The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	電気化学データベース利用の手引
Author(s)	石田, 卓也; 仁木, 克己; 磯本, 征雄
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1988, 70, p. 19-37
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/65787
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利用の手引

横浜国立大学工学研究科　石田卓也
横浜国立大学工学部　仁木克己
名古屋市立大学計算機センター　磯本征雄

はじめに

化学研究者は研究活動において情報の入手が不可欠の要素となっており、大量の情報を記憶し必要に応じて提供するデータベースの利用が注目されている。

我々は、既に電気化学反応（ＥＣＤＡＴＡ）及び、電解質溶液の電気伝導度（ＣＯＮＤＡＴＡ）の２つの内容について大阪大学の大型計算機上にデータベースを構築し、試験的に公開してきた。

本文では、このデータベース構成について、その全体を概説し、利用者への電気化学データベースに関する情報提供の資料としたい。

今回の運用によって一人でも多くの利用者を獲得し、本データベースの有効利用について多くの意見が寄せられれば幸いである。

第１章．電気化学データベースの内容

電気化学データベースは、全国の学術研究に従事している研究者へのコンピューターネットワークによる、オンラインサービスのためにデータベース管理システムＩＮＱの上で利用できるようにデータベース化している。図１には、現時点での電気化学データベースのファイルの構成をまとめた。

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電気化学データベースの構築を目指す。

１．電気化学反応パラメーター

ａ．反応に関する説明　ｂ．反応条件　ｃ．測定値　ｄ．測定方法　ｅ．書誌情報

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．イオン移動度の活性化エネルギー、および輸率

ｈ．これらに関する書誌情報

第２章．データベース利用法

データベースを利用するには、ＡＣＯＳ６のデータベースマネジメントシステム（ＤＢＭＳ）－ＩＮＱに備えられた端末利用者言語による方法と、データ操作言語を使って書かれた本データベース固有の検索コマンドによる方法がある。以下に各々について利用方法を説明する。

１．端末利用者言語によるアクセス

端末利用者言語による利用法は、データベース管理システムＩＮＱに備わったコマンド形式の言語を使用するものである。電気化学データベースは現在、次の３つのサブファイル

（１）ＥＣＤＡＴＡ　：電気化学反応パラメーター

（２）ＣＯＮＤＡＴＡ：電解質溶液の電気化学パラメーター

（３）ＢＩＢＬＩＯ　：電解質溶液の電気化学パラメーターに関する文献情報

に分けてデータが格納されているが、端末利用者言語を利用すれば、プログラム作製の手間をかけずに、これらのデータベースにアクセスすることが出来る。

端末利用者言語の詳細については、ＩＮＱの利用者マニュアル「端末利用者言語ＥＱＬ利用説明書」を参照して戴くこととして、ここではその初期の入力例を図２に示すのにとどめる。

図２はＣＯＮＤＡＴＡの文献情報の部（ＢＩＢＬＩＯ）を検索する場合の例である。

大阪大学大型計算機のＡＣＯＳシステムをよびだし、

①ＩＮＱサブシステムを呼び出して、データベース起動準備の状態にし、OPTION FILE ? には空送信をする。

②INQ SECTION ? に外部スキーマ名INQSCT03（ECDATA及びCONDATAはそれぞれINQSCT01,INQSCT02）と、それの格納されているファイル名ECD/ECDB/INQLIB を入力する。

③INQ FILE ? に概念スキーマ名BIBLIO（ECDATA及びCONDATAはそれぞれECDATA,CONDATA）を入力し、パスワードは空送信する。

④INQ CAT/FILE ? にデータの格納されているファイル名、ECD/ECDB/BIBLIO（図１参照）を入力する。

以上の入力でデータベースが起動状態になり、検索コマンドの入力待ち状態になる。

２．データ検索用簡易コマンドの利用

電気化学データベースを利用するには、ＤＢＭＳ－ＩＮＱのデータ操作言語（ＤＭＬ）によってＦＯＲＴＲＡＮプログラムを作製し、これを介してアクセスすることができる。この場合は前節の端末利用者言語によるアクセスと異なり、様々な応用分野への適用に、柔軟に対処できる。

ここで解説するのは現在大阪大学計算機センターでサービス中のＣＯＮＤＡＴＡ＋ＢＩＢＬＩＯ検索用のプログラムＣＯＮＤＵＣＴ及び、ＥＣＤＡＴＡ検索用プログラムＥＣＤＡＴＡである。これらのプログラムは大型計算機によるデータベース検索を会話的に進める。以下に、各々のプログラムについて実際に例を示しながらその利用法を示す。

２－１データベースＣＯＮＤＡＴＡ＋ＢＩＢＬＩＯ検索用プログラムＣＯＮＤＵＣＴ

ＡＣＯＳシステムの入力待ち状態

```
SYSTEM ?
```

に"ECD/CONDUCT"と入力する。

```
SYSTEM ?ECD/CONDUCT<CR>
```

電気伝導度データベース検索用のプログラムが始動し、会話開始画面が表示される。

```
>> SELECT COMMAND NUMBER   1-6 <<
>> (1) RETRIEVE  (2) AND        (3) OR
>> (4) DISPLAY   (5) SAVE       (6) END
=
```

入力待ち記号 = にコマンドまたは、番号で答えるとコマンド別に次のメニューに移る。

各コマンドの機能は次のとうりである。

(1)RETRIEVE

キーワードによるデータ検索を行う。初期メニュー画面の入力待ち状態 = にRETRまたは 1 と答えると RETR コマンドのメニュー画面が表示される。

```
= 1 <CR>

>> RETRIEVE << SELECT AN ITEM NAME OR ITEM NUMBER.
* (1)  SNOC (SERIAL NUMBER)
* (2)  AUTR (AUTHOR)              * (3)  JOUR (JOURNAL)
* (4)  SUBS (SUBSTANCE)           * (5)  SOLV (SOLVENT)
* (6)  EQCO (EQUIVALENT CONDUCTIVITY)
* (7)  TEMP (TEMPERATURE)
* (8)  INCO (MOLAR CONDUCTIVITY AT INFINITE DILUTION))
* (9)  TRNO (TRANSFER NUMBER)
* (10) MOCO (MOLAR CONDUCTIVITY)
* (11) DENS (DENSITY)
* (12) SPCO (SPECIFIC CONDUCTIVITY)
* (13) VISC (VISCOSITY)
* (14) ACTC (ACTIVITY COEFFICIENT)
* (15) ACTE (ACTIVATION ENERGY)
* (16) DIFF (DIFFUSION COEFFICIENT)
* (17) DIEL (DIELECTRIC CONSTANT)
* (18) DATA (MEASURED VALUES)
-------------------------------------------------------------
  TYPE IN AN ITEM NAME OR ITEM NUMBER.
```

```
=
```

項目を一つ選ぶとその項目に対するキーワードを聞いてくる。キーワードを入力すると、検索を行ない、該当したレコードの件数とそれを格納した一時ファイルの番号を表示した後、初期メニューに戻る。

```
=  4<CR>

>> INPUT A KEY WORD FOR THE RECORD SUBS <<
=  NAOH <CR>

>>     37   RECORDS FOUND
              SET NO. IS   1

>> SELECT COMMAND NUMBER   1-6 <<
>> (1) RETRIEVE  (2) AND        (3) OR
>> (4) DISPLAY   (5) SAVE       (6) END
=
```

SET NO.は検索結果を格納したファイルの番号で、以後ANDやOR,DISPLAY,SAVEなどのコマンドを実行する際にこの番号を指定する。

(2)AND,(3)OR

ANDは被検索解集合の論理積集合を得る。AND または 2 で AND コマンドのメニューが表示される。また、ORは同論理和集合を得る。OR または 3 で同様のメニューが表示され、OR コマンドが実行される。

```
=  2 <CR>

>> AND OR <<   INPUT TWO SET NUMBERS  ( A,B )
=  1,2 <CR>
```

RETRコマンドで検索した、被検索レコード集合のSET NO.を２つ入力すると、それらの間で積集合（または和集合）をつくり、新しいファイルに格納した後、初期メニューに戻る。

```
>> FILES=    34   RECORDS
>> SET NO. IS 3

>> SELECT COMMAND NUMBER   1-6 <<
>> (1) RETRIEVE  (2) AND        (3) OR
>> (4) DISPLAY   (5) SAVE       (6) END
=
```

(4)DISPLAY,(5)SAVE

DISPは指定されたファイル番号のデータを画面に出力する。DISP または 4 で検索結果の表示を行なう。また、SAVEは被検索解レコード集合を原データの形でＡＣＯＳのパーマネントファイルに格納する。SAVE または 5 で検索結果のパーマネントファイルへの保存を行なう。

```
= 4 <CR>

>> INPUT A SET NUMBER TO BE DISPLAYED OR SAVED.
= 3 <CR>
```

表示（保存）の対象となるファイルのSET NO.を答えると、次に表示（保存）する項目を聞かれる。

```
>> SELECT THE ITEMS TO BE DISPLAYED (OR SAVEED)
-------------------------------------------------------------
* (0)  ALL ITEMS
* (1)  SNOC (SERIAL NUMBER)
* (2)  AUTR (AUTHOR)            * (3)  JOUR (JOURNAL)
* (4)  SUBS (SUBSTANCE)         * (5)  SOLV (SOLVENT)
* (6)  EQCO (EQUIVALENT CONDUCTIVITY)
* (7)  TEMP (TEMPERATURE)
* (8)  INCO (MOLAR CONDUCTIVITY AT INFINITE DILUTION))
* (9)  TRNO (TRANSFER NUMBER)
* (10) MOCO (MOLAR CONDUCTIVITY)
* (11) DENS (DENSITY)
* (12) SPCO (SPECIFIC CONDUCTIVITY)
* (13) VISC (VISCOSITY)
* (14) ACTC (ACTIVITY COEFFICIENT)
* (15) ACTE (ACTIVATION ENERGY)
* (16) DIFF (DIFFUSION COEFFICIENT)
* (17) DIEL (DIELECTRIC CONSTANT)
* (18) DATA (MEASURED VALUES)
-------------------------------------------------------------
  TYPE IN AN ITEM NAME OR ITEM NUMBER.
= 2 <CR>
```

項目が選ばれると、該当するファイルのその項目の内容が、各レコードを点線で区切って表示（保存）される。保存は各利用者のファイルネーム”ＳＥＮＤＦＩＬＥ”にされる。

```
~
-------------------------------------------------------------
AUTR    AKERLOF, G.; KEGELES, G.
-------------------------------------------------------------
AUTR    AKERLOF, G.; KEGELES, G.
-------------------------------------------------------------
AUTR    AKERLOF, G.; KEGELES, G.
-------------------------------------------------------------
AUTR    AKERLOF, G.; KEGELES, G.
-------------------------------------------------------------
AUTR    DARKEN, L.S.; MEIER, H.F.
-------------------------------------------------------------
                                                            ~
```

(6)END

END または 6 で CONDUCT を終了し、ＡＣＯＳ６のコマンド入力画面に戻る。

```
>> SELECT COMMAND NUMBER   1-6 <<
```

```
>> (1) RETRIEVE  (2) AND        (3) OR
>> (4) DISPLAY   (5) SAVE       (6) END
= 6 <CR>
>> CONDUCT END
***END***
SYSTEM?
```

ＴＳＳ端末へのデータの転送は、一旦検索プログラムを終了させた後、ファイル名"SENDFILE"で作成されたパーマネントファイルを転送する手続により行う。

２－２データベースＥＣＤＡＴＡ検索用プログラムＥＣＤＡＴＡ

本プログラムの会話的検索環境は、利用者が次に行うべき操作を順次プログラムが聞いてくる事により、操作を簡単なものにしている。また、検索のあらゆる段階で、コマンドヘルプ機能を持たせている。これは、コマンドやその引数入力時に ? を入力することにより、その場面で行うべき操作や画面情報の補足説明を行うものである。キーワードヘルプ機能は、検索キーの一覧を表示し、その中よりキーワードを選んで検索を行わせる機能で、利用者は自分で正確なキーワードを入力しなくても画面を見て選べば良いようになっている。

ＡＣＯＳシステムの入力待ち状態

```
SYSTEM ?
```

に"ECD/ECDATA"と入力する。

```
SYSTEM ?ECD/ECDATA<CR>
```

電気化学反応速度データベース検索用のプログラムが始動し、会話開始が面が表示される。

```
COMMAND(RETR, DISP, AND, OR, SAVE, ?, END)?
=
```

入力待ち記号 = にコマンドで答えると、各コマンド別に次のメニューが示される。

各コマンドの機能は次のとうりである。

(1)RETR(IEVE)

キーワードによるデータ検索を行う。初期メニュー画面の入力待ち状態 = にRETRと答えるとメニュー画面が表示される。

```
= RETR<CR>

*** SELECT CONDITIONED ITEMS WITH NUMERAL ***
/ 1/SNO /    / 2/CS  /    / 3/OXST/    / 4/ORXN/    / 5/WELT/
/ 6/WESB/    / 7/WEEL/    / 8/WEFR/    / 9/WEAR/    /10/MSLT/
/11/MSSB/    /12/PH  /    /13/IS  /    /14/TEMP/    /15/EACO/
/16/EASB/    /17/MECO/    /18/MESB/    /19/MALT/    /20/MASB/
*********************************************
=
```

ここでは被検索項目選択する。項目は幾つでも選択することができ、また、?を入力することにより、ヘルプ画面を呼び出せる。

```
=?<CR>

** RETRIEVAL PARAMETERS ***
SNO   SERIAL NUMBER
CS    CHEMICAL SPECIES
OXST  HIGHEST OXIDATION STATE
ORXN  ELECTRODE REACTION
PH,IS PH AND IONIC STRENGTH
TEMP  TEMPERATURE
WE**   / CONDITIONS OF WORKING ELECTRODE      /
MS**   / CONDITIONS OF SOLVENT               /
EA**   / CONDITIONS OF ELECTROACTIVE SPECIES
ME**   / CONDITIONS OF SUPPORTING ELECTROLYTE   /
MA**   / CONDITIONS OF ADDITIVES             /
**RT  RATIO         OF  **SB
**CO  CONCENTRATION OF  **SB
**SB  SUBSTANCE     OF  **
**EL  ELECTRODE TYPE OF **
**FR  FORM OF           **
**AR  AREA OF           **
 ** TYPE IN <CR> KEY **
=<CR>
```

ここでのヘルプ画面は項目名の説明をしている。このようにコマンドヘルプ機能はその場合に応じてその場で一番疑問となると思われることをサポートしている。

項目名を選ぶと、次にプログラムはその項目順にキーワードをリストして、キーワードを選ばせる。項目は複数選ぶことができる。パラメーターの区切りは空白による。

```
=2 16<CR>
***************  KEY TABLE FOR /CS  /****************
( 0) NEXT TABLE
( 1)(2,4-diNO2)C6H3;   1    ( 2)(2-Cl)C6H4N2C6H;   2
( 3)(2-NO2)C6H4N2C6;   4    ( 4)(3-CH3)C6H4N2C6;   2
( 5)(3-NO2)C6H4N2C6;   2    ( 6)(4-Br)C6H4N2C6H;   1
( 7)(4-CH3)C6H4N2C6;   2    ( 8)(4-COOH)C6H4N2C;   2
( 9)(4-Cl)C6H4N2C6H;   3    (10)(4-I)C6H4N2C6H4;   1
(11)(4-NO2)C6H4N2C6;   4    (12)(4-OH)C6H4N2C6H;   3
(13)(4-SO3H)C6H4N2C;   4    (14)(BrC6H4)3N.(+)[;   1
(15)(C2H5)2Hg      ;   1    (16)(C2H5)2NH2Cl   ;   2
(17)(C2H5OOCCHC6H5);   1    (18)(C4H9)4NCOOC(C2;   1
(19)(C4H9)4NCOOC(CH;   5    (20)(C4H9)4NCOOC(CO;   1
(21)(C4H9)4NCOOCF3 ;   1    (22)(C4H9)4NCOOCH(C;   1
(23)(C4H9)4NCOOCH2(;   3    (24)(C4H9)4NCOOCH2C;   5
(25)(C4H9)4NCOOCH3 ;   1    (26)(C4H9)4NCOOCHCl;   1
(27)(C4H9)4NCOOCH[-;   1    (28)(C6Cl5)2Hg     ;   1
(29)(C6F5)2Hg      ;   1    (30)(C6H5)(CH3)C12H;   6
 *************  SELECT THE NUMBER FOR /CS  /*************
```

```
=0<CR>
```

一度に１５桁のリストを表示する。ここで0を選ぶと次のテーブルが表示される。

```
***************  KEY TABLE FOR /CS  /****************
( 0) NEXT TABLE
( 1)(C6H5)2C12H8N2(;   2    ( 2)(C6H5)2Hg      ;   2
( 3)(C6H5C6H4)3N.(+;   1    ( 4)(C6H5CC)2Hg    ;   1
( 5)(C6H5CH2)2Hg   ;   2    ( 6)(CCl2CCl)2Hg   ;   1
~
*************  SELECT THE NUMBER FOR /CS  /*************
=2<CR>
/CS   = '(C6H5)2Hg      '/
RECORD COUNT =     2  AT THIS STAGE.
=<CR>

***************  KEY TABLE FOR /EASB/****************
( 0) NEXT TABLE
( 1) CO            ;  11    ( 2)N2             ;  11
( 3)((C2H5)4N)3Fe(C;   4    ( 4)(2,4-diNO2)C6H3;   1
( 5)(2-Cl)C6H4N2C6H;   2    ( 6)(2-NO2)C6H4N2C6;   4
( 7)(3-CH3)C6H4N2C6;   2    ( 8)(3-NO2)C6H4N2C6;   2
( 9)(4-Br)C6H4N2C6H;   1    (10)(4-CH3)C6H4N2C6;   2
~
*************  SELECT THE NUMBER FOR /EASB/*************
=6<CR>
/EASB = '(2-NO2)C6H4N2C6'/
*** THERE'S NO DATA RETRIEVED
  PARAMETER '/EASB/' IS CANCELED ***
=<CR>
```

先に選んだ項目での検索結果中より以降の検索を行なうので、この例のようにリストより選んだキーワードによる検索に該当レコードがかからないことがある。一通り検索が終了した時点で、さらに補足の条件がないか、"TYPE IN RETRIEVAL CONDITION="と聞いてくる。キーワードが予めはっきりしている場合には項目毎の検索をキャンセルし、この部分を用いれば検索の省力化が図れる。この部分にはＩＮＱに渡す引数の形で条件を書き込む。これは上記のリストから項目を選んだ後に表示されている"/"で囲まれた部分の形式である。この例ではこの部分をキャンセルする。

```
TYPE IN RETRIEVAL CONDITION
=<CR>

----------------
RECORD NO.;    1
SET NO.   ;    1
-----------------
COMMAND (RETR, DISP, SAVE, AND, OR, ?, RESTART, END) ?
=
```

利用者が選んだ項目名につき、順次検索を進めることによって、データを絞り、全ての条件を満たす解を最後に選び出し、一時ファイルに格納し、そのファイル番号と格納件数を知らせてくる。

項目の優先順位は選択したときの並びの順番によって、先に選んだものの結果の中から次のパラメーターによる検索を行なう。ファイル番号は後に論理和や論理積の演算や、表示、セーブを行うときに指定する。また、各項目はただリターンキーを押すことによりキャンセルされる。このときはその項目は検索条件に含まれない。

(2)DISPLAY,(3)SAVE

DISPは指定されたファイル番号のデータを画面に出力する。入力待ち状態 = にDISPと答えるとメニュー画面が表示される。

```
=DISP<CR>
INPUT SET NUMBER TO BE DISPLAYED
=1<CR>
***  WHICH FORMAT TO BE DISPLAYED ? ***
  SOURCE DATA FORMAT =====> (1)
  RETRIEVAL PARAMETERS ===> (2)
***  SELECT 1 OR 2  ***
=1<CR>
****  SOURCE DATA  ****
SNO      4022-01-01
CS       (C6H5)2Hg
OXST     organic
ORXN     (*R*)2Hg + 2e <=> 2*R*(-) + Hg
ORXA     *R*= C6H5
SNO      4022-20-20
CS       (C6H5)2Hg
  ~
COMMAND (RETR, DISP, SAVE, AND, OR, ?, RESTART, END) ?
=
```

SAVEは被検索解レコード集合をＡＣＯＳ６のパーマネントファイルに格納する。

```
=SAVE<CR>
*** SAVE ***
FILE OLD OR NEW?
=
```

パーマネントファイルが存在するときはここでOLDと答える。

```
=OLD<CR>
INPUT THE FILE NAME WHICH SAVES THE RETRIEVED DATA.
=SENDFILE<CR>
```

パーマネントファイルがない場合、ここでNEWとすればＡＣＯＳ６のアクセスサブシステムが呼び出され、そこでパーマネントファイルを作成した後プログラムに戻る。

```
INPUT THE SAVED SET NUMBER.
```

```
=1<CR>
```

これで、原データのフォーマットでパーマネントファイル”ＳＥＮＤＦＩＬＥ”にデータが格納される。

```
COMMAND (RETR, DISP, SAVE, AND, OR, ?, RESTART, END) ?
=
```

(4)AND,(5)OR

プログラムＣＯＮＤＡＴＡにおけるAND及びORコマンドと同様である。

(6)END

プログラムECDATAを終了する。

```
=END<CR>
*** END OF ECDATA ***
SYSTEM ?
```

３．端末でのデータ利用

大型コンピューターのパーマネントファイルに格納されたデータを、端末のフロッピーディスク上にダウンロードする事により、得られたデータを端末のパソコン上で加工することができる。データの端末での利用は次の手順により行なう。

①前記の検索プログラムＣＯＮＤＵＣＴまたはＥＣＤＡＴＡにおけるＳＡＶＥコマンドによりパーマネントファイルに保存されたデータをフロッピーディスク（あるいは、他の適当な外部記憶装置）上にダウンロードする。

②データ書式をシミュレーションプログラムに合わせて変換する。

③適当なデータ編集を行なう事により、シミュレーションなど、応用が可能となる。

第３章．電気化学データベースのデータの構成

ＥＣＤＡＴＡ及びＣＯＮＤＡＴＡの内容は次の書式に従って記入されている。データは項目名ＳＮＯを区切りとして、一件一件のデータ集合に分かれている。項目名ＳＮＯと、次のＳＮＯまでの間に続く一群のデータが１レコードである。データの各桁の桁枠とその意味は次のようになっている。

		A	B	C	D	
1	2～5	6	7	8	9	10～72

1カラム　　：継続の印が入る

2～5カラム　：その項の項目名(ｱﾄﾘﾋﾞｭｰﾄ)

6～9カラム　：単位など

10～72カラム　：データの内容

アトリビュートの文字列は、10～72カラムに記入されるデータの意味を示す記号である。以下にＣＯＮＤＡＴＡ及びＥＣＤＡＴＡの各々について、アトリビュートごとにデータの内容を説明する。

１．電気伝導度データベース（ＣＯＮＤＡＴＡ）

ＣＯＮＤＡＴＡの内容は大きく二種類にわけられている。その内の一つは、測定データの掲載されている文献のでどころ、著者名、雑誌名、測定物質と測定条件など、文献情報の部である。これは後述の測定データに関する説明的情報である。もう一つは、測定番号、溶解質名、溶媒名とそれらの濃度、測定データ、その他の補助的情報が格納された測定データの部である。

１－１文献情報の部

ここには、主にデータを抽出した文献についての情報を記載する。

①文献番号（ＳＮＯ）

書式　＊＊＊＊　文献番号；文献出所

文献番号　　：５桁の数字で記入する。

文献出所　　：O～Original, C～Chemical Abstract

②文献の著者（ＡＵＴＲ）

書式　＊＊＊＊　著者名；著者名；．．．

著者名　　：文献の著者を次のように記入する。

1st author ,2nd author の頭文字 ,3rd author の頭文字

③データを引用した雑誌名（ＪＯＵＲ）

書式　＊＊＊＊　雑誌名；発行年；巻名；開始頁；言語

雑誌名　　：雑誌名をＣＯＤＥＮ（雑誌コード）で記入する。

発行年　　：西暦で、発行年を記入する。

巻名　　：ボリュームの名前を記入する。

開始頁　　：収録データの掲載頁を記入する。

言語　　：略号 ENG,GER,FR,RUSS,JPN,POL,ITAL,CH,HUNG,CZCH を用いて記入する。

１－２測定データの部

ここには、溶媒や溶質の物理化学的性質に関する測定データを記入する。

①データ引用文献番号（ＳＮＯＣ）

書式　＊＊＊＊　文献番号；SUBSTANCE番号；測定番号

文献番号　　：文献番号を５桁で記入する。

SUBSTANCE番号：同一文献番号で溶質が異なるとき、１から始まる２桁の数字でで記入する。

測定番号　　：SUBSTANCE番号が変化せず、測定条件が変化したときに、１から始まる２桁の数字で記入する。

溶媒のみの性質のときは、文献番号；０１；０２より始める。

②溶媒、溶質名とそれらの濃度（ＳＵＢＳ，ＳＯＬＶ）

書式　Ａ＊＊Ｄ　溶質（溶媒）名；濃度

濃度　　：値が一定の場合記入する。

Ａ　　：表１により濃度の単位を記入する。

Ｄ　　：溶質、溶媒の濃度が変化するとき4)に示すＤＡＴＡフィールドでの順番を記入する。

③補助的データ（データ名）

データ名　　：表１に従って、アトリビュートを記入する。

書式　ＡＢ＊Ｄ　データ値

Ａ　　：表１に従って、必要な場合のみ記入する。

Ｂ　　：表１に従って、必要な場合のみ記入する。

Ｄ　　：値が変化する場合に、④に示すＤＡＴＡフィールドでの順番を記入する。

データ値　　：値が一定の場合記入する。

④測定データ（ＤＡＴＡ）

書式　＊＊＊＊　１番のデータ；２番のデータ；．．．

ｎ番のデータ　：各アトリビュートの第４タグで記入した順番で、同一条件での値の組を記入する。

この欄は、各アトリビュートの最後に位置する。

２．電気化学反応パラメーター（ＥＣＤＡＴＡ）

ＥＣＤＡＴＡは電気化学反応に関する情報を３６のパラメーターに分けて記述している。原データの記述はＣＯＮＤＡＴＡと大きく異なるが、原データ各行の桁枠とその意味は共通である。

各タグの意味は次のようになっている。

Ａ　　：データ値の単位をＴＡＢＬＥに従って記入する。

Ｂ　　：データ値の意味をＴＡＢＬＥに従って記入する。

Ｃ　　：対応するコメントフィールドを示す。

D　　：値の引用を１～５の番号で示す。各番号の意味は下記のとうりである。

１．文献引用値

２．図からの読み取り値

３．仮定がある場合

４．文献引用値で、かつ図からの読み取りがある場合

５．計算値

以下に、ＥＣＤＡＴＡのデータの内容をアトリビュート毎に説明する。

①見出し番号（ＳＮＯ）

書式　＊＊＊＊　文献番号（６桁）－化学種識別番号（２桁）－データ識別番号（２桁）

②反応内容に関するパラメーター

ＣＳ（化学種），ＯＸＳＴ（最高原子価元素），

ＯＲＸＮ，ＯＲＸＡ（全電極反応及び、変数の内容）

書式　ＡＢＣＤ　化学式

ＮＯＳＮ（反応電子数）

書式　ＡＢＣＤ　混合比；全化学量論数；酸化方向；還元方向

③測定条件に関するパラメーター

ＷＥ（作用電極）

書式　ＡＢＣＤ　混合比；物質；電極形式；形状；面積

ＥＡＳ（反応活性物質），ＭＥＤＥ（支持電解質）

書式　ＡＢＣＤ　１濃度（圧力）；２物質（；１；２　最高４種まで）

ＭＥＤＡ（添加物）

書式　ＡＢＣＤ　１混入比；２物質（；１；２　最高４種まで）

ＭＥＤＳ（溶媒）

書式　ＡＢＣＤ　混合比；物質

ＰＨＩＳ（ｐＨとイオン強度）

書式　ＡＢＣＤ　ｐＨ；イオン強度

ＴＥＭＰ（温度）

書式　ＡＢＣＤ　温度

ＯＣＯＮ（その他の条件）

④測定データに関するパラメーター

ＥＬＰＯ（電極電位），ＡＴＣＭ，ＡＴＣＦ（酸化転移係数とその補正値），

ＣＴＣＭ，ＣＴＣＦ（還元転移係数とその補正値），ＡＴＳＬ（酸化方向のターフェル勾配），

ＡＣＥＮ（活性化エネルギー），ＣＴＳＬ（還元方向のターフェル勾配）

書式　ＡＢＣＤ　データ値

ＲＥＭＥ，ＲＣＦＲ（反応速度定数）

書式　ＡＢＣＤ　反応速度定数；測定電位；補正値

ＤＯＸ（拡散係数）

書式　ＡＢＣＤ　酸化拡散係数；溶液名

ＤＲＥＤ（拡散係数）

書式　ＡＢＣＤ　還元拡散係数；溶液名

⑤その他の条件に関するパラメーター

ＭＥＴＤ（実験方法）

書式　＊＊＊＊　実験方法；計算方法

ＲＡＮＧ（測定範囲）

書式　＊＊＊＊　電圧(V)；電流(A)；時間(s)；電極回転数(rpm)；滴下速度(mg/s)；周波数(Hz)；捜査速度(V/s)；パルス巾(s)

ＳＴＲＴ（表面処理），ＨＹＣＤ（撹拌状態），ＴＩＴＬ（タイトル），ＣＯＭＴ（コメント），ＲＥＦＥ（参照電極），ＡＵＴＲ（著者名），ＪＯＵＲ（文献）

書式　ＡＢＣＤ　データ値

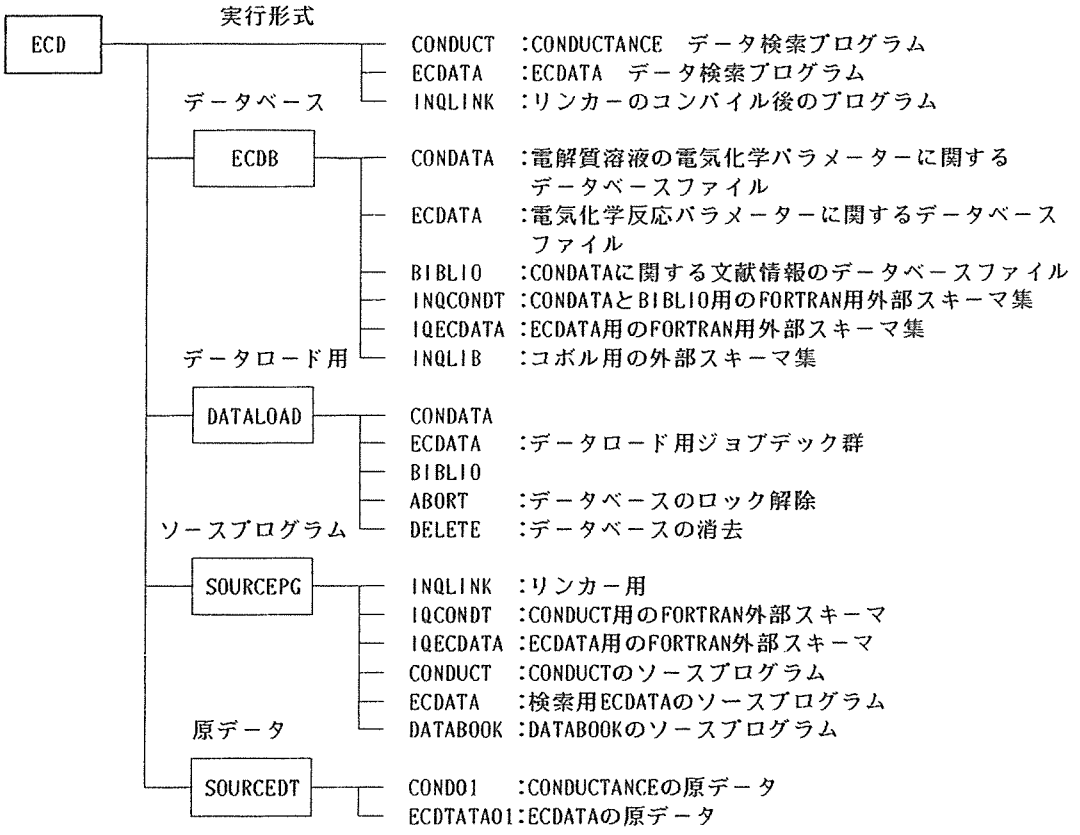

図1．電気化学データベースのファイル構成（四角枠内はカタログ名）

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

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

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

PASSWORD (BIBLIO          ) ?
  INQ CAT FILE ?  ECD/ECDB/BIBLIO  <CR>                     <--④
INQ CAT FILE ?
INQ FILE ?

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

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

     INQ DATA BASE RETRIEVE START

?
```

図２．ＥＱＬによる検索の初期入力例（ＢＩＢＬＩＯの場合）

表1　CONDATAのアトリビュートの記号とその意味及び単位

ｱﾄﾘﾋﾞｭｰﾄ	意味	単位
SNO	ｼﾘｱﾙﾅﾝﾊﾞｰ1	
SNOC	ｼﾘｱﾙﾅﾝﾊﾞｰ2	
AUTR	Author	
JOUR	Journal & Year,Vol	
SUBS	Substance	Table-1
SOLV	Solvent	Table-1
SPCD	Specific electric conductivity	$\Omega^{-1}cm^{-1}$
EQCO	Equivalent electric conductivity	$\Omega^{-1}cm^{2}/g$-equire
MOCO	Molar conductivity	$\Omega^{-1}cm^{2}mol^{-1}$
INCO	Equivalent electoric condactivity at infinite dilution	
DENS	Density	Table-8
VISC	Viscosity	Table-5
TRNO	Transport number	Table-10
DIFF	Diffusion coefficient	Table-3a,3b
ACTE	Activation energy	Table-6a,6b
ACTC	Activation coefficient	Table-2a,2b
MAFI	Magnetic field	Table-12
PRES	Pressure	Table-7
DIEL	Dielectric constant	
TEMP	Temperature	Table-11
DATA	Data	

TABLES～左肩の数字は、タグ位置を示す

CONDATAの部

Table-1 SUBS,SOLV

1	単位
–	Mol/l
1	g-eq/l
2	Mol/m^3
3	g-ep/m^3
4	wt%
5	mol%
6	vol%
7	Mol/kg of solv.
8	g-eq/kg of solv.
9	Mol/kg of soln

Table-2a ACTC(1)

1	
–	単位なし
1	相対値

Table-2b ACTC(2)

2	
–	Act.coef.
M	Mean act.coef.
C	Cation act.coef
A	Anion act.coef

Table-3a DIFF(1)

1	
–	cm^2/sec
1	cm^2/day
2	m^2/sec

Table-3b DIFF(2)

2	＊ Diff.coef.
–	＊
I	ntegral ＊
D	ifferential ＊

Table-4 VICO(1) 第２タグにA,B,..を記入。

1	A	B	D
–	$(dm^3mol^{-1})^{1/2}$	dm^3mol^{-1}	$(dm^3mol^{-1})^2$
1	–	$kg\cdot mol^{-1}$	$(kg\cdot mol^{-1})^2$

Table-5 VISC

1	
–	ﾎﾟｲｽﾞ g/cm・sec
1	ｾﾝﾁﾎﾟｲｽﾞ g/m・sec
2	kg/m・sec=Pa・s
3	kg/m・hr
4	lb/ft・sec
5	relative visc.
6	mNs/m^2
7	Ns/m^2

Table-6a ACTE(1)

1	
–	cal/mol
1	J/mol
2	eV

Table-6b ACTE(2)

2	
C	伝導の　～
D	拡散の　～
V	粘性流動の　～

Table-7 PRES

1	
–	atom
1	Pa
2	kg/cm^2
3	bar

Table-8 DENS

1	
–	g/cm^3
1	比重
2	relative density
3	kg/m^3

Table-9 KVIS

1	
–	cm^2/sec
1	m^2/sec

Table-10 TRNO

2	
C	Cation
A	Anion

Table-11 TEMP

1	
–	℃
1	K

Table-12 MAFI

1	
–	gauss
1	A/m

Table-13 COND

1	
–	cm系
1	m系

Table-14 第２タグ

2	
S	square root
L	log

Table-15 第３タグ

3	
R	reference 値
F	図からの読み取り
M	subs 濃度の mean value

ＥＣＤＡＴＡの部

Table-1 WE(1)

1	
−	単体
1	mol/l
2	体積比
3	モル比
4	重量比
7	モル分率
8	被覆率

Table-1b WE(2)

2	
−	単物質
B	合金
C	メッキ
D	被覆
E	混合物
F	被修飾

Table-2a EAS(1)

1	
−	mol/l
1	atm
2	mol%
3	wt%
4	mol/Kg

Table-2b EAS(2)

2	
−	化学式
A	化学式
B	化学名・慣用名

Table-3a MEDS(1)

1	
1	体積比
2	モル比
3	重量比
4	mol/l

Table-3b MEDS(2)

2	
A	水
B	水との混合溶媒
C	単一非水溶媒
D	混合非水溶媒
E	溶融塩
F	固体
G	重水

Table-4 MEDA

1	
0	mol/l
1	g/l
2	l/l
3	%
4	mol fraction
5	mol/cm^2

Table-5 MEDE

1	
−	mol/l
1	wt%

Table-6 ELPO

2	
A	NHE
B	SCE
C	O_2/CO_2
D	Hg
E	NCE
F	SHE
G	Fc(+)/Fc
H	RHE

Table-7 ATCM,ATCF

2	
A	Beta
B	nBeta

Table-8 CTCM,CTCF

2	
A	Alpha
B	nAlpha

Table-9 RCME,RCFR

1	2	
0	A	ks
2	A	log ks
4	A	ln ks
1	B	i0
3	B	log i0
5	B	ln i0
0	C	ka
2	C	log ka
4	C	ln ka
0	D	k[1/2]a
2	D	log k[1/2]a
4	D	ln k[1/2]a
0	E	kc
2	E	log kc
4	E	ln kc
0	F	k[1/2]c
2	F	log k[1/2]c
4	F	ln k[1/2]c
0	G	kf0
2	G	log kf0
4	G	ln kf0
0	H	kb0
2	H	log kb0
4	H	ln kb0
6	A	Rs
6	C	Ra
6	D	R[1/2]a
6	E	Rc
6	F	R[1/2]c
7	C	Ka/sqr(Dr)
7	E	Kc/sqr(Do)
8	A	Rs(-1)
8	C	RA(-1)
8	D	R[1/2]a(-1)
8	E	Rc(-1)
8	F	R[1/2]a(-1)
9	C	a(anodic)
9	E	a(cathodic)
0	I	Khi
2	I	log Khi
4	I	ln Khi
Khi = Koutechy's rete Khi		
0	J	K(s-1)
0	K	Kc(s-1)
0	L	Ka(s-1)