物の定量データも中にはあるが、特に困難なくデータ処理ができた。テーブルを追加・関係を再構築することにより将来のデータ構造変化などにも対応可能。などの特徴を有している。

しかしながら、データテーブルが多すぎるため、この構造では標準的な検索が実用的な時間内で行えなかった。そこで、検索ルーチンではデータテーブルの抜本的な構成変更を行い、複数のテーブルを合成して再構築した数枚のテーブルを基に動作するものに改めた。なお、本データベースは<http://WWW.aist.go.jp/RIODB/c1db/>にて公開している。

また、本データベースはこれらの反応に関する触媒を網羅的に含むとは言い切れないので、当時の触媒設計の思想やデータ化しきれない細かい情報に関して、使用された資料・スペクトルなどを全文・画像データベースとして整備した。また、時代および研究テーマによって分類できる月報、成果報告書に関しては、カレンダー形式で目次検索もできる仕様とした。あわせて、関連文書と数値データを関連づけるため、文書中にでてきた実験番号、触媒番号等から反応を検索できる仕様にした。

3. 今後の展開

近年、コンビナトリアルケミストリーを触媒反応に適用する等の動きもあり、触媒反応のデータベース化の必要性は増大している。本データベースで、基本的には関係データベースで汎用触媒データベースの開発

が可能であることが確認できた。今後、多くの触媒反応について、ある程度以上の量のデータベースが構築されれば、帰納的ではあるが触媒反応の定量的な数式化の可能性が出てくると思われ、理論的研究の推進にも貢献できると考えられる。併せて、これらの結果を知識ベース化、AI化することにより、従来経験や直感に頼る部分の多かった触媒設計を情報科学的に利用できる可能性がある。



| 整理項目 | 実験条件 | 実験結果 |
|------|---------------------|----------------------|
| 実験日 | 反応種類（気相/液相、バッチ/フロー） | コメント1（色、沈殿など） |
| 実験番号 | 反応条件(温度、圧力、経過時間) | コメント2（分析条件など） |
| 触媒番号 | 原料(組成・流量) | 収量（生成物、量および単位） |
| 装置番号 | 触媒希釈材(種類、量および単位) | 選択率(生成物、量および単位) |
| 著者名 | 触媒前処理(条件、温度、時間) | STY(生成物、量および単位) |
| | 担体もしくは溶媒(種類、量および単位) | Turnover(生成物、量および単位) |
| | 触媒前駆体(物質名、量) | 触媒分析結果 |
| | 触媒調製条件 | |

図1 C1触媒反応データベースで検討している反応の条件