

OECD/NEAで選定された熱力学データの
利用環境の整備（その4）

— 鉄、スズおよびトリウムの熱力学データの追加登録 —

Establishment of Data Base Files of Thermodynamic Data Developed
by OECD/NEA (Part IV)
- Addition of Thermodynamic Data for Iron, Tin and Thorium -

吉田 泰 北村 暁

Yasushi YOSHIDA and Akira KITAMURA

バックエンド研究開発部門
核燃料サイクル工学研究所
環境技術開発センター
基盤技術研究開発部

Radioactive Waste Processing and Disposal Research Department
Nuclear Backend Technology Center
Nuclear Fuel Cycle Engineering Laboratories
Sector of Decommissioning and Radioactive Waste Management

December 2014

本レポートは独立行政法人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>)
より発信されています。

独立行政法人日本原子力研究開発機構 研究連携成果展開部 研究成果管理課
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根2 番地4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency.
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to
Institutional Repository Section,
Intellectual Resources Management and R&D Collaboration 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, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2014

OECD/NEA で選定された熱力学データの利用環境の整備（その4）
—鉄、スズおよびトリウムの熱力学データの追加登録—

日本原子力研究開発機構

バックエンド研究開発部門 核燃料サイクル工学研究所 環境技術開発センター

基盤技術研究開発部

吉田 泰*, 北村 暁

(2014年9月26日 受理)

経済協力開発機構原子力機関(OECD/NEA)の熱化学データベース(Thermochemical Data Base; TDB)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元素の熱力学データベースの開発が行われている。近年では、2008年にトリウム、2012年にスズそして2013年に鉄(第1分冊)の熱力学データベースが公開された。収録されている熱力学データは、レビュー方法やデータ選定、ゼロイオン強度への活量係数補正、誤差の評価、および温度補正などについて示された、OECD/NEA自身のガイドラインに従い厳しい目で選定されており、そのため信頼性が高いとされている。日本原子力研究開発機構で開発している熱力学データベース(JAEA-TDB)は、OECD/NEAの選定値と比較することにより信頼性の確認を行っている。この比較のためには、OECD/NEAの選定値について、地球化学計算コードで読み込み可能なデータベースファイルフォーマットファイルを整備する必要がある。そこで、OECD/NEAの選定値について、既存のものにトリウム、スズおよび鉄(第1分冊)の選定値を追加し、汎用地球化学計算コードであるPHREEQC、EQ3/6およびGeochemist's Workbenchで読み込み可能なデータベースファイルとして整備した。また、整備を行ったデータベースファイルを用いた比較検討の一例としてNEA-TDBとJAEA-TDBの鉄の熱力学データで計算されるEh-pHダイアグラムの比較も実施した。整備したデータベースファイルは日本原子力研究開発機構の熱力学・収着・拡散データベースのホームページ(<http://migrationdb.jaea.go.jp/>)より入手することができる。

**Establishment of Data Base Files of Thermodynamic Data Developed by OECD/NEA
(Part IV)
- Addition of Thermodynamic Data for Iron, Tin and Thorium -**

Yasushi YOSHIDA* and Akira KITAMURA

Radioactive Waste Processing and Disposal Research Department, Nuclear Backend Technology Center,
Nuclear Fuel Cycle Engineering Laboratories,
Sector of Decommissioning and Radioactive Waste Management
Japan Atomic Energy Agency
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received September 26, 2014)

Thermodynamic data for compounds and complexes of elements with auxiliary species specialized in modeling requirements for safety assessments of radioactive waste disposal systems have been developed by the Thermochemical Data Base (TDB) project of the Nuclear Energy Agency in the Organization for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA). Recently, thermodynamic data for aqueous complexes, solids and gases of thorium, tin and iron (Part 1) have been published in 2008, 2012 and 2013, respectively. These thermodynamic data have been selected on the basis of NEA's guidelines which describe peer review and data selection, extrapolation to zero ionic strength, assignment of uncertainty, and temperature correction; therefore the selected data are considered to be reliable. The reliability of selected thermodynamic data of TDB developed by Japan Atomic Energy Agency (JAEA-TDB) has been confirmed by comparing with selected data by the NEA. For this comparison, text files of the selected data on some geochemical calculation programs are required. In the present report, the database files for the NEA's TDB with addition of selected data for iron, tin and thorium to the previous files have been established for use of PHREEQC, Geochemist's Workbench and EQ3/6. In addition, as an example of confirmation of quality, dominant species in iron TDB were compared in Eh-pH diagram and differences between JAEA-TDB and NEA-TDB were shown. Data base files established in the present study will be at the Website of thermodynamic, sorption and diffusion database in JAEA (<http://migrationdb.jaea.go.jp/>).

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

*NESI, Inc.

目 次

1. 序論	1
2. 熱力学データベース利用環境の整備	2
2.1 OECD/NEA における熱力学データ整理の概要	2
2.2 熱力学データベースファイルの作成	3
2.2.1 熱力学データベースファイル作成の手順	3
2.2.2 SIT パラメータ	12
2.2.3 作成した熱力学データベースファイル	31
3. NEA-TDB と JAEA-TDB の比較	32
3.1 Eh-pH ダイアグラムによる鉄の水酸化物錯体および炭酸錯体支配領域の比較	32
4. おわりに	35
参考文献	36

Contents

1. Introduction	1
2. Establishment of data files for thermodynamic data	2
2.1 TDB project of OECD/NEA	2
2.2 Establishment of thermodynamic data base files for geochemical calculation code	3
2.2.1 Procedure of establishment of thermodynamic data base files	3
2.2.2 SIT parameter	12
2.2.3 Data base files including thermodynamic data of Fe, Sn and Th	31
3. Comparison of NEA-TDB and JAEA-TDB	32
3.1 Eh-pH diagram on iron with NEA-TDB and JAEA-TDB	32
4. Conclusion	35
References	36

表リスト

表 1	OECD/NEA で選定された鉄化学種の平衡定数.....	4
表 2	OECD/NEA で選定された鉄化学種のギブズ自由エネルギー	5
表 3	OECD/NEA で選定された鉄（第 1 分冊）の平衡定数の選定値と JAEA-TDB の平衡定数の選定値の比較	6
表 4	OECD/NEA で選定されたスズの液、固および気相種の平衡定数	8
表 5	OECD/NEA で選定されたトリウムの液、固および気相種の平衡定数.....	10
表 6	OECD/NEA で選定された陽イオン種と Cl^- , ClO_4^- および NO_3^- のイオン相互作用係数.....	12
表 7	OECD/NEA で選定された陰イオン種と Li^+ , Na^+ および K^+ のイオン相互作用係数	24

図リスト

図 1	NEA-TDB を用いた Fe-O-H 系 Eh-pH 安定相図、 $\log a_{\text{Fe}^{2+}} = -20$	33
図 2	JAEA-TDB を用いた Fe-O-H 系 Eh-pH 安定相図、 $\log a_{\text{Fe}^{2+}} = -20$	34
図 3	NEA-TDB を用いた Fe-C-O-H 系 Eh-pH 安定相図、 $\log a_{\text{Fe}^{2+}} = -20$, $\log a_{\text{CO}_3^{2-}} = -5$	35

1. 序論

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（以下、原子力機構）では、前身の動力炉・核燃料開発事業団および核燃料サイクル開発機構を含めて熱力学データベース開発を行ってきており、1999年に核燃料サイクル開発機構熱力学データベース（JNC-TDB）¹⁾を公開するとともに、その更新版として原子力機構熱力学データベース（JAEA-TDB）を2010年²⁾、2012年³⁾および2014年⁴⁾に公開している。2014年の更新⁴⁾では、SIT活量補正モデル⁵⁾が利用可能なバージョンも作成され公開されている。

熱力学データベースの開発は、経済協力開発機構原子力機関（OECD/NEA）でも“Thermochemical Data Base (TDB) Project”として実施されている。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⁶⁻¹⁷⁾、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 プロジェクトではウラン^{6,10)}、アメリシウム^{7,10)}、テクネチウム^{8,10)}、ネプツニウム^{9,10)}、プルトニウム^{9,10)}、セレン¹¹⁾、ニッケル¹²⁾、ジルコニウム¹³⁾、有機物配位子（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）¹⁴⁾、トリウム¹⁵⁾およびスズ¹⁶⁾が公開されており、2013年に鉄（第1分冊）¹⁷⁾のデータベースが公開された。

原子力機構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。原子力機構では、JNC-TDB および JAEA-TDB 選定値について、汎用地球化学計算コードである PHREEQC¹⁸⁾、Geochemist's Workbench¹⁹⁾ および EQ3/6²⁰⁾を用いており、収集した熱力学データをこれらの地球化学計算コード対応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)として整備してきている。

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、原子力機構では、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。これまでウラン^{6,10)}、アメリシウム^{7,10)}、テクネチウム^{8,10)}、ネプツニウム^{9,10)}、プルトニウム^{9,10)}、セレン¹¹⁾、ニッケル¹²⁾、ジルコニウム¹³⁾、有機物配位子¹⁴⁾および補助データ(実験値より熱力学データを導出する際に必要となる、放射性元素以外の元素の熱力学データ)⁶⁻¹⁴⁾の熱力学データについて熱力学データベースファイルへの整備を実施している²¹⁻²³⁾。

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トリウム¹⁵⁾、スズ¹⁶⁾および鉄(第1分冊)¹⁷⁾の液、固および気相化学種を示し、さらに熱力学データベースファイル作成手順を説明し、最後に熱力学データベースファイルの整備状況を示す。作成した熱力学データベースファイルは PHREEQC¹⁶⁾、EQ3/6¹⁷⁾および Geochemist's Workbench (GWB)¹⁸⁾に対応するものである。

JAEAの熱力学データベースの信頼性の確認のため、一例として、NEA-TDBとJAEA-TDBの鉄の熱力学データのFe-O-H系およびFe-C-O-H系について、支配化学種をEh-pHダイアグラムに描画し比較した。その結果を、3章に示す。

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。また、整備したデータベースファイルは原子力機構熱力学・収着・拡散データベースのホームページ(<http://migrationdb.jaea.go.jp/>)より入手することができる。

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(トリウム、ウラン、ネプツニウム、プルトニウムおよびアメリシウム)、核分裂生成物(スズ、テクネチウム、ジルコニウムおよびセレン)および放射化生成物(ニッケル)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²⁴⁾。

- ・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で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、活量補正はイオン相互作用理論に基づくモデル式（Specific Ion Interaction Equations (SIT)）⁵⁾ を用いている。

2.2 熱力学データベースファイルの作成

2.2.1 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、化学種のギブスの生成自由エネルギーを用いて鉄、スズおよびトリウムの液、固および気相種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 ($\Delta_r G^\circ(T) = -RT \ln K^\circ(T)$) を用いた。ギブスの反応自由エネルギーから平衡定数 ($\log K^\circ$) への変換に用いた式を以下に示す。

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

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

気体定数(R)および絶対温度($T_{25^\circ\text{C}}$)は Grenthe et al.⁶⁾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、Grenthe et al.⁶⁾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。

鉄の化学種の平衡定数導出に用いた反応式に対する平衡定数およびギブス自由エネルギーを表1および表2に示す。

鉄、スズおよびトリウムの液、固および気相種の平衡反応式に対する平衡定数を表 1, 2, 3, 4 および 5 に示す。

表 1 OECD/NEA で選定された鉄化学種の平衡定数¹⁷⁾

Reaction	log K ^o
$\text{Fe}(\text{cr}) + 2\text{H}^+ = \text{Fe}^{2+} + \text{H}_2(\text{g})$	15.893 ± 0.112
$\text{Fe}^{2+} + \text{H}^+ = \text{Fe}^{3+} + 0.5\text{H}_2(\text{g})$	-13.051 ± 0.160
$\text{Fe}^{2+} + \text{H}_2\text{O}(\text{l}) = \text{FeOH}^+ + \text{H}^+$	-9.100 ± 0.400
$\text{Fe}^{3+} + \text{H}_2\text{O}(\text{l}) = \text{FeOH}^{2+} + \text{H}^+$	-2.150 ± 0.070
$\text{Fe}^{3+} + 2\text{H}_2\text{O}(\text{l}) = \text{Fe}(\text{OH})_2^+ + 2\text{H}^+$	-4.800 ± 0.400
$2 \text{Fe}^{3+} + 2 \text{H}_2\text{O} = \text{Fe}_2(\text{OH})_2^{4+} + 2 \text{H}^+$	-2.820 ± 0.011
$\text{Fe}^{2+} + \text{F}^- = \text{FeF}^+$	1.700 ± 0.200
$\text{Fe}^{3+} + \text{Cl}^- = \text{FeCl}^{2+}$	1.520 ± 0.100
$\text{Cl}^- + \text{FeCl}^{2+} = \text{FeCl}_2^+$	0.700 ± 0.200
$\text{FeCl}_2(\text{cr}) + \text{H}_2\text{O}(\text{g}) = \text{FeCl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}(\text{cr})$	-4.380 ± 0.350
$\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}(\text{cr}) = \text{FeCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}(\text{cr}) + 2\text{H}_2\text{O}(\text{g})$	-4.131 ± 0.263
$\text{FeCl}_2(\text{cr}) + 4\text{H}_2\text{O}(\text{l}) = \text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}(\text{cr})$	5.921 ± 0.176
$\text{Cl}^- + \text{FeCl}_2^+ = \text{FeCl}_3(\text{aq})$	-1.200 ± 0.200
$\text{Cl}^- + \text{FeCl}_3(\text{aq}) = \text{FeCl}_4^-$	-2.000 ± 0.700
$\text{Fe}^{2+} + \text{H}_2\text{S}(\text{aq}) = \text{FeS}(\text{cr}) + 2\text{H}^+$	-3.800 ± 0.400
$\text{Fe}^{3+} + \text{SO}_4^{2-} = \text{FeSO}_4^+$	4.250 ± 0.100
$\text{Fe}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} = \text{FeSO}_4(\text{aq})$	2.440 ± 0.030
$\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}(\text{cr}) = \text{FeSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}(\text{cr}) + 6\text{H}_2\text{O}(\text{g})$	-10.284 ± 0.876
$\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}(\text{cr}) = \text{FeSO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}(\text{cr}) + 3\text{H}_2\text{O}(\text{g})$	-5.123 ± 0.018
$\text{Fe}^{2+} + 7\text{H}_2\text{O}(\text{l}) + \text{SO}_4^{2-} = \text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}(\text{cr})$	2.279 ± 0.230
$\text{FeSO}_4^+ + \text{SO}_4^{2-} = \text{Fe}(\text{SO}_4)_2^-$	1.970 ± 0.130
$\text{FeCO}_3(\text{cr}) = \text{FeCO}_3(\text{aq})$	-5.410 ± 0.158
$\text{CO}_2(\text{g}) + \text{FeCO}_3(\text{cr}) + \text{H}_2\text{O}(\text{l}) = \text{Fe}(\text{CO}_3)_2^{2-} + 2\text{H}^+$	-21.794 ± 0.158
$\text{Fe}^{3+} + 3 \text{CO}_3^{2-} = \text{Fe}(\text{CO}_3)_3^{3-}$	24.000 ± 2.000
$\text{Fe}^{3+} + \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_3^{2-} = \text{Fe}(\text{OH})\text{CO}_3(\text{aq}) + \text{H}^+$	10.700 ± 2.000

表2 OECD/NEA で選定された鉄化学種のギブズ自由エネルギー¹⁷⁾(1/2)

Reaction	$\Delta_f G^0$
alpha_Fe	0.000
Fe ²⁺	-90.719 ± 0.641
Fe ³⁺	-16.226 ± 0.650
Fe _{0.932} O(cr)	-244.593 ± 1.906
alpha_Fe ₂ O ₃ (cr)	-744.448 ± 2.632
gamma_Fe ₂ O ₃ (cr)	-727.830 ± 3.027
alpha_Fe ₃ O ₄ (cr)	-1012.719 ± 1.609
alpha_FeOOH(cr)	-489.537 ± 1.996
gamma_FeOOH(cr)	-479.881 ± 2.005
FeOH ⁺	-275.916 ± 2.372
FeOH ²⁺	-241.094 ± 0.764
Fe(OH) ₂ ⁺	-463.107 ± 2.375
Fe ₂ (OH) ₂ ⁴⁺	-490.635 ± 1.446
FeF ⁺	-381.946 ± 1.481
FeF ₂ (cr)	-669.499 ± 8.500
FeCl ²⁺	-156.119 ± 0.873
FeCl ₂ ⁺	-291.332 ± 1.442
FeCl ₂ (cr)	-302.190 ± 0.527
FeCl ₂ ·H ₂ O(cr)	-505.772 ± 2.069
FeCl ₂ ·2H ₂ O(cr)	-803.802 ± 1.661
FeCl ₂ ·4H ₂ O(cr)	-1284.545 ± 0.709
FeCl ₃ (aq)	-415.700 ± 1.843
FeCl ₃ (cr)	-331.505 ± 0.260
FeCl ₄ ⁻	-535.501 ± 4.402
FeOCl(cr)	-358.618 ± 3.002
FeBr ₂ (cr)	-235.779 ± 1.337
FeBr ₃ (cr)	-240.767 ± 2.471
FeI ₂ (cr)	-127.076 ± 7.783
FeS(cr)	-96.677 ± 3.178
FeSO ₄ ⁺	-784.488 ± 0.960
FeSO ₄ (aq)	-848.651 ± 0.784
FeSO ₄ ·H ₂ O(cr)	-1077.518 ± 5.048
FeSO ₄ ·4H ₂ O(cr)	-1792.724 ± 0.671
FeSO ₄ ·7H ₂ O(cr)	-2507.710 ± 0.652
Fe ₂ (SO ₄) ₃ (cr)	-2263.397 ± 3.906
Fe(SO ₄) ₂ ⁻	-1539.738 ± 1.284

表2 OECD/NEA で選定された鉄化学種のギブズ自由エネルギー¹⁷⁾(2/2)

Reaction	$\Delta_f G^0$
$(\text{H}_3\text{O})_{0.91}\text{Fe}_{2.91}(\text{SO}_4)_2(\text{OH})_{5.64}(\text{H}_2\text{O})_{0.18}(\text{cr})$	-3163.853 ± 6.925
$\text{FeCO}_3(\text{aq})$	-648.677 ± 1.285
$\text{FeCO}_3(\text{cr})$	-679.557 ± 0.917
$\text{Fe}(\text{CO}_3)_2^{2-}$	-1186.670 ± 1.293
$\text{Fe}(\text{CO}_3)_3^{3-}$	-1736.918 ± 11.494
$\text{Fe}(\text{OH})\text{CO}_3(\text{aq})$	-842.342 ± 11.441
$\alpha\text{-Fe}_2\text{SiO}_4$	-1377.720 ± 1.076

表3 OECD/NEA で選定された鉄（第1分冊）の平衡定数の選定値¹⁷⁾と JAEA-TDB の平衡定数の選定値の比較(1/3)

Reaction	NEA-TDB log K°	JAEA-TDB log K°
$\text{Fe}^{2+} = \text{Fe}^{3+} + \text{e}^-$	-13.051 ± 0.002	-13.032 ± 0.010
$\text{Fe}^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \text{FeOH}^+ + \text{H}^+$	-9.100 ± 0.296	-9.500 ± 0.100
$\text{Fe}^{2+} + 2 \text{H}_2\text{O} = \text{Fe}(\text{OH})_2 + 2 \text{H}^+$		-20.570 ± 1.000
$\text{Fe}^{2+} + 3 \text{H}_2\text{O} = \text{Fe}(\text{OH})_3^- + 3 \text{H}^+$		-31.000 ± 1.500
$\text{Fe}^{3+} + \text{H}_2\text{O} = \text{FeOH}^{2+} + \text{H}^+$	-2.150 ± 0.013	-2.188 ± 0.020
$\text{Fe}^{3+} + 2 \text{H}_2\text{O} = \text{Fe}(\text{OH})_2^+ + 2 \text{H}^+$	-4.800 ± 0.288	-5.668 ± 0.100
$\text{Fe}^{3+} + 3 \text{H}_2\text{O} = \text{Fe}(\text{OH})_3 + 3 \text{H}^+$		-13.598
$\text{Fe}(\text{OH})_3(\text{s}) + 3 \text{H}^+ = \text{Fe}^{3+} + 3 \text{H}_2\text{O}$		4.890
$\text{Fe}^{3+} + 4 \text{H}_2\text{O} = \text{Fe}(\text{OH})_4^- + 4 \text{H}^+$		-21.598 ± 0.200
$2 \text{Fe}^{3+} + 2 \text{H}_2\text{O} = \text{Fe}_2(\text{OH})_2^{4+} + 2 \text{H}^+$	-2.820 ± 0.011	-2.946 ± 0.050
$3 \text{Fe}^{3+} + 4 \text{H}_2\text{O} = \text{Fe}_3(\text{OH})_4^{5+} + 4 \text{H}^+$		-6.304 ± 0.100
$\text{Fe}^{2+} + \text{F}^- = \text{FeF}^+$	1.700 ± 0.026	
$\text{Fe}^{3+} + \text{F}^- = \text{FeF}^{2+}$		6.232
$\text{Fe}^{3+} + 2.0 \text{F}^- = \text{FeF}_2^+$		10.832
$\text{Fe}^{3+} + 3.0 \text{F}^- = \text{FeF}_3(\text{aq})$		14.002
$\text{Fe}^{3+} + \text{Cl}^- = \text{FeCl}^{2+}$	1.520 ± 0.019	1.482
$\text{Fe}^{3+} + 2 \text{Cl}^- = \text{FeCl}_2^+$	2.220 ± 0.098	2.132
$\text{Fe}^{3+} + 3 \text{Cl}^- = \text{FeCl}_3(\text{aq})$	1.020 ± 0.148	1.132
$\text{Fe}^{3+} + 4 \text{Cl}^- = \text{FeCl}_4^-$	-0.980 ± 0.575	
$\text{Fe}^{3+} + \text{SO}_4^{2-} = \text{FeSO}_4^+$	4.250 ± 0.019	3.922
$\text{Fe}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} = \text{FeSO}_4(\text{aq})$	2.440 ± 0.048	2.250
$\text{Fe}^{3+} + 2 \text{SO}_4^{2-} = \text{Fe}(\text{SO}_4)_2^-$	6.220 ± 0.035	5.422
$\text{Fe}^{2+} + 2 \text{HS}^- = \text{Fe}(\text{HS})_2$		8.864
$\text{Fe}^{2+} + 3 \text{HS}^- = \text{Fe}(\text{HS})_3^-$		10.858
$\text{Fe}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \text{FeCO}_3(\text{aq})$	5.266 ± 0.044	

表3 OECD/NEA で選定された鉄（第1分冊）の平衡定数の選定値¹⁷⁾と JAEA-TDB の平衡定数の選定値の比較(2/3)

Reaction	NEA-TDB log K ^o	JAEA-TDB log K ^o
$\text{Fe}^{2+} + 2 \text{CO}_3^{2-} = \text{Fe}(\text{CO}_3)_2^{2-}$	7.034 ± 0.022	
$\text{Fe}^{3+} + 3 \text{CO}_3^{2-} = \text{Fe}(\text{CO}_3)_3^{3-}$	24.000 ± 1.695	
$\text{Fe}^{3+} + \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_3^{2-} = \text{Fe}(\text{OH})\text{CO}_3(\text{aq}) + \text{H}^+$	10.700 ± 1.815	
$\text{alpha-Fe} = \text{Fe}^{2+} + 2 \text{e}^-$	15.893 ± 0.112	
$\text{Fe}_{0.932}\text{O}(\text{cr}) + 2 \text{H}^+ + 0.136 \text{e}^- = 0.932 \text{Fe}^{2+} + \text{H}_2\text{O}$	13.507 ± 0.222	
$\text{FeOOH}(\text{goethite}) + 3 \text{H}^+ + \text{e}^- = \text{Fe}^{2+} + 2 \text{H}_2\text{O}$		11.290
$\text{alpha-Fe}_2\text{O}_3(\text{cr}) + 6 \text{H}^+ = 2 \text{Fe}^{3+} + 3 \text{H}_2\text{O}$	-0.101 ± 0.212	
$\text{gamma-Fe}_2\text{O}_3(\text{cr}) + 6 \text{H}^+ = 2 \text{Fe}^{3+} + 3 \text{H}_2\text{O}$	2.810 ± 0.281	
$\text{Fe}_2\text{O}_3(\text{hematite}) + 6 \text{H}^+ + 2 \text{e}^- = 2 \text{Fe}^{2+} + 3 \text{H}_2\text{O}$		22.400
$\text{alpha-Fe}_3\text{O}_4(\text{cr}) + 8 \text{H}^+ + 2 \text{e}^- = 3 \text{Fe}^{2+} + 4 \text{H}_2\text{O}$	36.439 ± 0.084	
$\text{Fe}_3\text{O}_4(\text{magnetite}) + 8 \text{H}^+ + 2 \text{e}^- = 3 \text{Fe}^{2+} + 4 \text{H}_2\text{O}$		30.650
$\text{alpha-FeOOH}(\text{cr}) + 3 \text{H}^+ = \text{Fe}^{3+} + 2 \text{H}_2\text{O}$	0.170 ± 0.221	
$\text{gamma-FeOOH}(\text{cr}) + 3 \text{H}^+ = \text{Fe}^{3+} + 2 \text{H}_2\text{O}$	1.861 ± 0.223	
$\text{FeF}_2(\text{cr}) = \text{Fe}^{2+} + 2 \text{F}^-$	-2.756 ± 1.134	
$\text{FeCl}_2(\text{cr}) = \text{Fe}^{2+} + 2 \text{Cl}^-$	8.928 ± 0.061	
$\text{FeCl}_2(\text{lawrencite}) = 2 \text{Cl}^- + \text{Fe}^{2+}$		6.820
$\text{FeCl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}(\text{cr}) = \text{Fe}^{2+} + 2 \text{Cl}^- + \text{H}_2\text{O}$	14.807 ± 0.202	
$\text{FeCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}(\text{cr}) = \text{Fe}^{2+} + 2 \text{Cl}^- + 2 \text{H}_2\text{O}$	4.140 ± 0.123	
$\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}(\text{cr}) = \text{Fe}^{2+} + 2 \text{Cl}^- + 4 \text{H}_2\text{O}$	3.008 ± 0.058	
$\text{FeCl}_3(\text{cr}) = \text{Fe}^{3+} + 3 \text{Cl}^-$	13.730 ± 0.130	
$\text{FeCl}_3(\text{molysite}) + \text{e}^- = 3 \text{Cl}^- + \text{Fe}^{2+}$		24.560
$\text{FeOCl}(\text{cr}) + 2 \text{H}^+ = \text{Fe}^{3+} + \text{H}_2\text{O} + \text{Cl}^-$	4.549 ± 0.384	
$\text{FeBr}_2(\text{cr}) = \text{Fe}^{2+} + 2 \text{Br}^-$	10.974 ± 0.063	
$\text{FeBr}_3(\text{cr}) = \text{Fe}^{3+} + 3 \text{Br}^-$	15.243 ± 0.231	
$\text{FeI}_2(\text{cr}) = \text{Fe}^{2+} + 2 \text{I}^-$	11.754 ± 1.212	
$\text{FeS}(\text{cr}) + 4 \text{H}_2\text{O} = \text{Fe}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} + 8 \text{H}^+ + 8 \text{e}^-$	-36.880 ± 0.400	-37.603
$\text{FeS}(\text{mackinawite}) + 4 \text{H}_2\text{O} = \text{Fe}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} + 8 \text{H}^+ + 8 \text{e}^-$		-38.323
$\text{Fe}_7\text{S}_8(\text{pyrrhotite}) - 32 \text{H}_2\text{O} = 8 \text{SO}_4^{2-} + 7 \text{Fe}^{2+} + 64 \text{H}^+ + 62 \text{e}^-$		-321.280
$\text{FeS}_2(\text{pyrite}) + 8 \text{H}_2\text{O} = 2 \text{SO}_4^{2-} + \text{Fe}^{2+} + 16 \text{H}^+ + 14 \text{e}^-$		-85.950
$\text{FeSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}(\text{cr}) = \text{Fe}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} + \text{H}_2\text{O}$	-0.991 ± 0.692	
$\text{FeSO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}(\text{cr}) = \text{Fe}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} + 4 \text{H}_2\text{O}$	-1.654 ± 0.097	
$\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}(\text{cr}) = \text{Fe}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} + 7 \text{H}_2\text{O}$	-2.279 ± 0.122	

表3 OECD/NEA で選定された鉄（第1分冊）の平衡定数の選定値¹⁷⁾と JAEA-TDB の平衡定数の選定値の比較(3/3)

Reaction	NEA-TDB log K°	JAEA-TDB log K°
$\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3(\text{cr}) = 2 \text{Fe}^{3+} + 3 \text{SO}_4^{2-}$	0.187 ± 0.237	
$(\text{H}_3\text{O})_{0.91}\text{Fe}_{2.91}(\text{SO}_4)_2(\text{OH})_{5.64}(\text{H}_2\text{O})_{0.18}(\text{cr}) + 4.73 \text{H}^+ + 2.91 \text{e}^- = 2.91 \text{Fe}^{2+} + 2 \text{SO}_4^{2-} + 6.73 \text{H}_2\text{O}$	32.253 ± 0.692	
$\text{FeCO}_3(\text{cr}) = \text{Fe}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$	-10.676 ± 0.020	-10.570
$\text{alpha-Fe}_2\text{SiO}_4 + 4 \text{H}^+ = 2 \text{Fe}^{2+} + \text{H}_4\text{SiO}_4$	19.526 ± 255.211	19.050
$\text{Fe}_2\text{Si}_2\text{O}_6(\text{s}) + 2 \text{H}_2\text{O} + 4 \text{H}^+ = 2 \text{Si}(\text{OH})_4 + 2 \text{Fe}^{2+}$		10.600
$\text{FeSiO}_3(\text{ferrosilite}) + \text{H}_2\text{O} + 2 \text{H}^+ = \text{Fe}^{2+} + \text{Si}(\text{OH})_4$		7.420
$\text{Fe}_3\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4(\text{greenalite}) + 6 \text{H}^+ = 3 \text{Fe}^{2+} + 2 \text{Si}(\text{OH})_4 + \text{H}_2\text{O}$		22.590
$\text{Fe}_2\text{SiO}_4(\text{fayalite}) + 4 \text{H}^+ = 2 \text{Fe}^{2+} + \text{Si}(\text{OH})_4$		19.050

表4 OECD/NEA で選定されたスズの液、固および気相種の平衡定数¹⁶⁾(1/2)

Reaction	log K°
$\text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 4 \text{H}^+ + 2 \text{e}^- = \text{Sn}^{2+} + 4 \text{H}_2\text{O}$	5.437 ± 0.129
$\text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 4 \text{H}^+ = \text{Sn}^{4+} + 4 \text{H}_2\text{O}$	-7.545 ± 0.688
$\text{Sn}^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \text{SnOH}^+ + \text{H}^+$	-3.530 ± 0.407
$3 \text{Sn}^{2+} + 4 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}_3(\text{OH})_4^{2+} + 4 \text{H}^+$	-5.600 ± 0.505
$\text{Sn}^{2+} + 2 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_2(\text{aq}) + 2 \text{H}^+$	-7.680 ± 0.407
$\text{Sn}^{2+} + 3 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_3^- + 3 \text{H}^+$	-16.436 ± 0.605
$\text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_5^- + \text{H}^+$	-8.600 ± 0.433
$\text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 2 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_6^{2-} + 2 \text{H}^+$	-18.670 ± 0.343
$\text{Sn}^{2+} + \text{F}^- = \text{SnF}^+$	5.250 ± 0.266
$\text{Sn}^{2+} + 2 \text{F}^- = \text{SnF}_2(\text{aq})$	8.890 ± 0.371
$\text{Sn}^{2+} + 3 \text{F}^- = \text{SnF}_3^-$	11.500 ± 1.087
$\text{Sn}^{2+} + \text{Cl}^- = \text{SnCl}^+$	1.520 ± 0.215
$\text{Sn}^{2+} + 2 \text{Cl}^- = \text{SnCl}_2(\text{aq})$	2.170 ± 0.192
$\text{Sn}^{2+} + 3 \text{Cl}^- = \text{SnCl}_3^-$	2.132 ± 0.216
$\text{Sn}^{2+} + 4 \text{Cl}^- = \text{SnCl}_4^{2-}$	2.030 ± 0.417
$\text{Sn}^{2+} + \text{Br}^- = \text{SnBr}^+$	1.330 ± 0.199
$\text{Sn}^{2+} + 2 \text{Br}^- = \text{SnBr}_2(\text{aq})$	1.970 ± 0.234
$\text{Sn}^{2+} + 3 \text{Br}^- = \text{SnBr}_3^-$	1.930 ± 0.298
$\text{Sn}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} = \text{SnSO}_4(\text{aq})$	3.430 ± 0.281
$\text{Sn}^{2+} + \text{SCN}^- = \text{SnSCN}^+$	1.500 ± 0.700

表4 OECD/NEA で選定されたスズの液、固および気相種の平衡定数¹⁶⁾(2/2)

Reaction	log K°
$\text{Sn}^{2+} + \text{NO}_3^- = \text{SnNO}_3^+$	1.270 ± 0.335
$\text{Sn}^{2+} + 2 \text{NO}_3^- = \text{Sn}(\text{NO}_3)_2(\text{aq})$	1.390 ± 0.564
$\alpha\text{-Sn} - 4 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 4 \text{H}^+ + 4 \text{e}^-$	-0.618 ± 0.121
$\beta\text{-Sn} + 4 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 4 \text{H}^+ + 4 \text{e}^-$	-0.639 ± 0.118
$\text{SnH}_4(\text{g}) + 4 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 8 \text{H}^+ + 8 \text{e}^-$	32.309 ± 0.400
$\text{SnO}(\text{cr}) + 2 \text{H}^+ = \text{Sn}^{2+} + \text{H}_2\text{O}$	1.591 ± 0.144
$\text{SnO}_2(\text{am}) + 2 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq})$	-7.224 ± 0.183
$\text{SnO}_2(\text{cass}) + 2 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq})$	-8.060 ± 0.123
$\text{SnF}_2(\text{g}) = \text{Sn}^{2+} + 2 \text{F}^-$	8.243 ± 0.555
$\text{SnCl}_2(\text{cr}) = \text{Sn}^{2+} + 2 \text{Cl}^-$	0.658 ± 0.391
$\text{SnCl}_2(\text{g}) = \text{Sn}^{2+} + 2 \text{Cl}^-$	14.522 ± 0.756
$\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}(\text{cr}) = \text{Sn}^{2+} + 2 \text{Cl}^- + 2 \text{H}_2\text{O}$	0.626 ± 0.268
$\text{SnCl}_4(\text{g}) + 4 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 4 \text{Cl}^- + 4 \text{H}^+$	14.298 ± 0.626
$\text{Sn}_{21}\text{Cl}_{16}(\text{OH})_{14}\text{O}_6(\text{cr}) + 26 \text{H}^+ = 21 \text{Sn}^{2+} + 16 \text{Cl}^- + 20 \text{H}_2\text{O}$	-34.022 ± 3.564
$\text{SnBr}_2(\text{cr}) = \text{Sn}^{2+} + 2 \text{Br}^-$	-0.488 ± 0.409
$\text{SnBr}_2(\text{g}) = \text{Sn}^{2+} + 2 \text{Br}^-$	13.900 ± 0.756
$\text{SnBr}_4(\text{cr}) + 4 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 4 \text{Br}^- + 4 \text{H}^+$	9.155 ± 0.543
$\text{SnBr}_4(\text{g}) + 4 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 4 \text{Br}^- + 4 \text{H}^+$	12.330 ± 0.800
$\text{SnI}_2(\text{cr}) = \text{Sn}^{2+} + 2 \text{I}^-$	-3.908 ± 0.514
$\text{SnI}_2(\text{g}) = \text{Sn}^{2+} + 2 \text{I}^-$	12.342 ± 0.547
$\text{SnI}_4(\text{cr}) + 4 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 4 \text{I}^- + 4 \text{H}^+$	-0.740 ± 0.476
$\text{SnI}_4(\text{g}) + 4 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 4 \text{I}^- + 4 \text{H}^+$	6.146 ± 0.713
$\text{SnS}(\text{cr}) = \text{Sn}^{2+} + \text{S}^{2-}$	-35.212 ± 2.152
$\text{Sn}_2\text{S}_3(\text{cr}) + 20 \text{H}_2\text{O} = 2 \text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 3 \text{SO}_4^{2-} + 32 \text{H}^+ + 26 \text{e}^-$	-153.213 ± 3.698
$\text{SnS}_2(\text{cr}) + 12 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 2 \text{SO}_4^{2-} + 20 \text{H}^+ + 16 \text{e}^-$	-97.396 ± 0.723
$\text{Cu}_2\text{Sn}_4\text{S}_9(\text{cr}) + 16 \text{H}_2\text{O} = 4 \text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 9 \text{HS}^- + 7 \text{H}^+ + 2 \text{Cu}^{2+} + 2 \text{e}^-$	-73.659 ± 1.882
$\text{Cu}_2\text{SnS}_3(\text{cr}) + 3 \text{H}^+ = \text{Sn}^{2+} + 3 \text{HS}^- + 2 \text{Cu}^{2+}$	-54.118 ± 1.223
$\text{Cu}_4\text{SnS}_4(\text{cr}) + 4 \text{H}^+ = \text{Sn}^{2+} + 4 \text{HS}^- + 4 \text{Cu}^{2+} + 2 \text{e}^-$	-93.369 ± 2.157
$\text{Sn}_3(\text{OH})_2\text{OSO}_4(\text{cr}) + 4 \text{H}^+ = 3 \text{Sn}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} + 3 \text{H}_2\text{O}$	-5.010 ± 0.426
$\text{SnAs}(\text{cr}) + 8 \text{H}_2\text{O} = \text{Sn}(\text{OH})_4(\text{aq}) + \text{AsO}_4^{3-} + 12 \text{H}^+ + 9 \text{e}^-$	-54.985 ± 0.907

表5 OECD/NEA で選定されたトリウムの液、固および気相種の平衡定数¹⁵⁾(1/2)

Reaction	log K°
$\text{Th}^{4+} + 1.0 \text{H}_2\text{O} - 1.0 \text{H}^+ = \text{ThOH} + 3$	-2.500 ± 0.500
$\text{Th}^{4+} + 2 \text{H}_2\text{O} = \text{Th}(\text{OH})_2^{2+} + 2 \text{H}^+$	-6.200 ± 0.500
$\text{Th}^{4+} + 4 \text{H}_2\text{O} = \text{Th}(\text{OH})_4(\text{aq}) + 4 \text{H}^+$	-17.400 ± 0.700
$2 \text{Th}^{4+} + 2 \text{H}_2\text{O} = \text{Th}_2(\text{OH})_2^{6+} + 2 \text{H}^+$	-5.900 ± 0.500
$2 \text{Th}^{4+} + 3 \text{H}_2\text{O} = \text{Th}_2(\text{OH})_3^{5+} + 3 \text{H}^+$	-6.800 ± 0.200
$4 \text{Th}^{4+} + 8 \text{H}_2\text{O} = \text{Th}_4(\text{OH})_8^{8+} + 8 \text{H}^+$	-20.400 ± 0.400
$4 \text{Th}^{4+} + 12 \text{H}_2\text{O} = \text{Th}_4(\text{OH})_{12}^{4+} + 12 \text{H}^+$	-26.600 ± 0.200
$6 \text{Th}^{4+} + 14 \text{H}_2\text{O} = \text{Th}_6(\text{OH})_{14}^{10+} + 14 \text{H}^+$	-36.800 ± 1.200
$6 \text{Th}^{4+} + 15 \text{H}_2\text{O} = \text{Th}_6(\text{OH})_{15}^{9+} + 15 \text{H}^+$	-36.800 ± 1.500
$\text{Th}^{4+} + \text{F}^- = \text{ThF}^{3+}$	8.870 ± 0.150
$\text{Th}^{4+} + 2 \text{F}^- = \text{ThF}_2^{2+}$	15.630 ± 0.230
$\text{Th}^{4+} + 3 \text{F}^- = \text{ThF}_3^+$	20.670 ± 0.160
$\text{Th}^{4+} + 4 \text{F}^- = \text{ThF}_4(\text{aq})$	25.580 ± 0.180
$\text{Th}^{4+} + \text{Cl}^- = \text{ThCl}^{3+}$	1.700 ± 0.100
$\text{Th}^{4+} + \text{SO}_4^{2-} = \text{ThSO}_4^{2+}$	6.170 ± 0.320
$\text{Th}^{4+} + 2 \text{SO}_4^{2-} = \text{Th}(\text{SO}_4)_2(\text{aq})$	9.690 ± 0.270
$\text{Th}^{4+} + 3 \text{SO}_4^{2-} = \text{Th}(\text{SO}_4)_3^{2-}$	10.748 ± 0.076
$\text{Th}^{4+} + \text{NO}_3^- = \text{ThNO}_3^{3+}$	1.300 ± 0.200
$\text{Th}^{4+} + 2 \text{NO}_3^- = \text{Th}(\text{NO}_3)_2^{2+}$	2.300 ± 0.400
$\text{Th}^{4+} + \text{PO}_4^{3-} + 2 \text{H}^+ = \text{ThH}_2\text{PO}_4^{3+}$	25.152 ± 0.365
$\text{Th}^{4+} + \text{PO}_4^{3-} + 3 \text{H}^+ = \text{ThH}_3\text{PO}_4^{4+}$	23.592 ± 0.356
$\text{Th}^{4+} + 2 \text{PO}_4^{3-} + 4 \text{H}^+ = \text{Th}(\text{H}_2\text{PO}_4)_2^{2+}$	49.604 ± 0.476
$\text{Th}^{4+} + 2 \text{PO}_4^{3-} + 5 \text{H}^+ = \text{Th}(\text{H}_3\text{PO}_4)(\text{H}_2\text{PO}_4)^{3+}$	48.824 ± 0.476
$\text{Th}^{4+} + 5 \text{CO}_3^{2-} = \text{Th}(\text{CO}_3)_5^{6-}$	31.000 ± 0.700
$\text{Th}^{4+} + 2 \text{CO}_3^{2-} + 2 \text{H}_2\text{O} = \text{Th}(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2^{2-} + 2 \text{H}^+$	8.798 ± 0.501
$\text{Th}^{4+} + 4 \text{CO}_3^{2-} + \text{H}_2\text{O} = \text{Th}(\text{CO}_3)_4\text{OH}^{5-} + \text{H}^+$	21.599 ± 0.500
$\text{Th}^{4+} + \text{CO}_3^{2-} + 4 \text{H}_2\text{O} = \text{ThCO}_3(\text{OH})_4^{2-} + 4 \text{H}^+$	-15.605 ± 0.603
$\text{Th}^{4+} + \text{ClO}_3^- = \text{ThClO}_3^{3+}$	1.550 ± 0.130
$\text{Th}^{4+} + \text{Br}^- = \text{ThBr}^{3+}$	1.380 ± 0.130
$\text{Th}^{4+} + \text{BrO}_3^- = \text{ThBrO}_3^{3+}$	1.900 ± 0.100
$\text{Th}^{4+} + \text{IO}_3^- = \text{ThIO}_3^{3+}$	4.140 ± 0.100
$\text{Th}^{4+} + 2 \text{IO}_3^- = \text{Th}(\text{IO}_3)_2^{2+}$	6.970 ± 0.120
$\text{Th}^{4+} + 3 \text{IO}_3^- = \text{Th}(\text{IO}_3)_3^+$	9.870 ± 0.110
$\text{Th}^{4+} + \text{N}_3^- = \text{ThN}_3^{3+}$	4.440 ± 0.640
$\text{Th}^{4+} + 2 \text{N}_3^- = \text{Th}(\text{N}_3)_2^{2+}$	8.590 ± 0.640
$\text{Th}^{4+} + \text{SCN}^- = \text{ThSCN}^{3+}$	2.000 ± 0.500
$\text{Th}^{4+} + 2 \text{SCN}^- = \text{Th}(\text{SCN})_2^{2+}$	3.400 ± 0.800

表5 OECD/NEA で選定されたトリウムの液、固および気相種の平衡定数¹⁵⁾(2/2)

Reaction	log K ^o
$\text{ThO}_2(\text{am}, \text{fresh}) + 4 \text{H}^+ = \text{Th}^{4+} + 2 \text{H}_2\text{O}$	9.304 ± 0.900
$\text{ThO}_2(\text{cr}) + 4 \text{H}^+ = \text{Th}^{4+} + 2 \text{H}_2\text{O}$	1.765 ± 1.113
$\text{ThO}_2(\text{am}, \text{aged}) + 4 \text{H}^+ = \text{Th}^{4+} + 2 \text{H}_2\text{O}$	8.504 ± 0.900
$\text{ThF}_4(\text{cr}, \text{hyd}) = \text{Th}^{4+} + 4 \text{F}^-$	-31.830 ± 0.400
$\text{ThF}_4(\text{cr}) = \text{Th}^{4+} + 4 \text{F}^-$	-30.634 ± 1.998
$\text{ThI}_4(\text{cr}) = \text{Th}^{4+} + 4 \text{I}^-$	44.182 ± 1.040
$\text{Th}(\text{SO}_4)_2 \cdot 9 \text{H}_2\text{O}(\text{cr}) = \text{Th}^{4+} + 2 \text{SO}_4^{2-} + 9 \text{H}_2\text{O}$	-11.250 ± 0.096
$\text{Na}_6\text{Th}(\text{CO}_3)_5 \cdot 12 \text{H}_2\text{O}(\text{cr}) = \text{Th}^{4+} + 5 \text{CO}_3^{2-} + 12 \text{H}_2\text{O} + 6 \text{Na}^+$	-42.200 ± 0.800
$\text{Th}(\text{cr}) = \text{Th}^{4+} + 4 \text{e}^-$	123.472 ± 0.928
$\text{Th}(\text{g}) = \text{Th}^{4+} + 4 \text{e}^-$	221.753 ± 1.403
$\text{ThO}(\text{g}) + 2 \text{H}^+ = \text{Th}^{4+} + \text{H}_2\text{O} + 2 \text{e}^-$	156.030 ± 1.403
$\text{ThO}_2(\text{g}) + 4 \text{H}^+ = \text{Th}^{4+} + 2 \text{H}_2\text{O}$	125.601 ± 2.858
$\text{ThH}_2(\text{cr}) = \text{Th}^{4+} + 2 \text{H}^+ + 6 \text{e}^-$	104.995 ± 0.992
$\text{ThH}_{3.75}(\text{cr}) = \text{Th}^{4+} + 3.75 \text{H}^+ + 7.75 \text{e}^-$	98.441 ± 1.681
$\text{ThF}(\text{g}) = \text{Th}^{4+} + \text{F}^- + 3 \text{e}^-$	172.654 ± 2.859
$\text{ThF}_2(\text{g}) = \text{Th}^{4+} + 2 \text{F}^- + 2 \text{e}^-$	116.673 ± 3.670
$\text{ThF}_3(\text{g}) = \text{Th}^{4+} + 3 \text{F}^- + \text{e}^-$	68.251 ± 2.859
$\text{ThF}_4(\text{g}) = \text{Th}^{4+} + 4 \text{F}^-$	19.542 ± 2.074
$\text{ThOF}(\text{g}) + 2 \text{H}^+ = \text{Th}^{4+} + \text{F}^- + \text{H}_2\text{O} + \text{e}^-$	115.146 ± 2.360
$\text{ThOF}_2(\text{cr}) + 2 \text{H}^+ = \text{Th}^{4+} + 2 \text{F}^- + \text{H}_2\text{O}$	-14.751 ± 1.691
$\text{ThCl}(\text{g}) = \text{Th}^{4+} + \text{Cl}^- + 3 \text{e}^-$	184.247 ± 3.679
$\text{ThCl}_2(\text{g}) = \text{Th}^{4+} + 2 \text{Cl}^- + 2 \text{e}^-$	135.928 ± 3.999
$\text{ThCl}_3(\text{g}) = \text{Th}^{4+} + 3 \text{Cl}^- + \text{e}^-$	93.670 ± 4.508
$\text{beta-ThCl}_4 = \text{Th}^{4+} + 4 \text{Cl}^-$	24.064 ± 0.994
$\text{ThCl}_4(\text{g}) = \text{Th}^{4+} + 4 \text{Cl}^-$	53.730 ± 1.316
$\text{ThOCl}_2(\text{cr}) + 2 \text{H}^+ = \text{Th}^{4+} + 2 \text{Cl}^- + \text{H}_2\text{O}$	8.898 ± 1.011
$\text{ThBr}(\text{g}) = \text{Th}^{4+} + \text{Br}^- + 3 \text{e}^-$	197.652 ± 3.679
$\text{ThBr}_2(\text{g}) = \text{Th}^{4+} + 2 \text{Br}^- + 2 \text{e}^-$	159.854 ± 3.663
$\text{ThBr}_3(\text{g}) = \text{Th}^{4+} + 3 \text{Br}^- + \text{e}^-$	113.044 ± 2.837
$\text{beta-ThBr}_4 = \text{Th}^{4+} + 4 \text{Br}^-$	34.190 ± 1.033
$\text{ThBr}_4(\text{g}) = \text{Th}^{4+} + 4 \text{Br}^-$	61.519 ± 1.355
$\text{ThI}_4(\text{g}) = \text{Th}^{4+} + 4 \text{I}^-$	68.914 ± 1.372
$\text{ThS}(\text{cr}) + \text{H}^+ = \text{Th}^{4+} + \text{HS}^- + 2 \text{e}^-$	52.676 ± 1.477
$\text{ThN}(\text{cr}) = \text{Th}^{4+} + \text{NO}_3^- + 6.0 \text{H}^+ + 9.0 \text{e}^- - 3.0 \text{H}_2\text{O}$	-43.707 ± 1.986
$\text{Th}_3\text{N}_4(\text{cr}) + 12 \text{H}_2\text{O} = 3 \text{Th}^{4+} + 4 \text{NO}_3^- + 24 \text{H}^+ + 32 \text{e}^-$	-260.721 ± 3.921
$\text{Th}(\text{NO}_3)_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}(\text{cr}) = \text{Th}^{4+} + 4 \text{NO}_3^- + 5 \text{H}_2\text{O}$	1.929 ± 1.091
$\text{ThC}_{0.97}(\text{cr}) + 2.91 \text{H}_2\text{O} = \text{Th}^{4+} + 0.97 \text{CO}_3^{2-} + 5.82 \text{H}^+ + 7.88 \text{e}^-$	70.480 ± 1.445
$\text{ThC}_{1.94}(\text{s}) + 5.82 \text{H}_2\text{O} = \text{Th}^{4+} + 1.94 \text{CO}_3^{2-} + 11.64 \text{H}^+ + 11.76 \text{e}^-$	38.901 ± 1.615

2.2.2 SIT パラメータ

地球化学計算コード PHREEQC¹⁸⁾は SIT (specific ion interaction theory)⁶⁾による活量係数補正を考慮した計算を行うことができる。これまでの原子力機構による NEA データベースの PHREEQC フォーマット整備においては、SIT パラメータの取り込みは行われていなかった²¹⁻²³⁾。本データベースファイル整備において、Lemire et al. (2013)¹⁷⁾により報告されている SIT パラメータを PHREEQC フォーマットデータファイルに取り込んだ。SIT パラメータの整備は、データベースファイルの SIT データブロックに化学種 k の、化学種 k に相対する (すなわち電荷の負号が反対の) 電解質イオン j に対するイオン相互作用定数 ($\epsilon(k,j)$) を所定のフォーマットで格納する。データベースファイルの SIT データブロックに取り込んだ $\epsilon(k,j)$ の値を表 6 および表 7 に示す。

表 6 OECD/NEA で選定された陽イオン種と Cl^- , ClO_4^- および NO_3^- のイオン相互作用係数(1/12)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg mol^{-1})	Comment
H^+	Cl^-	0.12 \pm 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
H^+	ClO_4^-	0.14 \pm 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
H^+	NO_3^-	0.07 \pm 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
NH_4^+	Cl^-	-0.01 \pm 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
NH_4^+	ClO_4^-	-0.08 \pm 0.04	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
NH_4^+	NO_3^-	-0.06 \pm 0.03	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
$\text{H}_2(\text{gly})^+$	Cl^-	-0.06 \pm 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
$\text{H}_3(\text{edta})^+$	Cl^-	-0.23 \pm 0.15	see Section VIII.3.7 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
$\text{H}_3(\text{edta})^+$	ClO_4^-	-0.23 \pm 0.15	see Section VIII.3.7 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
$\text{H}_3(\text{edta})^+$	NO_3^-	-0.23 \pm 0.15	see Section VIII.3.7 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
SnOH^+	ClO_4^-	-0.07 \pm 0.13	see Section VII.1.1 of [2012GAM/GAJ] ¹⁶⁾ .
SnF^+	ClO_4^-	0.14 \pm 0.10	see Section VIII.3.1.1 of [2012GAM/GAJ] ¹⁶⁾ .
SnCl^+	ClO_4^-	0.08 \pm 0.70	see Section VIII.3.2.1 of [2012GAM/GAJ] ¹⁶⁾ .
SnBr^+	ClO_4^-	0.15 \pm 0.70	see Section VIII.3.3.1 of [2012GAM/GAJ] ¹⁶⁾ .
SnNO_3^+	ClO_4^-	0.17 \pm 0.09	see Section X.1.1 of [2012GAM/GAJ] ¹⁶⁾ .
SnSCN^+	ClO_4^-	0.17 \pm 0.29	see Section XI.1.1 of [2012GAM/GAJ] ¹⁶⁾ .
Tl^+	ClO_4^-	-0.21 \pm 0.06	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾

表6 OECD/NEA で選定された陽イオン種と Cl⁻, ClO₄⁻および NO₃⁻のイオン相互作用係数(2/12)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg mol ⁻¹)	Comment
ZnHCO ₃ ⁺	Cl ⁻	0.2	taken from Ferri et al. [1985FER/GRE] ²⁷⁾
CdCl ⁺	ClO ₄ ⁻	0.25 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
CdI ⁺	ClO ₄ ⁻	0.27 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
CdSCN ⁺	ClO ₄ ⁻	0.31 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
HgCl ⁺	ClO ₄ ⁻	0.19 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Cu ⁺	ClO ₄ ⁻	0.11 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Ag ⁺	ClO ₄ ⁻	0.00 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Ag ⁺	NO ₃ ⁻	-0.12 ± 0.05	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
NiOH ⁺	Cl ⁻	-0.01 ± 0.07	evaluated in [2005GAM/BUG] ¹²⁾ (Section 3.1.1) for the reaction Ni ²⁺ + H ₂ O = NiOH ⁺ + H ⁺ from $\Delta\epsilon$ in chloride media / perchlorate media
NiOH ⁺	ClO ₄ ⁻	0.14 ± 0.07	evaluated in [2005GAM/BUG] ¹²⁾ (Section 3.1.1) for the reaction Ni ²⁺ + H ₂ O = NiOH ⁺ + H ⁺ from $\Delta\epsilon$ in chloride media / perchlorate media
NiF ⁺	ClO ₄ ⁻	0.34 ± 0.08	derived from $\Delta\epsilon = \epsilon(\text{NiF}^+, \text{ClO}_4^-) - \epsilon(\text{Ni}^{2+}, \text{ClO}_4^-) - \epsilon(\text{Na}^+, \text{F}^-) = -(0.049 \pm 0.060) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ (see Section V.4.2.3 of [2005GAM/BUG] ¹²⁾)
NiCl ⁺	ClO ₄ ⁻	0.47 ± 0.06	see details in Section V.4.2.4 of [2005GAM/BUG] ¹²⁾
NiNO ₃ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.44 ± 0.14	see details in Section V.6.1.2 of [2005GAM/BUG] ¹²⁾ , specially sub-section V.6.1.2.1 for an alternative treatment of this system
Ni(H ₂ (cit)) ⁺	ClO ₄ ⁻	0.12 ± 0.50	see Section VII.7 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
NiBr ⁺	ClO ₄ ⁻	0.59 ± 0.10	see details in [2005GAM/BUG] ¹²⁾ , cf. Section V.4.2.5, specially sub-section V.4.2.5.1 for an alternative treatment of this system
NiHS ⁺	ClO ₄ ⁻	-0.85 ± 0.39	see details in Section V.5.1.1.2 of [2005GAM/BUG] ¹²⁾
NiSCN ⁺	ClO ₄ ⁻	0.31 ± 0.04	derived from $\Delta\epsilon = \epsilon(\text{NiSCN}^+, \text{Na}^+) - \epsilon(\text{SCN}^-, \text{Na}^+) - \epsilon(\text{Ni}^{2+}, \text{ClO}_4^-) = -(0.109 \pm 0.025) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ (see Section V.7.1.3.1 of [2005GAM/BUG] ¹²⁾)
Fe(OH) ₂ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.37 ± 0.18	determined in Section VII.1.3.2 of [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
FeF ⁺	ClO ₄ ⁻	0.34 ± 0.07	determined in Section VIII.2.1.3 of [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
FeCl ₂ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.52 ± 0.05	determined in Section VIII.2.3.2.2.1 of [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
FeSO ₄ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.40 ± 0.1	determined in Section IX.1.2.1.4.1 of [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
Zr ₄ (OH) ₁₅ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.09 ± 0.92	determined in [2005BRO/CUR] ¹³⁾ from the overall fit of the hydrolysis data as described in Appendix D.
Zr ₄ (OH) ₁₅ ⁺	NO ₃ ⁻	-0.02 ± 1.46	determined in [2005BRO/CUR] ¹³⁾ from the overall fit of the hydrolysis data as described in Appendix D.
ZrF ₃ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.20 ± 0.06	determined from SIT plot in [2005BRO/CUR] ¹³⁾ .
YCO ₃ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.17 ± 0.04	taken from Spahiu [1983SPA] ²⁶⁾

表6 OECD/NEA で選定された陽イオン種と Cl⁻, ClO₄⁻および NO₃⁻のイオン相互作用係数(3/12)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg mol ⁻¹)	Comment
Am(OH) ₂ ⁺	Cl ⁻	-0.27 ± 0.20	evaluated in [2003GUI/FAN] ¹⁰⁾ (cf. Section 12.3.1.1) from $\Delta\epsilon$ (in NaCl solution) for the reactions $An^{3+} + n H_2O(l) = An(OH)_n^{(3-n)} + n H^+$
Am(OH) ₂ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.17 ± 0.04	estimated in [1995SIL/BID] ⁷⁾
AmF ₂ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.17 ± 0.04	estimated in [1995SIL/BID] ⁷⁾
AmSO ₄ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.22 ± 0.08	evaluated in [1995SIL/BID] ⁷⁾
AmCO ₃ ⁺	Cl ⁻	0.01 ± 0.05	estimated in [1995SIL/BID] ⁷⁾
AmCO ₃ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.17 ± 0.04	estimated in [1995SIL/BID] ⁷⁾
Am(ox) ⁺	ClO ₄ ⁻	0.08 ± 0.10	see Section VI.13 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
PuO ₂ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.24 ± 0.05	derived from $\Delta\epsilon = \epsilon(PuO_2^{2+}, ClO_4^-) - \epsilon(PuO_2^+, ClO_4^-) = -(0.22 \pm 0.03) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ [1995CAP/VIT] ³⁷⁾ . In [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , $\epsilon(PuO_2^+, ClO_4^-) = (0.17 \pm 0.05) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ was tabulated based on [1989ROB] ³²⁾ , [1989RIG/ROB] ³¹⁾ and [1990RIG] ³³⁾ . Capdevila and Vitorge's data [1992CAP] ³⁴⁾ , [1994CAP/VIT] ³⁵⁾ and [1995CAP/VIT] ³⁷⁾ were unavailable at that time.
PuO ₂ F ⁺	ClO ₄ ⁻	0.29 ± 0.11	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by analogy with $\Delta\epsilon$ of the corresponding Np(VI) reaction
PuO ₂ Cl ⁺	ClO ₄ ⁻	0.50 ± 0.09	from $\Delta\epsilon$ evaluated by Giffaut [1994GIF] ³⁶⁾
NpO ₂ ⁺	Cl ⁻	0.09 ± 0.05	see Section 12.1 of [2001LEM/FUG] ⁹⁾
NpO ₂ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.25 ± 0.05	derived from $\Delta\epsilon = \epsilon(NpO_2^{2+}, ClO_4^-) - \epsilon(NpO_2^+, ClO_4^-) = -(0.21 \pm 0.03) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ [1987RIG/VIT] ²⁹⁾ , [1989RIG/ROB] ³¹⁾ and [1990RIG] ³³⁾
NpO ₂ OH ⁺	ClO ₄ ⁻	-0.06 ± 0.40	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾
(NpO ₂) ₃ (OH) ₅ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.45 ± 0.20	see Section 8.1.2 of [2001LEM/FUG] ⁹⁾
NpO ₂ F ⁺	ClO ₄ ⁻	0.29 ± 0.12	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by analogy with $\Delta\epsilon$ of the corresponding U(VI) reaction
NpO ₂ Cl ⁺	ClO ₄ ⁻	0.50 ± 0.14	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by analogy with $\Delta\epsilon$ of the corresponding Pu(VI) reaction
NpO ₂ IO ₃ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.33 ± 0.04	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by assuming $\epsilon(NpO_2IO_3^+, ClO_4^-) \approx \epsilon(UO_2IO_3^+, ClO_4^-)$
Np(SCN) ₃ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.17 ± 0.04	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by assuming $\epsilon(Np(SCN)_3^+, ClO_4^-) \approx \epsilon(AmF_2^+, ClO_4^-)$
UO ₂ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.26 ± 0.03	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , using $\Delta\epsilon = \epsilon(UO_2^{2+}, ClO_4^-) = (0.46 \pm 0.03) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$
UO ₂ OH ⁺	ClO ₄ ⁻	-0.06 ± 0.40	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , using $\Delta\epsilon = \epsilon(UO_2^{2+}, X) = (0.46 \pm 0.03) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$, where X = Cl ⁻ , ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻
UO ₂ OH ⁺	NO ₃ ⁻	0.51 ± 1.40	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , using $\Delta\epsilon = \epsilon(UO_2^{2+}, X) = (0.46 \pm 0.03) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$, where X = Cl ⁻ , ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻

表6 OECD/NEA で選定された陽イオン種と Cl⁻, ClO₄⁻および NO₃⁻のイオン相互作用係数(4/12)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg·mol ⁻¹)	Comment
(UO ₂) ₃ (OH) ₅ ⁺	Cl ⁻	0.81 ± 0.17	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , using $\Delta\epsilon = \epsilon(\text{UO}_2^{2+}, \text{X}) = (0.46 \pm 0.03) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$, where X = Cl ⁻ , ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻
(UO ₂) ₃ (OH) ₅ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.45 ± 0.15	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , using $\Delta\epsilon = \epsilon(\text{UO}_2^{2+}, \text{X}) = (0.46 \pm 0.03) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$, where X = Cl ⁻ , ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻
(UO ₂) ₃ (OH) ₅ ⁺	NO ₃ ⁻	0.41 ± 0.22	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , using $\Delta\epsilon = \epsilon(\text{UO}_2^{2+}, \text{X}) = (0.46 \pm 0.03) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$, where X = Cl ⁻ , ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻
UF ₃ ⁺	Cl ⁻	0.1 ± 0.1	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
UF ₃ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.1 ± 0.1	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
UO ₂ F ⁺	Cl ⁻	0.04 ± 0.07	taken from Riglet <i>et al.</i> [1989RIG/ROB] ³¹⁾ , where the following assumptions were made: $\epsilon(\text{Np}^{3+}, \text{ClO}_4^-) \approx \epsilon(\text{Pu}^{3+}, \text{ClO}_4^-) = 0.49 \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ as for other (M ³⁺ , ClO ₄ ⁻) interactions, and $\epsilon(\text{PuO}_2^{2+}, \text{ClO}_4^-) \approx \epsilon(\text{UO}_2^{2+}, \text{ClO}_4^-) \approx \epsilon(\text{NpO}_2^{2+}, \text{ClO}_4^-) = 0.46 \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$
UO ₂ F ⁺	ClO ₄ ⁻	0.28 ± 0.04	see Section 9.4.2.2.1 of [2003GUI/FAN] ¹⁰⁾
UO ₂ Cl ⁺	ClO ₄ ⁻	0.33 ± 0.04	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , using $\Delta\epsilon = \epsilon(\text{UO}_2^{2+}, \text{X}) = (0.46 \pm 0.03) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$, where X = Cl ⁻ , ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻
UO ₂ ClO ₃ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.33 ± 0.04	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
UO ₂ Br ⁺	ClO ₄ ⁻	0.24 ± 0.04	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
UO ₂ BrO ₃ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.33 ± 0.04	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
UO ₂ IO ₃ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.33 ± 0.04	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
UO ₂ N ₃ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.3 ± 0.1	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
UO ₂ NO ₃ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.33 ± 0.04	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
UO ₂ SCN ⁺	ClO ₄ ⁻	0.22 ± 0.04	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
Th(OH) ₃ ⁺	Cl ⁻	0.06 ± 0.15	see Table VII-16 in Section VII.3.6.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
Th(OH) ₃ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.15 ± 0.10	see Table VII-16 in Section VII.3.6.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
Th(OH) ₃ ⁺	NO ₃ ⁻	0.05 ± 0.15	see Table VII-16 in Section VII.3.6.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
ThF ₃ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.1 ± 0.1	see Table VIII-8 in Section VIII.1.2.1 of 3 [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
ThF ₃ ⁺	NO ₃ ⁻	0.0 ± 0.2	see Table VIII-8 in Section VIII.1.2.1 of 3 [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
Th(NO ₃) ₃ ⁺	ClO ₄ ⁻	0.25 ± 0.15	evaluated in Section X.1.3.3 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ , using $\epsilon(\text{Th}^{4+}, \text{X}) = (0.70 \pm 0.10) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ where X = ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻ .
Th(NO ₃) ₃ ⁺	NO ₃ ⁻	0.25 ± 0.15	evaluated in Section X.1.3.3 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ , using $\epsilon(\text{Th}^{4+}, \text{X}) = (0.70 \pm 0.10) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ where X = ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻ .
H ₆ (edta) ²⁺	Cl ⁻	-0.20 ± 0.16	evaluated in [2005HUM/AND] ¹⁴⁾ (Section VIII.3.7)
H ₆ (edta) ²⁺	ClO ₄ ⁻	-0.20 ± 0.16	evaluated in [2005HUM/AND] ¹⁴⁾ (Section VIII.3.7)
H ₆ (edta) ²⁺	NO ₃ ⁻	-0.20 ± 0.16	evaluated in [2005HUM/AND] ¹⁴⁾ (Section VIII.3.7)
Sn ²⁺	Cl ⁻	0.14 ± 0.10	see Section VI.2.1 of [2012GAM/GAJ] ¹⁶⁾ .

表6 OECD/NEA で選定された陽イオン種と Cl^- , ClO_4^- および NO_3^- のイオン相互作用係数(5/12)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg mol^{-1})	Comment
Sn^{2+}	ClO_4^-	0.19 \pm 0.04	see Section VI.2.1 of [2012GAM/GAJ] ¹⁶⁾ .
$\text{Sn}_3(\text{OH})_4^{2+}$	ClO_4^-	-0.02 \pm 0.16	see Section VII.1.1 of [2012GAM/GAJ] ¹⁶⁾ .
Pb^{2+}	ClO_4^-	0.15 \pm 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Pb^{2+}	NO_3^-	-0.20 \pm 0.12	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
AlOH^{2+}	Cl^-	0.09	taken from Hedlund [1988HED] ³⁰⁾
AlOH^{2+}	ClO_4^-	0.31	taken from Hedlund [1988HED] ³⁰⁾
$\text{Al}_2\text{CO}_3(\text{OH})_2^{2+}$	Cl^-	0.26	taken from Hedlund [1988HED] ³⁰⁾
Zn^{2+}	ClO_4^-	0.33 \pm 0.03	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Zn^{2+}	NO_3^-	0.16 \pm 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
ZnCO_3^{2+}	Cl^-	0.35 \pm 0.05	taken from Ferri et al. [1985FER/GRE] ²⁷⁾
Cd^{2+}	NO_3^-	0.09 \pm 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Hg^{2+}	ClO_4^-	0.34 \pm 0.03	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Hg^{2+}	NO_3^-	-0.1 \pm 0.1	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
Hg_2^{2+}	ClO_4^-	0.09 \pm 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Hg_2^{2+}	NO_3^-	-0.2 \pm 0.1	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
Cu^{2+}	Cl^-	0.08 \pm 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Cu^{2+}	ClO_4^-	0.32 \pm 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Cu^{2+}	NO_3^-	0.11 \pm 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Ni^{2+}	Cl^-	0.17 \pm 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Ni^{2+}	ClO_4^-	0.370 \pm 0.032	derived from the ionic strength dependence of the osmotic and mean activity coefficient of $\text{Ni}(\text{ClO}_4)_2$ solution ([2005GAM/BUG] ¹²⁾ , Section V.4.3)
Ni^{2+}	NO_3^-	0.182 \pm 0.010	derived from the ionic strength dependence of the osmotic and mean activity coefficient of $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ solution ([2005GAM/BUG] ¹²⁾ , Section V.6.1.2.1)
Co^{2+}	Cl^-	0.16 \pm 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Co^{2+}	ClO_4^-	0.34 \pm 0.03	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Co^{2+}	NO_3^-	0.14 \pm 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Fe^{2+}	Cl^-	0.17 \pm 0.01	determined in Section VI.4.3 of [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
Fe^{2+}	ClO_4^-	0.37 \pm 0.04	determined in Section VI.4.4 of [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
FeOH^{2+}	ClO_4^-	0.46 \pm 0.05	section VII.1.3.1 of [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
FeCl^{2+}	Cl^-	0.64 \pm 0.06	determined in Section VIII.2.3.1.3 of [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
FeCl^{2+}	ClO_4^-	0.63 \pm 0.05	determined in Section VIII.2.3.1.3 of [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
FeSCN^{2+}	ClO_4^-	0.45	taken from Spahiu [1983SPA] ²⁶⁾

表6 OECD/NEA で選定された陽イオン種と Cl⁻, ClO₄⁻および NO₃⁻のイオン相互作用係数(6/12)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg mol ⁻¹)	Comment
Mn ²⁺	Cl ⁻	0.13 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Zr(OH) ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.62 ± 0.39	determined in [2005BRO/CUR] ¹³⁾ from the overall fit of the hydrolysis data as described in Appendix D.
ZrF ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.47 ± 0.08	determined from SIT plot in [2005BRO/CUR] ¹³⁾ .
ZrCl ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.84 ± 0.11	determined from SIT plot in [2005BRO/CUR] ¹³⁾ .
Zr(NO ₃) ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.84 ± 0.11	determined from SIT plot in [2005BRO/CUR] ¹³⁾ .
YHCO ₃ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.39 ± 0.04	taken from Spahiu [1983SPA] ²⁶⁾
AmOH ²⁺	Cl ⁻	-0.04 ± 0.07	evaluated in [2003GUI/FAN] ¹⁰⁾ (cf. Section 12.3.1.1) from $\Delta\epsilon$ (in NaCl solution) for the reactions $An^{3+} + n H_2O(l) = An(OH)_n^{(3-n)} + n H^+$
AmOH ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.39 ± 0.04	estimated in [1995SIL/BID] ⁷⁾
AmF ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.39 ± 0.04	estimated in [1995SIL/BID] ⁷⁾
AmCl ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.39 ± 0.04	estimated in [1995SIL/BID] ⁷⁾
AmN ₃ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.39 ± 0.04	estimated in [1995SIL/BID] ⁷⁾
AmNO ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.39 ± 0.04	estimated in [1995SIL/BID] ⁷⁾
AmNO ₃ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.39 ± 0.04	estimated in [1995SIL/BID] ⁷⁾
AmH ₂ PO ₄ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.39 ± 0.04	estimated in [1995SIL/BID] ⁷⁾
AmSCN ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.39 ± 0.04	estimated in [1995SIL/BID] ⁷⁾
PuO ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.46 ± 0.05	by analogy with $\epsilon(UO_2^{2+}, ClO_4^-)$ as derived from isopiestic measurements in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ . The uncertainty is increased because the value is estimated by analogy.
PuF ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.36 ± 0.17	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by analogy with $\Delta\epsilon$ of the corresponding U(IV) reaction
PuCl ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.39 ± 0.16	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by analogy with $\Delta\epsilon$ of the corresponding Am(III) reaction
PuI ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.39 ± 0.04	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by assuming $\epsilon(PuI^{2+}, ClO_4^-) \approx \epsilon(AmSCN^{2+}, ClO_4^-)$ and $\epsilon(I, NH_4^+) \approx \epsilon(SCN^-, Na^+)$
PuSCN ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.39 ± 0.04	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by assuming $\epsilon(PuSCN^{2+}, ClO_4^-) \approx \epsilon(AmSCN^{2+}, ClO_4^-)$
NpO ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.46 ± 0.05	by analogy with $\epsilon(UO_2^{2+}, ClO_4^-)$ as derived from isopiestic measurements noted in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ . The uncertainty is increased because the value is estimated by analogy.
(NpO ₂) ₂ (OH) ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.57 ± 0.10	see Section 8.1.2 of [2001LEM/FUG] ⁹⁾
NpF ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.38 ± 0.17	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by analogy with $\Delta\epsilon$ of the corresponding U(IV) reaction
NpSO ₄ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.48 ± 0.11	estimated on Section 10.1.2.1 of [2001LEM/FUG] ⁹⁾

表6 OECD/NEA で選定された陽イオン種と Cl⁻, ClO₄⁻および NO₃⁻のイオン相互作用係数(7/12)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg·mol ⁻¹)	Comment
Np(SCN) ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.38 ± 0.20	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by analogy with $\Delta\epsilon$ of the corresponding U(IV) reaction
UO ₂ ²⁺	Cl ⁻	0.21 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾ These coefficients were not used in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ because they were evaluated by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾ without taking chloride and nitrate complexation into account. Instead, Grenthe <i>et al.</i> used $\epsilon(\text{UO}_2^{2+}, \text{X}) = (0.46 \pm 0.03)$ kg·mol ⁻¹ , for X = Cl ⁻ , ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻ .
UO ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.46 ± 0.03	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾ These coefficients were not used in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ because they were evaluated by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾ without taking chloride and nitrate complexation into account. Instead, Grenthe <i>et al.</i> used $\epsilon(\text{UO}_2^{2+}, \text{X}) = (0.46 \pm 0.03)$ kg·mol ⁻¹ , for X = Cl ⁻ , ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻ .
UO ₂ ²⁺	NO ₃ ⁻	0.24 ± 0.03	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾ These coefficients were not used in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ because they were evaluated by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾ without taking chloride and nitrate complexation into account. Instead, Grenthe <i>et al.</i> used $\epsilon(\text{UO}_2^{2+}, \text{X}) = (0.46 \pm 0.03)$ kg·mol ⁻¹ , for X = Cl ⁻ , ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻ .
(UO ₂) ₂ (OH) ₂ ²⁺	Cl ⁻	0.69 ± 0.07	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , using $\epsilon(\text{UO}_2^{2+}, \text{X}) = (0.46 \pm 0.03)$ kg·mol ⁻¹ , for X = Cl ⁻ , ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻ .
(UO ₂) ₂ (OH) ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.57 ± 0.07	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , using $\epsilon(\text{UO}_2^{2+}, \text{X}) = (0.46 \pm 0.03)$ kg·mol ⁻¹ , for X = Cl ⁻ , ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻ .
(UO ₂) ₂ (OH) ₂ ²⁺	NO ₃ ⁻	0.49 ± 0.09	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , using $\epsilon(\text{UO}_2^{2+}, \text{X}) = (0.46 \pm 0.03)$ kg·mol ⁻¹ , for X = Cl ⁻ , ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻ .
(UO ₂) ₃ (OH) ₄ ²⁺	Cl ⁻	0.50 ± 0.18	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , using $\epsilon(\text{UO}_2^{2+}, \text{X}) = (0.46 \pm 0.03)$ kg·mol ⁻¹ , for X = Cl ⁻ , ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻ .
(UO ₂) ₃ (OH) ₄ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.89 ± 0.23	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , using $\epsilon(\text{UO}_2^{2+}, \text{X}) = (0.46 \pm 0.03)$ kg·mol ⁻¹ , for X = Cl ⁻ , ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻ .
(UO ₂) ₃ (OH) ₄ ²⁺	NO ₃ ⁻	0.72 ± 1.00	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , using $\epsilon(\text{UO}_2^{2+}, \text{X}) = (0.46 \pm 0.03)$ kg·mol ⁻¹ , for X = Cl ⁻ , ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻ .
UF ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.3 ± 0.1	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
USO ₄ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.3 ± 0.1	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
U(NO ₃) ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.49 ± 0.14	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , using $\epsilon(\text{UO}^{4+}, \text{ClO}_4^-) = (0.76 \pm 0.06)$ kg·mol ⁻¹
Th(OH) ₂ ²⁺	Cl ⁻	0.13 ± 0.05	calculated in Section VII.3.6.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
Th(OH) ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.33 ± 0.10	calculated in Section VII.3.6.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
Th(OH) ₂ ²⁺	NO ₃ ⁻	0.10 ± 0.15	calculated in Section VII.3.6.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
ThF ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.3 ± 0.1	see Table VIII-8 in Section VIII.1.2.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
ThF ₂ ²⁺	NO ₃ ⁻	0.15 ± 0.20	see Table VIII-8 in Section VIII.1.2.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
ThSO ₄ ²⁺	Cl ⁻	0.14 ± 0.15	see Section IX.1.3.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
ThSO ₄ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.3 ± 0.1	see Section IX.1.3.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .

表6 OECD/NEA で選定された陽イオン種と Cl⁻, ClO₄⁻および NO₃⁻のイオン相互作用係数(8/12)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg mol ⁻¹)	Comment
Th(N ₃) ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.40 ± 0.15	estimated in Section X.1.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
Th(NO ₃) ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.43 ± 0.18	estimated in Section X.1.3.3 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ , using $\epsilon(\text{Th}^{4+}, \text{X}) = (0.70 \pm 0.10) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ for X = ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻
Th(NO ₃) ₂ ²⁺	NO ₃ ⁻	0.43 ± 0.18	estimated in Section X.1.3.3 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ , using $\epsilon(\text{Th}^{4+}, \text{X}) = (0.70 \pm 0.10) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ for X = ClO ₄ ⁻ and NO ₃ ⁻
Th(H ₂ PO ₄) ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.4 ± 0.1	estimated in Section X.2.3.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
Th(SCN) ₂ ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.38 ± 0.20	see Section XI.1.3.6.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
Be ²⁺	Cl ⁻		taken from [1986BRU] ²⁸⁾ , where it appears to have been based on the average of the values for $\epsilon(\text{Mg}^{2+}, \text{ClO}_4^-)$ and $\epsilon(\text{Ca}^{2+}, \text{ClO}_4^-)$ [1980CIA] ²⁵⁾ .
Mg ²⁺	Cl ⁻	0.19 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Mg ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.33 ± 0.03	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Mg ²⁺	NO ₃ ⁻	0.17 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Ca ²⁺	Cl ⁻	0.14 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Ca ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.27 ± 0.03	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Ca ²⁺	NO ₃ ⁻	0.02 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Ba ²⁺	Cl ⁻	0.07 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Ba ²⁺	ClO ₄ ⁻	0.15 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Ba ²⁺	NO ₃ ⁻	-0.28 ± 0.03	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Al ³⁺	Cl ⁻	0.33 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Ni ₂ OH ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.59 ± 0.15	by assuming $\epsilon(\text{Ni}_2\text{OH}^{3+}, \text{ClO}_4^-) \approx \epsilon(\text{Be}_2\text{OH}^{3+}, \text{ClO}_4^-)$, see Section V.3.1.1 in [2005GAM/BUG] ¹²⁾
Fe ³⁺	Cl ⁻	0.76 ± 0.03	determined in Section VI.4.2.2 of [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
Fe ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.73 ± 0.04	determined in Sections VI.1.2.1.1.1 and VI.4.1 of [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
Cr ³⁺	Cl ⁻	0.30 ± 0.03	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Cr ³⁺	NO ₃ ⁻	0.27 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
ZrOH ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.57 ± 0.13	determined in [2005BRO/CUR] ¹³⁾ from the overall fit of the hydrolysis data as described in Appendix D.
Zr ₃ (OH) ₉ ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.93 ± 0.35	determined in [2005BRO/CUR] ¹³⁾ from the overall fit of the hydrolysis data as described in Appendix D.
ZrF ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.63 ± 0.10	determined from SIT plot in [2005BRO/CUR] ¹³⁾ .
ZrCl ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.87 ± 0.10	determined from SIT plot in [2005BRO/CUR] ¹³⁾ .
ZrNO ₃ ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.88 ± 0.11	determined from SIT plot in [2005BRO/CUR] ¹³⁾ .
La ³⁺	Cl ⁻	0.22 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
La ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.47 ± 0.03	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Lu ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.52	taken from Spahiu [1983SPA] ²⁶⁾ (La ³⁺ → Lu ³⁺ : 0.47 → 0.52)

表6 OECD/NEA で選定された陽イオン種と Cl⁻, ClO₄⁻および NO₃⁻のイオン相互作用係数(9/12)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg mol ⁻¹)	Comment
Am ³⁺	Cl ⁻	0.23 ± 0.02	the $\epsilon(\text{An}^{3+}, \text{Cl}^-)$ for An = Am and Cm is assumed to equal to $\epsilon(\text{Nd}^{3+}, \text{Cl}^-)$ which is calculated from trace activity coefficients of Nd ³⁺ ion in 0 – 4 m NaCl. These trace activity coefficients are based on the ion interaction Pitzer parameters evaluated in [1997KON/FAN] ³⁸⁾ from osmotic coefficients in aqueous NdCl ₃ – NaCl and NdCl ₃ – CaCl ₂ .
Am ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.49 ± 0.03	estimated in [1995SIL/BID] ⁷⁾
Pu ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.49 ± 0.05	estimated by analogy with $\epsilon(\text{Ho}^{3+}, \text{ClO}_4^-)$ [1983SPA] ²⁶⁾ as in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , [1995SIL/BID] ⁷⁾ . The uncertainty is increased because the value is estimated by analogy.
PuOH ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.50 ± 0.05	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾
PuF ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.56 ± 0.11	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾
PuCl ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.85 ± 0.09	derived from the $\Delta\epsilon$ evaluated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾
PuBr ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.58 ± 0.16	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by analogy with $\Delta\epsilon$ of the corresponding U(IV) reaction, and by assuming $\epsilon(\text{Br}^-, \text{H}^+) \approx \epsilon(\text{Br}^-, \text{Na}^+)$
Np ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.49 ± 0.05	estimated by analogy with $\epsilon(\text{Ho}^{3+}, \text{ClO}_4^-)$ [1983SPA] ²⁶⁾ as in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , [1995SIL/BID] ⁷⁾ . The uncertainty is increased because the value is estimated by analogy.
NpOH ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.50 ± 0.05	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾
NpF ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.58 ± 0.07	evaluated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾
NpCl ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.81 ± 0.09	derived from the $\Delta\epsilon$ selected in [2001LEM/FUG] ⁹⁾
NpI ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.77 ± 0.26	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by analogy with $\Delta\epsilon$ of the corresponding Np(IV) chloride reaction, and by assuming $\epsilon(\text{I}^-, \text{H}^+) \approx \epsilon(\text{I}^-, \text{Na}^+)$
NpSCN ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.76 ± 0.12	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by analogy with $\Delta\epsilon$ of the corresponding U(IV) reaction
U ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.49 ± 0.05	evaluated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by analogy with $\epsilon(\text{Am}^{3+}, \text{ClO}_4^-)$
UOH ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.48 ± 0.08	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
UF ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.48 ± 0.08	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
UCI ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.50 ± 0.10	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by analogy with $\Delta\epsilon$ of the corresponding Pu(IV) reaction and using $\epsilon(\text{U}^{4+}, \text{X}) = (0.76 \pm 0.06)$ kg·mol ⁻¹ for X = Cl ⁻ and ClO ₄ ⁻
UBr ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.52 ± 0.10	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ using $\epsilon(\text{U}^{4+}, \text{X}) = (0.76 \pm 0.06)$ kg·mol ⁻¹ for X = Br ⁻ and ClO ₄ ⁻
UI ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.55 ± 0.10	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ using $\epsilon(\text{U}^{4+}, \text{X}) = (0.76 \pm 0.06)$ kg·mol ⁻¹ for X = I ⁻ and ClO ₄ ⁻
UNO ₃ ³⁺	ClO ₄ ⁻	0.62 ± 0.08	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ using $\epsilon(\text{U}^{4+}, \text{X}) = (0.76 \pm 0.06)$ kg·mol ⁻¹ for X = NO ₃ ⁻ and ClO ₄ ⁻

表 6 OECD/NEA で選定された陽イオン種と Cl^- , ClO_4^- および NO_3^- のイオン相互作用係数 (10/12)

j	k	$\epsilon(j,k)$ ($\text{kg}\cdot\text{mol}^{-1}$)	Comment
ThOH^{3+}	Cl^-	0.19 \pm 0.05	see Table VII-18 in Section VII.3.6.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
ThOH^{3+}	ClO_4^-	0.48 \pm 0.08	see Table VII-18 in Section VII.3.6.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
ThOH^{3+}	NO_3^-	0.20 \pm 0.15	see Table VII-18 in Section VII.3.6.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
ThF^{3+}	ClO_4^-	0.48 \pm 0.08	estimated in Section VIII.1.2.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ (Table VIII-8).
ThF^{3+}	NO_3^-	0.25 \pm 0.20	estimated in Section VIII.1.2.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ (Table VIII-8).
ThCl^{3+}	Cl^-	0.62 \pm 0.11	calculated in Section VIII.2.2.1.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ using $\epsilon(\text{Th}^{4+}, \text{X}) = (0.70 \pm 0.10) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$, for $\text{X} = \text{Cl}^-$ and ClO_4^-
ThCl^{3+}	ClO_4^-	0.62 \pm 0.11	calculated in Section VIII.2.2.1.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ using $\epsilon(\text{Th}^{4+}, \text{X}) = (0.70 \pm 0.10) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$, for $\text{X} = \text{Cl}^-$ and ClO_4^-
ThClO_3^{3+}	ClO_4^-	0.62 \pm 0.11	calculated in Section VIII.2.2.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ using $\epsilon(\text{Th}^{4+}, \text{X}) = (0.70 \pm 0.10) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$, for $\text{X} = \text{ClO}_3^-$ and ClO_4^-
ThBr^{3+}	ClO_4^-	0.62 \pm 0.11	calculated in Section VIII.3.2.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ using $\epsilon(\text{Th}^{4+}, \text{X}) = (0.70 \pm 0.10) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$, for $\text{X} = \text{Br}^-$ and ClO_4^-
ThBrO_3^{3+}	ClO_4^-	0.62 \pm 0.08	calculated in Section VIII.3.2.2 of [2008RAN/FUG] using $\epsilon(\text{Th}^{4+}, \text{X}) = (0.70 \pm 0.10) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$, for $\text{X} = \text{BrO}_3^-$ and ClO_4^-
ThN_3^{3+}	ClO_4^-	0.55 \pm 0.15	see Section X.1.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
ThNO_3^{3+}	ClO_4^-	0.56 \pm 0.14	calculated in Section X.1.3.3 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ using $\epsilon(\text{Th}^{4+}, \text{X}) = (0.70 \pm 0.10) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$, for $\text{X} = \text{ClO}_4^-$ and NO_3^- .
ThNO_3^{3+}	NO_3^-	0.56 \pm 0.14	calculated in Section X.1.3.3 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ using $\epsilon(\text{Th}^{4+}, \text{X}) = (0.70 \pm 0.10) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$, for $\text{X} = \text{ClO}_4^-$ and NO_3^- .
$\text{Th}(\text{H}_2\text{PO}_4)^{3+}$	ClO_4^-	0.5 \pm 0.1	estimated in Section X.2.3.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}(\text{H}_2\text{PO}_4)(\text{H}_3\text{PO}_4)^{3+}$	ClO_4^-	0.5 \pm 0.1	estimated in Section X.2.3.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
ThSCN^{3+}	ClO_4^-	0.50 \pm 0.10	see Section XI.1.3.6.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Be}_2\text{OH}^{3+}$	Cl^-		taken from [1986BRU] ²⁸⁾ , where the following assumptions were made: $\epsilon(\text{Be}^{2+}, \text{ClO}_4^-) = 0.30 \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ as for other $\epsilon(\text{M}^{2+}, \text{ClO}_4^-)$; $\epsilon(\text{Be}^{2+}, \text{Cl}^-) = 0.17 \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ as for other $\epsilon(\text{M}^{2+}, \text{Cl}^-)$ and $\epsilon(\text{Be}^{2+}, \text{NO}_3^-) = 0.17 \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ as for other $\epsilon(\text{M}^{2+}, \text{NO}_3^-)$
$\text{Be}_3(\text{OH})_3^{3+}$	Cl^-	0.30 \pm 0.05	taken from [1986BRU] ²⁸⁾ , where the following assumptions were made: $\epsilon(\text{Be}^{2+}, \text{ClO}_4^-) = 0.30 \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ as for other $\epsilon(\text{M}^{2+}, \text{ClO}_4^-)$; $\epsilon(\text{Be}^{2+}, \text{Cl}^-) = 0.17 \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ as for other $\epsilon(\text{M}^{2+}, \text{Cl}^-)$ and $\epsilon(\text{Be}^{2+}, \text{NO}_3^-) = 0.17 \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ as for other $\epsilon(\text{M}^{2+}, \text{NO}_3^-)$
$\text{Be}_3(\text{OH})_3^{3+}$	ClO_4^-	0.51 \pm 0.05	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ using $\epsilon(\text{U}^{4+}, \text{ClO}_4^-) = (0.76 \pm 0.06) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$

表 6 OECD/NEA で選定された陽イオン種と Cl^- , ClO_4^- および NO_3^- のイオン相互作用係数 (11/12)

j	k	$\epsilon(j,k)$ ($\text{kg}\cdot\text{mol}^{-1}$)	Comment
$\text{Be}_3(\text{OH})_3^{3+}$	NO_3^-	0.29 ± 0.05	taken from [1986BRU] ²⁸⁾ , where the following assumptions were made: $\epsilon(\text{Be}^{2+}, \text{ClO}_4^-) = 0.30 \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ as for other $\epsilon(\text{M}^{2+}, \text{ClO}_4^-)$; $\epsilon(\text{Be}^{2+}, \text{Cl}^-) = 0.17 \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ as for other $\epsilon(\text{M}^{2+}, \text{Cl}^-)$ and $\epsilon(\text{Be}^{2+}, \text{NO}_3^-) = 0.17 \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ as for other $\epsilon(\text{M}^{2+}, \text{NO}_3^-)$
Sn^{4+}	ClO_4^-	0.7 ± 0.2	see Section VI.3.1 of [2012GAM/GAJ] ¹⁶⁾ .
$\text{Al}_3\text{HCO}_3(\text{OH})_4^{4+}$	Cl^-	0.41	taken from Hedlund [1988HED] ³⁰⁾
$\text{Ni}_4(\text{OH})_4^{4+}$	ClO_4^-	1.08 ± 0.08	derived from $\Delta\epsilon = 4 \epsilon(\text{H}^+, \text{ClO}_4^-) - \epsilon(\text{Ni}_4(\text{OH})_4^{4+}, \text{ClO}_4^-) - 4 \epsilon(\text{Ni}^{2+}, \text{ClO}_4^-) = (0.16 \pm 0.05) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ (see [2005GAM/BUG] ¹²⁾ , Section V.3.1.1.1)
$\text{Fe}_2(\text{OH})_2^{4+}$	ClO_4^-	1.04 ± 0.10	determined in Section VII.1.3.3 of [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
Zr^{4+}	Cl^-	0.33 ± 0.09	determined in [2005BRO/CUR] ¹³⁾
Zr^{4+}	ClO_4^-	0.89 ± 0.10	determined in [2005BRO/CUR] ¹³⁾
Zr^{4+}	NO_3^-	0.33 ± 0.35	determined in [2005BRO/CUR] ¹³⁾
$\text{Y}_2\text{CO}_3^{4+}$	ClO_4^-	0.80 ± 0.04	taken from Spahiu [1983SPA] ²⁶⁾
Pu^{4+}	Cl^-	0.37 ± 0.05	calculated in Section VI.3.1 of [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
Pu^{4+}	ClO_4^-	0.82 ± 0.07	derived from $\Delta\epsilon = \epsilon(\text{Pu}^{4+}, \text{ClO}_4^-) - \epsilon(\text{Pu}^{3+}, \text{ClO}_4^-) = (0.33 \pm 0.035) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ [1995CAP/VIT] ³⁷⁾ . Uncertainty estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ . In the [1992GRE/FUG] ⁶⁾ , $\epsilon(\text{Pu}^{3+}, \text{ClO}_4^-) = (1.03 \pm 0.05) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ was tabulated based on references [1989ROB] ³²⁾ , [1989RIG/ROB] ³¹⁾ , [1990RIG] ³³⁾ . Capdevila and Vitorge's data [1992CAP] ³⁴⁾ , [1994CAP/VIT] ³⁵⁾ and [1995CAP/VIT] ³⁷⁾ were unavailable at that time.
Np^{4+}	ClO_4^-	0.84 ± 0.06	derived from $\Delta\epsilon = \epsilon(\text{Np}^{4+}, \text{ClO}_4^-) - \epsilon(\text{Np}^{3+}, \text{ClO}_4^-) = (0.35 \pm 0.03) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ [1989ROB] ³²⁾ , [1989RIG/ROB] ³¹⁾ , [1990RIG] ³³⁾
U^{4+}	ClO_4^-	0.76 ± 0.06	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ . Using the measured value of $\Delta\epsilon = \epsilon(\text{U}^{4+}, \text{ClO}_4^-) - \epsilon(\text{U}^{3+}, \text{ClO}_4^-) = (0.35 \pm 0.06) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ p. 89 [1990RIG] ³³⁾ , where uncertainty is recalculated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ from the data given in this thesis, and $\epsilon(\text{U}^{3+}, \text{ClO}_4^-) = (0.49 \pm 0.05) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$, a value for $\epsilon(\text{U}^{4+}, \text{ClO}_4^-)$ can be calculated in the same way as is done for $\epsilon(\text{Np}^{4+}, \text{ClO}_4^-)$ and $\epsilon(\text{Pu}^{4+}, \text{ClO}_4^-)$. This value, $\epsilon(\text{U}^{4+}, \text{ClO}_4^-) = (0.84 \pm 0.06) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$ is consistent with that tabulated $\epsilon(\text{U}^{4+}, \text{ClO}_4^-) = (0.76 \pm 0.06) \text{ kg}\cdot\text{mol}^{-1}$, since the uncertainties overlap. The authors of [2001LEM/FUG] ⁹⁾ do not believe that a change in the previously selected value for $\epsilon(\text{U}^{4+}, \text{ClO}_4^-)$ is justified at present.
Th^{4+}	Cl^-	0.25 ± 0.03	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Th^{4+}	ClO_4^-	0.70 ± 0.01	evaluated in Section VI.3.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
Th^{4+}	NO_3^-	0.31 ± 0.12	evaluated in Section VI.3.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}_4(\text{OH})_{12}^{4+}$	Cl^-	0.25 ± 0.20	see Section VII.3.4.1.3 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}_4(\text{OH})_{12}^{4+}$	ClO_4^-	0.56 ± 0.42	see Section VII.3.4.1.3 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾
$\text{Th}_4(\text{OH})_{12}^{4+}$	NO_3^-	0.42 ± 0.50	see Section VII.3.4.1.3 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾

表 6 OECD/NEA で選定された陽イオン種と Cl^- , ClO_4^- および NO_3^- のイオン相互作用係数 (12/12)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg mol^{-1})	Comment
$\text{Th}(\text{H}_3\text{PO}_4)_4^{4+}$	ClO_4^-	0.7 ± 0.1	estimated in Section X.2.3.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Al}_3(\text{OH})_4^{5+}$	Cl^-	0.66	taken from Hedlund [1988HED] ³⁰⁾
$\text{Al}_3(\text{OH})_4^{5+}$	ClO_4^-	1.30	taken from Hedlund [1988HED] ³⁰⁾
$\text{Th}_2(\text{OH})_3^{5+}$	Cl^-	0.29 ± 0.09	calculated in Section VII.3.4.1.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}_2(\text{OH})_3^{5+}$	ClO_4^-	0.91 ± 0.21	calculated in Section VII.3.4.1.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}_2(\text{OH})_3^{5+}$	NO_3^-	0.69 ± 0.25	calculated in Section VII.3.4.1.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}_2(\text{OH})_2^{6+}$	Cl^-	0.40 ± 0.16	evaluated in Section VII.3.4.1.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}_2(\text{OH})_2^{6+}$	ClO_4^-	1.22 ± 0.24	evaluated in Section VII.3.4.1.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}_2(\text{OH})_2^{6+}$	NO_3^-	0.69 ± 0.26	evaluated in Section VII.3.4.1.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Zr}_3(\text{OH})_4^{8+}$	Cl^-	0.33 ± 0.28	determined in [2005BRO/CUR] ¹³⁾ from the overall fit of the hydrolysis data as described in Appendix D.
$\text{Zr}_3(\text{OH})_4^{8+}$	ClO_4^-	1.89 ± 0.31	determined in [2005BRO/CUR]13) from the overall fit of the hydrolysis data as described in Appendix D.
$\text{Zr}_3(\text{OH})_4^{8+}$	NO_3^-	2.28 ± 0.35	determined in [2005BRO/CUR]13) from the overall fit of the hydrolysis data as described in Appendix D.
$\text{Zr}_4(\text{OH})_8^{8+}$	ClO_4^-	3.61 ± 1.02	determined in [2005BRO/CUR]13) from the overall fit of the hydrolysis data as described in Appendix D.
$\text{Th}_4(\text{OH})_8^{8+}$	Cl^-	0.70 ± 0.20	evaluated in Section VII.3.4.1.3 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}_4(\text{OH})_8^{8+}$	ClO_4^-	1.69 ± 0.42	evaluated in Section VII.3.4.1.3 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}_4(\text{OH})_8^{8+}$	NO_3^-	1.59 ± 0.51	evaluated in Section VII.3.4.1.3 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}_6(\text{OH})_{15}^{9+}$	Cl^-	0.72 ± 0.30	see details in Section VII.3.4.1.4 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}_6(\text{OH})_{15}^{9+}$	ClO_4^-	1.85 ± 0.74	see details in Section VII.3.4.1.4 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}_6(\text{OH})_{15}^{9+}$	NO_3^-	2.20 ± 0.77	see details in Section VII.3.4.1.4 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}_6(\text{OH})_{14}^{10+}$	Cl^-	0.83 ± 0.30	estimated in Section VII.3.4.1.4 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}_6(\text{OH})_{14}^{10+}$	ClO_4^-	2.2 ± 0.3	estimated in Section VII.3.4.1.4 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$\text{Th}_6(\text{OH})_{14}^{10+}$	NO_3^-	2.9 ± 0.5	estimated in Section VII.3.4.1.4 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .

表7 OECD/NEA で選定された陰イオン種と Li⁺, Na⁺および K⁺のイオン相互作用係数(1/7)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg ⁻¹ mol ⁻¹)	Comment
OH ⁻	Li ⁺	-0.02 ± 0.03	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
OH ⁻	Na ⁺	0.04 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
OH ⁻	K ⁺	0.09 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
F ⁻	Na ⁺	0.02 ± 0.02	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
F ⁻	K ⁺	0.03 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
HF ₂ ⁻	Na ⁺	-0.11 ± 0.06	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
Cl ⁻	Li ⁺	0.10 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Cl ⁻	Na ⁺	0.03 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Cl ⁻	K ⁺	0.00 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
ClO ₃ ⁻	Na ⁺	-0.01 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
ClO ₄ ⁻	Li ⁺	0.15 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
ClO ₄ ⁻	Na ⁺	0.01 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Br ⁻	Li ⁺	0.13 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Br ⁻	Na ⁺	0.05 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Br ⁻	K ⁺	0.01 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
BrO ₃ ⁻	Na ⁺	-0.06 ± 0.02	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
I ⁻	Li ⁺	0.16 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
I ⁻	Na ⁺	0.08 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
I ⁻	K ⁺	0.02 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
IO ₃ ⁻	Na ⁺	-0.06 ± 0.02	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
HSO ₄ ⁻	Na ⁺	-0.01 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
N ₃ ⁻	Na ⁺	0.015 ± 0.020	see Section X.1.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
NO ₂ ⁻	Li ⁺	0.06 ± 0.04	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
NO ₂ ⁻	Na ⁺	0.00 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
NO ₂ ⁻	K ⁺	-0.04 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
NO ₃ ⁻	Li ⁺	0.08 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
NO ₃ ⁻	Na ⁺	-0.04 ± 0.03	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
NO ₃ ⁻	K ⁺	-0.11 ± 0.04	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
H ₂ PO ₄ ⁻	Na ⁺	-0.08 ± 0.04	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
H ₂ PO ₄ ⁻	K ⁺	-0.14 ± 0.04	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾

表7 OECD/NEA で選定された陰イオン種と Li⁺, Na⁺および K⁺のイオン相互作用係数(2/7)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg·mol ⁻¹)	Comment
HCO ₃ ⁻	Na ⁺	0.00 ± 0.02	these values differ from those reported in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ . See the discussion in [1995GRE/PUI] ⁴⁰⁾ . Values for CO ₃ ²⁻ and HCO ₃ ⁻ are based on [1980CIA] ²⁵⁾ .
HCO ₃ ⁻	K ⁺	-0.06 ± 0.05	calculated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ from Pitzer coefficients
H(ox) ⁻	Li ⁺	-0.28 ± 0.09	evaluated in Section VI.3.5 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
H(ox) ⁻	Na ⁺	-0.07 ± 0.01	evaluated in Section VI.3.5 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
H(ox) ⁻	K ⁺	-0.01 ± 0.08	evaluated in Section VI.3.5 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
H ₂ (cit) ⁻	Li ⁺	-0.11 ± 0.03	evaluated in Section VII.3.6 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
H ₂ (cit) ⁻	Na ⁺	-0.05 ± 0.01	evaluated in Section VII.3.6 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
H ₂ (cit) ⁻	K ⁺	-0.04 ± 0.01	evaluated in Section VII.3.6 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
CN ⁻	Na ⁺	0.07 ± 0.03	as reported in [1992BAN/BLI] ³⁹⁾
SCN ⁻	Na ⁺	0.05 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
SCN ⁻	K ⁺	-0.01 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
HCOO ⁻	Na ⁺	0.03 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
CH ₃ COO ⁻	Li ⁺	0.05 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
CH ₃ COO ⁻	Na ⁺	0.08 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
CH ₃ COO ⁻	K ⁺	0.09 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
H ₃ (edta) ⁻	Na ⁺	-0.33 ± 0.14	evaluated in Section VIII.3.7 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
H ₃ (edta) ⁻	K ⁺	-0.14 ± 0.17	evaluated in Section VIII.3.7 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
SiO(OH) ₃ ⁻	Na ⁺	-0.08 ± 0.03	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
Si ₂ O ₂ (OH) ₅ ⁻	Na ⁺	-0.08 ± 0.04	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
Sn(OH) ₃ ⁻	Na ⁺	0.22 ± 0.03	see Section VII.1.1 of [2012GAM/GAJ] ¹⁶⁾ .
SnCl ₃ ⁻	Na ⁺	0.04 ± 0.07	see Section VIII.3.2.1 of [2012GAM/GAJ] ¹⁶⁾ .
SnBr ₃ ⁻	Na ⁺	0.16 ± 0.08	see Section VIII.3.3.1 of [2012GAM/GAJ] ¹⁶⁾ .
B(OH) ₄ ⁻	Na ⁺	-0.07 ± 0.05	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
Ni(SCN) ₃ ⁻	Na ⁺	0.66 ± 0.13	evaluated in [2005GAM/BUG] ¹²⁾ (see Section V.7.1.3.1)
Fe(SO ₄) ₂ ⁻	Na ⁺	0.24 ± 0.14	estimated in Section IX.1.2.1.4.3 of [2013LEM/BER] ¹⁷⁾ .
ZrF ₅ ⁻	Na ⁺	-0.14 ± 0.03	determined from SIT plots in [2005BRO/CUR] ¹³⁾
Ni(cit) ⁻	Na ⁺	0.22 ± 0.50	evaluated in Section VII.7 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
Am(SO ₄) ₂ ⁻	Na ⁺	-0.05 ± 0.05	estimated in [1995SIL/BID] ⁷⁾
Am(CO ₃) ₂ ⁻	Na ⁺	-0.14 ± 0.06	evaluated in Section 12.6.1.1.1 [2003GUI/FAN] ¹⁰⁾ , from $\Delta\epsilon_n$ in NaCl solution for the reactions $An^{3+} + n CO_3^{2-} \rightarrow An(CO_3)_n^{(3-2n)}$ based on $\epsilon(Am^{3+}, Cl^-) = (0.23 \pm 0.02) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ and $\epsilon(Na^+, CO_3^{2-}) = -(0.08 \pm 0.03) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$.
Am(ox) ₂ ⁻	Na ⁺	-0.21 ± 0.08	evaluated in Section VI.13 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
Am(edta) ⁻	Na ⁺	0.01 ± 0.16	evaluated in Section VIII.13.2.1 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾

表7 OECD/NEA で選定された陰イオン種と Li⁺, Na⁺および K⁺のイオン相互作用係数(3/7)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg·mol ⁻¹)	Comment
Am(edta) ⁻	K ⁺	0.01 ± 0.16	estimated in [2005HUM/AND] ¹⁴⁾ Section VIII.13.2.1 by assuming $\epsilon(\text{Am}(\text{edta})^-, \text{K}^+) \approx \epsilon(\text{Am}(\text{edta})^-, \text{Na}^+)$
PuO ₂ CO ₃ ⁻	Na ⁺	-0.18 ± 0.18	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by analogy with $\epsilon(\text{NpO}_2\text{CO}_3^-, \text{Na}^+)$
Pu(edta) ⁻	K ⁺	0.01 ± 0.16	estimated in [2005HUM/AND] ¹⁴⁾ Section VIII.12.2.1 by assuming $\epsilon(\text{Pu}(\text{edta})^-, \text{K}^+) \approx \epsilon(\text{Am}(\text{edta})^-, \text{Na}^+)$
NpO ₂ (OH) ₂ ⁻	Na ⁺	-0.01 ± 0.07	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ (Section 8.1.3)
NpO ₂ CO ₃ ⁻	Na ⁺	-0.18 ± 0.15	calculated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ (Section 12.1.2.1.3)
NpO ₂ (ox) ⁻	Na ⁺	-0.4 ± 0.1	evaluated in Section VI.11.2.3 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
NpO ₂ (H ₂ edta) ⁻	Na ⁺	-0.18 ± 0.16	evaluated in Section VIII.11.2.3 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
(NpO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ ⁻	Na ⁺	0.00 ± 0.05	estimated by analogy in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ (Section 12.1.2.1.2)
UO ₂ (OH) ₃ ⁻	Na ⁺	-0.09 ± 0.05	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
UO ₂ F ₃ ⁻	Na ⁺	-0.14 ± 0.05	evaluated in [2003GUI/FAN] ¹⁰⁾ , Section 9.4.2.2.1.1
UO ₂ (N ₃) ₃ ⁻	Na ⁺	0.0 ± 0.1	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
(UO ₂) ₂ CO ₃ (OH) ₃ ⁻	Na ⁺	0.00 ± 0.05	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
UO ₂ (cit) ⁻	Na ⁺	-0.11 ± 0.09	evaluated in [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
ThCO ₃ (OH) ₃ ⁻	Na ⁺	-0.05 ± 0.20	see Section XI.1.3.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾
Mg(cit) ⁻	Na ⁺	0.03 ± 0.03	evaluated in [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
UO ₂ (Hedta) ⁻	Na ⁺	-0.18 ± 0.16	estimated in Section VIII.10.2.4 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
Mg(Hedta) ⁻	Na ⁺	0.11 ± 0.20	estimated in Section VIII.5.1 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
SO ₃ ²⁻	Na ⁺	-0.08 ± 0.05	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
SO ₄ ²⁻	Li ⁺	-0.03 ± 0.04	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
SO ₄ ²⁻	Na ⁺	-0.12 ± 0.06	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
SO ₄ ²⁻	K ⁺	-0.06 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
S ₂ O ₃ ²⁻	Na ⁺	-0.08 ± 0.05	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
HPO ₄ ²⁻	Na ⁺	-0.15 ± 0.06	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
HPO ₄ ²⁻	K ⁺	-0.10 ± 0.06	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
CO ₃ ²⁻	Na ⁺	-0.08 ± 0.03	these values differ from those reported in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ . See the discussion in [1995GRE/PUI] ⁴⁰⁾ . Values for CO ₃ ²⁻ and HCO ₃ ⁻ are based on [1980CIA] ²⁵⁾ .
CO ₃ ²⁻	K ⁺	0.02 ± 0.01	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾

表7 OECD/NEA で選定された陰イオン種と Li⁺, Na⁺および K⁺のイオン相互作用係数(4/7)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg ⁻¹ mol ⁻¹)	Comment
(ox) ²⁻	Li ⁺	-0.51 ± 0.09	evaluated in Section VI.3.5 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
(ox) ²⁻	Na ⁺	-0.08 ± 0.01	evaluated in Section VI.3.5 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
(ox) ²⁻	K ⁺	0.07 ± 0.08	evaluated in Section VI.3.5 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
H(cit) ²⁻	Li ⁺	-0.17 ± 0.04	evaluated in Section VII.3.6 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
H(cit) ²⁻	Na ⁺	-0.04 ± 0.02	evaluated in Section VII.3.6 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
H(cit) ²⁻	K ⁺	-0.01 ± 0.02	evaluated in Section VII.3.6 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
H ₂ (edta) ²⁻	Na ⁺	-0.37 ± 0.14	evaluated in Section VII.3.7 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
H ₂ (edta) ²⁻	K ⁺	-0.17 ± 0.18	evaluated in Section VII.3.7 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
SiO ₂ (OH) ₂ ²⁻	Na ⁺	-0.10 ± 0.07	evaluated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
Si ₂ O ₃ (OH) ₄ ²⁻	Na ⁺	-0.15 ± 0.06	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
Ni(ox) ₂ ²⁻	Na ⁺	-0.26 ± 0.03	evaluated in Section VI.7.2 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
Ni(CN) ₄ ²⁻	Na ⁺	0.185 ± 0.081	evaluated in [2005GAM/BUG] ¹²⁾ (see Section V.7.1.2.1.1)
Fe(CO ₃) ₂ ²⁻	Na ⁺	-0.050 ± 0.05	estimated in Section IX.1.2.1.4.3 of [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
CrO ₄ ²⁻	Na ⁺	-0.06 ± 0.04	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
CrO ₄ ²⁻	K ⁺	-0.08 ± 0.04	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
Zr(OH) ₆ ²⁻	Na ⁺	-0.10 ± 0.10	determined in this review by analogy to known interaction coefficients of doubly charged anionic species with alkali ions (source: [2001LEM/FUG] ⁹⁾).
ZrF ₆ ²⁻	Na ⁺	-0.15 ± 0.06	determined from SIT plots in [2005BRO/CUR] ¹³⁾ .
NpO ₂ (HPO ₄) ₂ ²⁻	Na ⁺	-0.1 ± 0.1	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾
NpO ₂ (CO ₃) ₂ ²⁻	Na ⁺	-0.02 ± 0.14	estimated by analogy in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ (Section 12.1.2.1.2)
NpO ₂ (cit) ²⁻	Na ⁺	-0.06 ± 0.03	evaluated in Section VII.11 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
NpO ₂ (Hedta) ²⁻	Na ⁺	0.07 ± 0.16	estimated in Section VIII.11.2.3 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
UO ₂ F ₄ ²⁻	Na ⁺	-0.30 ± 0.06	evaluated in [2003GUI/FAN] ¹⁰⁾ , Section 9.4.2.2.1.1
UO ₂ (SO ₄) ₂ ²⁻	Na ⁺	-0.12 ± 0.06	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
UO ₂ (N ₃) ₄ ²⁻	Na ⁺	-0.1 ± 0.1	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
UO ₂ (ox) ₂ ²⁻	Na ⁺	-0.18 ± 0.07	estimated in Section VI.1.2.4.1 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
UO ₂ (edta) ²⁻	Na ⁺	-0.22 ± 0.18	estimated in Section VIII.10.2.4 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
UO ₂ (CO ₃) ₂ ²⁻	Na ⁺	-0.02 ± 0.09	these values differ from those reported in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ . See the discussion in [1995GRE/PUI] ⁴⁰⁾ . Values for CO ₃ ²⁻ and HCO ₃ ⁻ are based on [1980CIA] ²⁵⁾ .
(UO ₂) ₂ (OH) ₂ (SO ₄) ₂ ²⁻	Na ⁺	-0.14 ± 0.22	evaluated in Section 9.5.1.1.2 of [2003GUI/FAN] ¹⁰⁾
ThF ₆ ²⁻	Na ⁺	-0.30 ± 0.06	see Table VIII-8 in Section VIII.1.2.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
Th(SO ₄) ₃ ²⁻	Li ⁺	-0.068 ± 0.003	in combination with $\epsilon_2 = (0.093 \pm 0.007)$
Th(SO ₄) ₃ ²⁻	Na ⁺	-0.091 ± 0.038	see Section IX.1.3.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .

表7 OECD/NEA で選定された陰イオン種と Li⁺, Na⁺および K⁺のイオン相互作用係数(5/7)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg·mol ⁻¹)	Comment
Th(SO ₄) ₃ ²⁻	K ⁺	-0.091 ± 0.038	see Section IX.1.3.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
Th(CO ₃) ₂ (OH) ₂ ²⁻	Na ⁺	-0.1 ± 0.2	see Section XI.1.3.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
ThCO ₃ (OH) ₄ ²⁻	Na ⁺	-0.1 ± 0.2	see Section XI.1.3.2 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
Mg(ox) ₂ ²⁻	Na ⁺	-0.15 ± 0.03	estimated in Section VI.5.1 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
Mg(ox) ₂ ²⁻	K ⁺	-0.15 ± 0.10	estimated in [2005HUM/AND] ¹⁴⁾ , Section VI.5.1 by assuming $\epsilon(\text{Mg(ox)}_2^{2-}, \text{K}^+) \approx \epsilon(\text{Mg(ox)}_2^{2-}, \text{Na}^+)$
Mg(edta) ²⁻	Na ⁺	-0.01 ± 0.15	evaluated in Section VIII.5.2 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
Ca(ox) ₂ ²⁻	Na ⁺	-0.15 ± 0.10	estimated in [2005HUM/AND] ¹⁴⁾ , Section VI.5.2 by assuming $\epsilon(\text{Ca(ox)}_2^{2-}, \text{Na}^+) \approx \epsilon(\text{Mg(ox)}_2^{2-}, \text{Na}^+)$
Ca(ox) ₂ ²⁻	K ⁺	-0.15 ± 0.10	estimated in [2005HUM/AND] ¹⁴⁾ , Section VI.5.2 by assuming $\epsilon(\text{Ca(ox)}_2^{2-}, \text{K}^+) \approx \epsilon(\text{Mg(ox)}_2^{2-}, \text{Na}^+)$
(cit) ³⁻	Li ⁺	-0.44 ± 0.15	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
(cit) ³⁻	Na ⁺	-0.076 ± 0.030	can be described more accurately with an ionic strength dependent function
(cit) ³⁻	K ⁺	0.02 ± 0.02	evaluated in Section VI.3.6 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
H(edta) ³⁻	Na ⁺	-0.10 ± 0.14	evaluated in Section VIII.3.7 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
H(edta) ³⁻	K ⁺	0.31 ± 0.18	evaluated in Section VIII.3.7 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
PO ₄ ³⁻	Na ⁺	-0.25 ± 0.03	can be described more accurately with an ionic strength dependent function, listed in Table B-6 [2013LEM/BER] ¹⁷⁾
PO ₄ ³⁻	K ⁺	-0.09 ± 0.02	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Si ₃ O ₆ (OH) ₃ ³⁻	Na ⁺	-0.25 ± 0.03	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
Si ₃ O ₅ (OH) ₅ ³⁻	Na ⁺	-0.25 ± 0.03	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
Si ₄ O ₇ (OH) ₅ ³⁻	Na ⁺	-0.25 ± 0.03	estimated in [1992GRE/FUG] ⁶⁾
Ni(CN) ₅ ³⁻	Na ⁺	0.25 ± 0.14	evaluated in [2005GAM/BUG] ¹²⁾ (see Section V.7.1.2.1.1)
Fe(CO ₃) ₃ ³⁻	Na ⁺	-0.23 ± 0.07	by analogy. See Appendix A entry for [2005GRI] ⁴³⁾ .
Am(CO ₃) ₃ ³⁻	Na ⁺	-0.23 ± 0.07	evaluated in Section 12.6.1.1.1 [2003GUI/FAN] ¹⁰⁾ , from $\Delta\epsilon_n$ in NaCl solution for the reactions $\text{An}^{3+} + n \text{CO}_3^{2-} \rightarrow \text{An}(\text{CO}_3)_n^{(3-2n)}$ based on $\epsilon(\text{Am}^{3+}, \text{Cl}^-) = (0.23 \pm 0.02) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ and $\epsilon(\text{Na}^+, \text{CO}_3^{2-}) = -(0.08 \pm 0.03) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$.
Am(ox) ₃ ³⁻	Na ⁺	-0.23 ± 0.10	estimated in [2005HUM/AND] ¹⁴⁾ , Section VI.13.2.1 by assuming $\epsilon(\text{Am(ox)}_3^{3-}, \text{Na}^+) \approx \epsilon(\text{Am(CO}_3)_3^{3-}, \text{Na}^+)$
Np(CO ₃) ₃ ³⁻	K ⁺	-0.15 ± 0.07	estimated by analogy in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ (Section 12.1.2.1.5)
NpO ₂ (CO ₃) ₂ ³⁻	Na ⁺	-0.33 ± 0.17	calculated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ (Section 12.1.2.1.3)
NpO ₂ (ox) ₂ ³⁻	Na ⁺	-0.3 ± 0.2	estimated in Section VI.11.2.3 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
NpO ₂ (edta) ³⁻	Na ⁺	0.20 ± 0.16	estimated in Section VIII.11.2.3 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
(edta) ⁴⁻	Na ⁺	0.32 ± 0.14	evaluated in Section VIII.3.7 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾

表7 OECD/NEA で選定された陰イオン種と Li⁺, Na⁺および K⁺のイオン相互作用係数(6/7)

j	k	$\epsilon(j,k)$ (kg·mol ⁻¹)	Comment
(edta) ⁴⁻	Na ⁺	0.32 ± 0.14	evaluated in Section VIII.3.7 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
(edta) ⁴⁻	K ⁺	1.07 ± 0.19	evaluated in Section VIII.3.7 of [2005HUM/AND] ¹⁴⁾
P ₂ O ₇ ⁴⁻	Na ⁺	-0.26 ± 0.05	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
P ₂ O ₇ ⁴⁻	K ⁺	-0.15 ± 0.05	reported by Ciavatta [1980CIA] ²⁵⁾
Fe(CN) ₆ ⁴⁻	K ⁺	-0.17 ± 0.03	(no comments)
Zr(CO ₃) ₄ ⁴⁻	Na ⁺	-0.09 ± 0.20	this value, referring to the ion pair (NH ₄ ⁺ ,Zr(CO ₃) ₄ ⁴⁻), has been estimated in this review by analogy with the monovalent ion pair (Na ⁺ ,U(CO ₃) ₄ ⁴⁻) (see [97GRE/PLY2] ⁴¹⁾).
NpO ₂ (CO ₃) ₃ ⁴⁻	Na ⁺	-0.40 ± 0.19	calculated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ (Section 12.1.2.1.2)
NpO ₂ (CO ₃) ₃ ⁴⁻	K ⁺	-0.62 ± 0.42	$\epsilon(\text{NpO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}, \text{NH}_4^+) = -(0.78 \pm 0.25) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$ is calculated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ (Section 12.1.2.1.2)
NpO ₂ (CO ₃) ₂ OH ⁴⁻	Na ⁺	-0.40 ± 0.19	estimated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ by analogy with NpO ₂ (CO ₃) ₃ ⁴⁻
U(CO ₃) ₄ ⁴⁻	Na ⁺	-0.09 ± 0.10	these values differ from those reported in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ . See the discussion in [1995GRE/PUI] ⁴⁰⁾ . Values for CO ₃ ²⁻ and HCO ₃ ⁻ are based on [1980CIA] ²⁵⁾ .
UO ₂ (CO ₃) ₃ ⁴⁻	Na ⁺	-0.01 ± 0.11	these values differ from those reported in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ . See the discussion in [1995GRE/PUI] ⁴⁰⁾ . Values for CO ₃ ²⁻ and HCO ₃ ⁻ are based on [1980CIA] ²⁵⁾ .
UO ₂ (ox) ₃ ⁴⁻	Na ⁺	-0.01 ± 0.11	estimated in [2005HUM/AND] ¹⁴⁾ , Section VI.10.2.4.1 by assuming $\epsilon(\text{UO}_2(\text{ox})_3^{4-}, \text{Na}^+) \approx \epsilon(\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}, \text{Na}^+)$
(UO ₂) ₃ (OH) ₄ (SO ₄) ₃ ⁴⁻	Na ⁺	0.6 ± 0.6	estimated in Section 9.5.1.1.2 of [2003GUI/FAN] ¹⁰⁾
NpO ₂ (CO ₃) ₃ ⁵⁻	Na ⁺	-0.53 ± 0.19	calculated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ (Section 12.1.2.1.3)
NpO ₂ (CO ₃) ₃ ⁵⁻	K ⁺	-0.22 ± 0.03	evaluated in [2003GUI/FAN] ¹⁰⁾ (discussion of [1998ALM/NOV] ⁴²⁾ in Appendix A) from $\Delta\epsilon$ for the reactions $\text{KNpO}_2\text{CO}_3(\text{s}) + 2 \text{CO}_3^{2-} = \text{NpO}_2(\text{CO}_3)_3^{5-} + \text{K}^+$ (in K ₂ CO ₃ -KCl solution) and $\text{K}_3\text{NpO}_2(\text{CO}_3)_2(\text{s}) + \text{CO}_3^{2-} = \text{NpO}_2(\text{CO}_3)_3^{5-} + 3 \text{K}^+$ (in K ₂ CO ₃ solution (based on $\epsilon(\text{K}^+, \text{CO}_3^{2-}) = -(0.02 \pm 0.01) \text{ kg} \cdot \text{mol}^{-1}$)
UO ₂ (CO ₃) ₃ ⁵⁻	Na ⁺	-0.62 ± 0.15	these values differ from those reported in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ . See the discussion in [1995GRE/PUI] ⁴⁰⁾ . Values for CO ₃ ²⁻ and HCO ₃ ⁻ are based on [1980CIA] ²⁵⁾ .
Th(CO ₃) ₄ OH ⁵⁻	Na ⁺	-0.22 ± 0.13	evaluated in Section XI.1.3.2.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
Np(CO ₃) ₅ ⁶⁻	K ⁺	-0.73 ± 0.68	calculated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ (Section 12.1.2.1.4)
(NpO ₂) ₃ (CO ₃) ₆ ⁶⁻	Na ⁺	-0.46 ± 0.73	calculated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ (Section 12.1.2.1.2)
U(CO ₃) ₅ ⁶⁻	Na ⁺	-0.30 ± 0.15	these values differ from those reported in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ . See the discussion in [1995GRE/PUI] ⁴⁰⁾ . Values for CO ₃ ²⁻ and HCO ₃ ⁻ are based on [1980CIA] ²⁵⁾ .
U(CO ₃) ₅ ⁶⁻	K ⁺	-0.70 ± 0.31	calculated in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ from Pitzer coefficients

表7 OECD/NEA で選定された陰イオン種と Li^+ , Na^+ および K^+ のイオン相互作用係数(7/7)

j	k	$\epsilon(j,k) (\text{kg}\cdot\text{mol}^{-1})$	Comment
$(\text{UO}_2)_3(\text{CO}_3)_6^{6-}$	Na^+	0.37 ± 0.11	these values differ from those reported in [1992GRE/FUG] ⁶⁾ . See the discussion in [1995GRE/PUI] ⁴⁰⁾ . Values for CO_3^{2-} and HCO_3^- are based on [1980CIA] ²⁵⁾ .
$(\text{UO}_2)_2\text{NpO}_2(\text{CO}_3)_6^{6-}$	Na^+	0.09 ± 0.71	estimated by analogy in [2001LEM/FUG] ⁹⁾ (Section 12.1.2.2.1)
$(\text{UO}_2)_5(\text{OH})_8(\text{SO}_4)_4^{6-}$	Na^+	1.10 ± 0.50	estimated in Section 9.5.1.1.2 of [2003GUI/FAN] ¹⁰⁾
$\text{Th}(\text{CO}_3)_5^{6-}$	Na^+	-0.30 ± 0.15	estimated in Section XI.1.3.2.1 of [2008RAN/FUG] ¹⁵⁾ .
$(\text{UO}_2)_4(\text{OH})_7(\text{SO}_4)_4^{7-}$	Na^+	2.80 ± 0.70	estimated in Section 9.5.1.1.2 of [2003GUI/FAN] ¹⁰⁾

2.2.3 作成した熱力学データベースファイル

<TDB 名>

140000c0.tdb (PHREEQC format)

140000s0.tdb (PHREEQC format using SIT)

140000g0.tdb (GWB format)

140000e0.tdb (EQ3/6 ver.7.2c)

<Reference>

Fe : Lemire et al. ¹⁷⁾

Sn : Gamsjäger et al. ¹⁶⁾

Th : Rand et al. ¹⁵⁾

<対象元素>

放射性元素 : Ni ¹²⁾, Se ¹¹⁾, Zr ¹³⁾, Tc ^{8,10)}, Sn ¹⁶⁾, Th ¹⁵⁾, U ^{6,10)}, Np ^{9,10)}, Pu ^{9,10)}, Am ^{7,10)}

地球化学元素 : H, Li, B, C, N, O, F, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, K, Ca, Fe ¹⁶⁾, Cu, Zn, As, Br, Rb, Sr, Ag, Cd, I, Cs, Ba, Hg, Tl, Pb

有機物配位子 : 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 ¹⁴⁾

3. NEA-TDB と JAEA-TDB の比較

3.1 Eh-pH ダイアグラムによる鉄の水酸化物錯体および炭酸錯体支配領域の比較

NEA-TDB の鉄の熱力学データの選定値¹⁷⁾は、現段階では JAEA-TDB の選定値⁴⁾と異なっていることから、化学種分配計算や溶解度計算の結果や Eh-pH ダイアグラムでの安定領域に相異が見られると予想される。その相異を比較することによって、それぞれのデータベースの特徴が観察されることが考えられる。ここでは、その比較の一例として NEA-TDB と JAEA-TDB の鉄の熱力学データの、Fe-O-H 系および Fe-C-O-H 系について Eh-pH ダイアグラムに描画し比較した。Eh-pH ダイアグラムは Geochemist's Workbench¹⁹⁾により作成した。

Fe²⁺の活量の対数 (log a_{Fe2+}) を -20 とした条件における NEA-TDB および JAEA-TDB での計算結果を図 1 および 2 に示す。図 1 および 2 より、pH の低い酸化性および還元性の領域においては Fe³⁺と Fe²⁺それぞれ支配的であり、pH の上昇にともない OH⁻による錯体が形成される。FeOH²⁺の支配領域が NEA-TDB と JAEA-TDB で異なっており、JAEA-TDB を用いた場合の方が、より pH の高い領域まで支配的となる。pH の高い領域において、JAEA-TDB を用いた計算では、酸化性領域で Fe(OH)₄⁻が、還元性領域で Fe(OH)₃⁻が支配的となる (図 2)。一方 NEA-TDB を用いた計算では、これらの化学種が設定されていないため、弱アルカリ領域で支配的な Fe(OH)₂⁺や FeOH⁺がアルカリ領域でも支配化学種となる (図 1)。したがって、高アルカリ領域においては、JAEA-TDB と NEA-TDB を用いた計算において結果に差が生じる。NEA-TDB での Lemire et al. (2013)¹⁷⁾による Fe(II)および Fe(III)の水酸化物錯体の熱力学データ選定について、2 価の鉄については、酸化還元電位の制御が難しく、溶解度実験の際には、制限固相である磁鉄鉱鉄(α-Fe₂O₃(magnetite))が安定に存在しにくいいため正確な溶解度データの取得が困難とされている。一方、3 価の鉄については、低い pH で水酸化物錯体を形成するため、分光光度法などによる Fe³⁺の同定が困難であり、また、pH の低い領域では重合種が生成する傾向があり、さらに酸化性雰囲気では鉄の溶解度も低くなることから信頼性の高いデータは少ないとされている。したがって、Fe(II)および Fe(III)の水酸化物錯体は、それぞれ、Fe(II)OH²⁺および Fe(II)(OH)₂⁺と Fe(III)OH⁺についてのみ平衡定数が選定されている。つまり、Lemire et al. (2013)¹⁷⁾は JAEA-TDB を用いた計算でみられる高アルカリ領域に生成される Fe(OH)₄⁻や Fe(OH)₃⁻の存在を否定するものではなく、信頼性の高い熱力学データの導出に必要な情報が十分でないということを示している。

鉄の炭酸錯体について NEA-TDB では FeCO₃(aq)および Fe(OH)CO₃(aq)の熱力学データが設定されている。一方、JAEA-TDB では鉄の炭酸錯体についての熱力学データは設定されていない。前述の Fe²⁺の活量の対数を -20 とした条件に加えて CO₃²⁻の活量の対数(log a_{CO32-}) を -5 とした条件での NEA-TDB を用いた Eh-pH ダイアグラムを図 3 に示す。図 3 より、NEA-TDB を用いた計算では、酸化性雰囲気においては、弱酸性から弱アルカリ性まで、還元雰囲気では酸性から中性領域まで炭酸錯体が支配的となる。

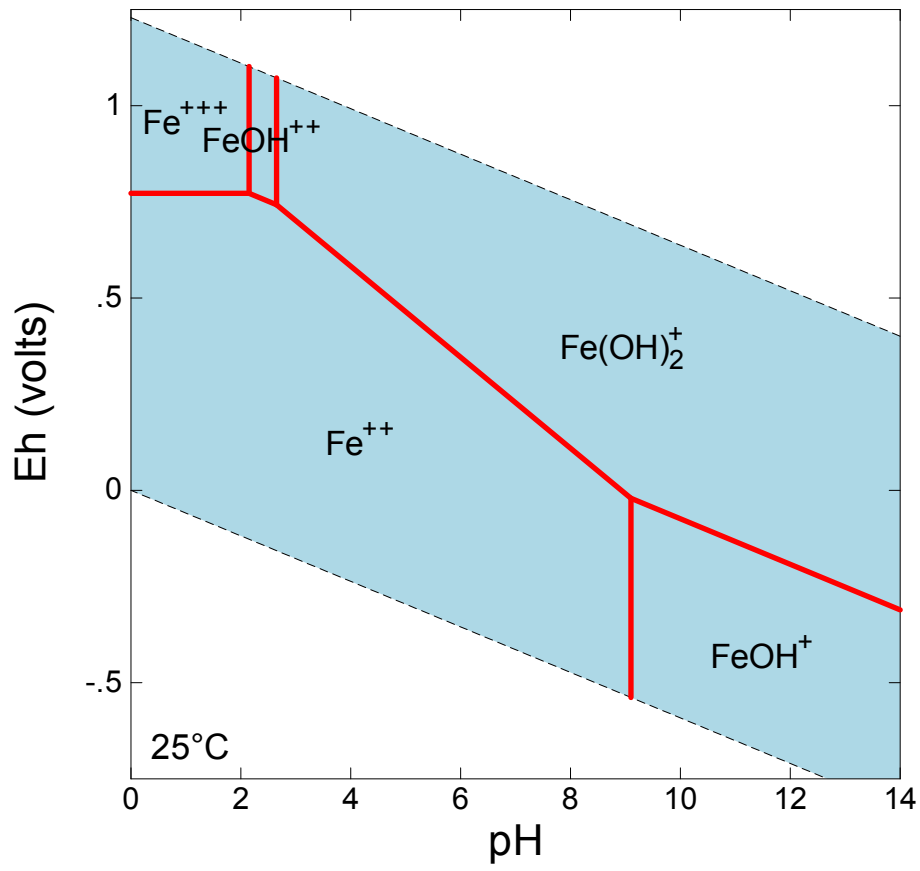


図1 NEA-TDB を用いた Fe-O-H 系 Eh-pH 安定相図、 $\log a_{\text{Fe}^{2+}} = -20$

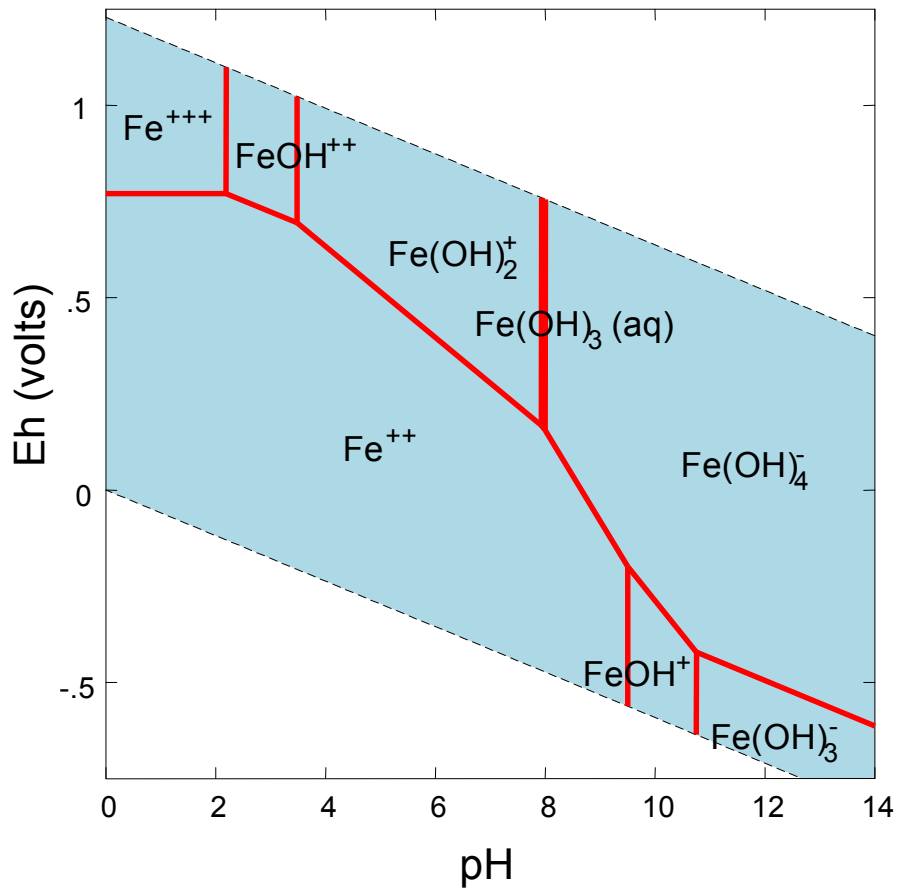


図2 JAEA-TDB を用いた Fe-O-H 系 Eh-pH 安定相図、 $\log a_{\text{Fe}^{2+}} = -20$

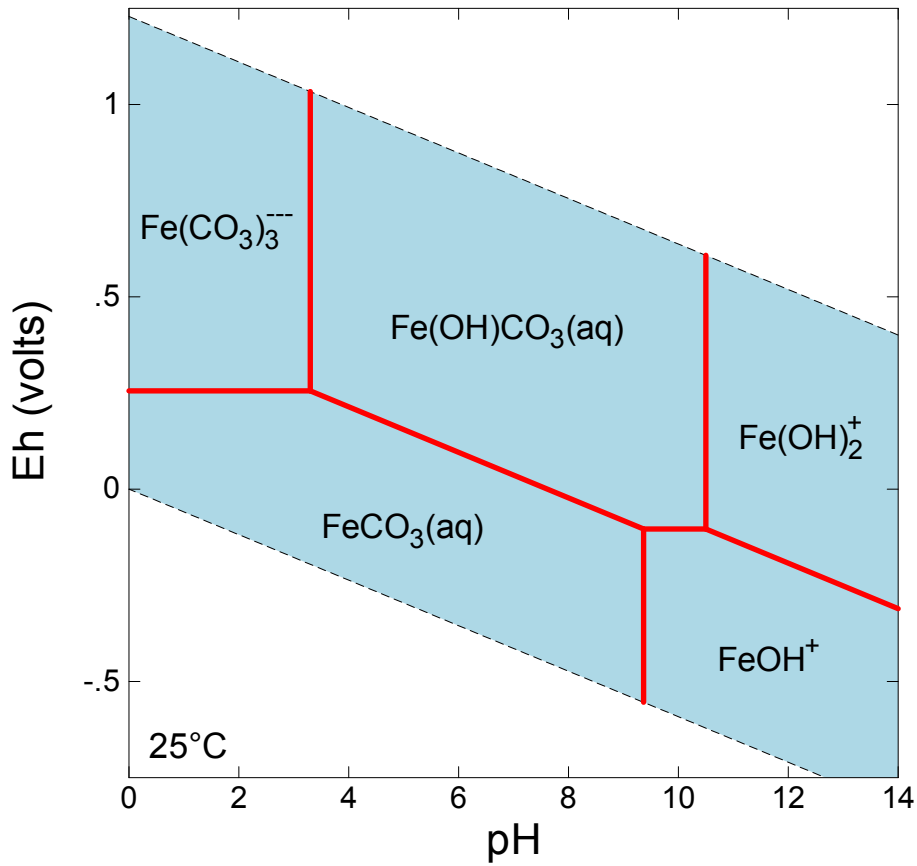


図3 NEA-TDB を用いた Fe-C-O-H 系 Eh-pH 安定相図、 $\log a_{\text{Fe}^{2+}} = -20$, $\log a_{\text{CO}_3^{2-}} = -5$

4. おわりに

NEA TDB プロジェクトにおける鉄、スズおよびトリウム熱力学データを PHREEQC、Geochemist's Workbench および EQ3/6 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。こ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、原子力機構の熱力学・収着・拡散データベースのホームページ (<http://migrationdb.jaea.go.jp/>) より入手可能である。

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),106p.
2. A. Kitamura, K. Fujiwara, R. Doi, Y. Yoshida, M. Mihara, M. Terashima and M. Yui: “JAEA thermodynamic database for performance assessment of geological disposal of high-level radioactive and TRU wastes”, JAEA-Data/Code 2009-024 (2010),84p.
3. A. Kitamura, K. Fujiwara, R Doi and Y. Yoshida : “Update of JAEA-TDB: Additional Selection of Thermodynamic Data for Solid and Gaseous Phases on Nickel, Selenium, Zirconium, Technetium, Thorium, Uranium, Neptunium, Plutonium and Americium, Update of Thermodynamic Data on Iodine, and Some Modifications”, JAEA-Data/Code 2012-006 (2012),65p.
4. A. Kitamura, R. Doi, and Y. Yoshida : “Updata of JAEA-TDB: Update of Thermodynamic Data for Palladium and Tin, Refinement of Thermodynamic Data for Protactinium, and Preparation of PHREEQC Database for Use of the Brønsted-Guggenheim-Scatchard Model”, JAEA-Data/Code 2014-009 (2014),69p.
5. I. Grenthe, F. Mompean, K. Spahiu and H. Wanner: “TDB-2: Guidelines for the extrapolation to zero ionic strength”, Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA) (2013).
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. Nöling, 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. M. Rand, J. Fuger, I. Grenthe, V. Neck and D. Rai : “Chemical thermodynamics of thorium ”, OECD Nuclear Energy Agency, Elsevier (2009).
 16. H. Gamsjäger, T. Gajda, J. Sangster, S. K. Saxena and W. Voigt : “Chemical thermodynamics of tin”, OECD Nuclear Energy Agency, Elsevier (2012).
 17. R.J. Lemire, U. Berner, C. Musikas, D.A. Palmer, P. Taylor and O. Tochiyama : “Chemical Thermodynamics of Iron (Part 1) ”, OECD Nuclear Energy Agency, Elsevier (2013).
 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. C. Bethke : “Geochemical Reaction Modeling”. Oxford Univ. Press, New York (1996).
 20. T.J. Wolery : “ EQ3/6, A Software Package for Geochemical Modeling of Aqueous Systems : Package Overview and Installation Guide (version 7.0) ”, Lawrence Livermore National Laboratory, UCRL-MA-110662PT1 (1992).
 21. 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), 22p.
 22. 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), 17p.
 23. 吉田 泰, 北村 暁: “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) ”, JAEA-Data/Code 2007-009 (2007), 15p.
 24. H. Wanner: “TDB-1: Guidelines for the review procedure and data selection”, Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA) (2000).
 25. L. Ciavatta, “The specific interaction theory in evaluating ionic equilibria”, Ann. Chim. (Rome), 70, pp.551-567(1980).
 26. K. Spahiu, “Carbonate complex formation in lanthanoid and actinoid systems”, Ph. D. Thesis, The Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden (1983).
 27. D. Ferri, I. Grenthe, S. Hietanen, E. Néher-Neumann, F. Salvatore, “Studies on metal carbonate equilibria: 12. Zinc(II) carbonate complexes in acid solution”, Acta Chem. Scand., A39, pp.347-353 (1985).
 28. J. Bruno, “Stoichiometric and structural studies on the Be^{2+} - H_2O - $\text{CO}_2(\text{g})$ system”, Ph. D. Thesis, The Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden (1986).
 29. C. Riglet, P. Vitorge, I. Grenthe, “Standard potentials of the $(\text{MO}_2^{2+}/\text{MO}_2^+)$ systems for uranium and other actinides”, Inorg. Chim. Acta, 133, pp.323-329 (1987).
 30. T. Hedlund, “Studies of complexation and precipitation equilibria in some aqueous aluminium(III) systems”, Ph. D. Thesis, University of Umeå, Sweden (1988).
 31. C. Riglet, P. Robouch, P. Vitorge, “Standard potentials of the $(\text{MO}_2^{2+}/\text{MO}_2^+)$ and $(\text{M}^{4+}/\text{M}^{3+})$ redox systems for neptunium and plutonium”, Radiochim. Acta, 46, pp.85-94 (1989).

32. P. Robouch, "Contribution à la prévision du comportement de l'américium, du plutonium et du neptunium dans la géosphère; données chimiques", Commissariat à l'Energie Atomique, Report CEA-R-5473, (1989).
33. C. Riglet, "Chimie du neptunium et autres actinides en milieu carbonate", Commissariat à l'Energie Atomique, Report CEA-R-5535 (1990), 267 p.
34. H. Capdevila, "Données thermodynamiques sur l'oxydoréduction du plutonium en milieux acide et carbonate. Stabilité de Pu(V)", Ph. D. Thesis, Université de Paris-Sud, Orsay, France, in French (1992). Also published as CEA-R-5643 Commissariat à l'Energie Atomique, France, (1993).
35. H. Capdevila, P. Vitorge, "Potentiels redox des couples $\text{PuO}_2^{2+}/\text{PuO}_2^+$ et $\text{Pu}^{4+}/\text{Pu}^{3+}$ à force ionique et temperature variables. Entropie et capacité calorifique, Commissariat à l'Energie Atomique", Report CEA-N-2762 (1994), 73p.
36. E. Giffaut, "Influence des ions chlorure sur la chimie des actinides", Ph. D. Thesis, Université de Paris-Sud, Orsay, France, in French (1994), 259p.
37. H. Capdevila, P. Vitorge, "Redox potentials of $\text{PuO}_2^{2+}/\text{PuO}_2^+$ and $\text{Pu}^{4+}/\text{Pu}^{3+}$ at different ionic strengths and temperatures. Entropy and heat capacity", *Radiochim. Acta*, 68, (1995), pp.51-62.
38. T. Könecke, T. Fanghänel, J. I. Kim, "Thermodynamics of trivalent actinides in concentrated electrolyte solutions. Modelling the chloride complexation of Cm(III)", *Radiochim. Acta*, 76, 3, (1997), pp.131-135.
39. I. Bányai, J. Blixt, J. Glaser, I. Tóth, "On the dissociation of hydrogen cyanide in aqueous solutions containing different ionic media. A combined potentiometric and carbon-13 NMR study", *Acta Chem. Scand.*, 46, (1992), pp.138-141.
40. I. Grenthe, I. Puigdomènech, M. H. Rand, M. C. A. Sandino, "Corrections to the Uranium NEA-TDB review, Appendix D, in: Chemical Thermodynamics of Americium (authored by R.J. Silva, G. Bidoglio, M.H. Rand and P.B Robouch, H. Wanner, I. Puigdomènech)", Nuclear Energy Agency, Organisation for Economic Co-operation and Development, Ed., North Holland Elsevier Science Publishers B. V., Amsterdam, The Netherlands, (1995), pp.347-374.
41. I. Grenthe, A.V. Plyasunov, K. Spahiu, "Estimations of medium effects on thermodynamic data, *Modelling in Aquatic Chemistry*", I. Grenthe, I. Puigdomènech, Eds., Nuclear Energy Agency, Organisation for Economic Co-operation and Development, Paris, France, (1997), pp.325-426.
42. Al Mahamid, I., Novak, C. F., Becraft, K. A., Carpenter, S. A., Hakem, N.: "Solubility of Np(V) in K-Cl-CO₃ and Na-K-Cl-CO₃ solutions to high concentrations: measurements and thermodynamic model predictions", *Radiochim. Acta*, 81, (1998), pp.93-101.
43. M. Grivé i Solé, "The linkage between uranium, iron and carbon cycling. Processes at interfaces: evidences from combined solution chemical and spectroscopic studies", Ph. D. Thesis, Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, Spain (2005), 341 p.

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	
	名称	記号
面積	平方メートル	m ²
体積	立法メートル	m ³
速度	メートル毎秒	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s ²
波数	毎メートル	m ⁻¹
密度, 質量密度	キログラム毎立方メートル	kg/m ³
面積密度	キログラム毎平方メートル	kg/m ²
比体積	立方メートル毎キログラム	m ³ /kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m ²
磁界の強さ	アンペア毎メートル	A/m
量濃度 ^(a) , 濃度	モル毎立方メートル	mol/m ³
質量濃度	キログラム毎立方メートル	kg/m ³
輝度	カンデラ毎平方メートル	cd/m ²
屈折率 ^(b)	(数字の)	1
比透磁率 ^(b)	(数字の)	1

(a) 量濃度 (amount concentration) は臨床化学の分野では物質濃度 (substance concentration) ともよばれる。
 (b) これらは無次元量あるいは次元1をもつ量であるが、そのことを表す単位記号である数字の1は通常は表記しない。

表3. 固有の名称と記号で表されるSI組立単位

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

(a) SI接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはやコヒーレントではない。
 (b) ラジアンとステラジアンは数字の1に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。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である数字の1は明示されない。
 (c) 測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。
 (d) ヘルツは周期現象についてのみ、ベクレルは放射性核種の統計的過程についてのみ使用される。
 (e) セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。セルシウス度とケルビンの単位の間には1:1の関係がある。したがって、温度差や温度間隔を表す数値はどちらの単位で表しても同じである。
 (f) 放射性核種の放射能 (activity referred to a radionuclide) は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。
 (g) 単位シーベルト (PV.2002.70,205) についてはCIPM勧告2 (CI-2002) を参照。

表4. 単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI組立単位	
	名称	記号
粘力のモーメント	ニュートンメートル	N m
表面張力	ニュートン毎メートル	N/m
角速度	ラジアン毎秒	rad/s
角加速度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s ²
熱流密度, 放射照度	ワット毎平方メートル	W/m ²
熱容量, エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K
比熱容量, 比エントロピー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)
比エネルギー	ジュール毎キログラム	J/kg
熱伝導率	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m ³
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m
電荷密度	クーロン毎立方メートル	C/m ³
表面電荷	クーロン毎平方メートル	C/m ²
電束密度, 電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m ²
誘電率	ファラド毎メートル	F/m
透磁率	ヘンリー毎メートル	H/m
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mol
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)
照射線量 (X線及びγ線)	クーロン毎キログラム	C/kg
吸収線量率	グレイ毎秒	Gy/s
放射線強度	ワット毎ステラジアン	W/sr
放射輝度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	W/(m ² sr)
酵素活性濃度	カタール毎立方メートル	kat/m ³

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	ヨクト	y

表6. SIに属さないが、SIと併用される単位

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=86 400 s
度	°	1°=(π/180) rad
分	'	1'=(1/60)°=(π/10800) rad
秒	"	1"=(1/60)'=(π/648000) rad
ヘクタール	ha	1 ha=1 hm ² =10 ⁴ m ²
リットル	L, l	1 L=1 dm ³ =10 ⁻³ m ³
トン	t	1 t=10 ³ kg

表7. SIに属さないが、SIと併用される単位で、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単位で表される数値
電子ボルト	eV	1 eV=1.602 176 53(14)×10 ⁻¹⁹ J
ダルトン	Da	1 Da=1.660 538 86(28)×10 ⁻²⁷ kg
統一原子質量単位	u	1 u=1 Da
天文単位	ua	1 ua=1.495 978 706 91(6)×10 ¹¹ m

表8. SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

名称	記号	SI単位で表される数値
バール	bar	1 bar=0.1 MPa=100 kPa=10 ⁵ Pa
水銀柱ミリメートル	mmHg	1 mmHg=133.322 Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1 nm=100 pm=10 ⁻¹⁰ m
海里	M	1 M=1852 m
バイン	b	1 b=100 fm ² =(10 ¹² cm) ² =10 ⁻²⁸ m ²
ノット	kn	1 kn=(1852/3600) m/s
ネーパ	Np	SI単位との数値的関係は、 対数量の定義に依存。
ベール	B	
デジベル	dB	

表9. 固有の名称をもつCGS組立単位

名称	記号	SI単位で表される数値
エル	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 =0.1 Pa s
ストークス	St	1 St=1 cm ² s ⁻¹ =10 ⁻⁴ m ² s ⁻¹
スチルブ	sb	1 sb=1 cd cm ⁻² =10 ⁴ cd m ⁻²
フオト	ph	1 ph=1 cd sr cm ⁻² 10 ⁴ lx
ガリ	Gal	1 Gal=1 cm s ⁻² =10 ⁻² ms ⁻²
マクスウェル	Mx	1 Mx=1 G cm ² =10 ⁻⁸ Wb
ガウス	G	1 G=1 Mx cm ⁻² =10 ⁻⁴ T
エルステッド ^(c)	Oe	1 Oe _e =(10 ³ /4π) A m ⁻¹

(c) 3元系のCGS単位系とSIでは直接比較できないため、等号「△」は対応関係を示すものである。

表10. SIに属さないその他の単位の例

名称	記号	SI単位で表される数値
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=1 cGy=10 ⁻² Gy
レム	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv
ガンマ	γ	1 γ=1 nT=10 ⁻⁹ T
フェルミ	f	1 フェルミ=1 fm=10 ⁻¹⁵ m
メートル系カラット		1メートル系カラット=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	1 cal=4.1858 J (「15°C」カロリ), 4.1868 J (「IT」カロリ), 4.184 J (「熱化学」カロリ)
マイクロン	μ	1 μ=1 μm=10 ⁻⁶ m

