

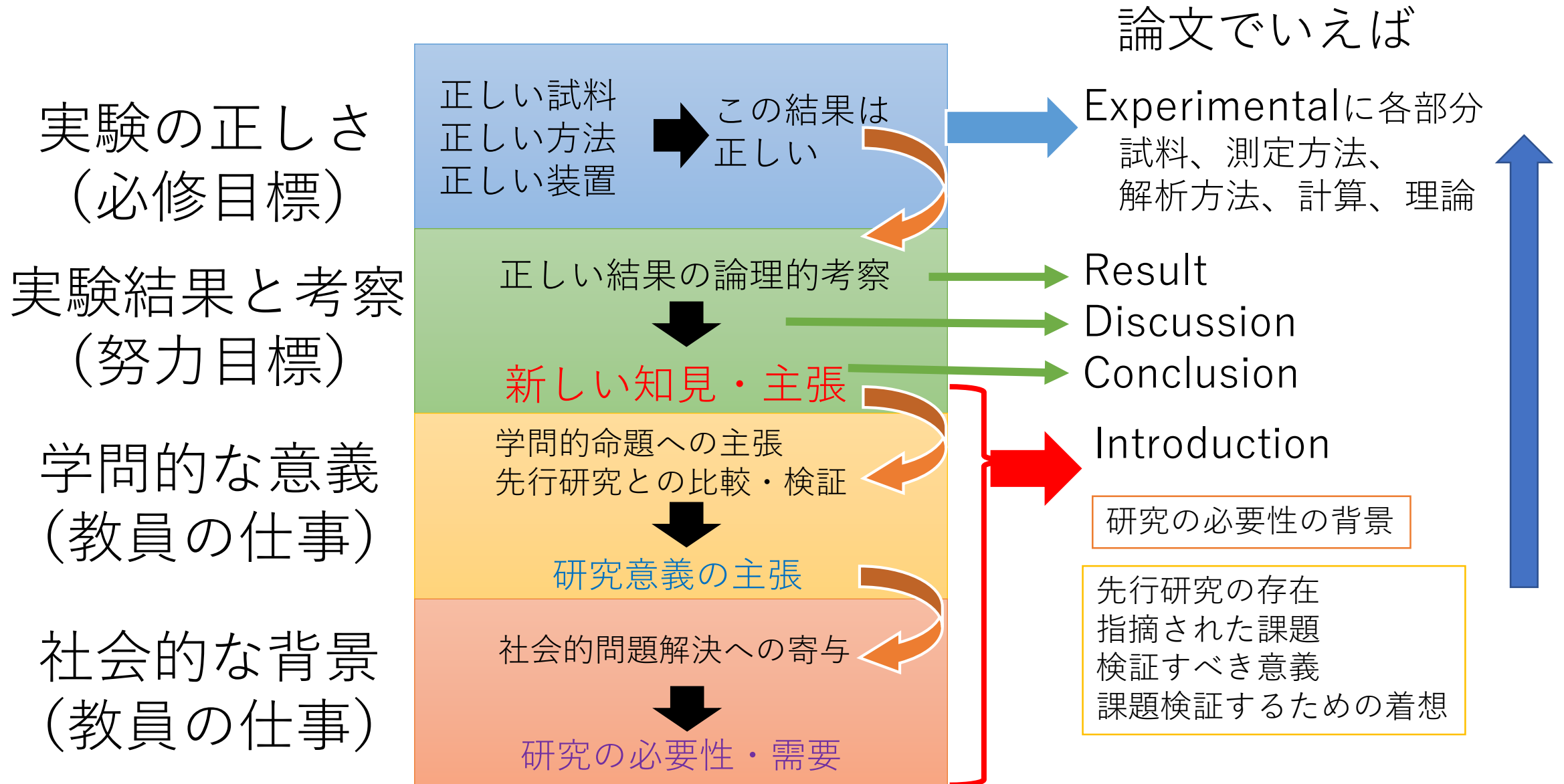
卒業研究論文の進め方

分光物性化学

研究とは

- 新規な結果・考察を論文として世界に発信する
 - 新規性---これまでにない結果や理論
 - 新規な実験デザイン、新規な実験手法、新規な実験結果、新規な物理・化学理論
 - 再現性---誰がやっても同じことをすれば一定の範囲で同じ結果になる
 - 実験手法のキーファクター・detail、統計的誤差の範囲
 - 論文---鍵となる結果を中心に論理的筋道で目的→結論を構成して伝える。
- 分光物性化学における研究の目標
 - 幅広い分光領域の機器分析においてそれぞれの領域の特徴を生かし応用と基礎をつなぐ
 - 分光領域：遠紫外分光、近赤外分光、テラヘルツ分光
 - 基礎：電子状態、化学結合（共有結合、水素結合）
 - 応用：多変量解析による定量分析、官能基分析による化学反応追跡

(卒業) 論文に必要な要素



実験の正しさ

- 目指す目標は

「この試料をこの装置でこの方法で実験」については学内一説明できる

- 説明できる = 解っている事・解っていない事を認識
装置・方法のメリットやデメリットを認識

原理を知ること・類似方法を知ること

- 実験の正しさを確立するための 勉強会
- 実験の正しさを確認するための 報告会

卒業研究を
単位認定するために
必修となる時間（授業）

研究の進め方のoutline

- 練習実験

- 実験の正しさを確立すること

5月中～6月初旬までに

- 鍵となる実験結果(key results)を得る

- 実験技術の取得（練習実験）→本実験→（試行錯誤）

本実験の結果（1セット）
6月中～7月初旬までに

- 研究で考察する仮説・目的を考える

- Key resultsがもつ新規性と、先行研究との関係・位置づけを考える
 - 先行研究についての論文を勉強する。

できれば合宿までに
少なくとも中間報告までに

- 目的→結論を得るための論理・道筋を考える

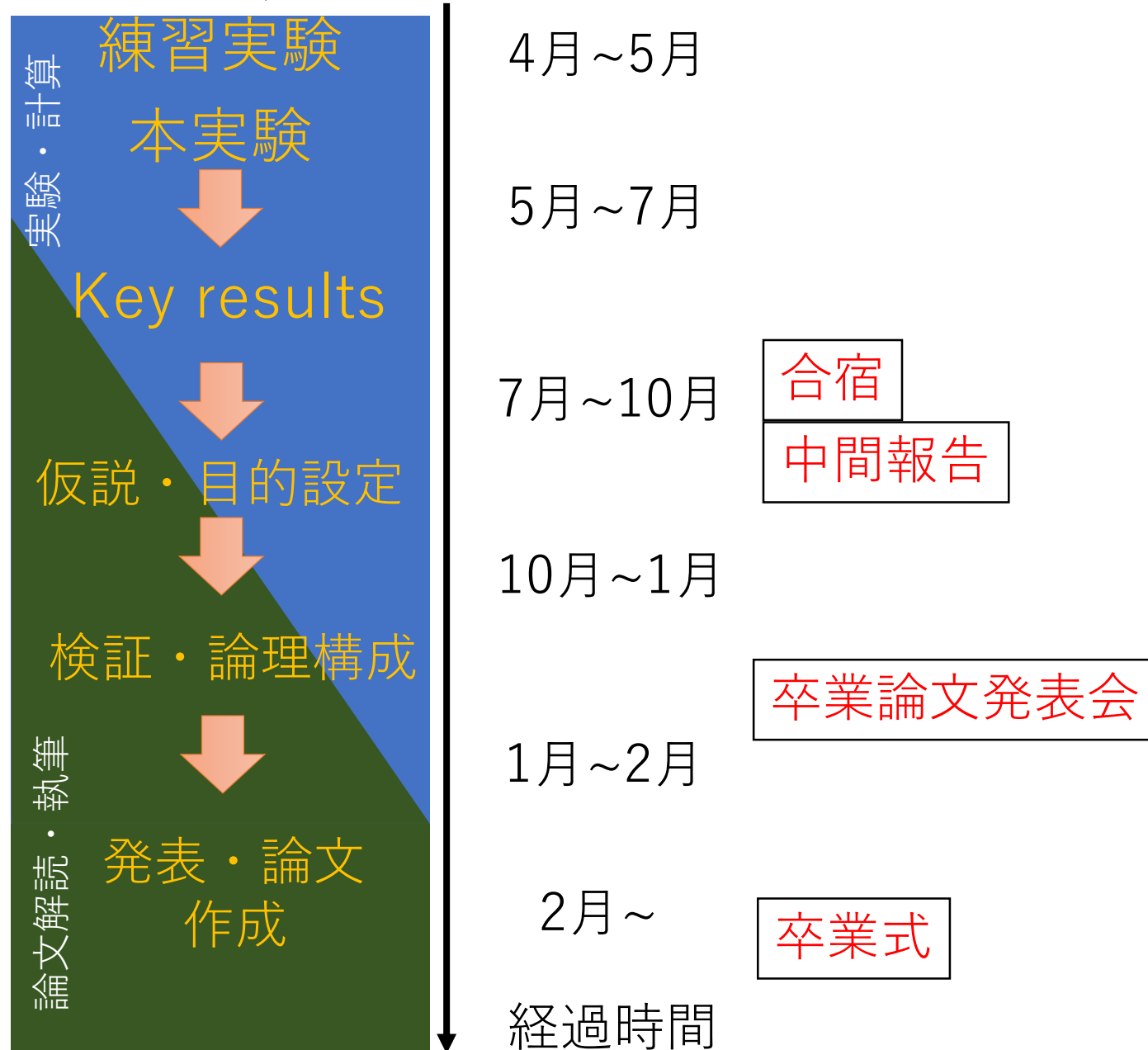
- Key results を中心に、論理を埋める実験を行う
 - どのような図をどの順番に並べると説得力があるのか

卒業論文発表会までに

- 論文を作成する

卒業式までに

研究の進め方のoutlineとスケジュール



「正しい結果」と呼ぶための再現性

- 再現性

- 同じ条件で同じことをやれば同じ「結果」がえられる

- 新規な結果の再現性の確認

- 3回の独立な実験が装置誤差の範囲内に収まる
 - 独立に調製した溶液、独立に実施した測定

- 装置誤差内に収まらない → 他の誤差原因を特定

実験計画のための実験時間の試算

- 週に一日の実験日（10時～17時）での実験量
 - FUVの測定 立ち上げ3時間（試料調整）
+（測定・洗浄・乾燥＝20分）：約10～12試料+片付け
 - NIRの測定 試料調整2・3時間
+（測定・洗浄・乾燥＝15分）：約16試料+片付け
- 3回の独立な実験に必要な時間の試算
 - 1日1回の独立な実験 → 3週で3回の独立な実験
 - 1日2回の独立な実験 → 2週で3回の独立な実験+ α

はじめのうちは5, 6試料

研究の目的 ⇔ 結論

- 現在の実験結果から最終的にどのような結論が導けるのか考える
(新しい知見・主張は何か?)
- その結論はどのような研究意義に対して必要か?
- 何を検証したことになるのか?
を考える。



研究の目的

結果について

- 結論を説得力をもって示すための証拠が実験・解析結果
- 卒業研究論文では途中経過報告の意味合いが強いので、できるだけ多くの結果（できればすべての結果）を論文に含めること

実験データのまとめと論文化

- 今後実験データを使った論文化を行うために以下のことをしてもらおうと助かります。
 - 実験データの整理
 - 取得スペクトルと資料の詳細がつながるような表
 - スペクトルデータの番号と試料データ（濃度・温度・時間など）がつながるように整理
 - 卒業研究論文の図で成型し作成したエクセル・またはoriginデータ
 - 卒業後に連絡可能なメールアドレス

実験・解析について

- 後輩がその文章を見て再現できるようにできるだけ詳しく書くこと
 - 溶液の濃度をできるだけ有効数字3桁まで計算して書くこと
 - グラフの凡例と線の対応をわかりやすく書くこと
 - グラフの軸が何を示すのか必ず説明する事