



|              |   |
|--------------|---|
| Title        | 電気化学データベース  |
| Author(s)    | 仁木, 克巳; 磯本, 征雄  |
| Citation     | 大阪大学大型計算機センターニュース. 1987, 66, p. 95-99   |
| Version Type | VoR   |
| URL          | <a href="https://hdl.handle.net/11094/65749">https://hdl.handle.net/11094/65749</a> |
| rights       |   |
| Note         |   |

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

## 電 気 化 学 デ ー タ ベ ー ス

横 浜 国 立 大 学 工 学 部 仁 木 克 巳

名 古 屋 市 立 大 学 計 算 セ ン タ ー 磯 本 征 雄

## 電 気 化 学 と は

電気化学の歴史は非常に古く、メソポタミア文明が発祥したチグリス河流域で金メッキが施されていたものと推定される銅製の壺（B.C 2500 頃）が発見されている。また、西暦紀元前 300 年から紀元 300 年にわたって栄えたペルシャの遺跡からは電気メッキに使用されたと思われる電池も発見されている。近代化学における電気化学は、蛙の筋肉に二種類の金属を接触させると筋肉がけいれんを起こすというガルバーニの発見（1771）、続いてボルタの電池の発見（1800）に始まる。そして今日では、電気化学は物理化学、分析化学、無機化学、高分子化学、生命化学などの基礎化学から化学工業、電子工業などの応用に至る広い分野に関わりをもつ、いわゆる「境界領域の学問」の典型である。

さて、電気化学系は二つの電子伝導体（電極）と、それに挟まれたイオン伝導体（電解質溶液、熔融状態の塩、固体電解質、イオン交換膜、細胞膜など）とから成り立っている。

電子伝導体中では電子が電気のカリヤーであり、イオン伝導体中ではイオンが電気のカリヤーになっている。したがって、電子伝導体とイオン伝導体との界面では電気の流れに関して質的な変化を生じる。電気化学体系中での反応は電極／電解質溶液界面における電子の移動（電子授受反応）と、それに付随する化学反応、および、イオン伝導体中でのイオンの移動など、いくつかの素反応から成り立っている。生体系は複雑な電気化学系の一つで、知覚の伝達、生体エネルギー（呼吸、光合成など）などの生体現象は電気化学反応から構成されている。

基礎科学、および、工学における電気化学の役割は（1）物理化学の分野では、電解質溶液論、酸・塩基、イオンの水和および会合、非水溶媒中における電解質、コロイド、電極における電子授受反応、光が関与する電気化学反応など、（2）無機化学の分野では、酸化還元、ポーラログラフィー、電気分析化学、錯体など、（3）有機化学の分野では、酸化還元、酸・塩基、ポーラログラフィー、電解合成、電解重合による各種機能性高分子膜の製造など、（4）冶金の分野では、金属の採取、生成、表面処理など、（5）生化学の分野では、細胞膜内でのイオン輸送、生体の pH、神経の伝達、呼吸系、光合成系など、（6）工学への応用では、エネルギーの生成・貯蔵（電池）、腐食抑制、電解加工、各種センサー等があり、その重要性は今更述べるまでもない。

化学エネルギーと、それを電気化学系によって電気的エネルギーに変換した場合の相互の関係については、（1）物質の質的な尺度としての化学ポテンシャルは、電気化学系においては、電位（電

気化学ポテンシャル)で表される。また、(2) 物質の量的なものは、Faraday の法則により、化学量と電気量とが関係づけられている。反応の種類は電位(電圧)で選択することができ、反応の速さは電流で、さらに反応量は電気量で抑制できる利点があるため、精密化学工業の進歩と共に、電気化学の役割は益々重要になってきている。また、微量成分の非破壊的(あるいは殆ど破壊することなしに)な、かつ連続的なモニターや制御にまで応用が広がってきている。

### 電気化学データベースの内容

さきに述べたように、電気化学系における現象は、電極/溶液界面における電荷移動現象と溶液内におけるイオンの移動現象の二つに大別される。我々はこれら二つの現象を記述するのに必要なパラメーターに関する情報を、電気化学データベースとして整理を進めている。その内容は、次の2種類の情報からなっている。

1. 電気化学反応パラメーター： 電極/溶液界面における電荷移動反応を記述するのに必要なパラメーターを36項目にわけて収録
  - a. 反応に関する説明
  - b. 反応条件
  - c. 測定値
  - d. 測定方法
  - e. 書籍情報
2. 電解質溶液の物理化学パラメーター：
  - a. 電解質溶液の伝導度
  - b. 密度
  - c. 粘度
  - d. 活量(または活量係数)
  - e. 誘電率
  - f. 拡散係数
  - g. イオン活動の活性化エネルギー、および、輪率
  - h. これらに関する書籍情報

### 電気化学データベースの構成とのアクセス方法

電気化学データベースは現在、次の3つのサブファイルにわけてデータが格納されている。

- (1) BIBLIO : 文献・書誌情報
- (2) EC DATA : 電気化学反応情報
- (3) CON DATA : 電気伝導度測定データ

データベースの利用方法には、端末利用者言語を用いて直接アクセスする方法、またはFORTRANプログラムからデータ操作言語を使ってアクセスする方法の2つがある。ここでは、端末利用者言語による電気化学データベースへのアクセスの方法について簡単に説明する。

端末利用者言語を使えば、プログラム作成の手間をかけずにこれらのデータベースへのアクセスが可能である。図1は上記(1) BIBLIO ファイルにアクセスする場合のコマンド入力例である。

```

SYSTEM ?  INQ <CR>                                <----- ①

      INQ EQL/JIPS VERSION 11.1-1      16:30'58"      05/07/87

OPTION FILE ?  <CR>                                <----- ②
INQ SECTION ?  INQSCT03,ECDB/ECDB/INQLIB  <CR>      <----- ③
INQ SECTION ?  <CR>                                <----- ④
INQ FILE ?  BIBLIO  <CR>                            <----- ⑤

PASSWORD (BIBLIO      ) ?                          <----- ⑥
      INQ CAT FILE ?  ECD/ECDB/BIBLIO  <CR>          <----- ⑦
INQ CAT FILE ?  <CR>                                <----- ⑧
INQ FILE ?      <CR>                                <----- ⑨

-----
: FILE NO : FILE NAME      : RECORD CNT : DATABASE NAME :
-----
:          : BIBLIO        :           :              :
-----

-----
: INQ SECTION NAME : TYPE : INQ FILE NO :
-----
:   INQSCT03       :   1   :   03       :
-----

      INQ DATA BASE RETRIEVE START

?  FIELD                                           <----- ⑩
ツス`キハ  ?

      BIBLIO      FILE  FIELD  DESCRIPTION

      LEVEL  DATA-NAME                                ATTRIBUTE

FDL  BIBLIO.03.
DATABASE ECDB.
02      SNO                                PIC  X(6) .
02      AUTHR (N).
03      AUTR                                PIC  X(72) .
02      JOURNL 8N).
03      JOUR                                PIC  X(72) .
FIEL  COMMAND  END

?                                           <----- ⑪
      (以下、INQの端末利用者言語EQLを参照して下さい)

```

図1 端末利用者言語によるBIBLIOへのアクセス開始画面

同様に図2と図3は、各々上記(2) ECDATA ファイルへのアクセス、(3) CONDATA ファイルへのアクセスのための、初期入力例である。

まず、図1の(1) BIBLIO ファイルへのアクセス方法について説明する。最初に、阪大大型計算機センターの ACOS SYSTEM を呼び出した後、SYSTEM ? がディスプレイ画面に表示されたところで、次のように入力する。

```
SYSTEM ?  INQ <CR>
```

```
      INQ EQL/JIPS VERSION 11.1-1      16:24'30"      05/07/87
```

```
OPTION FILE ? <CR>
```

```
INQ SECTION ?  INQSCT01,ECD/ECDB/INQLIB <CR>
```

```
INQ SECTION ? <CR>
```

```
INQ FILE ?  ECDATA <CR>
```

```
PASSWORD (ECDATA      ) ? <CR>
```

```
      INQ CAT/FILE ?  ECD/ECDB/ECDATA <CR>
```

```
INQ CAT/FILE ? <CR>
```

```
INQ FILE ? <CR>
```

(以下、図1と同じである)

図2 端末利用者言語によるECDATAへのアクセス開始画面

```
SYSTEM ?  INQ <CR>
```

```
      INQ EQL/JIPS VERSION 11.1-1      16:29'04"      05/07/87
```

```
OPTION FILE ? <CR>
```

```
INQ SECTION ?  INQSCT02,ECD/ECDB/INQLIB <CR>
```

```
INQ SECTION ? <CR>
```

```
INQ FILE ?  CONDATA <CR>
```

```
PASSWORD (ECDATA      ) ? <CR>
```

```
      INQ CAT/FILE ?  ECD/ECDB/CONDATA <CR>
```

```
INQ CAT/FILE ? <CR>
```

```
INQ FILE ? <CR>
```

(以下、図1と同じである)

図3 端末利用者言語によるCONDATAへのアクセス開始画面

- ① "SYSTEM ?" のところでは、"INQ"を入力して、データベース起動準備の状態にする。
- ② "OPTION FILE ?" には何も入力せず、送信キー<CR>のみを押す。
- ③ "INQ SECTION ?" に外部スキーマ名 "INQSCTO3" と、その格納されているファイル名 "ECD/ECDB/INQLIB" を入力する。
- ④ 2回目の "INQ SECTION ?" は、送信キー<CR>のみを押す。
- ⑤ "INQ FILE ?" に概念スキーマ名 "BIBLIO" を入力する。
- ⑥ この後パスワードを聞かれるが、送信キー<CR>のみでよい。
- ⑦ "INQ CAT/FILE ?" には、データベースを格納しているファイル名 "ECD/ECDB/BIBLIO" を入力する。
- ⑧ 2回目の "INQ CAT/FILE ?" では送信キー<CR>のみでよい。
- ⑨ 2回目の "INQ FILE ?" では、送信キー<CR>のみでよい。

以上の入力データベースBIBLIOが呼び出され、10数行の情報出力の後、検索コマンドの入力待ち状態 "?" になる。

図1の例では、⑩のところは "FIELD" コマンドを入力して、BIBLIOの中のデータ項目名一覧を出力させた。この他に、検索 "RETRIEVE"、表示 "DISPLAY" などの入力により、データベースの検索が可能となり、"DONE" により終了する。これらはいずれも、⑪のところでも入力のできるコマンドである。これらの端末利用者言語の利用法に関する詳細な説明については、INQ利用者マニュアル「端末利用者言語EQL利用解説書」を参照していただくこととして、今回は詳細な説明を割愛する。

図2は、データベースECDATAを呼び出す場合の入力例である。また図3は、データベースCONDATAを呼び出す場合の入力例である。なお、本稿では電気化学データベースの紹介のみにとどめたが、これら電気化学データベースの利用に関する手引書は、近いうちに本センター・ニュースに掲載する予定である。

我々は、昭和55年度より文部省科学研究費『研究成果刊行費（データベース）』により、続いて、昭和60年度以降は事業費により上記『電気化学データベース』の作製活動を続けている。今後はこれらデータベースの一層の充実を計ると共に、より広範囲にわたる電気化学に関するデータを収録した『電気化学データベース』の確立を目指している。