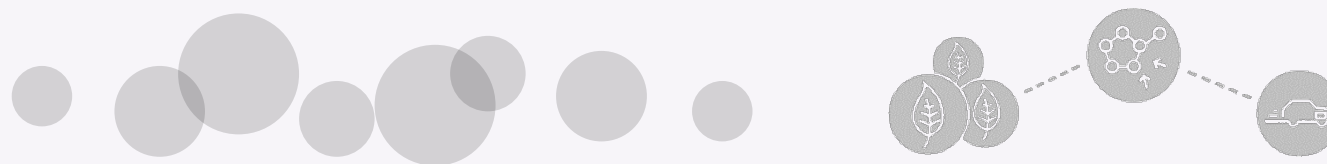


触媒研究の進め方について (戦術に関する基本的な考え方)



Masanori Yamamoto¹

¹Tokyo Institute of Technology
Department of Chemical Science and Engineering

本日の内容

1. データの取得と整理に関して

- 1-1. なぜ、系統的な結果の取得が良いのか
- 1-2. どのようにデータ精査を行うとよいのか？
- 1-3. どのように結果をまとめるべきなのか

2. 今後の方針

- 2-1. 実験方針
- 2-2. 分担方針とベンチマークの重要性について
- 2-3. 総論（D論でいうところの序論）のまとめ方
- 2-4. 図案について

1. データの取得と整理に関して

Q. なぜ、系統的な結果の取得が良いのか

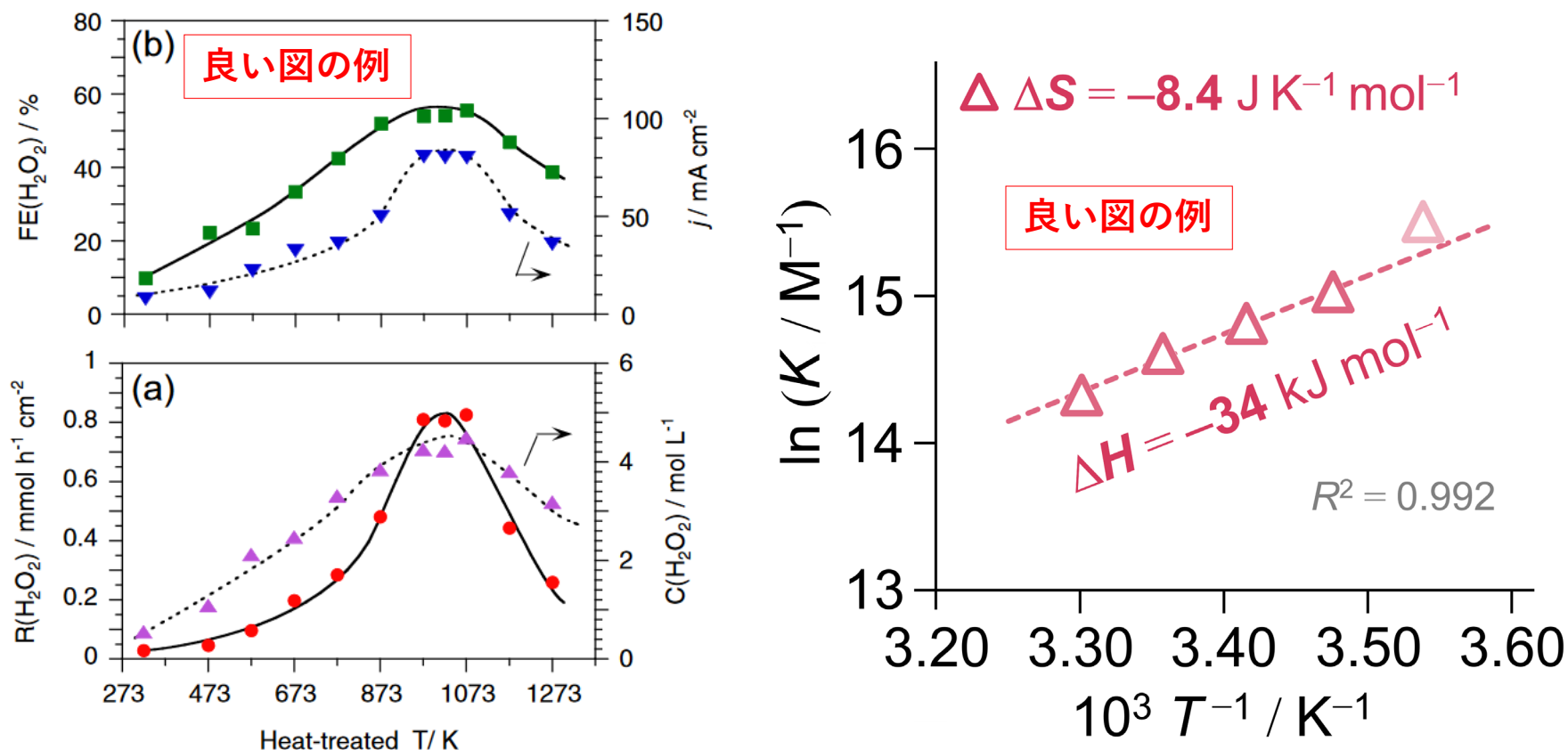


Fig. 3 Effects of heat-treatment temperatures of CoTPP/KB-electrocatalyst precursor on the H_2O_2 synthesis at 278 K. **a** Formation rate ($R(\text{H}_2\text{O}_2)$) and concentration ($C(\text{H}_2\text{O}_2)$). **b** Current density (j) and faradic efficiency ($\text{FE}(\text{H}_2\text{O}_2)$)

N. Yamato *et al.* *Chem. Commun.* **2022**, 58, 12106–12109

1. データの取得と整理に関して

Q. なぜ、系統的な結果の取得が良いのか

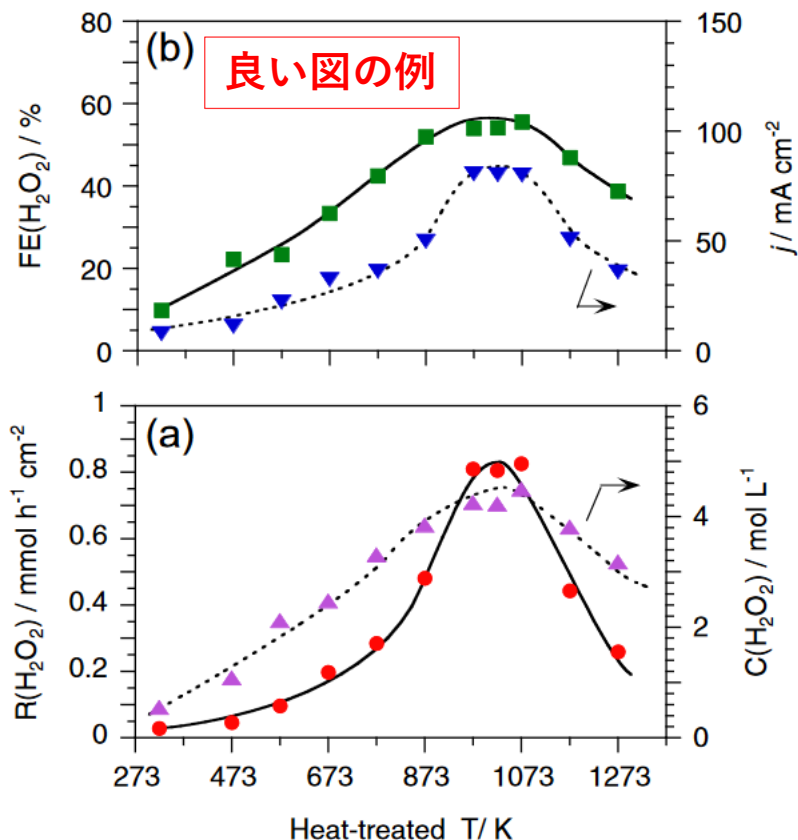


Fig. 3 Effects of heat-treatment temperatures of CoTPP/KB-electrocatalyst precursor on the H₂O₂ synthesis at 278 K. **a** Formation rate ($R(\text{H}_2\text{O}_2)$) and concentration ($C(\text{H}_2\text{O}_2)$). **b** Current density (j) and faradic efficiency ($\text{FE}(\text{H}_2\text{O}_2)$)

A) もし結果のばらつきが大きい場合は、そもそも傾向が見えないはず
→系統的に傾向が見えているということが、**客観的に「再現性を担保」している** (=審査する人、読み手も安心する)

B) 系統的に評価すれば、**メッセージが明確になる**。たとえば左の図であれば「熱処理の温度は1000 K付近がベスト」という主張の実験的根拠になる。

良い研究は、系統的な検討により明確なメッセージをたくさん演繹している。そういう仕事を我々も心がける。

重要なのはしっかり研究を進めないといふこと。この種の図は取得できないということ。

系統的な図がある=しっかり研究している

1. データの取得と整理に関して

Q. どのようにデータ精査を行うとよいのか？

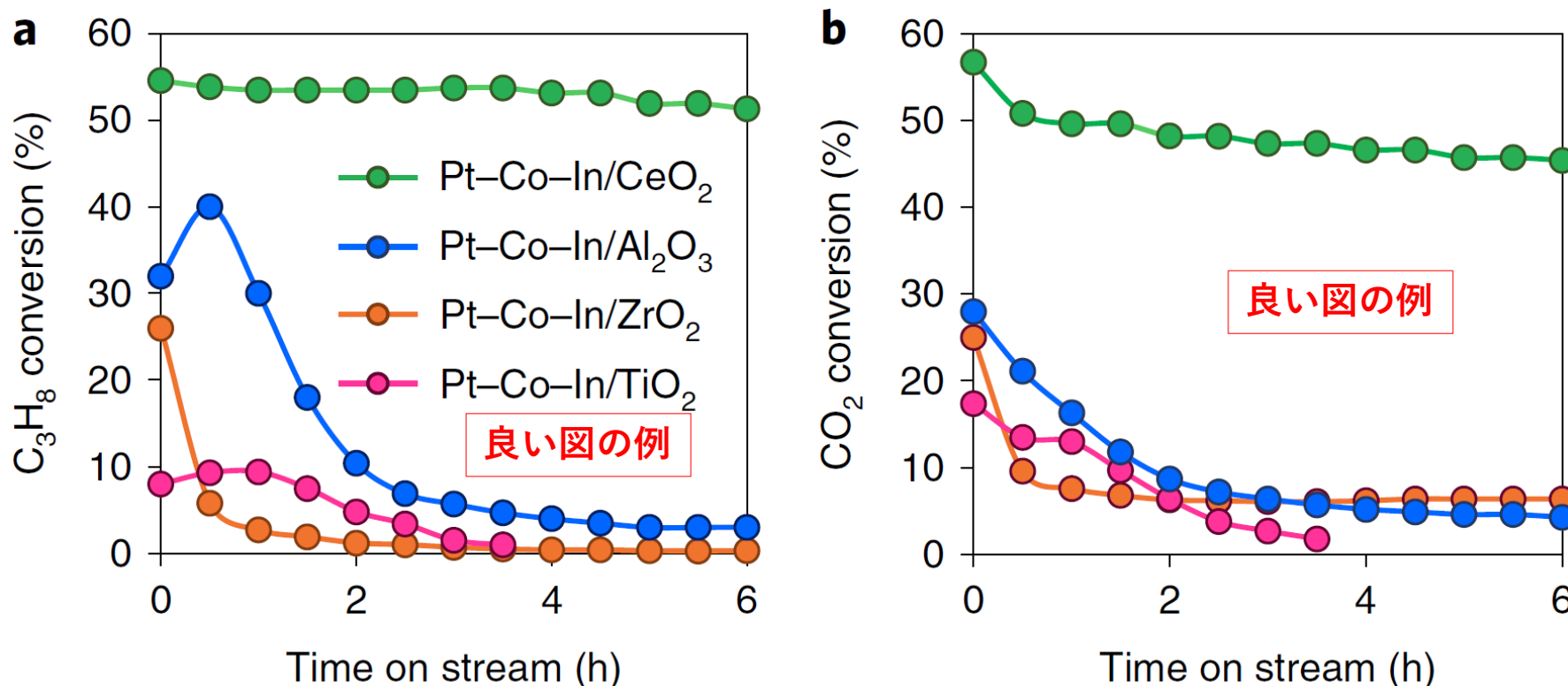
A. 結果を比較して結論を演繹する→その繰り返し

- **思い込みを排除して、データに基づいた議論を徹底**する
(当たり前のように思えるが、わりとできない人が多い)
- 比較の前提条件は「他の条件は全て同じで一か所だけ条件が違う」こと。注意して条件設定しなければ比較できない。
- また、比較のためには「再現性」「小さなばらつき」の担保が必要
(つまり再現性がない場合はデータを蓄積しても完全に無駄になるので、その段階で**一度立ち止まる必要がある**)
- 比較は「誰が見ても同じ結論が演繹される」ようにクリアであるべき。そのためには**「一つの図で比較する」**のがベスト
スライドを前後しなければ比較できないというのは論外。

1. データの取得と整理に関して

Q. どのように結果をまとめるべきなのか

A. 「同じ1枚の図」あるいは「一枚の表」で議論する(これを徹底)



S. Furukawa *et al.* *Nat. Catal.* **2022**, *5*, 55–65

スライドを前後しなければ比較できないというのは論外

1. データの取得と整理に関して

Q. どのようにデータ精査を行うとよいのか？

A. 研究は「客観的に」「誰が見ても」「明確に」結論が演繹されるべきはず。最初のデータ精査段階では、「他の研究者にデータを明確に説明できる」プレゼンテーションが不可欠。

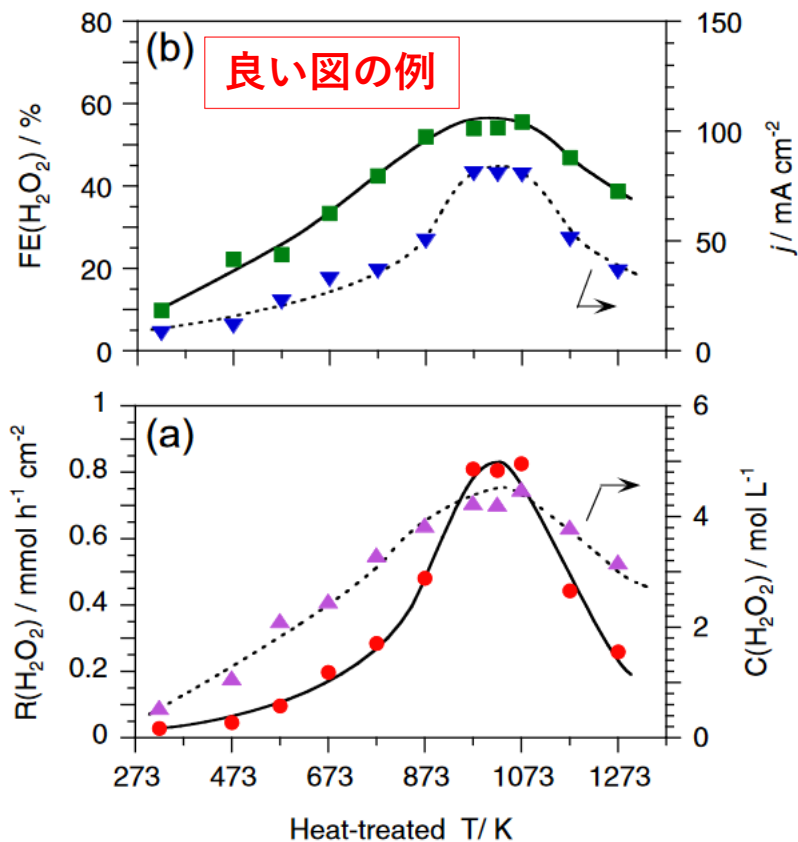
実験するのも大事だが、その結果を整理して「客観的に結論が明らかになるプレゼンテーションを構築する」のも同じくらい重要。そして、確実な結論の積み重ねで研究は着実に前進する。

情報は散逸しがち。それを整理するのが人間の知性。

これが出来なければ、外部の人間を説得させるだけの説得力のある論文化など、到底無理である。ましてや、これをしっかりやらなければ、20年後、50年後にも役に立つ研究成果など達成しようがない。

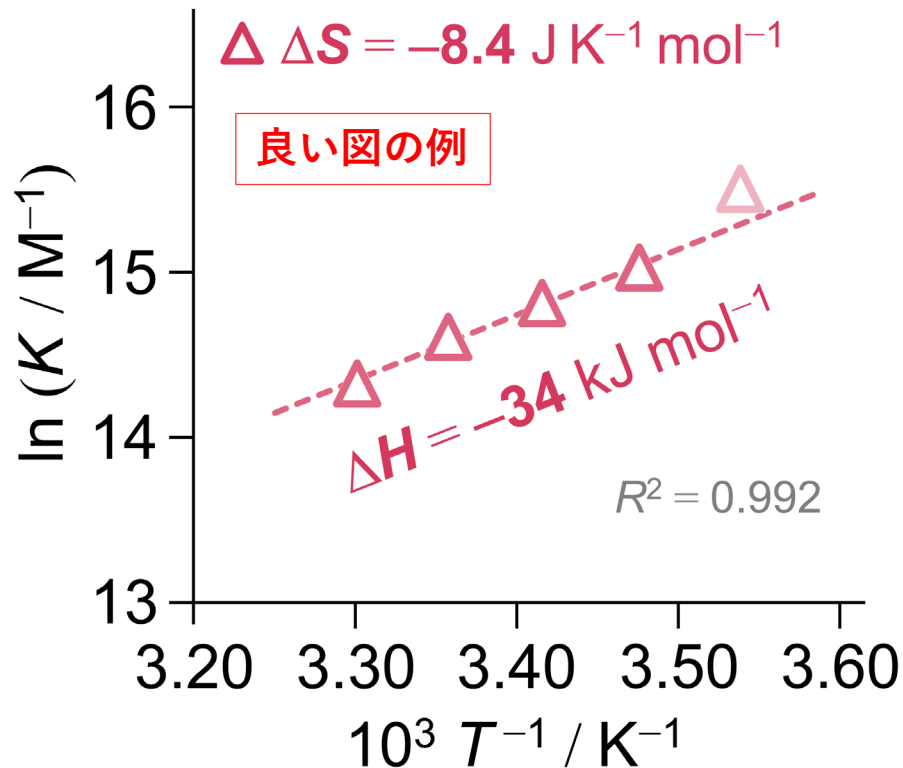
1. データの取得と整理に関して

Q. なぜ、系統的な結果取得が良いのか



I. Yamanaka, et al. *Electrocatalysis* **2018**, 9, 236–242

N. Yamato et al. *Chem. Commun.* **2022**, 58, 12106–12109



これら図は「再現性担保」と「明快なメッセージ」の両方を含んでいる点で優れている。系統的な結果が得られない場合は「何か問題がある」のである。こういう図の取得を目指す

結果の解釈の仕方

Q. もし結果がばらつく場合はどう考えるとよいのか？

A. 活性を制御する因子をすべて把握できていないと考えるべき
→「いちど実験から立ち止まって結果を精査する」
というのが(遠回りに見えて)一番の近道となる。

再現できない実験結果は全く価値を有さない

→再現できる条件を見出して報告すると人の役に立つ(価値がある)

しっかりと結果を精査するためにも、実験ノートはしっかりと記載する(最低限必要な情報は時間と数量記録、これに加えて、いつもと異なるイレギュラーな操作・現象の記録)。
=実験ノートをしっかりと書くのは、ほかでもない自分のため

実験は、最初結果がばらつくことのほうが普通である。

触媒研究の肝は分析の安定性。分析体制は妥当か？

うまく行かないときほど、他の人に適切に情報共有する

1. データの取得と整理に関して

要点

- 触媒反応は、とりわけ系統的なデータ出しが一般的な業界です
- 系統的にデータを示さない限りまともな雑誌への掲載は無理です
*ACS Catalysis*誌は再現性の問題に言及: *ACS Catal.* 2022, 12, 3644–3650
- 再現できない実験結果は無価値: 系統的評価＝再現性担保
- 系統的な評価を心がける姿勢は、どの業界においてもしっかりと通用する考え方の基礎になると思います。
- 常に「1枚の図で議論する」というデータ精査の徹底をお願い
スライドを前後しなければ比較できないというのは論外
情報の散逸(やりがち)→必要な情報を1枚の資料で議論する
- 大事なのは「誰が見ても一瞬で結論がクリアに演繹される図」
(議論の段階から明確な図を作る。そのまま論文の図になる)
- 思い込みを排除して、データに基づいた議論を徹底する
(当たり前のように思えるが、わりとできない人が多い)
- 確実な結論演繹の繰り返しでのみ、研究は前進します
そのためのデータ精査をよろしくお願いいたします