し、1999年くらいから学術刊行物専門出版社が、その雑誌をオンライン提供するようになることによって事情は大幅に変更された。

これらのオンラインジャーナルは、現在はPDFフォーマットによる提供が主流であるが、各社の動向を見る限り、今後はSGMLまたはXMLフォーマットに移行することがほぼ確実である。これは、全文検索を実現するために必要な移行であるとされている。そしてまた、そのことによりDOI (Digital Object Identifier) を利用する相互参照を実現して、論文を読みながら被参照文献をクリックひとつで読みにいけるというような環境を構成することができるようになる。このことを専門出版社は、CROSSREFというコンソーシアム

をつくって現在実現しようと努力しているところである。

もちろんこのような展開については、そのコストをどのように負担していくかという問題は残るが、これまでの文献検索・利用の様態が大きく変わりつつあることを否定できない。

●著者プロフィール

氏名：土屋 俊 Shun TSUCHIYA

所属：千葉大学附属図書館 (〒263-8522 千葉市稲毛区弥生町1-1)

役職：図書館長

2 電気化学の研究におけるインターネット利用

大谷 正幸

1 はじめに

15世紀ドイツの金細工職人による活版印刷技術の発明は、その後の人類の歩みを大きく変えてしまった。15世紀の印刷革命が16～17世紀における科学革命の技術的基盤となったことは歴史的事実であり¹⁾、印刷革命は面倒な写本や暗記から学者たちを解放し、知識の蓄積を容易にし、実験や思考に費やすことができる時間を大幅に増やした。研究成果が著書ないし雑誌論文として印刷公表されるようになったことで、先人の研究成果を踏まえた科学・技術の継続的発展が著しく促されるようになったのである。

15世紀の印刷革命が研究のあり方を変えたように、目下進行中のIT革命もまた研究のスタイルを変えつつある。15世紀の印刷革命は情報・知識の伝達手段を口承伝承から印刷メディアへと移行させ、情報・知識の伝達速度を大幅に速めた。IT革命は、電子メディアの活用によって情報・知識の伝達速度を著しく高速化することはもちろんのこと、情報・知識のあり方をマルチメディア化することを可能にする。というのも、すでに文字・映像・音はデジタル化されており、そこにインターネットという知識や情報を世界中で自由に交換・共有するためのインフラストラクチャーが供されたからである。

ここ数年の間に、インターネット上のサービスやシステムの中核をなしているWWW (World Wide Web) というしくみを利用して、HTML (Hyper Text Markup Language) 文書を目にする機会が格段に増えたことは紛れもない事実であろう。ネットワーク上に分散したデータをハイパーテキストによって結びつけるという構想は、もともとは欧州核物理学研究所 (CERN) でコンサルタントをしていたTim Berners-Leeが、世界各地に散らばっている核物理学研究者間の知識や情報の交換・共有に向けた効果的なシステムの構築のために提唱されたものであり、1991年、CERNで実現したものである²⁾。インターネットの商業利用ばかりが注目されているが、上のような経緯からもインターネットの研究

利用が期待されるのである。とりわけWWWは、ブラウザーウィンドウにテキストを表示するだけでなく、音声、静止画、動画といったマルチメディアを組み込む手段をも提供しており、Java ScriptやJavaを活用すれば、対話的で動的なウェブコンテンツを作成することもできる。さらに、VRMLやShockwave Director ファイルなどのさらに発展したメディアを表示することも可能である。このような情報伝達のためのアプリケーションを活用することで、たとえば、ある実験系において視覚的に確認できるような変化ならば、実験の様子をビデオ収録してHTMLファイルに貼り付ければ、レトリックを尽くすことなく効果的に実験の様子を伝えることができるだろう。また、数学的に複雑な理論的研究の場合、従来の印刷メディアでは方程式を眺めるだけで終わってしまいがちだが、電子メディア上ではその理論から予測される数値解を視覚的に把握しやすいように伝えることができる。インターネットを積極的に活用することは、教育・研究者の知識習得や概念理解を助け、学術・産業の発展を大いに促す可能性を有しているのである。

そこで本稿では、実際に電気化学の研究をウェブコンテンツとしてインターネット上で展開を試みた経験にもとづいて記そうと思う。

2 印刷メディアにおける困難

電気化学の研究におけるインターネット利用の有効性を理解していただくために、ひとまず従来の印刷メディアで直面する不都合について触れたい。そこで、著者が取り組んだ研究の一端を言及することをお許し願いたい。

チオール自己集合膜の電気化学的研究はナノテクノロジーにおける電気化学的アプローチの一つとしても活発な研究が進められてきたが、著者もまた酸化還元活性な自己集合単分子膜を被覆した電極のボルタンメトリック応答に関する研究に従事してきた。著者はそのボルタモグラムの形状が随分と

説明するための理論的な研究^{3,4)}に取り組んだ。それは電荷を有する自己集合単分子膜を被覆した電極/溶液界面における電位分布を考慮したボルタモグラム理論の構築であり、Smith-White の理論⁵⁾をベースにし、自己集合膜末端におけるイオン対生成を考慮したものである。それは電極上に固定された酸化還元活性種の酸化還元に伴う電荷の発生および消失による電位分布の変化を考慮することにはかならない。

Fig.1 は、その研究において用いた酸化還元活性種を固定した電極/溶液界面の様子とその数学モデルを表している。二つの誘電層（それぞれ誘電率 ϵ_1 , ϵ_2 , 厚み d_1 , d_2 ）に覆われた金属電極が溶液中に浸されているというイメージであり、酸化還元活性種は二つの誘電層の間に位置している。溶液相は濃度 C , 誘電率 ϵ_3 の 1:1 型支持電解質溶液を想定する。電極上の電荷密度を σ_M , 酸化還元活性種を含む面の電荷密度を σ_{PET} とし、拡散層の電位分布は Gouy-Chapmann モデルに従うとした。また、電極面からの距離を x とし、 $d_1 > x > 0$ および $d_1 + d_2 > x > d_1$ の領域には正味の電荷がないとすると、Gauss の法則に従って、位置 x における電位 $\phi(x)$ は、以下のように表すことができる。

$$\phi(x) = \frac{(d_1 - x)\sigma_M}{\epsilon_1 \epsilon_0} + \frac{d_2(\sigma_M + \sigma_{PET})}{\epsilon_2 \epsilon_0} + \phi_F \quad \text{at } d_1 \geq x \geq 0 \quad (1)$$

$$\phi(x) = \frac{(d_1 + d_2 - x)(\sigma_M + \sigma_{PET})}{\epsilon_2 \epsilon_0} + \phi_F \quad \text{at } d_1 + d_2 \geq x \geq d_1 \quad (2)$$

$$\tanh\left[\frac{F\phi(x)}{4RT}\right] = \tanh\left[\frac{F\phi_F}{4RT}\right] \exp[\kappa(d_1 + d_2 - x)] \quad \text{at } x \geq d_1 + d_2 \quad (3)$$

ここで、

$$\phi_F = \phi(d_1 + d_2) = \frac{2RT}{F} \sinh^{-1}\left[\frac{F(\sigma_M + \sigma_{PET})}{2RT\epsilon_3\epsilon_0\kappa}\right]$$

であり、 κ は Debye-Huckel 半径の逆数、 ϵ_0 は真空の誘電率である。なお、電位 $\phi(x)$ は溶液バルクの電位が基準に選ばれている。

さて、読者はハイパボリックタンジェントなる三角関数の描く軌跡がどのようなものか頭に描くことができるだろうか？ そもそも平方根の計算も容易なものではない。そして、ここで求めたいのは電流-電位曲線なのだから、さらに電極反応速度論に関わる Butler-Volmer 式を連立方程式に加えなければならない。さらなる方程式の記述は割愛するが、ボルタモグラムは連立された非線形方程式の解として与えられる。結局、コンピュータを利用した Newton-Raphson 法のような数値計算による以外に、ボルタモグラムの形状を描くことは無理なのである。しかも、方程式には複数の物理化学パラメータが含まれており、物理化学パラメータの組み合わせは無数に考えられる。

これまでの印刷メディアでは、定式化のプロセスが示され、いくつかの計算例が示されるのが慣わしであり、それは実際

Fig. 1 Schematic illustration of redox-active monolayer electrode/solution interface and the model used for the calculation of potential distribution.

の系に即したパラメータを使った計算結果を求める研究者にとっては不親切なものであった。数式の理解も大事だが、パラメータの値に依存してどのような実験結果が予測されるかを視覚的に訴えることは研究者の直感的理解を助けるだろう。インターネットはそのような研究者の要求に応えるものである。インターネットの普及と共に電気化学の実験と理論における弁証法的発展が促されることが期待されよう。

3 インターネット上での展開

電気化学の研究では、デジタルシミュレーションと呼ばれる手法を駆使した電気化学現象の解析が進められてきたが、商品化するほどの需要が見込めない特殊な系についてのデジタルシミュレーション用アルゴリズムは他の研究者が必要となきときに利用可能な情報資源としておくこともインターネットの有効な活用法である。その有望なテクノロジーを供するのが Sun Microsystems 社によって開発された JAVA 言語であり、Net Scape や Internet Explorer といった汎用ブラウザのウィンドウ上で実行可能なプログラム (Java Applet と呼ばれる) を供することができる。Java Applet はパソコンの OS が Mac か Windows か UNIX かといったことを問わず、教育・研究者はホームページを閲覧する要領でウェブサーバー上に用意されたウェブコンテンツにアクセスし、ブラウザのウィンドウ上でボルタモグラムのシミュレーション結果を得ることが可能となる。

そこで、2 節に記した電位分布を考慮した電極上に固定された酸化還元活性種のボルタモグラムをシミュレーションするためのアルゴリズムを導出し、それを Java Applet として HTML ファイルに組み込み、インターネット上での展開を試みた。Fig.2 は作成した Java Applet の Internet Explorer 上での出力結果である。画面左側に並んだ入力ボックスにパラメータの値を入力し、ボタンをクリックすることで数値計

Fig. 2 Voltammetric simulator displayed on the window of Internet Explorer.

Fig. 3 Effectiveness of announcement via internet.

算結果が電流-電位曲線として表示され、パラメータの組み合わせに依存したボルタモグラムの形状変化を視覚的に把握することが可能である。言うまでもなく、紙上でシミュレーションすることは不可能であり、下記 URL アドレスにアクセスしていただき、実際に体験していただいた方がよろしいかと思う。

<http://www.kanazawa-bidai.ac.jp/~momo/qrcv/QRCV.htm>

4 インターネットの波及効果

近年、印刷メディア上で発表される学术论文の中に、その末尾や欄外に補足的なデータをインターネット経由で配布している旨のことが記されたものが増えてきた。著者もまたその例に倣って、電極上に固定された酸化還元活性種のボルタモグラムについて導出した理論にもとづくシミュレーションがインターネット経由で利用可能であることを論文の末尾に書き添えた。そのようなアナウンスが果たしてどの程度効果的なのかを調べた結果を Fig. 3 に示す。Fig. 3 はウェブサーバーに記録されているアクセス履歴から計数した 1 週間あた

りのアクセス数をプロットしたものである。ここで、同一の IP アドレスから一日に複数回アクセスがあった場合は、1 回として数えている。Electrochem. Commun. 誌に論文掲載後、30 週目までのアクセス数は少なかったが、30 週目以降にアクセス数の顕著な増加がみられた。この変化は、シミュレーターを組み込んだウェブコンテンツが、Case Western Reserve 大学の Ernest B. Yeager センターが収集している電気化学関連の情報資源 (Education Material) としてリンクされたことによる。そのサイトはアルゴン国立研究所の Zoltan Nagy 博士によって管理されている "Electrochemical Science and Technology Information Resource (ESTIR)" というサイトであり、世界中の電気化学に関連した情報資源を網羅している。ESTIR の URL アドレスは下記の通りである。

<http://electrochem.cwru.edu/estir/inet.htm>

Fig. 3 から判断する限りでは、情報伝達において電子メディアが印刷メディアに優ると言わざるをえないだろう。WWW は世界各地に散らばっている研究者間の知識や情報の交換・共有に向けた効果的なシステムを実現することを目指したものであったが、WWW がまさにその効果的なシステムであることを実証するデータであるように思われる。

5 おわりに

印刷メディアでは不可能な動的な視覚的表現や双方向性といった情報のマルチメディア化は電子メディアによって実現可能となった。インターネットを積極的かつ効果的に活用することは電気化学に関連した学術・産業の発展に資するものと期待される。先進諸国における「理工系離れ」が叫ばれて久しく、また、わが国では「大学生の学力低下」ということも嘆かれてはいるが、21 世紀の環境・エネルギー問題に対処する上でも電気化学への期待は大きい。いかにして次代を担う若者を惹き込むかという観点からもインターネットは強力なツールとなるであろう。

文 献

- 1) 成定 薫, 電気情報通信学会技術研究報告, 100, 25 (2000).
<http://www.ne.jp/asahi/coffee/house/ARG/record-031.html>
- 2) 朝尾幸次郎, 英語コーパス, 4, 49 (1997).
<http://www.ne.jp/asahi/coffee/house/ARG/record-022.html>
- 3) M. Ohtani, S. Kuwabata, and H. Yoneyama, *Anal. Chem.*, 69 1045 (1997).
- 4) M. Ohtani, *Electrochem. Commun.*, 1, 488 (1999).
- 5) C.P. Smith and H.S. White, *Anal. Chem.*, 64, 2398 (1992).

●著者プロフィール

氏名: 大谷 正幸 Masayuki OHTANI
所属: 金沢美術工芸大学 (〒920-0942 金沢市小立野 5-11-1)
役職: 講師
趣味: 盆栽, 読書