



JAEA-Data/Code

2007-009



JP0750243

JAEA-Data/Code

OECD/NEAで選定された熱力学データの 利用環境の整備(その3)

-Ni, Se, Zrおよび有機物配位子の熱力学データベースファイルの作成-

Establishment of Data Base Files of Thermodynamic Data Developed
by OECD/NEA (Part III)

- Thermodynamic Data of Ni, Se, Zr and Organic Ligands -

吉田 泰* 北村 暁

Yasushi YOSHIDA* and Akira KITAMURA

地層処分研究開発部門

核種移行研究グループ

Radionuclide Migration Research Group

Geological Isolation Research and Development Directorate

March 2007

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。
本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ (<http://www.jaea.go.jp/index.shtml>)
より発信されています。このほか財団法人原子力弘済会資料センター*では実費による複写頒布を行っ
ております。

〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4
日本原子力研究開発機構 研究技術情報部 研究技術情報課
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920

*〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4 日本原子力研究開発機構内

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to
Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Department,
Japan Atomic Energy Agency
2-4 Shirakata Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920

OECD/NEA で選定された熱力学データの利用環境の整備 (その3)

— Ni, Se, Zr および有機物配位子の熱力学データベースファイルの作成 —

日本原子力研究開発機構 地層処分研究開発部門 地層処分基盤研究開発ユニット

吉田 泰*, 北村 暁

(2007年1月19日受理)

OECD/NEA の TDB (Thermodynamic Data Base) プロジェクトでは、放射性廃棄物の地層処分における性能評価上重要なアクチニドおよび核分裂性生成物などの熱力学データベースの開発が行われている。JAEA でも熱力学データベースの開発を行っており、その信頼性の評価には OECD/NEA のデータベースとの比較が必要である。本報告では、OECD/NEA のデータベースのうち、2005年に公開された Ni, Se, Zr および有機物配位子の熱力学データベースについて、地球化学計算の結果により、JAEA で開発している熱力学データベースと比較検討を行うために、地球化学計算コードで読み込み可能な熱力学データベースファイルとして整備した。整備された熱力学データベースファイルは、主要な地球化学コードである、PHREEQE, PHREEQC, EQ3/6 および Geochemist's Workbench で利用可能である。

また、TRU 第2次取りまとめにおいて作成された熱力学データベースについても地球化学計算コードに対応した熱力学データベースファイルを作成した。

Establishment of Data Base Files of Thermodynamic Data Developed by OECD/NEA (Part III)

— Thermodynamic Data of Ni, Se, Zr and Organic Ligands —

Yasushi YOSHIDA* and Akira KITAMURA

Geological Isolation Research Unit
Geological Isolation Research and Development Directorate
Japan Atomic Energy Agency
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received January 19, 2007)

Thermodynamic data base for compounds and complexes of actinides and fission products with auxiliary species specialized in modeling requirements for safety assessments of radioactive waste disposal systems are being developed by the TDB project of OECD/NEA. In the project, thermochemical data bases for compounds and complexes of Ni, Se, Zr and organic ligands have been published in 2005. The data base files of these data available for geochemical calculation codes have been established in the present study for the comparison to the TDB developed by JAEA to assess reliability of it in chemical modelling. The procedure for establishment and contents of data base files are described in this report. These data base files are prepared as the formats of major geochemical codes of PHREEQE, PHREEQC, EQ3/6 and Geochemist's Workbench.

The thermodynamic data base for the evaluation of alteration behavior of engineered barrier system in the TRU 2nd progress report has been already published by JNC. The abstract of this data base file is also shown in the appendix of this report.

Keywords : OECD/NEA Thermodynamic Database, PHREEQE, PHREEQC, EQ3/6, Geochemist's Workbench

* NESI Inc.

目 次

1. 緒言	1
2. 熱力学データベース利用環境の整備	3
2.1 OECD/NEA における熱力学データ整備の概要	3
2.2 OECD/NEA で整備された Ni, Se, Zr および organic ligands の熱力学データ	4
2.3 熱力学データベースファイルの作成	8
2.3.1 熱力学データベースファイル作成の手順	8
2.3.2 熱力学データベースファイルの変換	9
2.3.3 作成を行った Ni,Se,Zr および organic ligands の 熱力学データベースファイルについて	11
3. おわりに	12
参考文献	13
別添 1 TRU 第2次取りまとめの人工バリア変質評価用に開発された TDB	15
別添 2 各フォーマットの熱力学データベースファイル (添付 CD)	添付 CD

Contents

1. Introduction	1
2. Establishment of data files for thermodynamic data	3
2.1 TDB project of OECD/NEA	3
2.2 Thermodynamic data of Ni, Se, Zr and organic ligands selected by OECD/NEA	4
2.3 Establishment of thermodynamic data base files for geochemical calculation code	8
2.3.1 Procedure of establishment of thermodynamic data base files	8
2.3.2 Format conversion	9
2.3.3 Data base files including thermodynamic data of Ni, Se, Zr and organic ligands	11
3. Conclusion	12
References	13
Appendix 1 TDB for evaluation of alteration behavior of engineered barrier in the TRU 2nd progress report	15
Appendix 2 Data files	attached CD

表目次

表 1	熱力学データベースファイルへの整備を行った Ni の液中化学種および固相・気相	4
表 2	熱力学データベースファイルへの整備を行った Se の液中化学種および固相・気相	5
表 3	熱力学データベースファイルへの整備を行った Zr の液中化学種および固相・気相	6
表 4	熱力学データベースファイルへの整備を行った organic ligands の液中化学種および固相・気相	7

図目次

図 1	変換フロー	9
図 2	PHREEQE コードの熱力学データベースファイルのフォーマットのイメージ	9
図 3	PHREEQC コードの熱力学データベースファイルのフォーマットのイメージ	9
図 4	EQ3/6 コードの熱力学データベースファイルのフォーマットのイメージ	10
図 5	GWB コードの熱力学データベースファイルのフォーマットのイメージ	10

1. 緒言

高レベル放射性廃棄物の地層処分環境における化学的特性は、地層処分の性能評価において用いられる各種パラメータに大きな影響を与える。そのため、人工バリアおよび天然バリアにおける化学的な場の特性について評価が必要である。しかし、評価が必要な期間が超長期となり、実験的に得られた結果を直接的に適用することはできない。そのため、通常化学的に平衡となる系を仮定した地球化学計算により熱力学的にその傾向性が評価される。

地球化学計算の信頼性は、計算の入力情報のひとつである熱力学データベースに大きく依存する。そのため、日本原子力研究開発機構(JAEA) (以下原子力機構) では、熱力学データベース開発に関する研究を行っており、1999年に処分環境における放射性元素の溶解度を計算するための熱力学データベース (JNC-TDB) ¹⁾を作成した。

熱力学データベースの開発は OECD/NEA でも実施されている。OECD/NEA では、地層処分環境下で重要と考えられる放射性元素に対して、その熱力学データ整備を行っており³⁻⁵⁾、データの追跡性が確保され、データ選定の指針が明確に示されている。NEA TDB プロジェクトでは U (Grenthe, et al.⁶⁾), Am (Silva, et al.⁷⁾), Tc (Rard, et al.⁸⁾), Np および Pu (Lemire, et al.⁹⁾), U, Am, Tc, Np および Pu の更新データ(Guillaumont, et al.¹⁰⁾), さらに最近では 2005年に Se (Olin, et al.¹¹⁾), Ni (Gamsjäger, et al.¹²⁾), Zr (Brown, et al.¹³⁾)および organic ligands (溶液中で錯体を形成する有機物の配位子としてシュウ酸, クエン酸, エチレンジアミン 4 酢酸およびイソサッカリン酸を対象としている) (Hummel, et al.¹⁴⁾)についてデータベースが公開されている。

JAEA における熱力学データベース開発において、より信頼性の高い熱力学データベースを作成するには、OECD/NEA の熱力学データベースとの比較検討が必要である。この比較検討には、熱力学データの単純な値の比較だけでなく、地球化学計算の結果を比較することが有効である。地球化学計算は、複雑な化学系における平衡状態を導出する必要があるが、通常、そのような計算には地球化学計算コードが用いられる。

地球化学計算コードとは系のトータルマスバランスと反応定数に関する熱力学データを用いた連立方程式を解くことにより平衡状態における溶液中の化学状態を求めるプログラムである。JAEA では、地球化学計算コード PHREEQE ²⁾を主要な地球化学計算コードのひとつとして用いており、収集した熱力学データは PHREEQE フォーマットのデータベースファイル (以下、熱力学データベースファイル) として整備している。

一方、OECD/NEA より報告されている熱力学データは地球化学計算コードで利用できる熱力学データベースファイルとして整備されていない。そのため、JAEA では、OECD/NEA により報告されたデータの熱力学データベースファイルとしての整備を実施している。これまで U, Am, Tc, Np, Pu および auxiliary (放射性元素以外に OECD/NEA により熱力学データが選定された液中化

学種および固/気相)の熱力学データについては、熱力学データベースファイルへの取り込みが終了している¹⁵⁻¹⁷⁾。さらに OECD/NEA が 2005 年に公開した、Se (Olin, et al.¹¹⁾、Ni (Gamsjäger, et al.¹²⁾、Zr (Brown, et al.¹³⁾および organic ligands (Hummel, et al.¹⁴⁾の熱力学データについても熱力学データベースファイルへの整備を実施している。

本報告書では、OECD/NEA における熱力学データの整備の概要および熱力学データファイルへの取り込みを行った Ni, Se, Zr および有機物配位子の液中化学種および固/気相を示し (2.1 および 2.2)、さらに熱力学データベースファイル作成手順を説明 (2.3.1 および 2.3.2) し、最後に熱力学データベースファイルの整備状況を示す (2.3.3)。作成した熱力学データベースファイルは PHREEQE²⁾、PHREEQC¹⁸⁾、EQ3/6¹⁹⁾および Geochemist's Workbench²⁰⁾ (GWB)に対応するものである。データベースファイルのフォーマット変換には、フォーマット変換プログラム (ppcn14_5, green.exe および phgwb10)²¹⁾を用いた。

また、TRU 第 2 次取りまとめにおいて作成された熱力学データファイルを本報告書の別添 1 に示す。この熱力学データファイルは原子力機構の熱力学・収着データベースのホームページ (<http://migrationdb.jaea.go.jp/>)で公開を行っている。

整備を行った熱力学データファイルの電子データを別添 CD に格納する。別添 CD には 050000 と 050700 のフォルダーがあり、050000 のフォルダーには今回整備を行った熱力学データベースファイルを、050700 には TRU 第 2 次取りまとめで開発された熱力学データベースファイルを格納している。

2. 熱力学データベース利用環境の整備

2.1 OECD/NEA における熱力学データ整備の概要

NEA TDB プロジェクトは包括的で内部整合性があり、国際的に認知され、品質が保証された熱力学データベースを作成することを目的としており、特に放射性廃棄物地層処分システムの性能評価に資する信頼性のある熱力学データの選定を実施している。データ整備はアクチニド (U, Np, Pu および Am)、核分裂生成物 (Se および Zr) および放射化生成物 (Ni) の錯体および固相・気相に対して行われており、また、いくつかの有機物との化合物についてもデータを整備している。

熱力学データの選定は各国の専門家により組織されたレビューチームにより行われ、以下の点を満足することを目的としたデータベースの開発が行われている (NEA TDB プロジェクトホームページ, <http://www.nea.fr/html/dbtdb/>)。

- ・放射性廃棄物地層処分の性能評価上重要なすべての元素を含む
- ・データを選択した理由および整備までの方法を記述する
- ・データ集や推定値よりも実験データを基本とする
- ・用いられた実験データの出典を明確にする
- ・内部整合性を確保する
- ・放射性廃棄物地層処分重要であるすべての溶液化学種および固相・気相を対象とする

これらのデータ収集および整備では、熱力学データ (ギブス自由エネルギー、エンタルピー、エントロピーおよび熱容量) が対象であり、速度論データ、拡散および収着に関するデータは含まれていない。

熱力学データは、実験値をもとに、イオン強度 0 への外挿により導出されており、活量補正は Specific Ion Interaction Equations (SIT) ²²⁾ を用いている。

2.2 OECD/NEA で整備された Ni, Se, Zr および organic ligands の熱力学データ

NEA TDB プロジェクトで最終的にデータベースとしてまとめられているデータはギブスの自由エネルギー ($\Delta_f G^\circ$), エンタルピー ($\Delta_f H^\circ$), エントロピー (S°) であり, これらのデータを導出するために用いられた補助データ (auxiliary data) である一般の液中化学種や固相・気相の熱力学データおよび活量補正を行う SIT パラメータも同様にデータベースとしてまとめられている。

Ni, Se, Zr および organic ligands の液中化学種および固/気相のうちギブスの自由エネルギーが選定され, かつ平衡定数の導出が可能なものは Ni の液中化学種が 21 個, 固相・気相が 30 個, Se の液中化学種が 36 個, 固相・気相が 66 個, Zr の液中化学種が 24 個, 固相・気相が 51 個, organic ligands の液中化学種が 17 個, 固相・気相が 5 個である。データファイルへの整備はこれらの液中化学種および固/気相に対して行った。液中化学種および固相・気相名を表 1, 2, 3 および 4 に示す。

表 1 熱力学データベースファイルへの整備を行った Ni の液中化学種および固相・気相

system	Aqueous species	Solids and gases
Ni	Ni(l), Ni ²⁺	Ni(cr), Ni(g)
Ni-O		NiO(cr)
Ni-O-H	NiOH ⁺ , Ni(OH) ₃ , Ni ₂ OH ³⁺ , Ni ₄ (OH) ₄ ⁴⁺	β -Ni(OH) ₂ ,
Ni-C-O	NiCO ₃ (aq)	NiCO ₃ (cr)
Ni-C-O-H		NiCO ₃ ·5.5H ₂ O(cr)
Ni-F	NiF ⁺	NiF ₂ (cr)
Ni-Cl	NiCl ⁺	NiCl ₂ (cr)
Ni-Cl-O-H		NiCl ₂ ·2H ₂ O(cr), NiCl ₂ ·4H ₂ O(cr), NiCl ₂ ·6H ₂ O(cr)
Ni-P-O	NiP ₂ O ₇ ²⁻	
Ni-P-O-H	NiHPO ₄ (aq), HNiP ₂ O ₇ ,	
Ni-N-O	NiNO ₃ ⁺	
Ni-Si-O		Ni ₂ SiO ₄ (oliv)
Ni-S		α -NiS, β -NiS, NiS ₂ (cr), Ni ₃ S ₂ (cr), Ni ₉ S ₈ (cr)
Ni-S-O	NiSO ₄ (aq)	NiSO ₄ (cr)
Ni-S-H	NiHS ⁺	
Ni-S-O-H		α -NiSO ₄ ·6H ₂ O, β -NiSO ₄ ·6H ₂ O, NiSO ₄ ·7H ₂ O
Ni-SCN	Ni(CN) ₄ ²⁻ , Ni(CN) ₅ ³⁻ , NiSCN ⁺ , Ni(SCN) ₂ (aq), Ni(SCN) ₃ ⁻	
Ni-As		NiAs(cr), Ni ₅ As ₂ (cr), Ni ₁₁ As ₈ (cr)
Ni-As-O		Ni ₃ (AsO ₃) ₂ (cr,hyd)
Ni-As-O-H	NiHAsO ₄ (aq)	Ni ₃ (AsO ₄) ₂ ·8H ₂ O(cr)
Ni-Br		NiBr ₂ (cr)
Ni-I		NiI ₂ (cr)
Ni-I-O		β -Ni(IO ₃) ₂
Ni-I-O-H		Ni(IO ₃) ₂ ·2H ₂ O(cr)

* Species および solids and gases の化学式は Gamsjäger, et al.¹²⁾ と同じ表記としている

表 2 熱力学データベースファイルへの整備を行った Se の液中化学種および固相・気相

System	Aqueous Species	Solids and gases
Se	Se ²⁻ , Se ₂ ²⁻ , Se ₃ ²⁻ , Se ₄ ²⁻	Se(cr, =trigonal), Se(mono), Se(g), Se ₂ (g), Se ₃ (g), Se ₄ (g), Se ₅ (g), Se ₆ (g), Se ₇ (g), Se ₈ (g)
Se-O	SeO ₃ ²⁻ , SeO ₄ ²⁻	
Se-H	HSe ⁻ , H ₂ Se(aq)	H ₂ Se(g)
Se-H-O	HSeO ₃ ⁻ , HSeO ₄ ⁻ , H ₂ SeO ₃ (aq)	
Se-Li-O-H		Li ₂ SeO ₄ ·H ₂ O(cr)
Se-S		SeS(g)
Se-F	SeF ₄ (l)	SeF ₄ (g), SeF ₆ (g)
Se-O-F	SeOF ₂ (l)	SeOF ₂ (g),
Se-N-H		NH ₄ HSe(cr)
Se-N-O-N		(NH ₄) ₂ SeO ₄ (cr)
Se-Ni		Ni _{0.88} Se(cr), NiSe ₂ (cr)
Se-Ni-O	NiSeO ₄ (aq)	
Se-Ni-O-H		NiSeO ₃ ·2H ₂ O(cr), NiSeO ₄ ·6H ₂ O(cr)
Se-Cu		α-CuSe, β-CuSe
Se-Cu-O		CuSeO ₄ ·5H ₂ O(cr)
Se-Ag		α-Ag ₂ Se
Se-Ag-O		Ag ₂ SeO ₃ (cr), Ag ₂ SeO ₄ (cr)
Se-Zn		α-ZnSe, ZnSeO ₄ ·6H ₂ O(cr)
Se-B		BSe ₂ (g)
Se-Al		AlSe(g)
Se-Tl-O		Tl ₂ SeO ₄ (cr)
Se-C	CSe ₂ (l)	CSe(g), CSe ₂ (g)
Se-Si		SiSe(g)
Se-Cl	Se ₂ Cl ₂ (l)	SeCl ₂ (g), SeCl ₄ (g), Se ₂ Cl ₂ (g)
Se-O-Cl	SeOCl ₂ (l)	SeOCl ₂ (g)
Se-Br		SeBr ₂ (g)
Se-SCN	SeCN ⁻ , TlSeCN(aq), ZnSeCN ⁺ , Zn(SeCN) ₂ (aq), CdSeCN ⁺ , Cd(SeCN) ₂ (aq), Cd(SeCN) ₃ , Cd(SeCN) ₄ ²⁻ , Hg(SeCN) ₂ (aq), Hg(SeCN) ₃ , Hg(SeCN) ₄ ²⁻ , NiSeCN ⁺ , Ni(SeCN) ₂ (aq),	Cd(SCN) ₂ (cr), AgSeCN(cr)
Se-Mg-O	MgSeO ₄ (aq)	
Se-Mg-O-H		MgSeO ₃ ·6H ₂ O(cr), MgSeO ₄ ·6H ₂ O(cr)
Se-Ca-O	CaSeO ₄ (aq)	
Se-Ca-O-H		CaSeO ₃ ·H ₂ O(cr), CaSeO ₄ ·2H ₂ O(cr)
Se-Sr-O		SrSeO ₃ (cr)
Se-Ba-O		BaSeO ₃ (cr), BaSeO ₄ (cr)
Se-Na-O		Na ₂ SeO ₃ (cr)
Se-Na-O-H		Na ₂ SeO ₄ ·10H ₂ O(cr)
Se-K-O		K ₂ SeO ₄ (cr)
Se-Rb-O		Rb ₂ SeO ₄ (cr)
Se-Cs-O		Cs ₂ SeO ₄ (cr)
Se-Cd		α-CdSe
Se-Cd-O	CdSeO ₄ (aq)	CdSeO ₃ (cr)
Se-Hg	HgSe ₂ ²⁻	α-HgSe
Se-Hg-O	Hg(SeO ₃) ₂ ²⁻	HgSeO ₃ (cr), Hg ₂ SeO ₃ (cr)
Se-Sn		SnSe(g)
Se-Pb		PbSe(cr), PbSe(g)
Se-Pb-O		PbSeO ₃ (cr), PbSeO ₄ (cr)
Se-U		USe(cr)
Se-U-O	UO ₂ SeO ₄ (aq)	

* Species および solids and gases の化学式は Olin, et al. ¹¹⁾ と同じ表記としている

表 3 熱力学データベースファイルへの整備を行った Zr の液中化学種および固相・気相

system	Aqueous species	Solids and gases
Zr	Zr ⁴⁺	Zr(cr), Zr(g)
Zr-H		ZrH(cr), ε-ZrH ₂
Zr-O		ZrO(g), ZrO ₂ (monoclinic), ZrO ₂ (g)
Zr-H-O	ZrOH ³⁺ , Zr(OH) ₂ ²⁺ , Zr(OH) ₄ (aq), Zr(OH) ₆ ²⁻ , Zr ₃ (OH) ₄ ³⁺ , Zr ₃ (OH) ₉ ³⁺ , Zr ₄ (OH) ₈ ⁸⁺ , Zr ₄ (OH) ₁₅ ⁺ , Zr ₄ (OH) ₁₆ (aq)	
Zr-C		ZrC(cr)
Zr-C-O	Zr(CO ₃) ₄ ⁴⁺	
Zr-Si		ZrSiO ₄ (cr)
Zr-Si-Na-O		Na ₂ ZrSiO ₅ (cr), Na ₂ ZrSi ₂ O ₇ (cr), Na ₂ ZrSi ₃ O ₉ ·2H ₂ O(cr), Na ₂ ZrSi ₄ O ₁₁ (cr), Na ₂ ZrSi ₄ O ₁₁ (cr), Na ₂ ZrSi ₆ O ₁₅ ·3H ₂ O(cr), Na ₄ Zr ₂ Si ₃ O ₁₂ (cr)
Zr-P-Na-O		NaZr ₂ P ₃ O ₁₂ (cr)
Zr-Si-Ca-O		Ca ₂ ZrSi ₃ O ₁₂ (cr), Ca ₃ ZrSi ₂ O ₉ (cr)
Zr-Si-Sr-O		SrZrSi ₂ O ₇ (cr)
Zr-S-O	ZrSO ₄ ²⁺ , Zr(SO ₄) ₂ (aq), Zr(SO ₄) ₃ ²⁻	
Zr-N		ZrN(cr)
Zr-N-O	ZrNO ₃ ³⁺ , Zr(NO ₃) ₂ ²⁺	
Zr-P-O-H		α-Zr(HPO ₄) ₂ , Zr(HPO ₄) ₂ ·H ₂ O(cr)
Zr-F	ZrF ³⁺ , ZrF ₂ ²⁺ , ZrF ₃ ⁺ , ZrF ₄ (aq), ZrF ₅ ⁻ , ZrF ₆ ²⁻	ZrF(g), ZrF ₂ (g), ZrF ₃ (g), β-ZrF ₄ , ZrF ₄ (g)
Zr-Cl	ZrCl ³⁺ , ZrCl ₂ ²⁺	ZrCl(cr), ZrCl(g), ZrCl ₂ (cr), ZrCl ₂ (g), ZrCl ₃ (cr), ZrCl ₃ (g), ZrCl ₄ (cr), ZrCl ₄ (g)
Zr-Br		ZrBr ₄ (g)
Zr-I		ZrI(cr), ZrI(g), ZrI ₂ (cr), ZrI ₂ (g), ZrI ₃ (cr), ZrI ₃ (g), ZrI ₄ (cr), ZrI ₄ (g)
Zr-S		ZrS _{1.5} (cr), ZrS ₂ (cr), ZrS ₃ (cr), Zr(SO ₃) ₂ (cr), Zr(SO ₄) ₂ (cr), Zr(SO ₄) ₂ ·4H ₂ O(cr)

* Species および solids and gases の化学式は Brown, et al.¹³⁾ と同じ表記としている

表 4 熱力学データベースファイルへの整備を行った organic ligands の液中化学種および固相・気相

	system	Aqueous species	Solids and gases
ox*	ox	ox ²⁻ ,	
	H-ox	Hox ⁻ , H ₂ ox(aq)	α-H ₂ ox
	Ni-ox	Ni(ox)(aq), Ni(ox) ₂ ²⁻	
	Am-ox	Am(ox) ⁺ , Am(ox) ₂ ⁻ , Am(ox) ₃ ³⁻	
	Mg-ox	Mg(ox)(aq), Mg(ox) ₂ ²⁻	
	Ca-ox	Ca(ox)(aq), Ca(ox) ₂ ²⁻	Ca(ox)·H ₂ O(cr), Ca(ox)·2H ₂ O(cr), Ca(ox)·3H ₂ O(cr)
	U-ox	UO ₂ ox(aq), UO ₂ (ox) ₂ ²⁻ , UO ₂ (ox) ₃ ⁴⁻	UO ₂ ox·3H ₂ O
	Np-ox	NpO ₂ ox ⁻ , NpO ₂ (ox) ₂ ³⁻	
cit*	cit	cit ³⁻	
	H-cit	Hcit ²⁻ , H ₂ cit ⁻ , H ₃ cit(aq)	H ₃ cit(cr)
	H-O-H		H ₃ cit·H ₂ O(cr)
	Ni-cit	Ni(cit) ⁻ , Ni(cit) ₂ ⁴⁻	
	Ni-H-cit	Ni(Hcit)(aq), Ni(H ₂ cit) ⁺	
	Am-cit	Am(cit)(aq), Am(cit) ₂ ³⁻	
	Am-H-cit	Am(Hcit) ⁺ , Am(Hcit) ₂ ⁻	
	NpO ₂ cit ₂ ²⁻	NpO ₂ cit ²⁻	
	U-O-cit	UO ₂ cit ⁻ , (UO ₂) ₂ (cit) ₂ ²⁻ , UO ₂ (Hcit)(aq)	
	Mg-cit	Mg(cit) ⁻	
	Mg-H-cit	Mg(Hcit)(aq), Mg(H ₂ cit) ⁺	
	Ca-cit	Ca(cit) ⁻	
	Ca-H-cit	Ca(Hcit)(aq), Ca(H ₂ cit) ⁺	
	Ca-O-H-cit		Ca ₃ (cit) ₂ ·4H ₂ O(cr)
edta*	edta	Edta ⁴⁻	
	H-edta	Hedta ³⁻ , H ₂ edta ²⁻ , H ₃ edta ⁻ , H ₄ edta(aq), H ₅ edta ⁺ , H ₆ edta ²⁺	H ₄ edta(cr)
	Ni-edta	Niedta ²⁻	
	Ni-H-edta	Ni(Hedta) ⁻	
	Am-edta	Am(edta) ⁻	
	Am-H-edta	Am(Hedta)(aq)	
	Pu-edta	Pu(edta) ⁻	
	Pu-H-edta	Pu(Hedta)(aq)	
	Np-edta	Np(edta)(aq)	
	Np-O-edta	NpO ₂ edta ³⁻	
	Np-O-H-edta	NpO ₂ (Hedta) ²⁻ , NpO ₂ (H ₂ edta) ⁻	
	U-edta	Uedta(aq)	
	U-O-edta	UO ₂ edta ²⁻ , (UO ₂) ₂ edta(aq)	
	U-O-H-edta	UO ₂ (Hedta) ⁻	
	Mg-edta	Mg(edta) ²⁻	
	Mg-H-edta	Mg(Hedta) ⁻	
	Ca-edta	Ca(edta) ²⁻	
	Ca-H-edta	Ca(Hedta) ⁻	
	Na-edta	Na(edta) ³⁻	
	K-edta	K(edta) ³⁻	
isa*	isa	Isa ⁻	
	H-isa	Hisa(aq)	
	Ca-isa	Ca(isa) ⁺	Ca(isa) ₂ (cr)

* シュウ酸を ox, クエン酸を cit, エチレンジアミン 4 酢酸を edta, イソサッカリン酸を isa と表記する

** Species および solids and gases の化学式は Hummel, et al. ¹⁴⁾ と同じ表記としている

2.3 熱力学データベースファイルの作成

2.3.1 熱力学データベースファイル作成の手順

地球化学計算コードでは、熱力学データベースファイルに格納されている平衡定数により計算を行う。よって、Ni, Se, Zr および organic ligands のギブスの生成自由エネルギーを用いて Ni, Se, Zr および organic ligands の液中化学種および固相・液相の平衡定数を導出し熱力学データベースファイルの整備を行った。平衡定数導出に際してはギブスのエネルギーと平衡定数の関係式 ($\Delta_r G^\circ(T) = -RT \ln K(T)$) を用いた。ギブスの反応自由エネルギーから平衡定数 ($\log K$) への変換に用いた式を以下に示す。

$$\log K = -\Delta_r G^\circ / (\ln 10 \times R \times T_{25^\circ\text{C}}) \times 1000$$

$\Delta_r G^\circ$: ギブスの反応自由エネルギー [kJ/mol]

R : 気体常数, 8.314510 [J/K/mol]

$T_{25^\circ\text{C}}$: 摂氏 25°Cにおける絶対温度, 298.15 [K]

気体常数(R)および絶対温度($T_{25^\circ\text{C}}$)は Hummel, et al.¹⁴⁾で用いられている値を用いた。有効数字の取り扱いについても、Hummel, et al.¹⁴⁾に準拠し、小数点第4位を四捨五入し、小数点第3位の値を採用した。

2.3.2 熱力学データベースファイルの変換

PHREEQE コードデータベースフォーマットファイルに集約された Ni, Se, Zr および organic ligands の熱力学データは、データベースフォーマット変換プログラム (pqpcn14_5, green.exe および phgwb10) により PHREEQC コード, EQ3/6 コードおよび GWB コードのフォーマットに対応したデータベースファイルに変換した。変換フローの概要を図 1 に示す。また, PHREEQE, PHREEQC, EQ3/6 および GWB の熱力学データベースファイルのデータフォーマットの例を図 2, 3, 4 および 5 に示す。

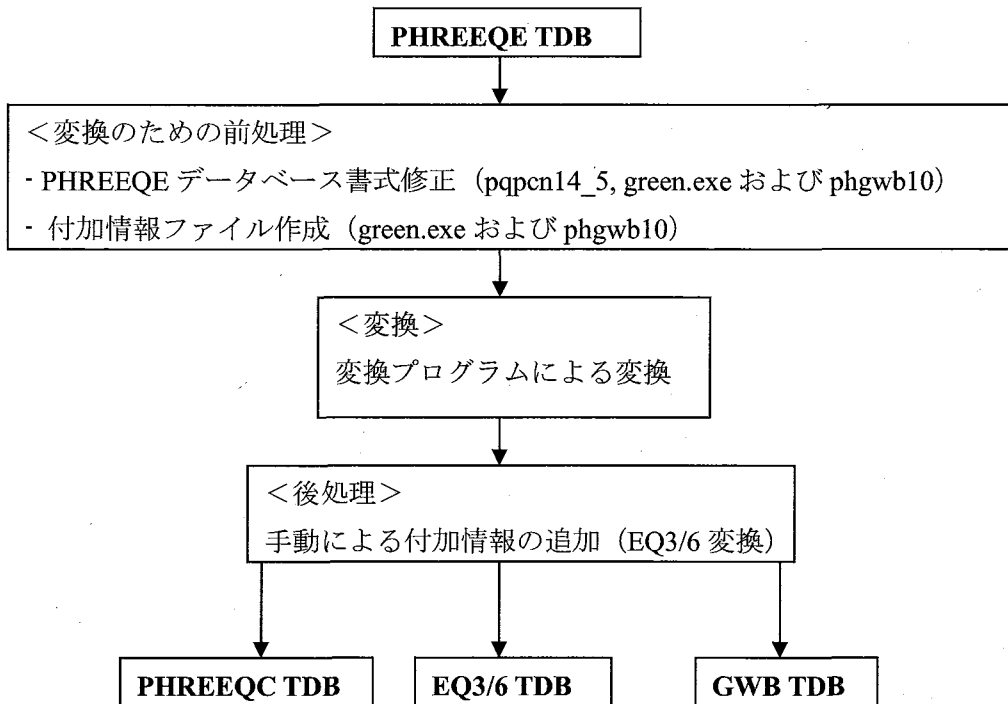


図 1 変換フロー

```

408 [NEA05b]_HSeO4-
HSeO4-1 200 -1.000 6.000
      1.750
      1 1.000 32 1.000
409 [NEA05b]_H2SeO3(aq)
H2SeO3 400 0.000 4.000
      39.039
      1 4.000 2 2.000 3 -1.000 32 1.000
  
```

図 2. PHREEQE コードの熱力学データベースファイルのフォーマットのイメージ

```

#[NEA05b]_HSeO4-
+ 1.0H+ + 1.0SeO4-2 = HSeO4-
log_k 1.750

#[NEA05b]_H2SeO3(aq)
+ 4.0H+ + 2.0e- -1.0H2O + 1.0SeO4-2 = SeH2O3
log_k 39.039
  
```

図 3. PHREEQC コードの熱力学データベースファイルのフォーマットのイメージ

```

+-----+
HSeO4-
  sp.type = aqueous
  revised =
  charge = -1.0
  3 element(s):
    1.0000 Se           1.0000 H           4.0000 O
  3 species in reaction:
    -1.0000 HSeO4-           1.0000 H+
    1.0000 SeO4--
**** logK grid [0-25-60-100C @1.0132bar; 150-200-250-300C @Psat-H2O]:
    -1.7500  -1.7500  -1.7500  -1.7500
    -1.7500  -1.7500  -1.7500  -1.7500
+-----+
H2SeO3(aq)
  sp.type = aqueous
  revised =
  charge = 0.0
  3 element(s):
    1.0000 Se           2.0000 H           3.0000 O
  5 species in reaction:
    -1.0000 H2SeO3(aq)           4.0000 H+
    2.0000 e-                   -1.0000 H2O
    1.0000 SeO4--
**** logK grid [0-25-60-100C @1.0132bar; 150-200-250-300C @Psat-H2O]:
    -39.0390 -39.0390 -39.0390 -39.0390
    -39.0390 -39.0390 -39.0390 -39.0390
+-----+

```

図 4. EQ3/6 コードの熱力学データベースファイルのフォーマットのイメージ

```

* [NEA05b]
HSeO4-
  charge= -1.0      ion size= 0.0 A      mole wt.= 143.9655 g
  2 species in reaction
    1.000 H+           1.000 SeO4--
    -1.7500  -1.7500  -1.7500  -1.7500
    -1.7500  -1.7500  -1.7500  -1.7500

* [NEA05b]
ZnSeO4(aq)
  charge= 0.0      ion size= 0.0 A      mole wt.= 208.3476 g
  2 species in reaction
    1.000 SeO4--           1.000 Zn++
    -2.1600 -2.1600 -2.1600 -2.1600
    -2.1600 -2.1600 -2.1600 -2.1600

```

図 5. GWB コードの熱力学データベースファイルのフォーマットのイメージ

2.3.3 作成を行った Ni, Se, Zr および organic ligands の熱力学データベースファイルについて

<TDB 名>

050000q0.tdb (PHREEQE format)

050000c0.tdb (PHREEQC format)

050000g0.tdb (GWB format)

050000e0.tdb (EQ3/6 ver.7.2c format, binary 変換版は 050000b0.tdb)

<Reference>

Ni : Gamsjäger, et al.¹²⁾

Se : Olin, et al.¹¹⁾

Zr : Brown, et al.¹³⁾

Organic ligands : Hummel, et al.¹⁴⁾

その他のデータ : Guillaumont, et al.¹⁰⁾

<対象元素>

放射性元素 : U, Am, Tc, Np, Pu, Ni, Se, Zr および organic ligands

地球化学元素 : H, Li, B, C, N, O, F, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, K, Ca, Cu, Zn, As, Se, Br, Rb, Sr, Ag,

Cd, Sn, I, Cs, Ba, Hg, Tl, Pb

3. おわりに

NEA TDB プロジェクトにおける Ni, Se, Zr および organic ligands の熱力学データを PHREEQE, PHREEQC, EQ3/6 および GWB の各コードで利用できる熱力学データベースファイルとして整備した。また, TRU 第2次取りまとめにおいて作成された熱力学データベースについても, PHREEQE, PHREEQC および GWB の各コードで利用できるデータベースフォーマットとして整備した。これらの熱力学データベースファイルの電子データは添付 CD の中に含めており, これらを用いて, 上記の地球化学計算コードで計算を行うことが可能である。また, NEA TDB プロジェクトにおける Ni, Se, Zr および organic ligands の熱力学データを含む各地球化学計算コードで利用可能な熱力学データベースファイルは 2007 年 4 月より, 原子力機構熱力学・収着データベースのホームページ (<http://migrationdb.jaea.go.jp/>) よりダウンロードサービスを開始する予定である。

参考文献

- 1) M. Yui, J. Azuma and M. Shibata : “JNC Thermodynamic Database for Performance Assessment of High - level Radioactive Waste Disposal System”, JNC TN8400 99-070 (1999).
- 2) D.L.Parkhurst, D.C. Thorstenson and L.N. Plummer : “ PHREEQE - A Computer Program for Geochemical Calculations ”, U.S. Geological Survey, Water - Resources Investigations 80-96 (1980).
- 3) A.B. Muller : “ International Chemical Thermodynamic Data Base for Nuclear Applications ”, Radioact. Waste Manage. Nucl. Fuel Cycle, vol. 6, pp. 131-141(1985).
- 4) H. Wanner. : “ The NEA Thermochemical Data Base Project “, Radiochim, Acta, vol. 44/45, pp. 325-329 (1988).
- 5) H. Wanner. : “ The NEA Thermochemical Data Base project “ , Tech. Rep. TDB-0 (Revision 2)., OECD Nuclear Energy Agency, Data Bank, Gif-sur-Yvette, France, 1991, pp. 10 (1991).
- 6) I. Grenthe, J. Fuger, R.J.M. Konings, R.J. Lemire and A.B. Muller : The Chemical Thermodynamics of Uranium, OECD Nuclear Energy Agency, Amsterdam, North - Holland (1992).
- 7) R.J. Silva, G. Bidoglio, M.H. Rand, P.B. Robouch, H. Wanner and I. Puigdomenech : “ Chemical Thermodynamics of Americium “, OECD Nuclear Energy Agency, Elsevier (1995).
- 8) J.A. Rard, M.H. Rand, G. Anderegg and H. Wanner : “ Chemical Thermodynamics of Technetium “, OECD Nuclear Energy Agency, Amsterdam, North - Holland (1999).
- 9) R.J. Lemire, J. Fuger, H. Nitsche, P.E. Potter, M.H. Rand, J. Rydberg, K. Spahiu, J.C. Sullivan, W.J. Ullman, P. Vitorge and H. Wanner : “Chemical Thermodynamics of Neptunium and Plutonium “, OECD Nuclear Energy Agency, Amsterdam, North – Holland (2001).
- 10) R. Guillaumont, T. Fanghänel, J. Fuger, I. Grenthe, V. Neck, D.A. Palmer and M.H. Rand : “Update on the Chemical Thermodynamics of Uranium, Neptunium, Plutonium, Americium and Technetium “, OECD Nuclear Energy Agency, Elsevier (2003).
- 11) Å. Olin, B. Noläng, L.-O. Öhman, E.G. Osadchii and E. Rosén : “Chemical thermodynamics of Selenium “, OECD Nuclear Energy Agency, Elsevier (2005).
- 12) H. Gamsjäger, J. Bugajski, T. Gajda, R.J. Lemire and W. Preis : “Chemical thermodynamics of Nickel “, OECD Nuclear Energy Agency, Elsevier (2005).
- 13) P.L. Brown, E. Curti, B. Grambow : “Chemical thermodynamics of Zirconium “, OECD Nuclear Energy Agency, Elsevier (2005).
- 14) W. Hummel, G. Anderegg, L. Rao, I. Puigdoménech and O. Tochiyama : “Chemical Thermodynamics of Compounds and Complexes of U, Np, Pu, Am, Tc, Se, Ni and Zr with Selected Organic Ligands “, OECD Nuclear Energy Agency, Elsevier (2005).

- 15) 吉田 泰, 油井 三和 : “ 地球化学計算コードで利用可能な JNC 熱力学データベース “ , JNC TN8400 2003 -005 (2003).
- 16) 吉田 泰, 笹本 広 : “ OECD/NEA で整備された熱力学データベース利用環境の整備 その 1 - Np および Pu の熱力学データ - , JNC TN8400 2003-027 (2004).
- 17) 吉田 泰, 柴田 雅博 : “OECD/NEA で整備された熱力学データベース利用環境の整備その 2-Tc, U, Np, Pu, Am および auxiliary の熱力学データの更新-, JNC TN8400 2004-025 (2005).
- 18) D.L. Parkhurst : “ PHREEQC - User's Guide to PHREEQC - A Computer Program for Speciation, Reaction - Path, Advective - Transport, and Inverse Geochemical Calculations ” , U.S. Geological Survey, Water - Resources Investigations Report 95-4227 (1995).
- 19) T.J. Wolery : “ EQ3/6, A Software Package for Geochemical Modeling of Aqueous Systems : Package Overview and Installation Guide (versin 7.0) ” , Lawrence Livermore National Laboratory, UCRL-MA-110662PT1 (1992).
- 20) C. Bethke : Geochemical Reaction Modeling. Oxford Univ. Press, New York (1996).
- 21) 吉田 泰, 油井 三和 : “ 熱力学データベースフォーマット変換プログラムの作成 ” , JNC TN8400 2002-024 (2003).
- 22) L. Ciavatta : “ The specific interaction theory in evaluating ionic equilibria “ , Ann. Chim. (Rome), 70, 551-567 (1980).

別添 1 TRU 第 2 次取りまとめの人工バリア変質評価用に開発された TDB

<TDB 名>

050700q0.tdb (PHREEQE format)

050700c0.tdb (PHREEQC format)

050700g0.tdb (GWB format)

<Reference (化学種) >

R. C. Arthur, et al. : “Development of Thermodynamic Databases for Hyperalkaline, Argillaceous Systems”, JNC Technical Report, JNC TN8400 2005-010(2005).

<対象元素>

放射性元素 : Ac, Am, Cm, Sm, Th, Pa, U, Np, Pu, Nb, Tc, Pd, Sn, Sb, Pb, Bi, Po, Ni, Se, Zr

地球化学元素 : H, O, Ca, Mg, Na, K, Fe, Mn, Al, Ba, Sr, Si, Cl, C, S, N, B, P, F, Li, Br, Co, Cs

<詳細>

- 超ウラン(TRU)元素を含む廃棄物や他の放射性廃棄物の地層処分において、セメント-ベントナイトの相互反応による人工バリアの変質に関わる地球化学解析を行うために開発された。

- 高アルカリ-粘土系で重要、あるいは代表であると認識されている鉱物データを格納しており、計算値と実験値との比較が行われているデータについては、おおむね妥当であることが示されている。

This is a blank page.

国際単位系 (SI)

表1. SI 基本単位

基本量	SI 基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質の量	モル	mol
光度	カンデラ	cd

表2. 基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

組立量	SI 基本単位		記号
	名称	記号	
面積	平方メートル	m ²	m ²
体積	立方メートル	m ³	m ³
速度	メートル毎秒	m/s	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s ²	m/s ²
波数	毎メートル	m ⁻¹	m ⁻¹
密度 (質量密度)	キログラム毎立方メートル	kg/m ³	kg/m ³
質量体積 (比体積)	立方メートル毎キログラム	m ³ /kg	m ³ /kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m ²	A/m ²
磁界の強さ (物質量の) 濃度	アンペア毎メートル	A/m	A/m
輝度	モル毎立方メートル	mol/m ³	mol/m ³
屈折率	カンデラ毎平方メートル	cd/m ²	cd/m ²
	(数の) 1	1	1

表5. SI 接頭語

乗数	接頭語	記号	乗数	接頭語	記号
10 ²⁴	ヨタ	Y	10 ⁻¹	デシ	d
10 ²¹	ゼタ	Z	10 ⁻²	センチ	c
10 ¹⁸	エクサ	E	10 ⁻³	ミリ	m
10 ¹⁵	ペタ	P	10 ⁻⁶	マイクロ	μ
10 ¹²	テラ	T	10 ⁻⁹	ナノ	n
10 ⁹	ギガ	G	10 ⁻¹²	ピコ	p
10 ⁶	メガ	M	10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ³	キロ	k	10 ⁻¹⁸	アト	a
10 ²	ヘクト	h	10 ⁻²¹	ゼプト	z
10 ¹	デカ	da	10 ⁻²⁴	エクト	y

表3. 固有の名称とその独自の記号で表されるSI組立単位

組立量	SI 組立単位		他のSI単位による表し方	SI基本単位による表し方
	名称	記号		
平面角	ラジアン ^(a)	rad		m ² ・m ⁻² =1 ^(b)
立体角	ステラジアン ^(a)	sr ^(c)		m ² ・m ⁻² =1 ^(b)
周波数	ヘルツ	Hz		s ⁻¹
力	ニュートン	N		m ² ・kg ² ・s ⁻²
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m ²	m ⁻¹ ・kg ² ・s ⁻²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N・m	m ² ・kg ² ・s ⁻²
工率, 放射束	ワット	W	J/s	m ² ・kg ² ・s ⁻³
電荷, 電気量	クーロン	C		s ² ・A
電位差 (電圧), 起電力	ボルト	V	W/A	m ² ・kg ² ・s ⁻³ ・A ⁻¹
静電容量	ファラド	F	C/V	m ⁻² ・kg ⁻¹ ・s ⁴ ・A ²
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	m ² ・kg ² ・s ⁻³ ・A ⁻²
コンダクタンス	ジーメンズ	S	A/V	m ⁻² ・kg ⁻¹ ・s ³ ・A ²
磁束密度	ウェーバ	Wb	V・s	m ² ・kg ² ・s ⁻² ・A ⁻¹
磁束	テスラ	T	Wb/m ²	kg ² ・s ⁻² ・A ⁻¹
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	m ² ・kg ² ・s ⁻² ・A ⁻²
セルシウス温度	セルシウス度 ^(d)	°C		K
光照度	ルーメン	lm	cd・sr ^(c)	m ² ・m ⁻² ・cd=cd
(放射核種の) 放射能	ベクレル	Bq	lm/m ²	m ² ・m ⁻⁴ ・cd=m ⁻² ・cd
吸収線量, 質量エネルギー	グレイ	Gy	J/kg	s ⁻¹
線量当量, 周辺線量当量, 方向性線量当量, 個人線量当量, 組織線量当量	シーベルト	Sv	J/kg	m ² ・s ⁻²

- (a) ラジアン及びステラジアンの使用は、同じ次元であっても異なった性質をもった量を区別するときの組立単位の表し方として利点がある。組立単位を形作るときのいくつかの用例は表4に示されている。
- (b) 実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号“1”は明示されない。
- (c) 測光学では、ステラジアンの名称と記号srを単位の表し方の中にそのまま維持している。
- (d) この単位は、例としてミリセルシウス度m°CのようにSI接頭語を伴って用いても良い。

表4. 単位の中に固有の名称とその独自の記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI 組立単位		SI 基本単位による表し方
	名称	記号	
粘着力のモーメント	パスカル秒	Pa・s	m ⁻¹ ・kg ² ・s ⁻¹
表面張力	ニュートンメートル	N・m	m ² ・kg ² ・s ⁻²
角速度	ニュートン毎メートル	N/m	kg ² ・s ⁻²
角加速度	ラジアン毎秒	rad/s	m ² ・m ⁻¹ ・s ⁻¹ =s ⁻¹
熱流密度, 放射照度	ラジアン毎平方秒	rad/s ²	m ² ・m ⁻¹ ・s ⁻² =s ⁻²
熱容量, エントロピー	ワット毎平方メートル	W/m ²	kg ² ・s ⁻³
質量熱容量 (比熱容量), 質量エンタロピー	ジュール毎平方メートル	J/K	m ² ・kg ² ・s ⁻² ・K ⁻¹
質量エンタロピー (比エネルギー)	ジュール毎キログラム	J/(kg・K)	m ² ・s ⁻² ・K ⁻¹
熱伝導率	ジュール毎キログラム	J/kg	m ² ・s ⁻² ・K ⁻¹
体積エネルギー	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m・K)	m ² ・kg ² ・s ⁻³ ・K ⁻¹
電界の強さ	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ⁻¹ ・kg ² ・s ⁻²
体積電荷	ボルト毎メートル	V/m	m ² ・kg ² ・s ⁻³ ・A ⁻¹
電気変位	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ⁻³ ・s ² ・A
誘電率	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² ・s ² ・A
透磁率	ファラド毎メートル	F/m	m ⁻³ ・kg ⁻¹ ・s ⁴ ・A ²
モルエンタロピー	ヘンリー毎メートル	H/m	m ² ・kg ² ・s ⁻³ ・A ⁻²
モル熱容量	ジュール毎モル	J/mol	m ² ・kg ² ・s ⁻² ・mol ⁻¹
照射線量 (X線及びγ線)	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol・K)	m ² ・kg ² ・s ⁻² ・K ⁻¹ ・mol ⁻¹
放射線量	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ ・s ² ・A
放射強度	グレイ毎秒	Gy/s	m ² ・s ⁻³
放射輝度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m ⁴ ・m ⁻² ・kg ² ・s ⁻³ =m ² ・kg ² ・s ⁻³
	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	W/(m ² ・sr)	m ² ・m ⁻² ・kg ² ・s ⁻³ =kg ² ・s ⁻³

表6. 国際単位系と併用されるが国際単位系に属さない単位

名称	記号	SI 単位による値
分	min	1 min=60s
時	h	1 h=60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86400 s
度	°	1°=(π/180) rad
分	'	1'=(1/60)°=(π/10800) rad
秒	"	1"=(1/60)'=(π/648000) rad
リットル	l, L	1 l=1 dm ³ =10 ⁻³ m ³
トン	t	1 t=10 ³ kg
ネーパ	Np	1 Np=1
ベル	B	1 B=(1/2) ln10 (Np)

表7. 国際単位系と併用されこれに属さない単位でSI単位で表される数値が実験的に得られるもの

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
電子ボルト	eV	1 eV=1.60217733(49)×10 ⁻¹⁹ J
統一原子質量単位	u	1 u=1.6605402(10)×10 ⁻²⁷ kg
天文単位	ua	1 ua=1.49597870691(30)×10 ¹¹ m

表8. 国際単位系に属さないが国際単位系と併用されるその他の単位

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
海里		1 海里=1852m
ノット		1 ノット=1 海里毎時=(1852/3600)m/s
アール	a	1 a=1 dam ² =10 ² m ²
ヘクタール	ha	1 ha=1 hm ² =10 ⁴ m ²
バール	bar	1 bar=0.1MPa=100kPa=1000hPa=10 ⁵ Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1nm=10 ⁻¹⁰ m
バイン	b	1 b=100fm ² =10 ²⁸ m ²

表9. 固有の名称を含むCGS組立単位

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
エルグ	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J
ダイン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N
ポアズ	P	1 P=1 dyn・s/cm ² =0.1Pa・s
ストークス	St	1 St=1cm ² /s=10 ⁻⁴ m ² /s
ガウス	G	1 G=10 ⁴ T
エルステッド	Oe	1 Oe=(1000/4π)A/m
マクスウェル	Mx	1 Mx=10 ⁻⁸ Wb
スチルブ	sb	1 sb=1cd/cm ² =10 ⁴ cd/m ²
ホルト	ph	1 ph=10 ⁴ lx
ガリ	Gal	1 Gal=1cm/s ² =10 ⁻² m/s ²

表10. 国際単位に属さないその他の単位の例

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
キュリー	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq
レントゲン	R	1 R=2.58×10 ⁻⁴ C/kg
ラド	rad	1 rad=1cGy=10 ⁻² Gy
レム	rem	1 rem=1cSv=10 ⁻² Sv
X線単位		1 X unit=1.002×10 ⁻⁴ nm
ガンマ	γ	1 γ=1 nT=10 ⁻⁹ T
ジャンスキ	Jy	1 Jy=10 ⁻²⁶ W・m ⁻² ・Hz ⁻¹
フェルミ	fm	1 fermi=1 fm=10 ⁻¹⁵ m
メートル系カラット		1 metric carat = 200 mg = 2×10 ⁻⁴ kg
トル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
カロリ	cal	
マイクロン	μ	1 μ = 1μm=10 ⁻⁶ m