

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 研究技術情報部 研究技術情報課
〒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
Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Department,
Japan Atomic Energy Agency
2-4 Shirakata Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2010

第2次 TRU レポートでの緩衝材/セメント系人工バリアシステムの化学反応/物質輸送連成解析における二次鉱物の安定性とモンモリロナイトの変質速度との関係の逆転について

日本原子力研究開発機構

地層処分研究開発部門 地層処分基盤研究開発ユニット

本田 明, 山口 耕平, 小田 治恵

(2010年6月7日 受理)

第2次 TRU レポートにおけるセメント系材料及びベントナイト緩衝材からなる人工バリアシステムの化学反応/物質輸送連成解析において、緩衝材の変質が、安定二次鉱物ケースより準安定二次鉱物ケースの方が著しいという結果が得られた。この結果は、“安定二次鉱物の方が、準安定二次鉱物より、溶質の濃度を低く制御すると考えられ、モンモリロナイトの飽和指数を低く制御するものであり、安定二次鉱物ケースの方が、準安定二次鉱物ケースよりモンモリロナイトの変質速度が大きい”という一般的な考え方と逆の傾向であった。この“逆の傾向”を示した理由を把握するため、上記化学反応/物質輸送連成解析から化学反応部分のみを取り出し、物質収支の把握しやすい閉鎖された回分式の系で化学反応計算を実施した。

この化学反応計算の結果に基づき、安定二次鉱物ケース及び準安定二次鉱物ケースそれぞれについて、溶解反応速度式において水酸化物イオンの活量の影響を示す Sato factor (F_s)及び飽和度の影響を示す Cama factor (F_c)の経時変化を算定した。この変化を見ると、水酸化物イオンの活量の影響を示す F_s の経時変化には顕著な相違は認められないのに対して、 F_c の経時変化は準安定二次鉱物ケースの方が、大きい傾向が認められた。これは、モンモリロナイトの飽和指数(S.I.)が、準安定二次鉱物ケースの方が小さく(Chemical affinity の点で飽和から遠く)保たれたためである。このように F_c が大きい状態で推移したために、準安定二次鉱物ケースの方がモンモリロナイトの変質が、より著しいという結果になったと考えられる。

Inverted Relation between Stabilities of Secondary Minerals and Alteration Rate of Montmorillonite in
Chemistry/Mass-Transport Coupled Analyses of Cement/Bentonite Engineered Barrier System for
TRU-2 Report

Akira HONDA, Kohei YAMAGUCHI and Chie ODA

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

(Received June 7, 2010)

More significant alteration of montmorillonite was estimated if the precipitation of meta-stable as opposed to stable secondary minerals was assumed in a chemical/mass-transport coupled analyses of cement/bentonite engineered barrier system for TRU-2. In general, stable secondary minerals control lower solution concentrations than meta-stable secondary minerals. This suggests that the dissolution rate of montmorillonite in the stable secondary mineral case would be higher because the saturation index (S.I.) of montmorillonite would be lower than in the meta-stable secondary mineral case. The estimation results of chemical/mass-transport coupled analyses of cement/bentonite engineered barrier system for TRU-2 report, however, showed the reversed tendency. In order to understand the reasons of this reversed tendency, chemical reaction analyses of a batch system were conducted, in which mass balance can be easily understood.

The “Sato Factor (F_s)”, which shows the effect of hydroxyl ion concentration on the dissolution rate of montmorillonite, and the “Cama Factor (F_c)”, which shows the effect of chemical affinity on the dissolution rate of montmorillonite, were determined using previously calculated results. No significant difference of F_s was found between the meta-stable secondary and stable secondary minerals. However, the F_c of the meta-stable secondary minerals was higher than that of the stable secondary minerals, except for a very short initial stage of reaction. These results mean that the S.I. of montmorillonite is lower in the case of meta-stable secondary minerals, except for the very short initial period. Because the F_c is higher throughout most of the reaction period in the case of meta-stable secondary minerals, the alteration is more significant.

Keywords : Cement, Bentonite, Alteration, TRU-2, Meta-stable Secondary Minerals, Stable Secondary Minerals

Collaborating Engineer (Now Mitsubishi Materials Corporation)

目次

1. 緒言	1
2. 解析条件	2
3. 解析結果と考察	3
4. 結言	6
参考文献	8
Appendix 仮想元素の導入による緩衝材のアルカリ変質の近似計算の方法	17

Contents

1. Introduction	1
2. Conditions of Analyses	2
3. Results of Analyses and Discussion	3
4. Conclusions	6
References	8
Appendix : Approximate Computation of Bentonite Alteration Using Hypothetical Element	17

表目次

表-1 緩衝材の鉱物組成及び層間陽イオン交換に関する諸量 -----9
 表-2 緩衝材と反応させるアルカリ性水溶液の組成 -----10

図目次

図-1 安定二次鉱物ケースにおけるモンモリロナイト量の変化(L/S=1.95, 固液共存系 1dm³あたり) -----11
 図-2 準安定二次鉱物ケースにおけるモンモリロナイト量の変化(L/S=1.95, 固液共存系 1dm³あたり) -----11
 図-3 安定二次鉱物ケースにおける鉱物量の変化(L/S=1.95, 固液共存系 1dm³あたり) -----12
 図-4 準安定二次鉱物ケースにおける鉱物量の変化(L/S=1.95, 固液共存系 1dm³あたり) --12
 図-5 安定二次鉱物ケースにおける液相濃度の変化(L/S=1.95) -----13
 図-6 準安定二次鉱物ケースにおける液相濃度の変化(L/S=1.95) -----13
 図-7 安定相ケース(a)及び準安定相ケース(b)における溶解反応速度に対する水酸化物イオンの活量の影響を示す Sato factor (F_s)の経時変化 -----14
 図-8 安定相ケース(a)及び準安定相ケース(b)における溶解反応速度に対する飽和度の影響を示す Cama factor (F_c)の経時変化 -----15
 図-9 安定二次鉱物ケース及び準安定二次鉱物ケースにおける各イオン型モンモリロナイトの存在割合を重みとする Cama factor (F_c)の加重平均-----16

1. 緒言

TRU 廃棄物は高レベル放射性廃棄物に比して、廃棄物量は格段に多く、崩壊熱の発生速度は小さい。このため、これらの廃棄物を地層処分する場合には、大空洞に集積配置することが合理的である。そのような大空洞を深部地下に建設するためには、地圧を支持するためなどにセメント系材料が必要とされる。またセメント系材料は TRU 廃棄物の固化マトリックスとしても一般的である。一方、TRU 廃棄物の地層処分において線量を支配する放射性核種は、I-129 及び C-14 等の可溶性で貧吸着性の放射性核種である。このような放射性核種の移行を抑制するために、ベントナイト緩衝材層を水理バリアとして設けることが考えられている。したがって TRU 廃棄物の地層処分においては、セメント系材料及びベントナイト緩衝材からなる人工バリアシステム(C-B システム)が計画されており、TRU 廃棄物の地層処分施設ではベントナイトとセメント系材料が近接して設置されることとなる。

一方、ベントナイトとセメント系材料とは熱力学的に安定に共存することはできない。このことは、無限時間の中ではベントナイトとセメントの化学的相互作用による変質は、必ず起こると考えざるを得ないということを意味している。したがって、TRU 廃棄物の地層処分システムの性能評価では、経時的な C-B システムの変化を評価する必要がある。このため第 2 次 TRU レポート[1]では、モンモリロナイトの溶解速度を pH 及び飽和指数の関数として表現し、その他の反応は瞬時に化学平衡状態に到達することを仮定して、1 次元の化学反応/物質輸送連成解析を実施した。この解析では、二次鉱物の生成・変遷過程に、単一のケースで代表させることのできない不確実性があるため、複数の二次鉱物ケースを設け、それぞれのケースについて、化学反応/物質輸送連成解析を実施し、評価結果の幅を不確実の範囲と見なし評価した[1]。

この二次鉱物ケースの設定においては、準安定な二次鉱物が最初に生成し、より安定な二次鉱物に変遷していくという Ostwald 段階則[2]を念頭に、緩衝材とアルカリ性水溶液の反応実験やアルカリ性塩湖湖底堆積物の続成作用に関する研究等の情報に基づき二次鉱物に関するケース設定を実施した[1,3]。このケースの中には、準安定二次鉱物ケースと安定二次鉱物ケースが含まれており、化学反応/物質輸送連成解析では、ベントナイトの主要構成鉱物であるモンモリロナイトの変質は、安定二次鉱物ケースより準安定二次鉱物ケースの方が著しいという結果が得られた。通常、安定二次鉱物の方が、準安定二次鉱物より、溶質の濃度を低く制御すると考えられ、モンモリロナイトの飽和指数を低く制御するものであり、安定二次鉱物ケースの方が、準安定二次鉱物ケースよりモンモリロナイトの変質速度が大きいと考えるのが、一般的である。しかし連成解析では、準安定二次鉱物ケースのほうが大きい変質速度が算定されている[1]。この理由を把握するため、上記化学反応/物質輸送連成解析から化学反応部分のみを取り出し、物質収支の把握しやすい閉鎖された回分式の系で化学反応計算を実施した。本書はその結果を示すものである。

2. 解析条件

解析条件は、基本的には第2次 TRU レポートにおける化学反応/物質輸送連成解析の化学部分と同一である。ただし物質輸送を伴う上記解析と異なり、外部から溶質の供給のない閉鎖系を想定したため、変質量が小さくなり変質挙動が不鮮明となる可能性がある。これを避けるため、上記化学反応/物質輸送連成解析における緩衝材部分より液固比を高めて(L/S=1.95)解析を実施した。

緩衝材はクニゲル V1[®]とケイ砂を重量比 7:3 で混合したものと仮定して、鉱物組成を決定した。その際、ケイ砂の主成分は石英と考えられるが、ここでは玉髄と仮定した。この仮定は、ケイ砂に含まれる SiO₂ 成分は石英、ベントナイトに含まれる SiO₂ 成分は玉髄と考えられるが、石英と玉髄とを共存させて化学平衡計算を行うと、第1時間ステップで、玉髄は全て、より熱力学的に安定な石英に変化してしまう。一方、実際には、そのようなことはなく、間隙水の SiO₂(aq)の濃度は、より溶解度が高い玉髄が支配すると考えられる。このため、間隙水の SiO₂(aq)の濃度が現実的な値となるように、この仮定を導入した。また緩衝材のアルカリ性環境での変質に影響を及ぼす可能性の小さな微量成分は無視した。さらに、ベントナイトの主要構成鉱物であるモンモリロナイトは、陽イオン交換性であるため、Na⁺, K⁺, Ca²⁺及び Mg²⁺についてのイオン交換反応を、Gaines-Thomas の考え方[4]に基づきイオン交換選択係数を用いて評価に反映した。本解析での緩衝材の初期鉱物組成及び層間陽イオン交換に関する諸量を表-1 に示す。

緩衝材と反応させる水溶液は降水系高 pH 型モデル地下水(FRHP)[5]と Region [6]相当の普通ポルトランドセメント(OPC)水和物とを平衡させた水溶液である。その組成を表-2 に示す。本解析では、モンモリロナイトの溶解反応以外は全て瞬時化学平衡を仮定した。計算に用いた熱力学データベース及び地球化学計算コードは、それぞれ JNC TDB-TRU[7] (バージョン名称:090804LMNOP_noneHZ_QC_a_small_cem_Rate-JNC-H17_Si_Davies-Na-Mont.dat)及び PHREEQC-TRANS[8](バージョン名称:pht2.6.1_090804_nk.exe)である。モンモリロナイトの溶解反応の反応速度式には、第2次 TRU レポートと同様に(1)式を用いた。

$$Rate = \left(4.74 \cdot 10^{-6} \cdot e^{-39.57/RT} \cdot \frac{177 \cdot e^{20.37/RT} \cdot a_{OH^-}}{1 + 177 \cdot e^{20.37/RT} \cdot a_{OH^-}} + 1.70 \cdot e^{-69.67/RT} \cdot \frac{0.0297 \cdot e^{23.53/RT} \cdot a_{OH^-}}{1 + 0.0297 \cdot e^{23.53/RT} \cdot a_{OH^-}} \right) \cdot A_{min} \cdot \{1 - \exp(-6 \cdot 10^{-10} \cdot (2 \cdot \Delta Gr / RT)^6)\} \quad (1)$$

$$\Delta Gr = -RT \ln Q/K$$

ここに A_{min} , R , T , a_{OH^-} , Gr , Q 及び K は、それぞれ鉱物の反応性表面の面積、ガス定数、絶対温度、水酸化物イオンの活量、モンモリロナイトの溶解反応のギブス自由エネルギー、モンモリロナイトの溶解沈殿反応に含まれる化学種のイオン積及びモンモリロナイトの溶解沈殿反応の平衡定数である。(1)式の水酸化物イオンの活量依存性を示す A_{min} の前のカッコ内を Sato factor(Fs)と呼び、モンモリロナイトの飽和度依存性を示す A_{min} の後ろのカッコ内を Cama factor(Fc)と呼ぶこととする。したがって溶解速度は $Fs \cdot A_{min} \cdot$

Fe となる。

(1)式を層間イオン型(Na, K, Ca, Mg)それぞれに適用し, 各時間ステップにおいてイオン型毎にモンモリロナイトを溶解させた。これに合わせて, 溶解したモンモリロナイトに対応する層間のイオン交換サイト数及びそこに収着された交換性陽イオンも減少させる必要があるが, 試行の結果, 前の時間ステップの各イオン型のモンモリロナイト量をイオン交換反応の平衡計算に使用すると, 誤差が蓄積し, 物質収支が崩れることがわかった。このため, 同時間ステップの中で, モンモリロナイトを溶解させ, 溶解させた後の各イオン型のモンモリロナイト量を用いてイオン交換反応の平衡計算をする必要があった。しかし, このような計算をインプットファイルや熱力学データベースを編集することで, 直接に実施することは, 現行の PHREEQC Ver.2 及び PHREEQC-TRANS では困難であった。このため, 仮想元素を計算に含め, これらの仮想元素により溶解したモンモリロナイトに対応する層間のイオン交換サイト及びそこに収着された交換性陽イオンをマスクすることにより, 近似解を得る方法を考案して対処した。その詳細は Appendix に示す。モンモリロナイトの層間イオンは, モンモリロナイトを溶解させた後に, 上記の近似方法を導入しつつイオン交換選択係数[8]を用いて, 他の鉱物の溶解・沈殿と併せて化学平衡計算を行うことにより, 液相と平衡させた。イオン交換容量, 初期交換性陽イオン組成及びイオン交換反応選択係数は表-1 中に示した。

本検討では, 二次鉱物として安定二次鉱物(ローモンタイト, アナルサイム, カリ長石)を仮定したケース(安定二次鉱物ケース)及び準安定二次鉱物(クリノプチロライト, フィリップサイト, ヒューランダイト)を仮定したケース(準安定二次鉱物ケース)について解析を実施した。準安定二次鉱物ケースのクリノプチロライト及びフィリップサイトは固溶体であるため, それぞれ端成分にあたる 2 種類の組成を仮定し, 別々の鉱物として与えることにより表現した。安定二次鉱物ケース, 準安定二次鉱物ケースともに, 溶解度を超えれば容易に沈殿すると考えられる CSH ゲル, 水酸化物, 炭酸塩は溶解度を超えれば沈殿することとした。結晶性に乏しい Mg のケイ酸水和物ゲルも容易に沈殿すると考えられるが, 熱力学データがないため, セピオライトを, その代用として用いた。CSH ゲルの非調和溶解・沈殿は, 固溶体モデルの一つである Atkinson [9]のモデルで表現した。

3. 解析結果と考察

上記の条件・方法による解析により算定した, 安定二次鉱物ケース及び準安定二次鉱物ケースのそれぞれについてのモンモリロナイト量の推移(図-1 及び図-2), モンモリロナイト以外の鉱物組成の経時変化(図-3 及び図-4)及び液相の経時変化(図-5 及び図-6)を以下に示す。

安定二次鉱物ケースについて検討する。安定二次鉱物ケースにおけるモンモリロナイト量の変遷は, 図-1 に示されるように 10a 付近に明瞭なグラフの屈曲が認められる。初期に

は初期溶液組成(表-2)を反映して K 型モンモリロナイトが多いが、時間経過とともにすみやかに K 型が減少し、全モンモリロナイト量も減少する。10a 程度で K 型モンモリロナイトは枯渇し、替わって Na 型モンモリロナイトが主要なタイプとなる。1a から 10a の間に Na 型の量が増えていることから、K 型は溶解するとともに Na 型に変化していることがわかる。この層間イオン型の変化は、図-5 において 10a までの間、Na 濃度はほとんど変化しないのに対して、K 濃度は 4 桁低下していることにより十分説明できる。固相側の変化を見ると、図-3 より、10a 程度まで二次鉱物であるカリ長石が生成し続けていることがわかる。このカリ長石の生成反応が K の sink となっていると考えられる。またカリ長石が生成し続けている期間は、Al 濃度が低く制御されており、K が液相から枯渇してカリ長石の生成が止まる 10a ごろに Al 濃度が 4 桁程度上昇し、その後、ほぼ一定の値を示した。このことは、10a ごろまで Al 濃度を支配していたのはカリ長石の溶解・沈殿反応平衡であったが、液相中の K の枯渇に伴い、Al 濃度を支配する反応が切り替わったことを示唆している。10a 以降は、モンモリロナイトはほとんどが Na 型となり、10a 以前と比較してゆっくりとした速度で溶解・変質した。二次鉱物を見ると 10a 以降に、多量に生成した Al を含む二次鉱物はアナルサイムである。したがって 10a 以降はアナルサイムが Al の sink となっている。一方、Si の液相濃度は、単純な SiO_2 である玉髄が常に存在し続けていることを考えると、単純な pH の関数になっていると考えられる。pH はモンモリロナイトの急激な溶解が起こった 10a までに著しく低下し、その後は、モンモリロナイトの溶解反応による OH^- の消費とともに緩やかに低下した。すなわち、極めて熱力学的に安定な K のアルミノケイ酸塩であるカリ長石が、液相中に十分な濃度で K が存在する間は沈殿しつづけ、Al の濃度を低く抑えたため、かなり Na 濃度が高い条件であるにもかかわらず Na のアルミノケイ酸塩であるアナルサイムの生成が抑制されていたと考えられる。しかし、10a 程度で K はカリ長石として沈殿することで枯渇し、もはやカリ長石が沈殿できないため、Al 濃度が上昇して、アナルサイムが過飽和となり 10a 頃から沈殿しはじめたと考えられる。一方、この間 Si 濃度の変化は 1 桁以内に留まっており、これらの過程の変化には大きな影響を与えていないと考えられる。また 10a までのカリ長石沈殿による低い Al 濃度によってモンモリロナイトの飽和度も低く保たれたと考えられ、10a までは、モンモリロナイトが大きな速度で溶解し、モンモリロナイト量が急激に減少したと考えられる。

次に準安定二次鉱物ケースについて検討する。図-2 及び図-4 に示されるように、準安定二次鉱物ケースではモンモリロナイトのタイプは K 型が最も多く、それについて Na 型という序列であり、この K 型及び Na 型が主たるタイプである。溶解に伴いモンモリロナイト総量は変化するが、終始、この序列や K 型及び Na 型の割合は変化しない。このことは図-6 の Na 濃度及び K 濃度が、ほぼ同様の経時変化を示していることによっている。モンモリロナイト量の減少は滑らかで、安定二次鉱物ケースに見られたようなグラフの屈曲は認められない。これは、安定二次鉱物ケースの Al に見られるような液相中のモンモリロナイト構成成分の急激な時間変化がないためである。Si の液相濃度については、安定二次鉱

物ケースと同様に、玉髄が常に存在し続けており、単純に pH に連動して変化していると考えられる。固相側は、準安定二次鉱物ケースでは、およそ全時間領域にわたって、フィリップサイト_a (K/Na=2.8/3.2, Si/Al=24.4/7.6)、セピオライトが生成し、Si,Al に加え、それぞれが K, Na, Mg など陽イオンのシンクとなっている。Ca を含む固相については、最初に C-S-H(0.9)が生成するが、10a 以降に減少し 100a までに消失する。この C-S-H の減少と同時に 10a 頃からカルサイトが生成しており、Ca を含む固相が変遷していることがわかる。

安定二次鉱物ケース及び準安定二次鉱物ケース間の総モンモリロナイト量の変化を比較する。安定二次鉱物ケースは、10a までのモンモリロナイト量の減少が大きいいため、100a までは準安定二次鉱物ケースより総モンモリロナイト量は小さいが、100a 程度で逆転し、それ以降は、安定二次鉱物ケースのほうが総モンモリロナイト量は大きくなる。ここで、モンモリロナイト溶解速度の変化をさらに検討するために、安定二次鉱物ケース及び準安定二次鉱物ケースそれぞれについて、溶解反応速度式において水酸化物イオンの活量の影響を示す Sato factor (F_s)及び飽和度の影響を示す Cama factor (F_c)の経時変化を、それぞれ図-7 及び図-8 に示す。水酸化物イオンの活量の影響を示す F_s の経時変化には顕著な相違は認められず、 10^3 a 頃に、やや準安定二次鉱物ケースで F_s が小さいだけである。一方、 F_c の経時変化は 10a 未満の期間を除けば、準安定二次鉱物ケースが大きい傾向が認められる。 F_c はイオン型により相違するため、安定二次鉱物ケース及び準安定二次鉱物ケースについて F_c を比較するため、それぞれ全モンモリロナイトに占める各イオン型のモンモリロナイトの存在割合を重みとする F_c の加重平均を求め、その経時変化を示した(図-9 参照)。10a 未満を除けば、残りの大半の期間は、 F_c は準安定二次鉱物ケースの方が大きい。したがって安定二次鉱物ケースと比較して、大半の期間において、準安定二次鉱物ケースの方がモンモリロナイトの変質が激しいと考えられる。

第 2 次 TRU レポートの化学反応-物質輸送の連成解析においても、安定二次鉱物ケース及び準安定二次鉱物ケースによって緩衝材中の F_c の経時変化が異なり、変質の度合いもそれに連動して異なることが認められている [10]。その様子について、上述した本バッチ系の解析結果に基づき、次のように解釈することができる。安定二次鉱物ケースにおける緩衝材-セメント境界部の狭い範囲で、セメントから供給される K によりカリ長石の沈殿が起こる。この領域では、カリ長石の高い熱力学的安定性のために、Al 等のモンモリロナイトの構成元素の濃度が低く維持されるため、準安定二次鉱物ケースよりもモンモリロナイトの S.I.は低くなり、その結果、 F_c 項が大きくなって、準安定二次鉱物ケースよりモンモリロナイトの変質速度は大きくなったと考えられる。これは、本バッチ解析における初期(<10a)の様子に相当する。一方、安定二次鉱物ケースにおける緩衝材中心部分の広い範囲では、前述のようにセメント緩衝材境界部で K がカリ長石として消費され、枯渇するために、アルサイトが生成しており、本バッチ解析の 10a 以降の状況と類似する状況となっている。

これに対して、準安定二次鉱物ケースでは、安定二次鉱物のカリ長石の場合のように著しく K や Al 等の溶液濃度を低下させる二次鉱物はなく、広い範囲でフィリップサイトやヒューランダイトが生成し、中心部においても準安定二次鉱物として設定されたゼオライト類が生成している。したがって、セメント緩衝材境界部の狭い範囲を除けば、本バッチ系の解析における 10a 以降と同様に、安定二次鉱物ケースの方が準安定二次鉱物ケースより Fe が小さく保たれ、これによってモンモリロナイトの変質速度は小さくなっていたものと考えることができる。

第 2 次 TRU レポートでは、アルカリ塩湖の天然事例や粘土層の埋没続成作用において認められる Ostwald 段階則の傾向等に基づき、緩衝材のセメント由来のアルカリ性間隙水による変質過程で生成する二次鉱物群を選定し、安定二次鉱物及び準安定二次鉱物等に分類した[1]。この時、「安定二次鉱物の方が、準安定二次鉱物より、溶質の濃度を低く制御すると考えられ、モンモリロナイトの S.I. を低く制御するものであり、安定二次鉱物ケースの方が、準安定二次鉱物ケースよりモンモリロナイトの変質速度が大きい」という一般的考え方が成立すると考えていた。しかし、本検討により、この考え方は常に成立するわけではない事がわかった。液相中における鉱物の熱力学的安定性は、液相の組成と鉱物の組み合わせで決定されるものであるが、上記の鉱物選定・分類において参照した天然の系とセメント-緩衝材の系とでは、時空間分布を含め間隙水の組成が相違している。このため、条件によっては鉱物の熱力学的安定性の関係が逆転する場合もあると考えられる。さらに、選定した二次鉱物の化学量論数とモンモリロナイトとの化学量論数との組み合わせによってもモンモリロナイトの S.I. は影響を受けると考えられ、この効果も重畳される可能性がある。これらの影響により、上記の考え方が成立しない場合もあると考えられる。なお、第 2 次 TRU レポートでは、安定二次鉱物+準安定二次鉱物のケースの評価が実施されており、このような一般的考え方が成立しない場合にも対応している。

4. 結言

第 2 次 TRU レポートにおけるセメント系材料及びベントナイト緩衝材からなる人工バリアシステムの化学反応/物質輸送連成解析において、緩衝材の変質が、安定二次鉱物ケースより準安定二次鉱物ケースの方が著しいという結果が得られた。この結果は、「安定二次鉱物の方が、準安定二次鉱物より、溶質の濃度を低く制御すると考えられ、モンモリロナイトの飽和指数を低く制御するものであり、安定二次鉱物ケースの方が、準安定二次鉱物ケースよりモンモリロナイトの変質速度が大きい」という一般的な考え方と逆の傾向であった。この“逆の傾向”を示した理由を把握するため、上記化学反応/物質輸送連成解析から化学反応部分のみを取り出し、物質収支の把握しやすい閉鎖された回分式の系で化学反応計算を実施した。

この化学反応計算の結果に基づき、安定二次鉱物ケース及び準安定二次鉱物ケースそれ

それぞれについて、溶解反応速度式において水酸化物イオンの活量の影響を示す F_s 及び飽和度の影響を示す F_c の経時変化を見ると、水酸化物イオンの活量の影響を示す F_s の経時変化には顕著な相違は認められないのに対して、 F_c の経時変化は準安定二次鉱物ケースの方が、大きい傾向が認められた。これは、モンモリロナイトの飽和指数が、準安定二次鉱物ケースの方が小さく (Chemical affinity の点で飽和から遠く) 保たれたためである。このように F_c が大きい状態で維持されたために、準安定二次鉱物ケースの方がモンモリロナイトの変質が、より著しいという結果になったと考えられる。

参考文献

- [1] 電気事業連合会・核燃料サイクル開発機構：“TRU 廃棄物処分技術検討書-第2次TRU 廃棄物処分研究開発取りまとめ-”，JNC TY1400 2005-013, FEPC, TRU-TR2-2005-02(2005).
- [2] W. Stumm and J.J. Morgan: Aquatic Chemistry, Chemical Equilibria and Rates in Natural Waters, Third Edition, JOHN WILEY & SONS, INC., New York, pp.806-808(1995).
- [3] 小田治恵, 佐々木良一, D. Savage, R.C. Arthur, 本田明: 緩衝材の鉱物学的長期変遷シナリオ, JNC TN8400 2005-020(2005).
- [4] G.L. Gaines. Jr. and H.C. Thomas: Adsorption Studies on Clay Minerals. . A Formulation of Thermodynamics of Exchange Adsorption, The Journal of Chemical physics, Vol.21, No.4, pp.714-718(1953).
- [5] M. Yui, H. Sasamoto and R.C. Arthur: Groundwater evolution modeling for 2nd progress performance assessment (PA) report, JNC TN8400 99-030(1999).
- [6] M.H. Bradbury and F.-A. Sarott: Sorption Database for the Cementitious Near-Field of a L/ILW Repository for Performance Assessment, NAGRA TECHNICAL REPORT 93-08, pp.77-78(1994).
- [7] R.C. Arthur, H. Sasamoto, C. Oda, A. Honda, M. Shibata, Y. Yoshida and M. Yui: Development of thermodynamic database for hyperalkaline, argillaceous systems, Japan Nuclear Cycle Development Institute, JNC TN8400 2005-010(2005).
- [8] 電気事業連合会・核燃料サイクル開発機構：“TRU 廃棄物処分技術検討書-第2次TRU 廃棄物処分研究開発取りまとめ- 根拠資料集 分冊2 地層処分の安全性の検討”，JNC TY1450 2005-001(2), FEPC, TRU-TR2-2005-04(2005).
- [9] A. Atkinson, J.A. Hearne and C.F. Knights: Aqueous Chemistry and Thermodynamic Modelling of CaO-SiO₂-H₂O Gels, AERE R12548, UKAEA(1987).
- [10] 亀井玄人, 本田明, 三原守弘, 小田治恵, 村上裕, 増田賢太, 山口耕平, 中西博, 佐々木良一, 市毛悟, 高橋邦明, 目黒義弘, 山口大美, 青山佳男, 小華和治：“TRU 廃棄物処分の処理・処分技術に関する研究開発 平成18年度報告”，JAEA-Research 2007-067(2007).

表-1 緩衝材の鉱物組成及び層間陽イオン交換に関する諸量

材料及び構成鉱物		組成式	式量	緩衝材溶液共存系単位体積中の量 (1 dm ³ あたり)	
ケイ砂	Quartz	SiO ₂	60.1	Calculated as Chalcedony	
クニゲルV1 [©]	Montmorillonite	48.0wt%	Na _{0.33} Mg _{0.33} Al _{1.67} Si ₄ O ₁₀ (OH) ₂	367.0	0.271 mol/dm ³ -total
			Ca _{0.165} Mg _{0.33} Al _{1.67} Si ₄ O ₁₀ (OH) ₂	366.0	0.039 mol/dm ³ -total
			K _{0.33} Mg _{0.33} Al _{1.67} Si ₄ O ₁₀ (OH) ₂	372.3	0.003 mol/dm ³ -total
			Mg _{0.165} Mg _{0.33} Al _{1.67} Si ₄ O ₁₀ (OH) ₂	363.4	0.004 mol/dm ³ -total
	Quartz	0.6wt%	<i>neglected</i>		
	Chalcedony	38.0wt%	SiO ₂	60.1	3.25 mol/dm ³ -total
	Plagioclase	4.7wt%	<i>neglected</i>		
	Calcite	2.4wt%	CaCO ₃	100.1	0.058 mol/dm ³ -total
	Dolomite	2.4wt%	<i>neglected</i>		
	Analcime	3.3wt%	<i>neglected</i>		
Pylite	0.6wt%	<i>neglected</i>			
項目				値	
Cation exchange capacity				60.1 [meq/(100 bentonite-g)]	
Initial composition of exchangeable cations				ZNa : 51.4, Z ₂ Ca : 7.4, ZK : 0.6, Z ₂ Mg : 0.7	
Selectivity of ion exchange reaction, logK _{G&T} (Selectivity of ion exchange coefficients obey a definition in Gaines & Thomas(1953).)				2ZNa-Z ₂ Ca:0.69, ZNa-ZK:0.42, 2ZNa-Z ₂ Mg:0.67, ZNa-ZH:1.88	

表-2 緩衝材と反応させるアルカリ性水溶液の組成

Element	Concentration(mol/dm ³)
Na	1.98E-01
K	3.04E-01
Ca	9.61E-04
Mg	1.63E-09
C	3.53E-03
S	5.08E-02
Cl	1.45E-05
Al	1.64E-05
Si	1.71E-05
pH	13.5

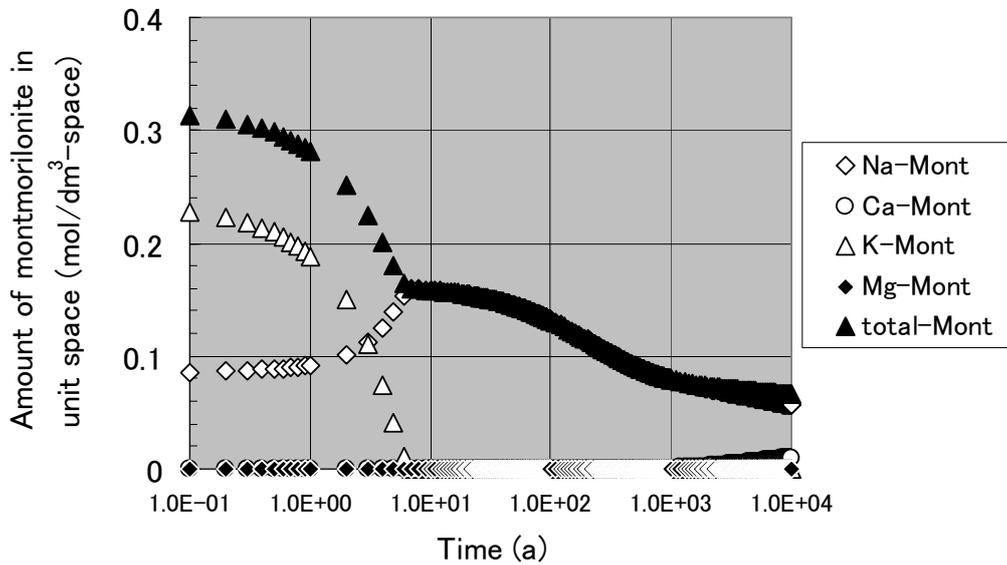


図-1 安定二次鉱物ケースにおけるモンモリロナイト量の変化
(L/S=1.95, 固液共存系1 dm³あたり)

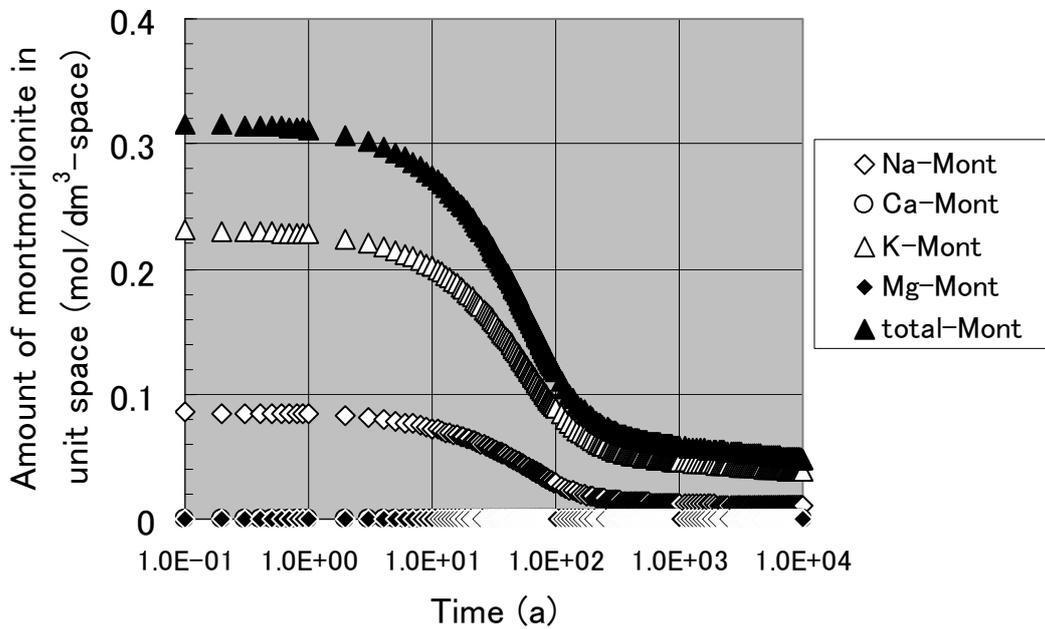


図-2 準安定二次鉱物ケースにおけるモンモリロナイト量の変化
(L/S=1.95, 固液共存系1 dm³あたり)

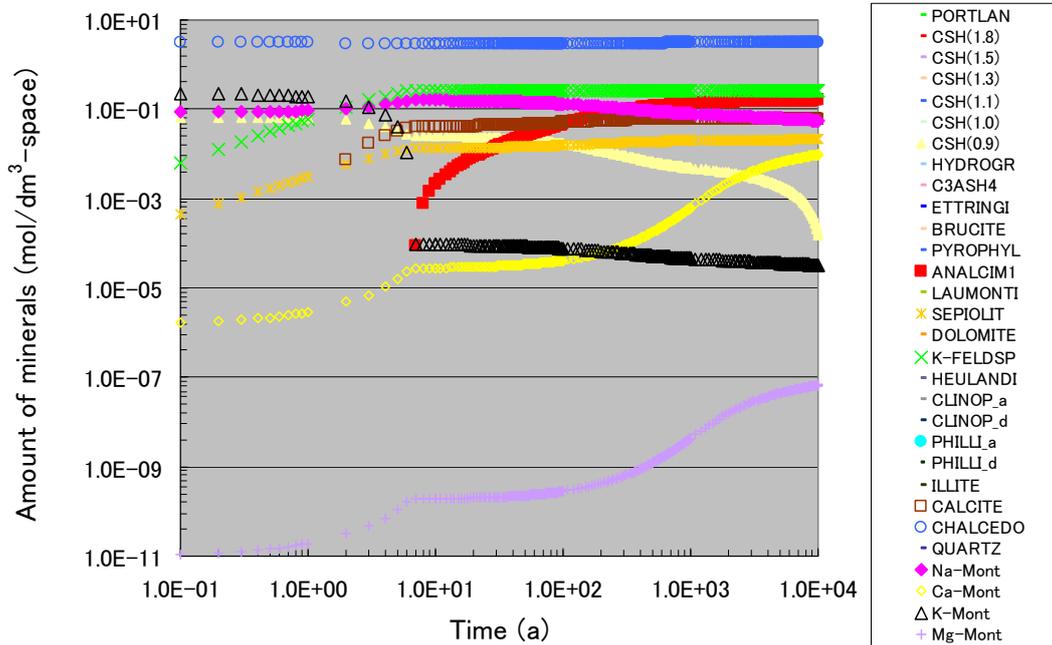


図-3 安定二次鉱物ケースにおける鉱物量の変化
(L/S=1.95, 固液共存系1 dm³あたり)

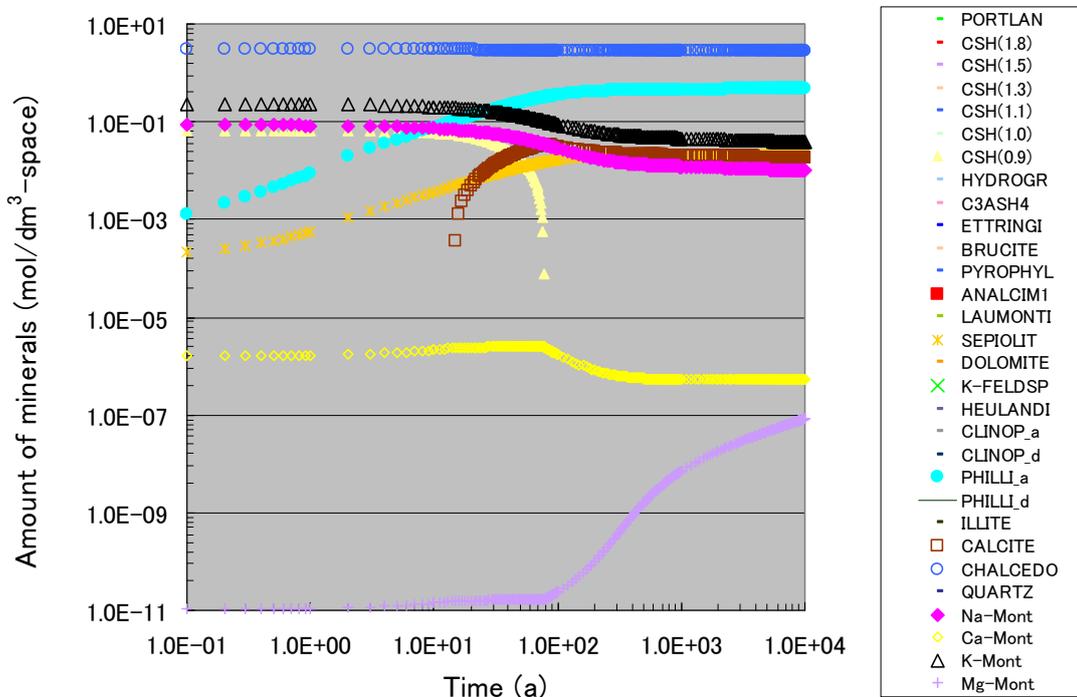


図-4 準安定二次鉱物ケースにおける鉱物量の変化
(L/S=1.95, 固液共存系1 dm³あたり)

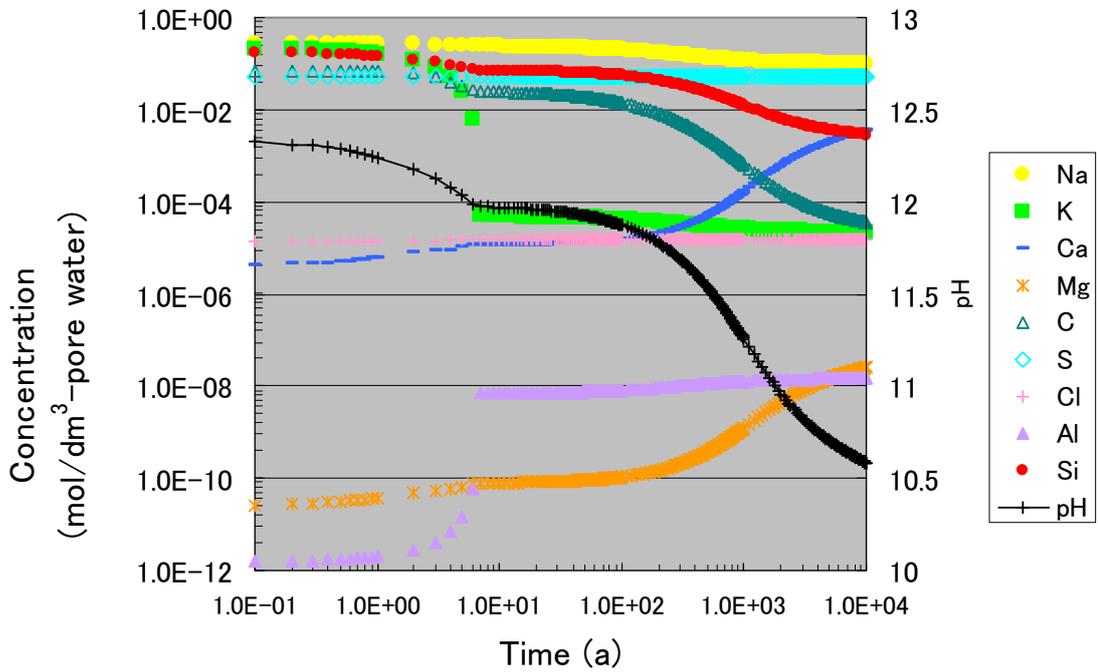


図-5 安定二次鉱物ケースにおける液相濃度の変化 (L/S=1.95)

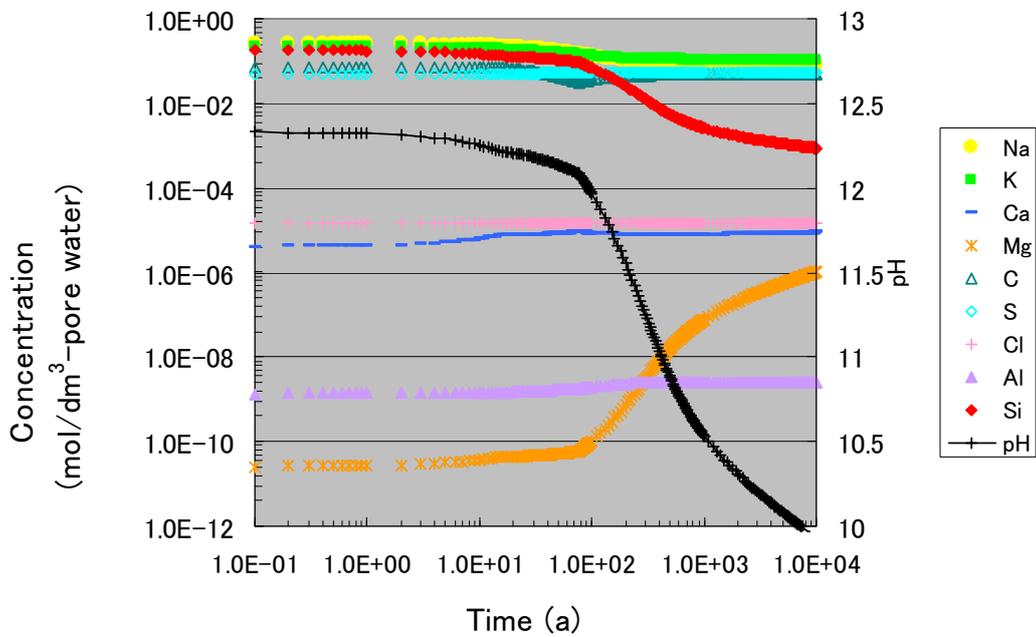
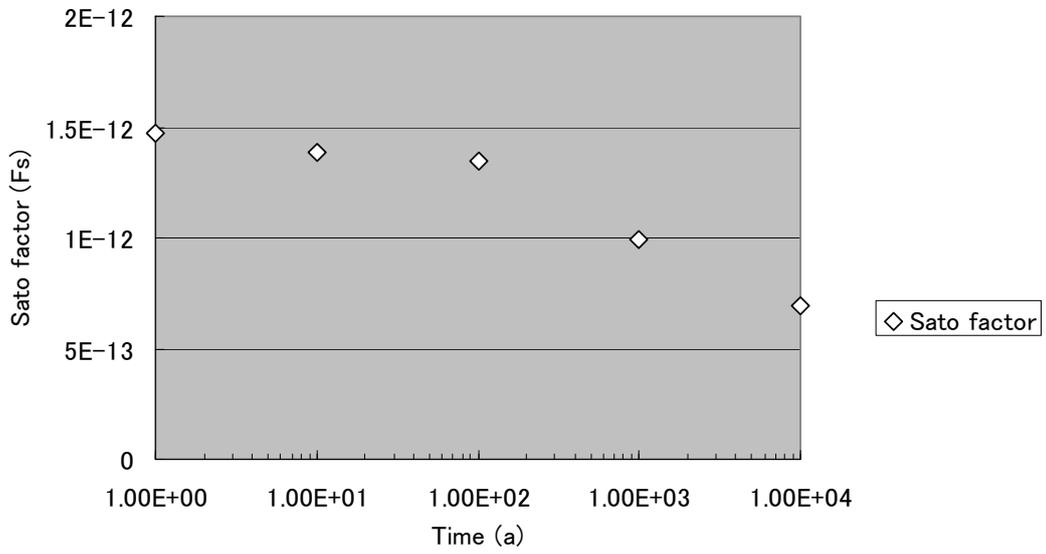
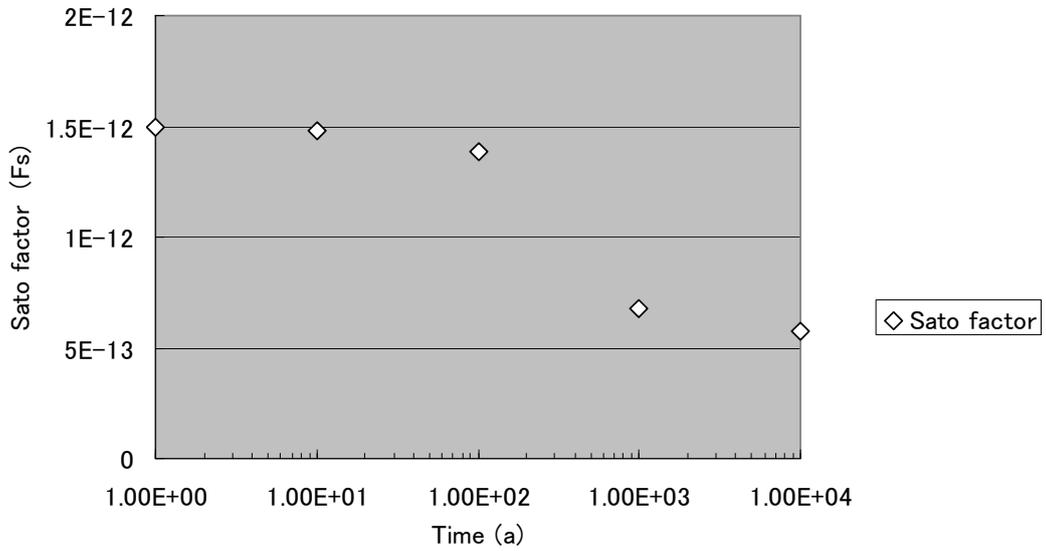


図-6 準安定二次鉱物ケースにおける液相濃度の変化 (L/S=1.95)

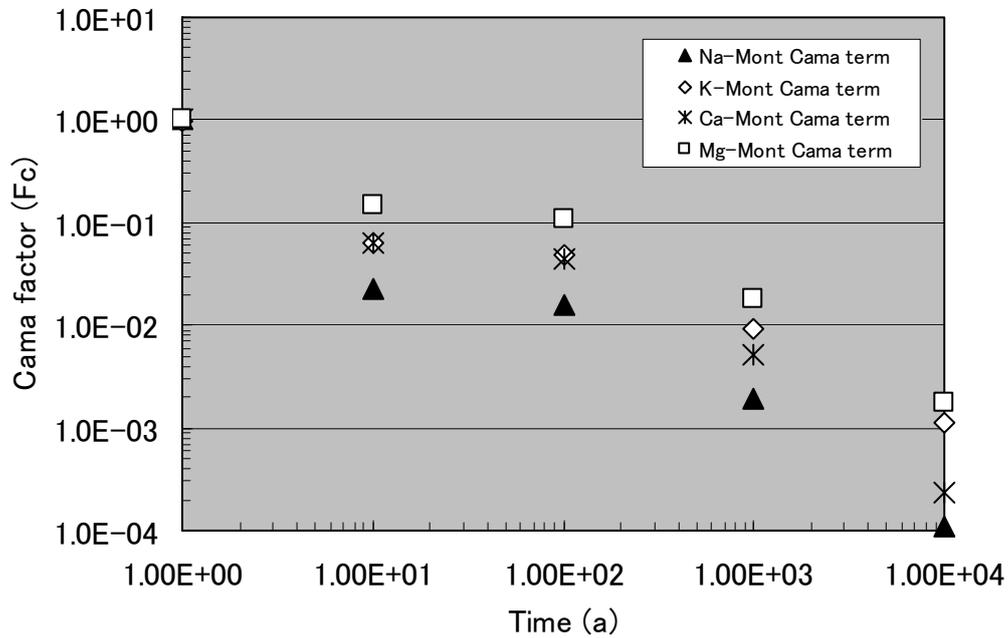


(a) 安定二次鉱物ケース

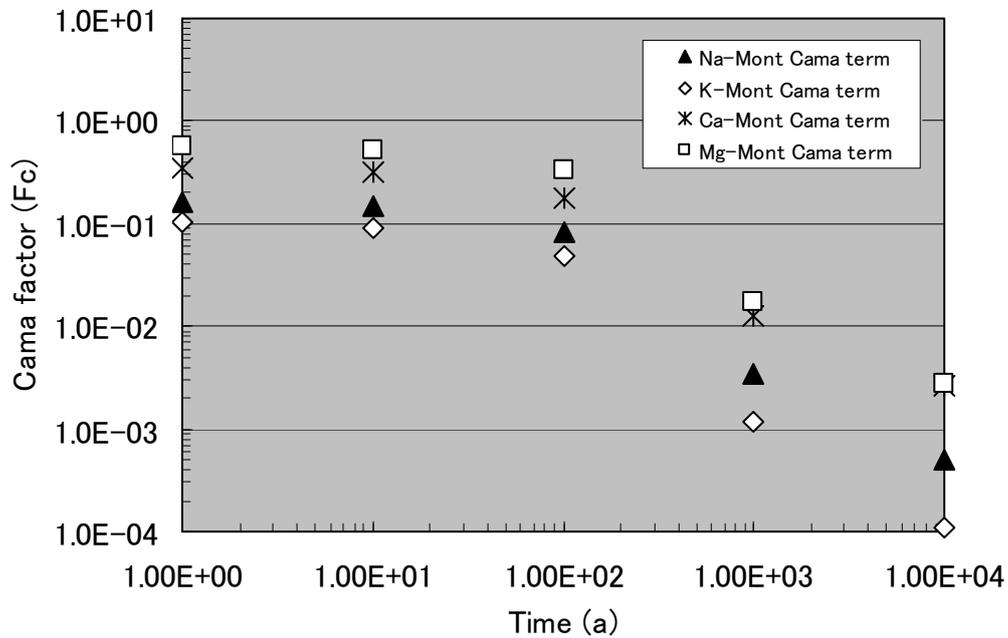


(b) 準安定二次鉱物ケース

図-7 安定相ケース(a)及び準安定相ケース(b)における溶解反応速度に対する水酸化物イオンの活量の影響を示す Sato factor (F_s)の経時変化



(a) 安定二次鉱物ケース



(b) 準安定二次鉱物ケース

図-8 安定相ケース(a)及び準安定相ケース(b)における溶解反応速度に対する飽和度の影響を示す Cama factor (F_c)の経時変化

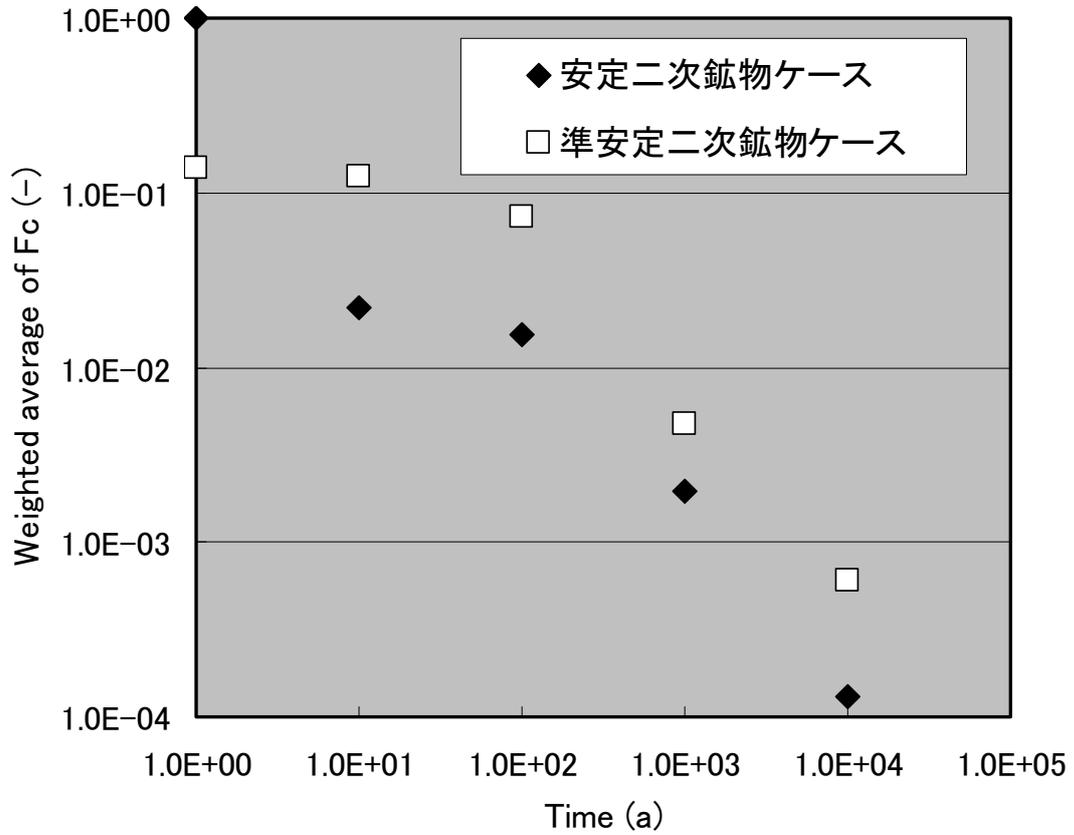


図-9 安定二次鉱物ケース及び準安定二次鉱物ケースにおける各イオン型モンモリロナイトの存在割合を重みとする Cama factor (Fc) の加重平均

Appendix : 仮想元素の導入による緩衝材のアルカリ変質の近似計算の方法**1. 近似計算の必要性和近似の方法**

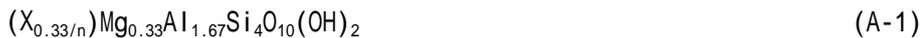
モンモリロナイトは Na^+ , K^+ , Ca^{2+} 及び Mg^{2+} 等の交換性陽イオンを持つ鉱物である。ベントナイト緩衝材に対するセメント由来の高アルカリブルームの影響を評価するため、地球化学解析が実施される。この解析では、ベントナイト中のモンモリロナイトがアルカリ性条件下で溶解する過程を速度論的に扱い、二次鉱物及びモンモリロナイト以外の初生鉱物の溶解・沈殿反応並びに陽イオン交換反応を平衡論的に扱うこととした。ベントナイト中のモンモリロナイトの溶解速度は、pH 及び飽和指数の関数として表現されている。したがって、ある時間ステップでの計算過程は、まず前の時間ステップの化学種の濃度から pH 及び交換性陽イオンのタイプ (Na 型, K 型, Ca 型及び Mg 型) 毎のモンモリロナイト、それぞれについて飽和指数を算定し、これを用いてモンモリロナイト溶解速度を決定して、その速度に応じてモンモリロナイトを溶解させる。この計算操作により、溶解したモンモリロナイトに対応する元素が液相種として放出される。その結果、系が平衡状態から乖離した状態となるため、二次鉱物及びモンモリロナイト以外の初生鉱物の溶解・沈殿反応並びにモンモリロナイトの陽イオン交換反応について化学平衡状態が達成されるよう、計算を行う。この計算を時間ステップ数だけ繰り返すことにより、緩衝材のアルカリ変質挙動を評価している。その際にモンモリロナイトの溶解反応に伴う陽イオン交換サイト及び当該サイトの交換性陽イオンの減少を、イオン交換反応の平衡計算に反映させる必要がある。しかし、試行の結果、前の時間ステップの各イオン型のモンモリロナイト量をイオン交換反応の平衡計算に使用すると、誤差が蓄積し、物質収支が崩れることがわかった。このため、同時時間ステップの中で、モンモリロナイトを溶解させ、溶解させた後の各イオン型のモンモリロナイト量を用いてイオン交換反応の平衡計算をする必要があった。しかし、このような計算をインプットファイルや熱力学データベースを編集することで、直接に実施することは、現行の PHREEQC Ver.2 及び PHREEQC-TRANS では困難であった。またこれらの計算コードのソースプログラムを解読して、変更することも現実的対処とは言えない。

そこで仮想元素を導入し、すでに溶解したモンモリロナイトのイオン交換サイトに仮想元素イオンを強く収着させることにより、当該イオン交換サイトをマスクするとともに、速度論的にモンモリロナイトを溶解させた時に液相に放出された交換性陽イオンを、陽イオン交換反応の平衡計算時に、仮想元素との低溶解度塩を形成させることによりマスクした。このようなマスクングによる近似計算により、同時時間ステップの中で、モンモリロナイトを溶解させ、溶解させた後の各イオン型のモンモリロナイト量を用いてイオン交換反応の平衡計算をすることができるようになった。その具体的方法を以下に示す。

2. 仮想元素によるマスキングに基づく近似計算

現行の計算コードの問題は、速度論的に溶解させたことによる鉱物量の変化を、同じ時間ステップでの化学平衡計算における、その鉱物が持つイオン交換サイト数とそのサイトに収着した交換性イオン量に反映できない点にある。この問題を、コード自体を変えることなく解決するためには、インプットファイル及びデータベースファイルを編集することにより、溶解して減ってしまったイオン交換サイトとそのサイトに収着した交換性イオンが、評価したい化学反応に与らないようにすれば良い。そのために、すでに溶解したモンモリロナイトのイオン交換サイトに仮想元素イオンを強く収着させることによりマスクするとともに、そのサイトに収着していた交換性陽イオンは仮想元素との低溶解度塩を形成させることによりマスクすることとした。

現在、熱力学データベース JNC TDB.TRU では、モンモリロナイトの分子式として(A-1)式を採用している。



ここで、 $(X_{0.33/n})$ 部分が交換性陽イオンに対応しており、Na, K, Ca または Mg が入る。また n はそれぞれの交換性陽イオンの価数の絶対値である。ここで仮想元素 L, Ma, Nk, Mc 及び Mm を導入し、速度論的に溶解させるモンモリロナイトの分子式を、Na 型, K 型, Ca 型及び Mg 型それぞれについて(A-2)式, (A-3)式, (A-4)式及び(A-5)式のように書き変えた。



仮想元素 L は、溶解すると 1 価の陽イオン L^+ になると設定した。一方、仮想元素 Ma, Nk, Mc 及び Mm は、溶解すると 1 価の陰イオン (Ma^- , Nk^- , Mc^- 及び Mm^-) になると設定した。したがって仮想元素 L は溶解したモンモリロナイトの総交換性陽イオンと当量分、液相中に放出されることになる。一方、仮想元素 Ma, Nk, Mc 及び Mm は、それぞれ、溶解したモンモリロナイトの交換性ナトリウムイオン、交換性カリウムイオン、交換性カルシウムイオン及び交換性マグネシウムイオンと当量分、液相中に放出されることになる。

イオン L^+ はモンモリロナイトの陽イオン交換サイト Z に非常に強く収着されるように、(A-6)式のイオン交換反応のイオン選択係数 K を十分に大きな値として $\log K = 20$ と設定した。



この計算操作により溶解したモンモリロナイトの陽イオン交換サイト Z^- は、 LZ の形で仮想元素 L の陽イオンによってマスクされ、他の化学反応にはよらないことになる。

溶解したモンモリロナイトの交換性ナトリウムイオン、交換性カリウムイオン、交換性カルシウムイオン及び交換性マグネシウムイオンと当量分、それぞれ液相中に放出された Ma^- 、 Nk^- 、 Mc^- 及び Mm^- は、 $NaMa$ 、 KMk 、 $CaMc_2$ 及び $MgMm_2$ という化学式の難溶性の塩を作るように 1 価のアルカリ元素 (Na 及び K) については $NaMa$ 、及び KMk の乖離式の平衡定数 K を $\log K = -30$ 、2 価のアルカリ土類元素 (Ca 及び Mg) については $CaMc_2$ 及び $MgMm_2$ の乖離式の平衡定数 K を $\log K = -60$ と設定した。この計算操作により溶解したモンモリロナイトの交換性陽イオンは、 $NaMa$ 、 KMk 、 $CaMc_2$ 及び $MgMm_2$ という仮想元素との塩の形でマスクされ、他の化学反応にはよらない。

上記のような計算操作を行うことにより、モンモリロナイトの溶解に応じて、イオン交換サイト及びそのサイトに収着された交換性陽イオンを減少させた場合と、ほぼ等価な計算を行うことができる。ただし、溶解速度式は飽和指数の関数であるため、各時間ステップでのモンモリロナイトの溶解反応速度を決定するためには、飽和指数を算定する必要がある。この飽和指数の算定には、仮想種を付加する前のモンモリロナイトの化学式及び平衡定数を用いた。さらに PHREEQC を計算に用いる場合には、平衡計算により生じた交換性陽イオンの型の変化を、直接各イオン型毎のモンモリロナイト量に反映させることができない。このため、各イオン型毎のサイト数に応じて各イオン型毎のモンモリロナイトの反応表面積 (A_{min}) を変化させて、平衡計算により生じた交換性陽イオンの型の変化を反応速度計算に反映させた。

This is a blank page.

国際単位系 (SI)

表1. SI基本単位

基本量	SI基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質的量	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	立方メートル	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	SI基本単位による表し方
平面角	ラジアン ^(b)	rad	1 ^(b)	m/m
立体角	ステラジアン ^(b)	sr ^(c)	1 ^(b)	m ² /m ²
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	m ⁻¹ kg s ⁻²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N m	m ² kg s ⁻²
仕事率, 工率, 放射束	ワット	W	J/s	m ² kg s ⁻³
電荷, 電流量	クーロン	C		s A
電位差 (電圧), 起電力	ボルト	V	W/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻¹
静電容量	ファラド	F	C/V	m ⁻² kg ⁻¹ s ⁴ A ²
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻²
コンダクタンス	ジーメンズ	S	A/V	m ⁻² kg ⁻¹ s ³ A ²
磁束	ウェーバ	Wb	Vs	m ² kg s ⁻² A ⁻¹
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²	kg s ⁻² A ⁻¹
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	m ² kg s ⁻² A ⁻²
セルシウス温度	セルシウス度 ^(e)	°C		K
光照度	ルーメン	lm		cd sr ^(c)
放射線量	ルクス	lx		lm/m ²
放射線当量, 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	m ² s ⁻²
酸素活性化	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、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大きさは同一である。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	SI基本単位による表し方
粘力のモーメント	パスカル秒	Pa s	m ⁻¹ kg s ⁻¹
表面張力	ニュートンメートル	N m	m ² kg s ⁻²
角速度	ニュートン毎メートル	N/m	kg s ⁻²
角加速度	ラジアン毎秒	rad/s	m m ⁻¹ s ⁻¹ =s ⁻¹
熱流密度, 放射照度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s ²	m m ⁻¹ s ⁻² =s ⁻²
熱容量, エントロピー	ワット毎平方メートル	W/m ²	kg s ⁻³
比熱容量, 比エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	m ² kg s ⁻² K ⁻¹
比エネルギー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	m ² s ⁻² K ⁻¹
熱伝導率	ジュール毎キログラム	J/kg	m ² s ⁻²
体積エネルギー	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s ⁻³ K ⁻¹
電界の強さ	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ¹ kg s ⁻²
電荷密度	ボルト毎メートル	V/m	m kg s ⁻³ A ⁻¹
表面電荷	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ³ s A
電束密度, 電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ² s A
誘電率	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ² s A
透磁率	ファラド毎メートル	F/m	m ³ kg ⁻¹ s ⁴ A ²
モルエネルギー	ヘンリー毎メートル	H/m	m kg s ⁻² A ⁻²
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル	J/mol	m ² kg s ⁻² mol ⁻¹
照射線量 (X線及びγ線)	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	m ² kg s ⁻² K ⁻¹ mol ⁻¹
吸収線量率	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ s A
放射線強度	グレイ毎秒	Gy/s	m ² s ⁻³
放射線輝度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m ³ m ⁻² kg s ⁻³ =m ² kg s ⁻³
酵素活性濃度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	W/(m ² sr)	m ² m ⁻² kg s ⁻³ =kg s ⁻³
	カタール毎立方メートル	kat/m ³	m ³ s ⁻¹ mol

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	1h=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	1ha=1hm ² =10 ⁴ m ²
リットル	L, l	1L=1l=1dm ³ =10 ³ cm ³ =10 ⁻³ m ³
トン	t	1t=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	1eV=1.602 176 53(14)×10 ⁻¹⁹ J
ダルトン	Da	1Da=1.660 538 86(28)×10 ⁻²⁷ kg
統一原子質量単位	u	1u=1 Da
天文単位	ua	1ua=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=0.1MPa=100kPa=10 ⁵ Pa
水銀柱ミリメートル	mmHg	1mmHg=133.322Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1nm=100pm=10 ⁻¹⁰ m
海里	M	1 M=1852m
バイン	b	1 b=100fm ² =(10 ⁻¹² cm) ² =10 ⁻²⁸ m ²
ノット	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネーパ	Np	SI単位との数値的な関係は、対数量の定義に依存。
ベベル	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
エルグ	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J
ダイン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N
ポアズ	P	1 P=1 dyn s cm ⁻² =0.1Pa s
ストークス	St	1 St=1cm ² s ⁻¹ =10 ⁻⁴ m ² s ⁻¹
スチルブ	sb	1 sb=1cd cm ⁻² =10 ⁻⁴ cd m ⁻²
ファ	ph	1 ph=1cd sr cm ⁻² 10 ⁴ lx
ガラ	Gal	1 Gal=1cm 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=1Mx cm ⁻² =10 ⁻⁴ T
エルステッド ^(c)	Oe	1 Oe ≐ (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=1cGy=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	1cal=4.1858J (「15°C」カロリ), 4.1868J (「IT」カロリ), 4.184J (「熱化学」カロリ)
マイクロン	μ	1 μ=1μm=10 ⁻⁶ m

