

固体触媒材料の「同定」

有機化学の分野では、報告する有機化合物を同定しないと論文は受理されないのが常識である。ほとんどの有機化学分野の雑誌では、理論（予想）値と比べて0.5%以内で一致する元素分析結果とNMRパターンの提示が最低限必要。元素分析は化合物の元素組成を、NMRパターンは化合物の骨格構造を表す。この二つがわかれば、その化合物分子の構造を決定して、その構造を一義的に表す（ユニークな）名称を付けることが可能となる。つまり「同定」とは命名できるということである。

では固体触媒の分野ではどうか。これまで一度も触媒材料が同定されたことはないと言言できる。これは、「同定しないですませている」わけではなく、「同定が困難」なので「しかたなく」である。IUPAC（国際純粋応用化学連合）の勧告に準拠して編集された「化合物命名法」¹⁾によれば、「（無機化合物の）固体の詳細な構造を完全に体系的名称によって構築することは困難である」とある。命名が困難だから当然同定も困難。つまり、固体無機化合物の同定は免責されているのである。

なぜ、固体材料の同定が困難かというと、その構造を詳細に記述できないから。かろうじてわかるのは元素組成だが、組成と構造を推定できるのは、結晶部分だけで、X線回折パターンにピークを与えない非結晶成分については、全く不明。たとえば、バルク構造を決定できたとしても、表面構造を記述するのはあきらめざるを得ない。それは、その表面構造を普遍的に記述する手段がなく、それができても、その分布、さらに、異なる表面構造の接続の仕方

の記述も必要だと、きりが無い。そのうえ、固体バルクあるいは表面のサイズとその分布というパラメータも記述する必要がある。と考えれば、IUPACが「命名することは困難」とするのも当然である。

そもそも有機化学の分野で同定が必須になったのは、「同定しないで議論が行われたために混乱が生じた」ことに起因するのは想像にかたくない。固体触媒の分野で考えてみると、「同定しないで議論されているために混乱が生じている」はずだが、それに気づいてないだけである。逆にいえば、我々が論文を投稿できるのは、「同定しないおかげで議論が可能になっている」かも知れない。

かつては赤外線吸収スペクトル（IR）の「指紋」領域が同定に使われていたこともある（NMRパターンも一種の「指紋」）。それなら、固体無機化合物のバルク構造、表面構造およびサイズを反映する「指紋」があれば、たとえ詳細の構造を名称として記述できなくても、「同定」できるかもしれない。我々は、無機（半導体）固体の「指紋」となるパターンを測定・解析する新規手法を開発した²⁾。これで、触媒材料も同定できるが、ご安心あれ。これはあくまで構造を反映する「指紋」にすぎないので、その構造そのものについての解析と議論の余地は「たっぷり」残されている。

（大谷文章）

文 献

- 1) 日本化学会命名法専門委員会編、化合物命名法：IUPAC 勧告に準拠、東京化学同人（2011）。
- 2) A. Nitta *et al.*, *Catal. Today*, 2, 321-322（2019）。