

Anaconda と Jupyter Notebook を用いた Python プログラミング (7)

※このドキュメントは相互参照型のハイパーテキストを意図しており、Web サイトおよびブックマーク、図表、数式、補足説明へのリンク (参照) を [下線付き青文字](#) で表し、(↪) の記号は初出の参照元へのリンクを表す。

7. レポートの書き方と提出のしかた

レポートや論文は「^{せつ}節 (section)」に区切って構成する。配列は「1. はじめに (^{しょげん}緒言)」、「2. 実験とデータ処理」、「3. 結果と考察」、「4. 結論」、「参考文献 (references)」の順にするので良い。必要があれば、さらに「^{せつ}小節 (subsection)」、「^{せつ}小小節 (subsubsection)」で区分する。(補足 7.A)

2024 年度の学生実験レポートは、Moodle の 24-1-2423 「セラミックス物理化学実験 I」実験 21 レポート提出 BOX に A4 版の PDF (portable document format) ファイルとして提出する。ファイル名は

「実験21_学生番号_氏名.pdf」とする。

レポートを作成するために Microsoft 社のクラウドサービスである Microsoft 365 (旧称 Office 365) URL: <https://www.microsoft365.com/> の Word を利用する場合には、「ファイル」メニューから「名前をつけて保存」項目を選択、[PDF としてダウンロード] を選択すれば良い。

Apple Pages をレポート作成に用いる場合には「ファイル」メニューから「書き出す▶」「PDF...」を選択する。

7-1 はじめに (緒言)

英文では「導入部」の意味を持つ “Introduction” は、日本では「はじめに」「緒言」と翻訳されて用いられる例が多い。論文・レポートでは、「何をしたか」について冒頭の部分で簡潔に書く。論文では “Introduction” の節を設けることは必須に近いが、レポートでは「要旨」に相当する内容を書くので良い。「^{しょげん}緒言」としてもよいが、現代的な日本語では「緒言」という表現のしかたは「^{おおげさ}大袈裟すぎる」印象を受けられる場合も多く、「緒言」という表現のとられる頻度は少なくなる傾向がある。

論文では「はじめに」の部分と「結論」との部分で内容を対応させること (concordness) は重要とされる。「結論」を決めてから「はじめに」の部分を書く。

研究論文では「はじめに」(導入部; introduction)の冒頭の文は「読者に読む気を起こさせる」ために重要と言われてきた。しかし、現代的な論文出版システムでは、むしろ「要旨 (abstract)」が重要とされる傾向が強くなっている。「レポート」には要旨を別に付ける必要はないが、「論文」を書く場合には、本文を全て書き上げてから「本文の内容を短くまとめたもの」として「要旨」を書く。

「はじめに」の部分に研究課題の歴史的な背景、社会的な要請、研究の動機(目的)などについて書かれる場合は多い。異なる専門分野の読者・閲覧者に関心を持たせるための工夫という意味があり、読者の知識の範囲・レベルに応じて、書く内容や表現のしかたは変える。ただし読者は大学教養レベル以上の知識を持つことを前提として良いという暗黙のルールは存在する。

7-2 実験とデータ処理

7-2-1 試料

試料としては NIST SRM640d Si 標準粉末に粉碎処理を施さずに用いたこと、試料充填部の赤道方向に沿った幅 $W = 20 \text{ mm}$ のガラス製試料ホルダの試料充填部容積と試料の秤量値から見積もられた嵩密度は $\rho_{\text{bulk}} = 0.719 \text{ g cm}^{-3}$ であり、充填率 (filling factor) は $f = 30.9\%$ 、Cu $K\alpha$ X線に対する侵入深さ $\mu^{-1} = 0.218 \text{ mm}$ 、試料の平均厚さ 0.618 mm と見積もられたことなどについて書く。

これらの情報は、測定試料を調製する時点で実験ノートに自筆で記録するが、必要となる情報に応じてフォーマットを決め、テキストデータの電子ファイルとしても記録を残す。配布ファイルの中の“20240503MiniFlex / 00memo.txt”は、そのように作成されたファイルであり、この実験課題のレポートを作成するときには、このファイル“00memo.txt”の内容を確認すれば良い。

7-2-2 装置と測定条件

半導体ストリップ型(フォトダイオードアレイ型) X線検出器 Rigaku D/teX Ultra-2 を装備し、ゴニオメーター半径 $R = 150 \text{ mm}$ の Bragg-Brentano 型の粉末 X線回折装置 Rigaku MiniFlex 600-C を用いたこと、X線源としては銅ターゲットの封入管 (Canon Electron Tubes & Devices, A-21 Cu) を加速電圧 40 kV 、放電電流 15 mA で用いたこと、Cu $K\beta$ 線を減衰させるために 0.023 mm 厚の Ni 箔を入射ビーム行路に挿入したこと、発散スリットの開き角 (diverge slit angle) は $\Phi_{\text{DS}} = 1.25^\circ$ 、ソーラースリット中の金属箔の間隔と長さの比の逆正接として定義されるソーラースリット角 (Soller slits angle) は、入射側 (incident beam side) のソーラースリットについては $\Phi_{\text{SS}}^{(i)} = 1.25^\circ$ 、回折側 (diffracted beam side) のソーラー

スリットについては $\Phi_{SS}^{(d)} = 1.18^\circ$ であったこと、X線検出ストリップの間隔は 0.1 mm、ストリップ本数は 128 本であり、試料位置からの検出面の赤道方向に沿った視野角は $2\Psi = 4.89^\circ$ であったこと、ゴニオメーター角 $2\Theta : 4.38^\circ - 142.38^\circ$ の範囲を角速度 $10^\circ/\text{min}$ の連続走査積算モードでサンプリング間隔 0.01° の測定を 10 回繰り返したことについて書く。

装置の基本的なパラメータの多くは装置の取扱説明書あるいは仕様書に記載されている。ただし装置製造会社から必ずしも装置に関する正確な情報を得られない場合もあることには注意をした方がよい。

現代的な測定制御システムでは、適切なオペレーション（操作）をすれば、測定条件の記録も自動的に生成される。装置製造会社によらず、強度データファイル冒頭のヘッダ部にこのような情報を記録することは一般的なもので、あらかじめ確認をしておくが良い。

7-2-3 データ処理

10 回の繰り返し測定の結果を積算して処理対象データとしたこと、装置のパラメータ（ゴニオメーター半径 $R = 150 \text{ mm}$ ，発散スリット角 $\Phi_{DS} = 1.25^\circ$ ，入射側ソーラスリット角 $\Phi_{SS}^{(i)} = 1.25^\circ$ ，回折側ソーラスリット角 $\Phi_{SS}^{(d)} = 1.18^\circ$ ，検出器視野角 $2\Psi = 4.89^\circ$ ）と試料のパラメータ（試料幅 $W = 20 \text{ mm}$ X線侵入深さ $\mu^{-1} = 0.218 \text{ mm}$ ）を用いて逆畳込的処理を施したこと、個別ピーク形状分析で LaB_6 標準粉末の各回折ピーク位置を求めたこと、オフセット誤差 $\Delta 2\Theta_0$ と試料位置ずれ ΔS を可変パラメータとする素朴ピークシフトモデルを用いた最適化計算によって較正曲線を求めたことについて書く。

7-3 結果・考察

どのような結果になったのか (results) について書く。

図・グラフを適切に示すことは、読者に伝えるべきことを伝えるために効果的である。しかし、「図を示すだけ」では結果を示したことにならず、「論文」を書いたことにも「レポート」を書いたことにもならない。グラフに何かの特徴が現れている場合には、その特徴を文章を使って説明しなければならない。

この課題では、個別ピーク形状フィッティングのすべてのグラフは掲載する必要はなく、例えば低角、中角、高角の 3 ピークを代表的なものとして掲載すれば良い。回折ピーク位置ずれの回折角依存性は掲載する。

「考察」(discussions) として、 LaB_6 標準粉末 NIST SRM660 シリーズでなく Si 標準粉末 NIST SRM640 シリーズを用いたことの是非、較正後のピーク位置が NIST SRM640d の保証書に記載された値からランダムにずれているとみなせるか、統計誤差が過小評価されていないか、実測のデータに逆畳込的処理を施すことが正当化されるか、曲線当て嵌め分析が適切であるか、較正の手続きが妥当とみなせるかなどについて取り上げて良い。

7-4 結論

何をして、どのような結果になったかについて簡潔に書く。課題を解決したという肯定的な結論であっても、解決できなかったという否定的な結論であっても構わないが、結論をどのようにするかは、自分で決める。

一般的には全肯定も全否定もするのでなく「課題の一部は解決できたが、まだ解決できない課題が残っている」ような内容を控えめな表現で述べれば無難になる傾向はある。

よく使われる「控えめな表現」に「...となる傾向が示された」「...であることが示唆された」「...の可能性はある」などがある。あまり控えめな表現を多用すると読者に弱い印象を持たれるので、それも避けるべきである。間違いのない事実とみなせることには、むしろ断定的な表現をすべきである。

7-5 参考文献

適切に文献を引用する。原則的に「掲載可否の審査を受けてから学術雑誌に掲載された論文」を引用する。現代的な図書館管理システムでは、学術論文が出版されれば事実上永遠に記録として残され、永遠に内容が参照可能となる。

電子文書の中で学術論文を引用する場合には、その論文を特定するための DOI (digital object identifier) リンクを付けるのが標準的になっている。逆に DOI の付かない論文は情報としての信頼性が低く、参考文献として引用するには適さないと考えた方が良い。

Web ページは予告されず内容が書き換えられることも、削除される（消滅する）こともあり、読者にとって参考文献にはならなくなる場合がある。読者の便宜のために Web ページの URL (uniform resource locator) アドレスの情報を提供することはありうるが、その場合には URL だけでなく、最低でも最終閲覧日を明記する。著者やページのタイトルなどの情報があれば記載する。URL が変更されても、これらの情報から検索エンジンを使って再探索できるようになる場合がある。

補足

(補足 7.A) 卒業論文や修士論文の構成 (↔)

大学の卒業論文や修士論文、博士論文は、「^{しょう}章 (chapter)」「^{しょう}節」...のように構成するのが普通だが、研究の内容が、異なるテーマについての研究で構成される場合に「^ぶ部 (part)」「^{しょう}章」「^{しょう}節」...のように構成する場合もある。 (↔)