

セシウム交換反応Csl + Cs' → Cs + ICs' の 理論的研究 (受託研究)

Theoretical Study of the Cs Isotope Exchange Reaction of CsI + Cs' \rightarrow Cs + ICs' (Contract Research)

小林 孝徳 橋本 雅史 横山 啓一

Takanori KOBAYASHI, Masashi HASHIMOTO and Keiichi YOKOYAMA

原子力科学研究部門 関西光科学研究所

Kansai Photon Science Institute Sector of Nuclear Science Research

December 2015

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは国立研究開発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(<u>http://www.jaea.go.jp</u>) より発信されています。

国立研究開発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大字白方 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, 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, 2015

セシウム交換反応 CsI + Cs' → Cs + ICs'の理論的研究 (受託研究)

日本原子力研究開発機構 原子力科学研究部門 関西光科学研究所

小林 孝徳*1、橋本 雅史+1、横山 啓一+1

(2015年10月5日受理)

セシウム交換反応 CsI + Cs' \rightarrow Cs + ICs'の反応性を議論するため、中間体 Cs₂I の安定化 エネルギー、構造、結合形態、Cs と CsI の二体衝突ポテンシャル曲面を M06/def2-TZVPPD 密度汎関数法を用いて計算した。その結果 Cs₂I の生成は入口障壁なしで進むことがわかっ た。また、2 つの CsI 結合は、化学的に等価になることがわかった。これらの結果は、CsI + Cs' \rightarrow Cs + ICs'によるセシウム交換反応の速度が衝突律速に近いことを示唆している。

本報告書は国立大学法人大阪大学からの受託研究契約により実施した研究成果に関するものである。

関西光科学研究所:〒619-0215 京都府木津川市梅美台 8-1-7

+1 原子力科学研究部門 量子ビーム応用研究センター レーザー応用技術研究ディビジョン ※1 特定課題推進員

Theoretical Study of the Cs Isotope Exchange Reaction of CsI + Cs' \rightarrow Cs + ICs' (Contract Research)

Takanori KOBAYASHI^{**1}, Masashi HASHIMOTO⁺¹ and Keiichi YOKOYAMA⁺¹

Kansai Photon Science Institute Sector of Nuclear Science Research Japan Atomic Energy Agency Kizugawa-shi, Kyoto

(Received October 5, 2015)

To discuss the exchange reaction of Cs isotope by CsI + Cs' \rightarrow Cs + ICs', the structure and chemical properties of Cs₂I intermediate and potential energy surface of the entrance reaction are calculated using M06/def2-TZVPPD density functional calculation. The calculation shows that the reaction to the intermediate has no barrier and the two Cs-I bonds of Cs₂I are chemically equivalent. These results suggest that the rate of the Cs exchange reaction of CsI + Cs' \rightarrow Cs + ICs' is as high as the collision rate.

Keywords: The Exchange Reaction of Cesium Isotope, DFT Calculation, CsI, Cs₂I

This work was performed by Osaka University under contract with Japan Atomic Energy Agency.

⁺¹ Laser Application Technology Division, Quantum Beam Science Center, Sector of Nuclear Science Research

^{*1} Special Topic Researcher

目次

1.	緒言	·1
2.	量子化学計算	-1
3.	結果	-2
	3.1. 計算レベルの検証	-2
	3.2. Cs ₂ I	-3
	3.3. 生成物	-5
	3.4. PES	-5
4.	結論	-6
謝	辞	-6
参	考文献	-6

Contents

1. Introduction1	L
2. Computational Details1	L
3. Results2	2
3.1. Comparison with the experimental results for Cs ₂ and CsI2	,
3.2. Cs ₂ I	3
3.3. Products5	;
3.4. PES	5
4. Conclusions6	5
Acknowledgements	5
References	5

This is a blank page.

1. 緒言

持続可能な原子力エネルギーシステムを形成する上で、長寿命核分裂生成物(Long-Lived Fission Product, LLFP)の核変換技術は重要な役割を担っている[1]。LLFP の中でも¹³⁵Cs は半 減期 $\tau = 2.3 \times 10^6$ 年に及び、環境への影響度から核変換の優先度が最も高いものの一つであ る。一方、ウランの核分裂では、¹³⁵Cs だけではなく¹³³Cs(安定)、¹³⁷Cs($\tau = 30$ 年)がほぼ等量 生成される。問題の¹³⁵Cs は中性子照射によって、最終的に安定核種¹³⁶Ba に変換できる。 しかし、同時に¹³³Cs が 2 つの中性子を段階的に吸収することで¹³⁵Cs に変換される。この 反応により中性子が不足するため¹³³Cs が共存するかぎり、¹³⁵Cs の核変換は成立しない。こ れらのことから、¹³⁵Cs の核変換のためには¹³³Cs と¹³⁵Cs を分離しておく必要がある。現時 点では、これに適用できる Cs 同位体分離技術は存在しない。

私達は最近、1 つの新しい同位体分離スキームを提案した[2]。その提案では、ヨウ化セシ ウム分子 CsI の同位体選択的な光分解反応を用いる。[3,4]

$$^{135}CsI + h\nu \rightarrow {}^{135}Cs + I \tag{1}$$

¹³³CsI + hv → ¹³³CsI (分解せず) (2)

しかし、この光分解反応後に、以下の同位体交換反応が起こる恐れがある。

 $^{133}CsI + ^{135}Cs \rightarrow ^{133}Cs + I^{135}Cs$ (3)

この反応が無視できない速度で起こる場合、最終的な分離係数が低下する。本研究では、 反応(3)について、反応速度を定性的に評価するため、反応のエネルギー変化及び微視的機 構を量子化学計算により調べた。

2. 量子化学計算

本研究では次の反応について解析した。

 $CsI + Cs \Leftrightarrow Cs_2I$

 $\rightarrow Cs_2 + I(^2P_{3/2}) \tag{5}$

(4)

各分子種の構造最適化と振動数計算、電子エネルギー計算を行い、それらの値から反応熱 を計算した。

振動数計算では¹³³Cs と¹²⁷Iの質量を用いた。¹³³CsI と¹³⁵CsI、¹³³Cs¹³³CsI と¹³³Cs¹³⁵CsIの 零点振動エネルギーの差は無視できることを確認した(0.01 kJ mol⁻¹以下)。

この量子化学計算で得られる I 原子のエネルギーには、スピン軌道相互作用は含まれていない。I 原子のスピン軌道分裂は 90.88 kJ mol⁻¹[5]であり、I 原子が関与する反応(5)の反応熱を議論するためには、これを考慮する必要がある。I(${}^{2}P_{3/2}$)の電子エネルギーとして、計算値から 30.29 (= 90.88 / 3) kJ mol⁻¹を差し引いた値を用いた。

CsI と Cs₂I の Mulliken のポピュレーション解析による原子上の電荷、自然軌道(NBO)に よる各原子の電荷の解析、及びスピン密度の解析を行った。 Cs 原子と CsI 分子の二体衝突ポテンシャルエ ネルギー曲面(PES)を以下の手順で計算した。 (1) CsI の重心を原点とした(Figure 1)。 (2) CsI 分子軸方向を z 軸、z 軸に垂直な方向を x 軸と した。(3) CsI 分子の結合距離を、孤立 CsI 分子 の最適化構造の値で固定した。(4) r を原点から Cs 原子の距離、 θ を CsI 分子軸と r とのなす角 とし、各(r, θ) に Cs を配置したときの電子エネ ルギーを計算した。このグリッド間隔は、r=9.0 Å までの間では 0.1 Å、r=9.0 Å 以降では 2.0 Å とした。 θ は 0~180°全域で 10°刻みとした。計 算点は合計 1239 点であった。(5) 得られたエネ ルギー面を 3 次元スプライン関数で補間し、そ れを(x,z)座標系に変換した。



Figure 1. The definition of the coordinate for PES

構造最適化、振動数計算、ポテンシャルエネルギー曲面の計算には Gaussian 09 [6]を用いた。自然軌道(NBO)によるポピュレーション解析には GAMESS[7]にインストールされた NBO 5.9[8]を用いた。分子の形状とスピン密度の視覚化には Gabedit [9]を用いた。計算レベルは M06 密度汎関数法[10]を用いた。基底関数は def2-TZVPPD を用いた[11]。

3. 結果

3.1. 計算レベルの検証

frequencies in cm ⁻¹ , of CsI and Cs ₂ and comparison with the experimental results					
		Calc.	Exp.		
	Binding Energy $(D_o) / kJ \text{ mol}^{-1}$	55.81	$43.59\!\pm\!0.08^{*1}$		
Cs_2	Bond length / Å	4.507	4.47^{*2}		
	Frequency / cm ⁻¹	46.364	42.022^{*2}		
	Binding Energy $(D_o) / kJ \text{ mol}^{-1}$	316.31	$333\pm2^{*3}$		
CsI	Bond length / Å	3.355	3.31519 ^{*2}		
	Frequency / cm ⁻¹	114.8474	119.178^{*2}		

Table 1. The calculated results of the binding energies in kJ mol⁻¹, bond lengths in Å, and frequencies in cm^{-1} of CsI and Cs₂ and comparison with the experimental results

*1 Reference [12]. $D_e (= D_o - \Delta E_{ZPE})$

*2 Reference [13]

*3 Reference [14]

Table 1 に、本計算レベルの信頼性をはかる指標の 1 つとして、Cs₂及び CsI の結合エネル ギー、結合距離、振動数の計算結果と、実験結果との比較を行ったものを載せた。Cs₂の各 計算値はそれぞれ 55.81 kJ mol⁻¹、4.507 Å、46.36 cm⁻¹であった。それらの実験値はそれぞれ 43.59 kJ mol⁻¹、4.47 Å、42.02 cm⁻¹である。CsI の各計算値はそれぞれ 316.31 kJ mol⁻¹、3.355 Å、114.85 cm⁻¹であった。それらの実験値は、それぞれ 333 kJ mol⁻¹、3.315 Å、119.18 cm⁻¹ である。結果として、本研究の目的には十分な精度が得られていると考えた。

 $3.2.\ Cs_2I$

Table 2 に、各分子の電子エネルギー E_{el} と零点振動エネルギー E_{ZPE} の計算結果をまとめた。 Figure 2 に各分子の最適化構造を示した。全ての構造で負の振動数は計算されなかった。分 子 M における原子 A と B の結合距離を $d_M(A-B)$ と表記する。

Table 2. The electronic energies E_{el} in hartree and the

	zero point energies E _{ZPE} in kJ mol ⁻¹				
	E_{el} / hartree	$E_{ZPE} / kJ mol^{-1}$			
Cs	-20.09923835				
Ι	-297.7417169				
Cs ₂	-40.21983507	0.28			
CsI	-317.9732337	0.69			
Cs_2I	-338.0972704	1.21			

 $Cs_2I の 2 つの d_{Cs2l}(Cs-I)$ は共に 3.573 Å であ り、等しくなった。これは、これらの結合が 化学的に等価になったことを示唆している。 この結合距離は $d_{Csl}(Cs-I)$ の 3.355 Å より約 0.2 Å 長い。Cs-I-Cs の結合角は 81.42°であり、大 きく折れ曲がっている。 $d_{Cs2l}(Cs-Cs)$ は 4.661 Å であり、 $d_{Cs2}(Cs-Cs) = 4.507$ Å と比較して、そ れほど伸びていない。



Figure 2. The optimized geometries of Cs_2 , CsI, and Cs_2I . The structural parameters are shown in Å and degree.

Figure 3 に反応(4)と(5)のエネルギーダイアグラムを示した。反応(4)は 64.60 kJ mol⁻¹の安 定化であり、通常の化学結合による安定化エネルギーよりも小さい。孤立 CsI 分子の結合エ ネルギーの計算値は316.31 kJ mol⁻¹(Table 1)である。しかし、van der Waals 錯体の結合エネル ギーよりははるかに大きい。また、2 つの $d_{Cs2I}(Cs-I)$ が等しくなることからも、これは CsI …Cs のような van der Waals 錯体ではない。Cs 原子から CsI への電子移動が、Cs₂I の構造や エネルギーに大きな影響を与えているものと思われる。そこで、電子移動量を計算するため、 ポピュレーション解析を行った。



Figure 3. The energy diagram of the reactions (4) and (5). Δ H's are shown in kJ mol⁻¹

Table 3 が、Cs 原子が付加する前後の各原子の電荷である。Mulliken 電荷(カッコ内は NBO 電荷)によると、CsI 分子中の Cs の電荷は+0.762 (+0.925)から+0.389 (+0.470)へと大きく減少 した。それに対し、I の電荷は-0.762 (-0.925)から-0.778 (-0.940)と、わずかに減少したのみ であった。また、Cs 原子の電荷は 0 (0)から+0.389 (+0.470)となった。これは、Cs の電荷が Cs に移動していることを示している。

Table 3. The Mulliken charge and natural charge before and after the formation of Cs₂I

	CsI +	+ Cs'	Cs	s ₂ I
	Mulliken NBO		Mulliken	NBO
Cs	+0.7616	+0.9249	+0.3889	+0.4700
Ι	-0.7616	-0.9249	-0.7798	-0.9401
Cs'	0.0000	0.0000	+0.3889	+0.4700

この電荷移動は、スピン密度を見るとよりはっき りする。Figure 4 が Cs_2I のスピン密度である。この 図から 2 つの Cs 原子間にスピン密度が拡がってい ることがわかった。このようなスピン密度の拡がり は、以前工藤らが Li₂CN の計算をした際[15]にも得 られたものと同様のものである。そこでは、2 つの Li 原子の間にスピン密度が広がっている様相が計 算された。平衡構造では Cs_2 ⁺⁶- Γ^{δ} のような化学結合 になっているものと推察できる。



Figure 4. The spin density of Cs₂I

3.3. 生成物

第三体との衝突による内部エネルギーの散逸がない場合、反応(4)により生成した Cs₂I は 安定化されない。Cs₂I の解離経路として反応(5)及び反応(4)の逆反応が考えられる。反応(5) の Δ H は+260.54 kJ mol⁻¹であり、反応(5)が起こるためにはかなりの衝突エネルギーが必要で ある。したがって、エネルギー的に最も有利な経路は反応(4)の逆反応であり、CsI + Cs に解 離する経路である(Figure 3)。Cs₂I の 2 つの Cs が等価であることから、反応(4)が起こった場 合、約 1/2 の確率で Cs 交換反応がおこることになる。

3.4. PES

CsI と Cs の PES を Figure 5 に示す。引力が働く領域が I の周りに拡がっている。(x,z)が (3.58, -1.34)の点で極小点があり、これが Cs₂I に対応する。そのときのエネルギーは-60.7 kJ mol⁻¹と計算された。 Δ H(Cs₂I)の-64.60 kJ mol⁻¹と比較して約 4 kJ mol⁻¹程度の違いであった。 極小点での Cs 原子と I の距離 3.60 Å は、CsI の結合距離を 3.355 Å に固定しているにもかか わらず、d_{Cs2I}(Cs-I)の 3.573 Å とほとんど同じであった。このことは、安定構造の形成までの 段階で、CsI の結合距離を固定したことによる PES への影響はほとんどないことを示してい る。また、この PES から、その最小エネルギー構造に到達する前に、入口障壁は存在しな いことが分かる。この事から、CsI に Cs'原子が衝突した場合、速やかに Cs₂I が形成される と考えられる。従って、セシウム交換反応の速度は衝突頻度の約 1/2 となると思われる。



Figure 5. PES of CsI···Cs. The contour line is drawn every 5 kJ mol⁻¹. The black bold line is the 0 kJ mol⁻¹ line, which means $E_{el}(CsI) + E_{el}(Cs')$ dissociation limit.

4. 結論

このレポートでは、セシウム交換反応 CsI + Cs'→Cs + ICs'の反応性を考察をするため、密 度汎関数法による解析を行った。中間体 Cs₂I の構造と電荷分布を計算した。Cs と CsI の二 体衝突 PES を計算した。これらの結果から、(1) CsI と Cs の反応はバリアレスで進み、Cs₂I が容易に形成されることが示された。そして、(2) Cs₂I における 2 つの Cs-I 結合は化学的に 等価であることが示された。結論として、セシウムの交換は、Cs と CsI の衝突頻度の約 1/2 の速度で起こるといえる。

謝辞

この研究は、文部科学省の融合光新創生ネットワークのサポートで行われたものである。 また、JSPS 科研費 No.15H02345 のサポートも戴いた。この場を借りて御礼申し上げる。

参考文献

[1] K. Arie, M. Kawashima, Y. Araki, M. Sato, K. Mori, Y. Nakayama, K. Ishiguma, Y. Fuji-ie, "The sustainable system for global nuclear energy utilization", GLOBAL2007 (2007) pp.310-317.

[2] K. Yokoyama, L. Matsuoka, T. Kasajima, M. Tsubouchi, A. Yokoyama, "Quantum control of molecular vibration and rotation toward the isotope separation", in *Advances in Intense Laser Science & Photonics*, J. Lee et al. ed., (Publishing House for Science and Technology, Hanoi, 2010) pp.113-119.

[3] A. Ichihara, L. Matsuoka, Y. Kurosaki, K. Yokoyama, "Quantum control of isotope-selective rovibrational excitation of diatomic molecules in the thermal distribution", Opt. Rev. 22 (2015) pp.153-156.

[4] A. Ichihara, L. Matsuoka, E. Segawa, K. Yokoyama, "Isotope-selective dissociation of diatomic molecules by terahertz optical pulses", Phys. Rev. A 91 (2015) 043404.

[5] NIST atomic spectra database. URL: http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm

[6] M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H.P. Hratchian, A.F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J.L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J.A. Montgomery, Jr., J.E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J.J. Heyd, E. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J.M. Millam, M. Klene, J.E. Knox, J.B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R.E. Stratmann, O. Yazyev, A.J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J.W. Ochterski, R.L.

Martin, K. Morokuma, V.G. Zakrzewski, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, S. Dapprich, A.D. Daniels, O. Farkas, J.B. Foresman, J.V. Ortiz, J. Cioslowski, and D.J. Fox, Gaussian 09, Revision D.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2013.

[7] M.W. Schmidt, K.K. Baldridge, J.A. Boatz, S.T. Elbert, M.S. Gordon, J.H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K.A. Nguyen, S. Su, T.L. Windus, M. Dupuis, J.A. Montgomery, "General Atomic and Molecular Electronic Structure System", J. Comput. Chem. 14 (1993) pp.1347-1363.

[8] NBO 5.9. E.D. Glendening, J.K. Badenhoop, A.E. Reed, J.E. Carpenter, J.A. Bohmann, C.M. Morales, F. Weinhold (Theoretical Chemistry Institute, University of Wisconsin, Madison, WI, 2009); http://www.chem.wisc.edu/~nbo5

[9] A.R. Allouche, "Gabedit - A graphical user interface for computational chemistry softwares", J. Comput. Chem. 32 (2011) pp.174-182.

[10] Y. Zhao and D. G. Truhlar, The M06 suite of density functionals for main group thermochemistry, thermochemical kinetics, noncovalent interactions, excited states, and transition elements: two new functionals and systematic testing of four M06-class functionals and 12 other functionals", Theor. Chem. Acc. 120 (2008) pp.215-241.

[11] Dmitrij Rappoport F. Furche, "Property-optimized Gaussian basis sets for molecular response calculations", J. Chem. Phys. 133 (2010) 134105.

[12] M. Raab, H. Weickenmeier, W. Demtröder, "The dissociation energy of the cesium dimer", Chem. Phys. Lett. 88 (1982) pp.377-383.

[13] NIST Chemistry Webbook URL: http://webbook.nist.gov/chemistry/

[14] T.-M. R. Su, S.J. Riley, "Alkali halide photofragment spectra. I. Alkali iodide bond energies and excited state symmetries at 266 nm", J. Chem. Phys. 71 (1979) pp.3194-3202

[15] H. Kudo, M. Hashimoto, K. Yokoyama, C.H. Wu, A.E. Dorigo, F.M. Bickelhaupt, P.v.R. Schleyer, "Structure and Stability of the Li₂CN Molecule. An Experimental and ab initio Study", J. Phys. Chem 99 (1995) pp.6477-6482.

This is a blank page.

表 1. SI 基本単位				
甘大昌	SI 基本ì	单位		
盔半里	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	А		
熱力学温度	ケルビン	Κ		
物質量	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					
an de La SI 組立単位	<u>f</u>				
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 さ , 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/					
面積密度キログラム毎平方メート/	ν kg/m ²				
比体積 立方メートル毎キログラ」	m ³ /kg				
電 流 密 度 アンペア毎平方メート/	ν 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/					
輝 度 カンデラ毎平方メート/	ν cd/m ²				
屈 折 率 ^(b) (数字の) 1	1				
比 透 磁 率 ^(b) (数字の) 1	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

	SI 旭立単位			
組立量	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 隹	ラジアン ^(b)	rad	1 (в)	m/m
立 体 催	ステラジアン ^(b)	sr ^(c)	1 (b)	m^2/m^2
周 波 数	ヘルツ ^(d)	Hz	1	s ^{·1}
力	ニュートン	Ν		m kg s ⁻²
压力,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,電気量	クーロン	С		s A
電位差(電圧),起電力	ボルト	V	W/A	$m^2 kg s^{\cdot 3} A^{\cdot 1}$
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	ジーメンス	s	A/V	$m^{2} kg^{1} s^{3} A^{2}$
磁東	ウエーバ	Wb	Vs	$m^2 kg s^2 A^{-1}$
磁束密度	テスラ	Т	Wb/m ²	$\text{kg s}^{2} \text{A}^{1}$
インダクタンス	ヘンリー	Н	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
光東	ルーメン	lm	cd sr ^(c)	cd
照度	ルクス	lx	lm/m^2	m ⁻² cd
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	$m^2 s^{-2}$
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	$m^2 s^{-2}$
酸素活性	カタール	kat		s ⁻¹ mol

酸素活性(カタール) kat [s¹ 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)へルツは周頻現象についてのみ、ペラ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)セン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。
 (d)やレシウス度はケルビンの特別な名称で、1.温度を表すために使用される。それシウス度とケルビンの
 (d)かんジス度はケルビンの特別な名称で、1.温度差が素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

	SI 組立単位			
組立量	名称	記号	SI 基本単位による 表し方	
粘度	パスカル秒	Pa s	m ⁻¹ kg s ⁻¹	
カのモーメント	ニュートンメートル	N m	m ² kg s ⁻²	
表 面 張 九	ニュートン毎メートル	N/m	kg s ⁻²	
角 速 度	ラジアン毎秒	rad/s	m m ⁻¹ s ⁻¹ =s ⁻¹	
角 加 速 度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s^2	$m m^{-1} s^{-2} = s^{-2}$	
熱流密度,放射照度	ワット毎平方メートル	W/m ²	kg s ⁻³	
熱容量、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)	$m^2 s^{-2} K^{-1}$	
比エネルギー	ジュール毎キログラム	J/kg	$m^{2} s^{2}$	
熱伝導率	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s ⁻³ K ⁻¹	
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ⁻¹ kg s ⁻²	
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	m kg s ⁻³ A ⁻¹	
電 荷 密 度	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ⁻³ s A	
表 面 電 荷	「クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ² 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 卒	ファラド毎メートル	F/m	$m^{-3} kg^{-1} s^4 A^2$	
透磁 率	ペンリー毎メートル	H/m	m kg s ⁻² A ⁻²	
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mol	$m^2 kg s^2 mol^1$	
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)	$m^2 kg s^{-2} K^{-1} mol^{-1}$	
照射線量(X線及びγ線)	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ s A	
吸収線量率	グレイ毎秒	Gy/s	$m^{2} s^{-3}$	
放 射 強 度	ワット毎ステラジアン	W/sr	$m^4 m^{-2} kg s^{-3} = m^2 kg s^{-3}$	
放 射 輝 度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	$W/(m^2 sr)$	m ² m ⁻² kg s ⁻³ =kg s ⁻³	
酵素活性濃度	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	名称	記号	乗数	名称	記号
10^{24}	э 9	Y	10 ⁻¹	デシ	d
10^{21}	ゼタ	Z	10 ⁻²	センチ	с
10^{18}	エクサ	Е	10^{-3}	ミリ	m
10^{15}	ペタ	Р	10^{-6}	マイクロ	μ
10^{12}	テラ	Т	10 ⁻⁹	ナノ	n
10^{9}	ギガ	G	10^{-12}	ピコ	р
10^{6}	メガ	М	10^{-15}	フェムト	f
10^{3}	+ 1	k	10^{-18}	アト	а
10^{2}	ヘクト	h	10^{-21}	ゼプト	z
10^1	デ カ	da	10^{-24}	ヨクト	У

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=60 s		
時	h	1 h =60 min=3600 s		
日	d	1 d=24 h=86 400 s		
度	٥	1°=(π/180) rad		
分	,	1'=(1/60)°=(π/10 800) rad		
秒	"	1"=(1/60)'=(π/648 000) rad		
ヘクタール	ha	1 ha=1 hm ² =10 ⁴ m ²		
リットル	L, 1	1 L=1 l=1 dm ³ =10 ³ cm ³ =10 ⁻³ m ³		
トン	t	$1 \pm 10^3 \text{ kg}$		

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	ŀ	eV	1 eV=1.602 176 53(14)×10 ⁻¹⁹ J
ダル	ŀ	\sim	Da	1 Da=1.660 538 86(28)×10 ⁻²⁷ kg
統一原于	子質量単	单位	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=0.1MPa=100 kPa=10 ⁵ Pa	
水銀柱ミリメートル	mmHg	1 mmHg≈133.322Pa	
オングストローム	Å	1 Å=0.1nm=100pm=10 ⁻¹⁰ m	
海 里	М	1 M=1852m	
バーン	b	$1 \text{ b}=100 \text{ fm}^2=(10^{\cdot 12} \text{ cm})^2=10^{\cdot 28} \text{m}^2$	
ノット	kn	1 kn=(1852/3600)m/s	
ネーパ	Np	の単位しの教徒的な問題は	
ベル	В	31単位との数値的な関係は、 対数量の定義に依存。	
デシベル	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	Р	1 P=1 dyn s cm ⁻² =0.1Pa s			
ストークス	St	$1 \text{ St} = 1 \text{ cm}^2 \text{ s}^{\cdot 1} = 10^{\cdot 4} \text{ m}^2 \text{ s}^{\cdot 1}$			
スチルブ	sb	$1 \text{ sb} = 1 \text{ cd cm}^{-2} = 10^4 \text{ cd m}^{-2}$			
フォト	ph	1 ph=1cd sr cm ⁻² =10 ⁴ lx			
ガル	Gal	1 Gal =1cm s ⁻² =10 ⁻² ms ⁻²			
マクスウエル	Mx	$1 \text{ Mx} = 1 \text{ G cm}^2 = 10^{-8} \text{Wb}$			
ガウス	G	$1 \text{ G} = 1 \text{Mx cm}^{-2} = 10^{-4} \text{T}$			
エルステッド ^(a)	Oe	1 Oe ≙ (10 ³ /4 π)A m ⁻¹			
(a) 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	ユ		IJ	-	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq	
$\scriptstyle u$	\sim	ŀ	ゲ	\sim	R	$1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{C/kg}$	
ラ				ĸ	rad	1 rad=1cGy=10 ⁻² Gy	
$\scriptstyle u$				ム	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv	
ガ		$\boldsymbol{\mathcal{V}}$		7	γ	$1 \gamma = 1 \text{ nT} = 10^{-9} \text{T}$	
フ	T.		N	Ξ		1フェルミ=1 fm=10 ⁻¹⁵ m	
メー	ートル	/系	カラゞ	ット		1 メートル系カラット= 0.2 g = 2×10 ⁻⁴ kg	
ŀ				N	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa	
標	準	大	気	圧	atm	1 atm = 101 325 Pa	
力			IJ	-	cal	1 cal=4.1858J(「15℃」カロリー), 4.1868J (「IT」カロリー), 4.184J(「熱化学」カロリー)	
3	ク			~	ц	$1 \mu = 1 \mu m = 10^{-6} m$	