JAEA-Review 2009-051



高レベルおよび TRU 廃棄物地層処分の 性能評価のための JAEA 熱力学データベース: セレンの熱力学データ選定

JAEA Thermodynamic Database for Performance Assessment of Geological Disposal of High-level and TRU Wastes: Selection of Thermodynamic Data of Selenium

土井 玲祐 北村 暁 油井 三和

Reisuke DOI, Akira KITAMURA and Mikazu YUI

地層処分研究開発部門 地層処分基盤研究開発ユニット

Geological Isolation Research Unit Geological Isolation Research and Development Directorate

KEVIEN

February 2010

日本原子力研究開発機構

Japan Atomic Energy Agency

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(<u>http://www.jaea.go.jp</u>) 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

高レベルおよび TRU 廃棄物地層処分の性能評価のための JAEA 熱力学データベース: セレンの熱力学データ選定

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 土井 玲祐,北村 暁,油井 三和⁺

(2009年12月10日受理)

高レベル放射性廃棄物および TRU 廃棄物の地層処分の性能評価に用いるための熱力学データ ベースの整備の一環として、セレン(Se)の熱力学データを選定した.熱力学データ選定にあたっ ては、すでに Se 熱力学データベースを公開している経済協力開発機構/原子力機関(OECD/NEA) の選定値を引用した.地層処分の性能評価上重要な熱力学データについては、OECD/NEA の選定過 程を調査し、その選定過程に留意点が見出されたものについては、本報告に記した.また、熱力学デ ータの信頼性が不十分であることを理由に OECD/NEA が選定していない鉄セレン化合物について は、地層処分の性能評価にとって重要なものなので、掲載するデータの品質および今後のデータ整 備の必要性を明記しつつ、暫定値として JAEA-TDB に取り込んだ.

^{*} 地層処分研究開発部門

JAEA Thermodynamic Database for Performance Assessment of Geological Disposal of High-level and TRU Wastes: Selection of Thermodynamic Data of Selenium

Reisuke DOI, Akira KITAMURA and Mikazu YUI⁺

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

(Received December 10, 2009)

Within the scope of the JAEA thermodynamic database project for performance assessment of geological disposal of high-level and TRU radioactive wastes, the selection of the thermodynamic data on the inorganic compounds and complexes of selenium was carried out. Selection of thermodynamic data of selenium was based on a thermodynamic database of selenium published by the Nuclear Energy Agency in the Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA). The remarks of a thermodynamic database by OECD/NEA found by the authors were noted in this report and then thermodynamic data was reviewed after surveying latest literatures. Some thermodynamic values of iron selenides were not selected by the OECD/NEA due to low reliability. But they were important for the performance assessment of geological disposal of radioactive wastes, so we selected them as a tentative value with specifying reliability and needs of the value to be determined.

Keywords: Thermodynamic Database, Performance Assessment, Geological Disposal, High-level Radioactive Waste, TRU Waste, Data Selection, Selenium

⁺ Geological Isolation Research and Development Directorate

目次

1.	緒言	·	1
	1.1	放射性廃棄物の地層処分	1
	1.2	熱力学データベースの整備状況	1
2.	JAE	A-TDB 整備のための基本方針	3
	2.1	全体計画概要	3
	2.2	セレンの熱力学データ選定方針	3
3.	NEA	-TDB の留意点	5
	3.1	鉄セレン化合物の熱力学データ	5
	3.2	Se(IV)/Se(VI)の標準電極電位	5
	3.3	Se ²⁻ (n=2-4)の熱力学データ	6
4.	セレ	ンの熱力学データの選定	8
	4.1	NEA-TDB で採用されなかった熱力学データ追加の検討	8
	4	4.1.1 鉄セレン化合物の標準生成自由エネルギー	8
	4	4.1.2 鉄セレン化合物を含む反応式の平衡定数および反応の自由エネルギー	8
	4.2	Se(IV)/Se(VI)の酸化還元平衡に関わる熱力学データ	10
	4.3	NEA-TDB 以降の熱力学データの追加の検討	10
5.	結言	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	11
謝括	辛		11
参表	与文献	4 \	

Contents

1.	Intro	oduction	.1
	1.1	Geological Disposal of Radioactive Waste	. 1
	1.2	Status of Thermodynamic Database for Performance Assessment	. 1
2.	Basi	ic Policy on Selection of Thermodynamic Data for JAEA-TDB	.3
	2.1	General Approach	.3
	2.2	Brief Procedure of Selection of Thermodynamic Data of Selenium	.3
3.	Ren	narks of NEA-TDB	.5
	3.1	Thermodynamic Data of iron-selenides	.5
	3.2	The Standard Electrode Potential of Se(IV)/Se(VI)	.5
	3.3	Thermodynamic Data of Se _n ²⁻ (n=2-4)	.6
4.	Deta	ailed Procedure of Selection of Thermodynamic Data of Selenium	.8
	4.1	Discussion of Additional Selection of Thermodynamic Data	.8
		4.1.1 The Standard Molar Gibbs Energy of Formation of Iron Selenides	.8
		4.1.2 The Equilibrium Constant and the Molar Gibbs Energy of Reaction for Iron Selenides	.8
	4.2	Discussion of Thermodynamic Data of the Redox Couple Se(IV)/Se(VI)	10
	4.3	Discussion of Thermodynamic Data after NEA-TDB	10
5.	Con	clusions	11
Ack	nowl	edgement	11
Refe	erence	25	12

1. 緒言

1.1 放射性廃棄物の地層処分

高レベルおよび地層処分対象の TRU 廃棄物の地層処分において,ガラス等の固化体に含まれ る放射性廃棄物の移行を支配する最も可能性の高い経路は,固化体に地下水が接触することによ り放射性核種が地下水中に溶出し,人工バリアおよび天然バリア中を移行していく経路であると 考えられる.したがって,様々な状態にある地下水中における放射性核種の溶解,人工バリアや 天然バリアに対する収着および拡散挙動は,地層処分の性能評価を行う上で重要な情報である. 特に,溶解度は地下水中に含まれる放射性核種の濃度の最大値を規定し,錯生成挙動は人工バリ や天然バリアに対する収着および拡散挙動を明らかにするための基盤情報となることから,核種 移行挙動の中でも最も重要であるといえる.この溶解度の評価には,処分環境において想定され る溶解度制限固相の溶解度積や,処分環境で想定される溶液中の化学種分配を推定するための平 衡定数が必要となる.したがって,これらの評価に必要となる熱力学データは不可欠なものであ り,常に最新の知見に基づいた最も確からしいデータを安全評価の実施者が利用可能な状態で整 備しておくことが重要である.

セレン(Se)は高レベル放射性廃棄物の処分システムの性能評価における重要な元素の一つである. 核分裂生成物のひとつである Se-79 は半減期が長く(半減期は 4.8×10⁵ 年¹⁾とも 1.1×10⁶ 年²⁾とも言われている),高レベル放射性廃棄物の地層処分後約 10⁵ 年までは,Se-79 が全線量に大きく寄与すると報告されている³. Se は難溶性なのでガラス固化体表面において固相として沈殿し、ベントナイト間隙水中の Se 濃度はこの固相の溶解度で制限されると考えられる³⁾. したがって、地層処分の性能評価においては、地下水中の Se 濃度を支配している Se 含有固相を特定するとともに、その溶解度を求めることが重要であることから、Se の熱力学データの整備が必要とされている.

1.2 熱力学データベースの整備状況

核燃料サイクル開発機構(Japan Nuclear Cycle Development Institute, JNC)は、1999年にJNC-TDB⁴ を公開した.JNC-TDBにおいては、SeO₃², SeO₄², HSeO₃⁻, H2SeO₃(aq)およびFeSe(cr)以外の熱力学デ ータは、Cross et al.⁵から引用している.SeO₃², HSeO₃⁻及びH₂SeO₃(aq)の熱力学データはSilva et al.⁶から 引用し、SeO₄²の熱力学データはWagman et al.⁷から引用している.FeSe(cr)の熱力学データはMills⁸か ら引用しており、その反応式の平衡定数の導出に必要なFe²⁺の熱力学データは、Robie and Hemingway⁹ から引用している.JNC-TDB⁴は専門家によるレビューを受けており、地層処分場における溶解度を評 価するには十分であるとの評価を与えられている。しかしながら、複数の文献から熱力学データを引 用して平衡定数を求めていることに加え、各熱力学データの信頼性を十分に調査していないので JNC-TDB 内で内部整合性が確保されていない可能性があり、実験に基づく熱力学データの更なる検証 も求められている。

スイス放射性廃棄物管理協同組合(National Cooperative for the Disposal of Radioactive Waste in Switzerland, Nagra)とポール・シェラー研究所(Paul Scherrer Institute, PSI)は、共同でNagra/PSI-TDB¹⁰⁾を 2002 年に公開しており、本熱力学データベースの整備作業は、後述する経済協力開発機構/原子力機関 (OECD/NEA)による Se の熱力学データベース(NEA-TDB)¹¹⁾が公開される前に行われた. そこで、Nagra/PSI-TDB¹⁰⁾の整備作業が進行している頃にOECD/NEA がすでに公開していた Se 以外の熱力学デ

ータベース (例えば, Rard et al.¹²⁾)に掲載されていたコアデータ (Auxiliary Data) としての Se 熱力学 データ(SeO₃²⁻, H₂Se(aq), HSeO₃ および HSeO₄ についての熱力学データ)が, Nagra/PSI-TDB¹⁰に引用され ている.また, Nagra/PSI-TDB¹⁰では, Séby et al.¹³⁾も参考にしてデータを選定している.しかしながら, Séby et al.¹³⁾における鉄セレン化合物を含む種々の固相の熱力学データについては、極端に溶解度積が 小さいことに加え,これらの固相が処分環境で溶解度制限固相になり得るのか疑問であるとして Nagra/PSI-TDB¹⁰では未選定である.

NEA-TDB¹¹⁾ が公開された後に、スウェーデン核燃料・廃棄物管理会社(Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co., SKB)も 2006 年に熱力学データベース(SKB-TDB)¹⁴⁾ を公開している. しかしながら, SKB-TDB¹⁴⁾ の熱力学データ整備作業は、NEA-TDB¹¹⁾ が公開される前に終了されたため、NEA-TDB¹¹⁾ の内容は反映されていない. Nagra/PSI-TDB¹⁰⁾と同様に、OECD/NEA による Se 以外の熱力学データベース (例えば、Rard et al.¹²⁾)に掲載されていたコアデータ (Auxiliary Data) としての Se 熱力学データ は、SKB-TDB¹⁴ に引用されている. SKB-TDB¹⁴ は、主に Séby et al.¹³⁾および Elrashidi et al.¹⁵⁾に基づい ており、地層処分の性能評価上重要な鉄セレン化合物を含めた種々の固相の熱力学データについては、Séby et al.¹³⁾, Wagman et al.⁷⁾, Mills⁸⁾および Baeyens and McKinley¹⁶⁾等に基づき選定している. ただし、熱力学データの信頼性が十分確認できなくても、データが存在すれば選定するという方針であり、硫 黄(S)の化学アナログによるデータ選定も行っている.

このように、Se が地層処分の性能評価上重要な元素であることは諸外国でも認識されており、 OECD/NEA において NEA-TDB^{II)} が整備されている.この NEA-TDB^{II)} では、世界各国から専門家が 集まり、実験的に取得された熱力学データに関する文献調査を行い、実験手法や実測値についてレビ ューを実施し、信頼できる値のみを選定している.このことから、NEA-TDB^{II)} に選定されている熱力 学データの信頼性は非常に高いといえる一方で、その存在が確実と考えられる化合物もしくは溶存化 学種についても、熱力学データの信頼性が低い場合には選定していない.このため、地層処分の性能 評価を行うためには、NEA-TDB^{II)} で選定されていない化合物の熱力学データをも必要とする場合が生 じる.

本報告では、NEA-TDB¹¹⁾を基盤にしつつ、さらに性能評価で必要とするであろう熱力学データについては追加で選定することにした.また、地層処分の性能評価上重要な熱力学データについては、 OECD/NEAの選定過程を調査し、その選定過程に留意点が見出されたものについては、本報告に記載 した.以上の手順で得られた Se の熱力学データを、JNC-TDB⁴⁾更新版としての日本原子力研究開発機 構の熱力学データベース(JAEA-TDB)の選定値として選定することとした.

2. JAEA-TDB 整備のための基本方針

2.1 全体計画概要

詳細な全体計画は別途公開されている¹⁷ことから、本報告では概要のみを記す.

JAEA-TDBにて掲載する熱力学データは、標準生成自由エネルギー($\Delta_{f}G^{\circ}_{m}$)、反応の平衡定数 (K°)、反応の自由エネルギー($\Delta_{r}G^{\circ}_{m}$ =-RT ln K° ; Rは気体定数、Tは絶対温度)の掲載を必須と し、熱力学データの重要性および値の信頼性に応じて、エンタルピー($\Delta_{r}H^{\circ}_{m}$)やエントロピー($\Delta_{r}S^{\circ}_{m}$)、 熱容量等の掲載を推奨するものとする.

熱力学データを掲載する化学形は、主に自然界や地層処分環境中に存在すると考えられるものと する.例えば金属元素の場合、ハロゲン、酸素、炭素、窒素、硫黄、リンなどと形成される化合物 もしくは錯イオンに対する熱力学データが主な掲載対象となる.有機配位子に対する錯生成定数は、 OECD/NEAの熱力学データベースの掲載値¹⁸⁾のみを掲載対象として検討する.性能評価上の対象元 素ではないものの掲載を必要とする熱力学データについては、OECD/NEAの熱力学データベース (例えば、M. Rand et al.¹⁹) に掲載されているコアデータ(Auxiliary Data)を用いるものとする.

実験データが存在する場合のデータレビューおよびレビューに基づく値の選定は、原則として、 OECD/NEAのガイドライン(TDB-1²⁰)に従うこととする.このガイドラインに従って熱力学デー タが収集および選定されている熱力学データベース(例えばNEA-TDB^{11)や}Lothenbach et al.²¹)が整 備されているものについては、最新の文献を調査し、データベースの内部整合性を確認した上で引 用することを許可する.その他の場合は、文献調査により熱力学データを収集した上で、収集した 熱力学データのレビューおよびデータ選定を行う.

実験データが存在しない場合で、化学的類似元素に対する値が存在する場合には、化学的類似元素の値に基づく値やモデルによる推定値の適用を検討する.また、十分に信頼性の高い熱力学データの提示ができない場合であっても、地層処分の安全評価においてその存在に留意する必要がある 固相および錯体種の熱力学データについては、掲載するデータの品質および今後のデータ整備の必要性を明記しつつ、暫定値を採用する場合がある.

全ての熱力学データは、温度298.15 K、イオン強度0における値で整備する.活量係数補正には、 原則としてイオン相互作用理論(SIT)¹¹に基づくモデルを用いることとする.

2.2 セレンの熱力学データ選定方針

Se については OECD/NEA において数多くの熱力学データが専門家によってレビューされ、熱力学 データベースが公開されていることから、原則として、このデータベースの熱力学データを抽出する こととした. $\Delta_f G^{\circ}_m$, K° および $\Delta_f G^{\circ}_m$ が OECD/NEA に選定されている化学種のものは、JAEA-TDB にそのまま引用することとする. $\Delta_f G^{\circ}_m$ が選定されていたとしても、 $\log_{10} K^{\circ}$ が選定されていない化学 種の熱力学データについては、地球化学計算に熱力学データを適用できないので、JAEA-TDB には選 定しないこととする. また、OECD/NEA が選定している気相化学種の熱力学データは、地層処分の性 能評価においては重要ではないので、JAEA-TDB には引用しないこととする.

OECD/NEA によるデータベースは網羅性に欠けることから、一部化学種の値の追加を検討する.地 層処分の性能評価における重要化学種で、データの存在が確認されているにもかかわらず NEA-TDB ガイドラインに準じておらず OECD/NEA が選定していないデータは、網羅性確保の観点から暫定値と して JAEA-TDB に取り込むこととする.

NEA-TDB 以降に Se の熱力学データを報告している文献があれば、その熱力学データの品質を調査の上、JAEA-TDB への追加を検討する.

3. NEA-TDB の留意点

3.1 鉄セレン化合物の熱力学データ

前述したように、地層処分の性能評価においては、地下水中の Se 濃度を支配している Se 含有 固相を特定することが重要であるが、地下処分場においては、鉄(Fe)から成るオーバーパックの 腐食によって Fe²⁺がベントナイト間隙水中に十分存在することから、ベントナイト間隙水中の Se が Fe と反応することで Fe-Se 固相が生成されることが考えられる.

Iida et al.²²⁾は、低酸素雰囲気 Fe 共存系の熱力学的に FeSe₂の生成が期待される条件で、Se の溶解度制限固相を特定するために過飽和法および未飽和法により Se の溶解度実験を実施した.平衡に到達した後の固相のX線回折により、過飽和法による析出固相からは Se(cr)および FeSe₂(cr)を特定し、未飽和法による固相からは FeSe(cr)、FeSe₂(cr)および Fe₇Se₈(cr)を特定している.また、支配的な溶存種は HSe⁻⁻であった.

Doi et al.²³⁾は、還元雰囲気 Fe 共存系において過飽和法で Se 溶解実験を実施し、析出した固相のX線回折により Se(cr), FeSe(cr)および FeSe₂(cr)を特定した.さらに、X線回折のピーク強度の経時変化により Se(cr)から Fe-Se 固相(FeSe(cr)および FeSe₂(cr))への変遷を確認している.この研究においても支配的な溶存種は HSe⁻であった.

これら2報によれば、ベントナイト間隙水中でFe-Se 化合物の生成が期待されるので、熱力学 データベースの網羅性確保の観点から、Fe-Se 化合物の熱力学データは地層処分の性能評価のた めのデータベースに整備する必要がある.しかしながら、NEA-TDB においては Fe-Se 化合物で ある FeSe₂(cr)、 β -Fe_{1.04}Se、 γ -Fe₃Se₄、および α -Fe₇Se₈の Δ (G^om, K^oおよび Δ G^om が選定されていない. ただし、これらの Fe-Se 化合物の標準生成エンタルピー(Δ cH^om</sub>)および標準モルエントロピー(S^om) については、実験研究によって得られた NEA-TDB ガイドラインに従う信頼性のあるデータが存 在しているので NEA-TDB に選定されている. OECD/NEA は、自身が選定したこれらの Fe-Se 化 合物の Δ H^om および S^om に加えて、選定した Se(cr)の S^om を用いてこれらの Fe-Se 化合物の Δ G^om を算出している. FeSe₂(cr)を例に、OECD/NEA による Δ G^om の算出過程を(1)式に示す.

 $\Delta_{\rm f} G^{\circ}_{\rm m} ({\rm FeSe}_2({\rm cr})) =$

 $\Delta_{\rm f} {\rm H}^{\circ}_{\rm m} ({\rm FeSe}_2({\rm cr})) - 298.15 \{ {\rm S}^{\circ}_{\rm m} ({\rm FeSe}_2({\rm cr})) - {\rm S}^{\circ}_{\rm m} ({\rm Fe}({\rm cr})) - 2 {\rm S}^{\circ}_{\rm m} ({\rm Se}({\rm cr})) \}$ (1)

しかしながら、計算過程において用いた Fe(cr)の S°_m(OECD/NEA は、Chase, Jr.²⁴⁾から引用)につい てはNEA-TDB ガイドラインに従う信頼性のあるデータではないために、算出して求めた FeSe₂(cr), β -Fe_{1.04}Se, γ -Fe₃Se₄, および α -Fe₇Se₈ の Δ_f G°_m は選定値とせずに、レビュー当時の最適値として Appendix の別表に表記するに留めている¹¹⁾. したがって、NEA-TDB は地層処分の性能評価にと って十分とは言えず、地層処分の性能評価に用いるための熱力学データベースを整備するにあた っては、NEA-TDB に FeSe₂(cr), β -Fe_{1.04}Se, γ -Fe₃Se₄, および α -Fe₇Se₈ の Δ_f G°_m, K°および Δ_f G°_m を 追加することが必要である.

3.2 Se(IV)/Se(VI)の標準電極電位

Se は酸化還元に鋭敏であるが、Se の酸化還元平衡については過去にほとんど研究されていない. OECD/NEA は、自身が選定した Se(IV)/Se(VI)の標準電極電位(E^0)は唯一の実験研究に基づいてお り、この E^0 については更なる詳細な議論が必要であると述べている. OECD/NEA が選定した Se(IV)/Se(VI)の E^0 については、Sherrill and Izard²⁵⁾による実験研究のみに基づいている. この実験は、 臭素および臭化物を含む系で実施され、(2)式の平衡定数を導出している.

 $Br_2(aq) + H_2SeO_3(aq) + H_2O(l) = HSeO_4^{-} + 3H^{+} + 2Br^{-}$ (2)

また, H₂SeO₃(aq)と臭化物との錯生成に関する(3)式の平衡定数を決定した Milne and Lahaie²⁶⁾の報告がある.

 $H_2SeO_3(aq) + Br^{-} + H^{+} = HSeO_2Br(aq) + H_2O(l)$ (3)

OECD/NEA はこの2 報について、(3)式に従うと Sherrill and Izard²⁵⁾の実験条件では HSeO₂Br(aq)が 存在するにもかかわらず、(2)式の平衡定数は HSeO₂Br(aq)の存在を考慮せずに実際より大きい H₂SeO₃(aq)の濃度を用いて導出されている点を指摘している.しかしながら、OECD/NEA は、 HSeO₃Br(aq)の存在を考慮して(2)式の平衡定数を補正するにしても、その補正はかなり小さいとし て、Sherrill and Izard²⁵⁾が決定した平衡定数を補正せずに用い、Se(IV)/Se(VI)の酸化還元平衡に関わ る(4)式の $\Delta_{G^{\circ}m}$ 値を選定している.

$$HSeO_4^{-} + 3H^{+} + 2e^{-} = H_2SeO_3(aq) + H_2O(l), \Delta_r G^{\circ}_m = -212.85 \pm 1.00 \text{ kJ/mol}$$
 (4)

一方,OECD/NEA が選定した(4)式の $\Delta_r G^{\circ}_m$ 値から計算される E^0 に基づけば Se(IV)が安定に存 在すると考えられる電位, pH 域において, Se(VI)の存在を確認した報告 ^{27,28)} がある. このことは, Se(IV)/Se(VI)の真の E^0 は,OECD/NEA の選定値より卑であることを示唆し,Se(IV)/Se(VI)の E^0 に は再考の余地があると考えられる.

3.3 Sen²⁻(n=2-4)の熱力学データ

Lyons and Young²⁹は、1/2Se₂²/Se², 1/3Se₃²/Se², 1/4Se₄²/Se²の酸化還元平衡の式量電位³⁰⁾を水酸化 カリウム(KOH)溶液(304K, 1M)中で測定している. OECD/NEA は、Lyons and Young²⁹⁾が報告 している KOH 溶液(304K, 1M)中における式量電位をもとに、SIT により以下のように(5)式、(6) 式および(7)式の E⁰を算出している.

$Se_2^{2-} + 2e^- \Leftrightarrow 2Se^{2-}, E^0 = -0.749 \pm 0.010 \text{ V vs. SHE}$	(5)
$Se_3^{2-} + 4e^- \Leftrightarrow 3Se^{2-}, E^0 = -0.739 \pm 0.010 \text{ V vs. SHE}$	(6)
$Se_4^{2-} + 6e^- \Leftrightarrow 4Se^{2-}, E^0 = -0.720 \pm 0.010 \text{ V vs. SHE}$	(7)

ただし、OECD/NEA は(5)式、(6)式および(7)式の E^0 を算出する際に、 Se_n^2 とカリウムイオン(K⁺) との間のイオン相互作用係数(ϵ (Se_n^2 , K⁺))の文献値が存在しなかったため、-2 価のイオンと K⁺ との間のイオン相互作用係数の平均値-0.06 (kg·mol⁻¹)を ϵ (Se_n^2 , K⁺)として代用している.また、 (5)式,(6)式および(7)式の $\Delta_H^{\circ}_m$ についても文献値が存在しなかったため、温度補正を考慮せずに 304Kにおける値を標準状態のものとして(5)式,(6)式および(7)式の E^0 を算出している.

さらに、OECD/NEA は、(5)式、(6)式および(7)式の E^0 および選定した Se²の Δ_{f} G^omから、Se²の Δ_{f} G^om から、Se²の Δ_{f} G^om を算出している. したがって、NEA-TDB における Se²の熱力学データの信頼性は、(5)式、(6) 式および(7)式の E^0 の信頼性に依存している. 前述したように、 E^0 の導出にあたり必要な ϵ (Se², K⁺)や(5)式、(6)式および(7)式の Δ_{r} H^om についての文献値が存在しないので、現状としては OECD/NEA が選定した Se²に関わる熱力学データを JAEA-TDB にも引用することとする. ただ し、Se²に関わる熱力学データについては、そのイオン相互作用係数や Δ_{r} H^om についての新たな情 報を確認しつつ、今後も議論が必要と考えられる.

4. セレンの熱力学データの選定

4.1 NEA-TDB で採用されなかった熱力学データ追加の検討

3.1 で述べたように、NEA-TDB では、地層処分の性能評価において重要と思われる FeSe₂(cr)、 β -Fe_{1.04}Se、 γ -Fe₃Se₄、および α -Fe₇Se₈の Δ G^om, K^oおよび Δ G^om</sub>が選定されていない. Se の JAEA-TDB では、網羅性を重視し、これらの Fe-Se 化合物の Δ G^om, K^oおよび Δ G^om</sub>についても暫定値として 採用することとする. NEA-TDB の選定値は小数点以下第 3 位まで求めてあるので、JAEA-TDB の暫定値も同様に小数点以下第 3 位まで求めることとする. JAEA-TDB として最終的に選定され た全ての熱力学データを Table 1 に示す. Table 1 において、以下の議論で採用された暫定値は斜 体で示す.

4.1.1 鉄セレン化合物の標準生成自由エネルギー

暫定値としての FeSe₂(cr), β -Fe_{1.04}Se, γ -Fe₃Se₄, および α -Fe₇Se₈の Δ_f G°_mを求めるのに, (1)式の ように, OECD/NEA が選定したこれらの Fe-Se 化合物の Δ_f H°_mおよび S°_mに加えて, OECD/NEA が選定した Se(cr)の S°_mを用いて算出することとした. この際, Fe(cr)の S°_mは Chase, Jr.²⁴⁾および Robie and Hemingway⁹の値を用いた. この二つの文献に記載されている Fe(cr)の S°_mの値を Table 2 にまとめた.

FeSe₂(cr)を例にして暫定値の算出過程を説明する. Chase, Jr.²⁴⁾から引用した Fe(cr)の S°mを用いて Δ_{f} G°m $\epsilon(1)$ 式により算出すると、 Δ_{f} G°m (FeSe₂(cr)) = -101.300±15.000(kJ.mol⁻¹)になり、この値は OECD/NEA が最適値として Appendix の別表に載せたものである. 一方、Robie and Hemingway⁹⁾ から引用した Fe(cr)の S°mを用いて Δ_{f} G°m $\epsilon(1)$ 式により算出すると、 Δ_{f} G°m (FeSe₂(cr)) = -101.404± 15.004(kJ.mol⁻¹)になる. そこで、誤差評価に関する OECD/NEA のガイドライン (TDB-3³¹⁾) に従 って、これら二つの Δ_{f} G°m (FeSe₂(cr))を包含するように誤差を大きくし、 Δ_{f} G°m (FeSe₂(cr)) = -101.352 ±15.056(kJ.mol⁻¹)を暫定値として JAEA-TDB に採用する. β -Fe_{1.04}Se, γ -Fe₃Se₄, および α -Fe₇Se₈ の Δ_{f} G°m についても同様に、Chase、Jr.²⁴⁾あるいは Robie and Hemingway⁹から引用した Fe(cr)の S°m を 用いて算出される二つの Δ_{f} G°m を包含するように誤差を大きくした Δ_{f} G°m を暫定値として JAEA-TDB に採用する.

4.1.2 鉄セレン化合物を含む反応式の平衡定数および反応の自由エネルギー

3.1 で述べたように、Iida et al.²²⁾ および Doi et al.²³⁾ の還元雰囲気 Fe 共存系における Se 溶解実験 において、Fe-Se 化合物の析出が確認され、溶存種は HSe⁻であった. そこで、暫定値として、FeSe₂(cr)、 β -Fe_{1.04}Se、 γ -Fe₃Se₄、および α -Fe₇Se₈の K^oおよび $\Delta_{q}G^{o}_{m}$ を選定する反応式は、これら Fe-Se 化合物 から HSe⁻への溶解反応で表される(8)、(9)、(10)および(11)式とした. (8)、(9)、(10)および(11)式の K^o および $\Delta_{q}G^{o}_{m}$ を求めるのに、Fe²⁺の $\Delta_{f}G^{o}_{m}$ は Robie and Hemingway⁹⁾から引用し(Chase, Jr.²⁴⁾には、 Fe²⁺の $\Delta_{f}G^{o}_{m}$ が記載されていない.)、HSe⁻の $\Delta_{f}G^{o}_{m}$ は OECD/NEA の選定値を用い、FeSe₂(cr)、 β -Fe_{1.04}Se、 γ -Fe₃Se₄、および α -Fe₇Se₈の $\Delta_{f}G^{o}_{m}$ は 4.1.1 で述べた JAEA-TDB の暫定値を用いた. 算出 された暫定値としての K^oおよび $\Delta_{c}G^{o}_{m}$ を以下に示す.

Fe²⁺ + 2HSe⁻ \Leftrightarrow FeSe₂(cr) + 2H⁺ +2e⁻, log₁₀K^o = 17.220 ± 2.754, $\Delta_r G^o{}_m = -98.294 \pm 15.718 (kJ.mol⁻¹)$

(8)

 $1.04 \text{Fe}^{2+} + \text{HSe}^{-} + 0.08 \text{e}^{-} \Leftrightarrow \beta - \text{Fe}_{1.04} \text{Se} + \text{H}^{+},$ $\log_{10} K^{\circ} = 3.503 \pm 0.870, \ \Delta_{r} \text{G}^{\circ}_{m} = -19.995 \pm 4.969 (\text{kJ.mol}^{-1})$ (9) $3 \text{Fe}^{2+} + 4 \text{HSe}^{-} \Leftrightarrow \gamma - \text{Fe}_{3} \text{Se}_{4} + 4 \text{H}^{+} + 2 \text{e}^{-},$ $\log_{10} K^{\circ} = 25.908 \pm 5.547, \ \Delta_{r} \text{G}^{\circ}_{m} = -147.882 \pm 31.665 (\text{kJ.mol}^{-1})$ (10) $7 \text{Fe}^{2+} + 8 \text{HSe}^{-} \Leftrightarrow \alpha - \text{Fe}_{7} \text{Se}_{8} + 8 \text{H}^{+} + 2 \text{e}^{-},$

$$\log_{10}K^{\circ} = 36.274 \pm 5.175, \ \Delta_{\rm r}G^{\circ}{}_{\rm m} = -207.055 \pm 29.541 (kJ.mol^{-1})$$
 (11)

JNC-TDB⁴においては, FeSe₂(cr), FeSe および HSe について, (12)式, (13)式および(14)式の log₁₀K^o が選定されている. ただし, JNC-TDB⁴ においては, Mills(1974)⁸の Fe_{1.04}Se(s)の熱力学データを FeSe(cr)のものとして(13)式の log₁₀K^oを算出しているので,本報告においては JNC-TDB における FeSe(cr)を Fe_{1.04}Se(s)と記載する.

$$FeSe_{2}(cr) + 8H_{2}O \Leftrightarrow 2SeO_{4}^{2-} + Fe^{2+} + 16H^{+} + 14e^{-}, \ \log_{10}K^{\circ} = -181.1$$
(12)

$$Fe_{1.04}Se(s) + 4H_2O \Leftrightarrow SeO_4^{2-} + 1.04Fe^{2+} + 8H^+ + 8.08e^-, \ \log_{10}K^\circ = -84.78$$
(13)

$$\text{SeO}_4^{2^\circ} + 9\text{H}^+ + 8\text{e}^\circ \iff \text{HSe}^\circ + 4\text{H}_2\text{O}, \ \log_{10}K^\circ = 81.16$$
 (14)

これらの JNC-TDB⁴における log₁₀K[®]をもとに, (8)式および(9)式の反応式の log₁₀K[®]を算出すると, 以下の値が得られる.

 $\operatorname{Fe}^{2^+} + 2\operatorname{HSe}^{-} \Leftrightarrow \operatorname{FeSe}_2(\operatorname{cr}) + 2\operatorname{H}^{+} + 2\operatorname{e}^{-}, \ \log_{10} K^{\circ} = 18.78$

 $1.04 \text{Fe}^{2+} + \text{HSe}^- + 0.08 \text{e}^- \iff \text{Fe}_{1.04} \text{Se}(\text{s}) + \text{H}^+, \ \log_{10} K^\circ = 3.62$

したがって、JNC-TDB⁴ における FeSe₂(cr), Fe_{1.04}Se(s)および HSe についての \log_{10} K^oは、JAEA-TDB における(8)式および(9)式の \log_{10} K^oの誤差範囲内におさまっていることがわかる.

JAEA-TDB の整備にあたっては、Fe-Se 化合物の $\Delta_{f}G^{\circ}_{m}$ 、K^oおよび $\Delta_{f}G^{\circ}_{m}$ を暫定値として採用し たが、これらの暫定値の信頼性は Fe の熱力学データの信頼性に左右されているので、Fe の熱力 学データに関する最新の知見を収集することが今後の課題として挙げられる.また、暫定値を算 出する際に用いた Fe-Se 化合物の $\Delta_{f}H^{\circ}_{m}$ の誤差が大きいことが原因で、暫定値が持つ誤差も大き くなっている. Fe-Se 化合物の $\Delta_{f}H^{\circ}_{m}$ は OECD/NEA に選定されているとはいえ、これらの $\Delta_{f}H^{\circ}_{m}$ の誤差を小さくすることも今後の課題である.さらに、溶解度実験により Fe-Se 化合物により制 限された Se 濃度を確認することで Fe-Se 化合物の $\Delta_{f}G^{\circ}_{m}$ 、K^oおよび $\Delta_{f}G^{\circ}_{m}$ を実験研究により直接 求めることも今後の課題として挙げられる. 4.2 Se(IV)/Se(VI)の酸化還元平衡に関わる熱力学データ

土井および油井³²⁾は、Se 以外の化学種による影響がない系においてサイクリックボルタンメトリーにより、(15)式で表される Se(IV)/Se(VI)の酸化還元反応の E^0 を測定している.

 $HSeO_3^{-} + H_2O = SeO_4^{2-} + 3H^+ + 2e^-, E^0 = 0.821 \pm 0.167 \text{ V vs. SHE}$ (15)

ただし、(15)式の E^0 は誤差が大きいため、誤差を縮め、信頼性を向上するための更なる実験研究 も必要である.したがって、JAEA-TDB を整備するにあたっては、Se(IV)/Se(VI)の酸化還元平衡 に関わる熱力学データについて、土井および油井³²⁾による(15)式の E^0 を JAEA-TDB に反映せず に、OECD/NEA が選定した(4)式の ΔG°_m 値を選定することとする.ただし、OECD/NEA も指摘 しているように、Se(IV)/Se(VI)の酸化還元平衡については実験研究に基づく更なる議論が今後も 必要と考えられる.

4.3 NEA-TDB 以降の熱力学データの追加の検討

OECD/NEA の熱力学データベースのレビュー対象とならなかった 2004 年以降の公開文献を対象と して文献検索サービス Web of Science³³⁾を用いて文献調査を行ったところ,地層処分の性能評価上重 要と思われる Se の熱力学データを報告しているのは, Iida et al.²²⁾のみであった.そこで, Iida et al.²²⁾ が報告している熱力学データの品質を調査の上, JAEA-TDB への追加を検討した.

3.1 で述べたように、Iida et al.²⁰は、熱力学的に FeSe₂の生成が期待される条件で Se の溶解度実験(過飽和法および未飽和法)を実施したところ、平衡に到達した後の固相のX線回折により、 過飽和法による固相からは Se(cr)および FeSe₂(cr)を特定し、未飽和法による固相からは FeSe(cr), FeSe₂(cr)および Fe₇Se₈(cr)を特定している. Se(cr)は特定されずに Fe-Se 化合物のみが特定されたサ ンプルも含めた全てのサンプルについて、Se 濃度の pH、Eh および Fe 濃度に対する依存性は、 Fe-Se 化合物の溶解反応よりも Se の単体固相(Se(s))の溶解反応によって解釈できるものであった. そこで、Se(cr)の存在を確認できなかったサンプルも含めた全てのサンプルについて、Se の溶解 度を支配していたのは Se(am)あるいはX線回折で特定できないほど少量の Se(cr)であったとして いる.また、支配的な溶存種は HSeであったので、(16)式で表される反応式の log₁₀K^oを導出して いる.

 $Se(s) + H^+ + 2e^- \iff HSe^-, \log_{10}K^\circ = -7.46 \pm 0.11$

(16)

(16)式の $\log_{10}K^{\circ}$ は、NEA-TDB¹¹⁾から引用しJAEA-TDB として選定した Se(cr)および HSe⁻の $\Delta_f G^{\circ}_m$ から算出される値 ($\log_{10}K^{\circ} = -7.62 \pm 0.06$) と誤差の範囲で一致することからも、Iida et al.²²⁾における溶解度制限固相は Se(cr)であったと考えられる. Iida et al.²²⁾は、JAEA-TDB として選定した Se(cr) および HSe⁻の $\Delta_f G^{\circ}_m$ の信頼性を溶解度実験により裏付けてはいるものの、ほとんどのサンプルについて、溶解度制限固相であったと考えられる Se(cr)の存在を固相の X 線回折によって確認していないので、(16)式の $\log_{10}K^{\circ}$ は JAEA-TDB に追加しないこととした.

5. 結言

放射性廃棄物の地層処分の性能評価に用いるための熱力学データベース整備の一環として、Se の熱力学データを選定した.原則として、NEA-TDBの熱力学データを抽出するとともに、地層処分 の性能評価において重要と思われる FeSe₂(cr)、 β -Fe_{1.04}Se, γ -Fe₃Se₄、および α -Fe₇Se₈の Δ_{f} G^o_m、K^o および Δ_{f} G^o_mの値を算出し暫定値として JAEA-TDB に採用した.その他、NEA-TDB の留意点を 指摘した本報告で選定した熱力学データは、JAEA-TDB の信頼性向上に大きく寄与するものと期 待される.

謝辞

Se 熱力学データベースの整備を実施するに当たり、ライ環境化学有限責任会社 ダンパット・ライ 博士および(独)日本原子力研究開発機構 安全研究センター 原子力エネルギー関連施設安全評価 研究ユニット 廃棄物・廃止措置安全評価研究グループ 飯田芳久博士から貴重な御助言をいただい た.ここに記して敬意を表します.

参考文献

- 1. R. Yu, J. Guo, A. Cui, P. Tang, D. Li and D. Li: "Measurement of the half-life of ⁷⁹Se using a radiochemical method", J. Radioanal. Nucl. Chem., 196, No. 1, pp. 165-170 (1995).
- S. Jiang, J. Guo, S. Jiang, C. Li, A. Cui, M. He, S. Wu and S. Li: "Determination of the Half-life of ⁷⁹Se with the Accelerator Mass Spectrometry Technique", Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B, 123, pp. 405-409 (1997).
- 3. 核燃料サイクル開発機構:わが国における高レベル放射性廃棄物地層処分の技術的信頼性-地層処分研究開発第2次取りまとめー分冊3, JNC TN1400 99-023 (1999).
- M. Yui, J. Azuma and M. Shibata: JNC thermodynamic database for performance assessment of high-level radioactive waste disposal system, Japan Nuclear Cycle Development Institute, JNC TN8400 99-070 (1999).
- 5. J. E. Cross, F. T. Ewart and C. J. Tweed: Thermodynamic Modelling with Application to Nuclear Waste Processing and Disposal, AERE-R 12324 (1987).
- 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).
- D. D. Wagman, W. H. Evans, V. B. Parker, R. H. Schumm, I. Halow, S. M. Bailey, K. L. Churney and R. L. Nuttall: "The NBS Tables of Chemical Thermodynamic Properties Selected Values for Inorganic and C1 and C2 Organic Substances in SI Units", Journal of Physical and Chemical Reference Data, Vol. 11, No.2. (1982).
- K. C. Mills: Thermodynamic Data for Inorganic Sulphides Selenides and Tellurides, ISBN 0-408-70537-X, Butterworths & Co (Publishers) Ltd, London (1974).
- R. A. Robie and B. S. Hemingway: Thermodynamic Properties of Minerals and Related Substances at 298.15K and 1Bar (10⁵ Pascals) Pressure and at Higher Temperatures, U.S. Geological Survey Bulletin 2131, Washington (1995).
- W. Hummel, U. Berner, E. Curti, F. J. Pearson and T. Thoenen: Nagra/PSI chemical thermodynamic data base 01/01, National Cooperative for the Disposal of Radioactive Waste in Switzerland (Nagra), Technical Report 02-16 (2002).
- Å. Olin, B. Noläng, L. -O. Öhman, E. G. Osadchii and E. Rosén: Chemical Thermodynamics of Selenium, OECD Nuclear Energy Agency, ELSEVIER, The Netherlands (2005).
- 12. 例えば J. A. Rard, M. H. Rand, G Anderegg and H. Wanner: Chemical thermodynamics of Technetium, Organisation for Economic Co-Operation and Development, North-Holland, Elsevier, ISBN 0-444-503780-1. (1999).
- 13. F. Séby, M. Potin-Gautier, E. Giffaut, G Borge and O. F. X. Donard: "A critical review of thermodynamic data for selenium species at 25°C", Chem. Geol., 171, pp. 173-194 (2001).
- L. Duro, M. Grivé, E. Cera, C. Domènech and J. Bruno: Update of a thermodynamic database for radionuclides to assist solubility limits calculation for performance assessment, Technical Report TR-06-17, Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Co. (SKB) (2006).
- M. Elrashidi, D. Adriano, S. Workman and W. Lindsay: "Chemical-Equilibria of Selenium in Soils A Theoretical Development", Soil Science, 144, pp. 141-152 (1987).

- B. Baeyens and I. G. McKinley: A PHREEQC Database for Pd, Ni and Se, Nagra Technical Report NTB 88-28 (1989).
- 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).
- W. Hummel, G. Anderegg, L. Rao, I. Puigdomènech and O. Tochiyama: Chemical thermodyanmics of compounds and complexes of U, Np, Pu, Am, Tc, Se, Ni and Zr with selected organic ligands, Organisation for Economic Co-Operation and Development, Elsevier B. V. (2005).
- 19. 例えば M. Rand, J. Fuger, I. Grenthe, V. Neck and D. Rai: Chemical thermodynamics of Thorium, Organisation for Economic Co-Operation and Development, Elsevier B. V. (2008).
- 20. 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).
- B. Lothenbach, M. Ochs, H. Wanner and M. Yui: Thermodynamic data for the speciation and solubility of Pd, Pb, Sn, Sb, Nb and Bi in aqueous solution, Japan Nuclear Cycle Development Institute, JNC TN8400 99-011 (1999).
- Y. Iida, T. Yamaguchi, T. Tanaka, A. Kitamura and S. Nakayama: "Determination of Solubility Limiting Solid of Selenium in the Presence of Iron under Anoxic Conditions", Proc. Mobile Fission and Activation Products in Nuclear Waste Disposal, La Baule, France, January 16-19, 2007, pp. 135-145 (2009).
- 23. R. Doi, H. Tachikawa and M. Yui: "Transformation of Selenium Solid Phase in the Presence of Iron under Reducing Conditions", Journal of Nuclear Science and Technology (in press).
- 24. M. W. Chase, Jr.: "Monograph No. 9. NIST-JANAF Thermochemical Tables", J. Phys. Chem. Ref. Data (1998).
- 25. M. S. Sherrill and E. F. Izard: "The reduction potential of selenous acid and the free energy of aqueous selenic acid", J. Am. Chem. Soc., 50, pp. 1665-1675 (1928).
- 26. J. Milne and P. Lahaie: "Bromoselenate(IV) equilibria in aqueous hydrobromic acid", Inorg. Chem., 24, pp. 840-844 (1985).
- 27. Y. Zhang and W. T. Frankenberger, Jr.: "Characterization of selenate removal from drainage water using rice straw", J. Environ. Qual., 32, pp. 441-446 (2003).
- 28. P. Masscheleyn, R. Delaune and W. Patrick: "Arsenic and selenium chemistry as affected by sediment redox potential and pH", J. Environ. Qual., 20, pp. 522-527 (1991).
- 29. L. E. Lyons and T. L. Young: "Alkaline selenide, polyselenide electrolytes: Concentrations, absorption spectra and formal potentials", Aust. J. Chem., 39, pp. 511-527 (1986).
- 30. 渡辺 正, 中林誠一郎: "電子移動の化学-電気化学入門", 朝倉書店, 東京 (1996).
- 31. H. Wanner: TDB-3: "Guidelines for the assignment of uncertainties", Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA) (1999).
- 32. 土井玲祐,油井三和: "Se(IV)/Se(VI)の標準電極電位に関するサイクリックボルタンメトリーに よる実験的研究",原子力バックエンド研究,16(印刷中).
- 33. THOMSON REUTERS: Web of Science, (online) available from http://isiknowledge.com/

Compound	$\Delta_f G^o_m (kJ.mol^{-1})$	Reaction	$\log_{10} K^{\mathrm{o}}$	$\Delta_r G^o_m (kJ.mol^{-1})$	$\Delta_r H^o_m (kJ.mol^{-1})$	$\Delta_r S^o_m (J.K^{-l}.mol^{-l})$
Se(cr)	0.000					
Se ²⁻	128.600 ± 3.000	$Se(cr) + 2e - \Leftrightarrow Se^{2-}$	-22.530 ± 0.526	128.600 ± 3.000		
Se_{2}^{2-}	112.670 ± 6.294	$2Se^{2-} \Leftrightarrow Se_{2}^{2-} + 2e^{-}$	25.320 ± 0.333	-144.530 ± 1.900		
$\mathrm{Se_3}^{2-}$	100.590 ± 9.198	$3 \mathrm{Se}^{2-} \Leftrightarrow \mathrm{Se}_{3}^{2^{-}} + 4 \mathrm{e}^{-}$	49.966 ± 0.333	-285.210 ± 1.900		
$\mathbf{Se_4}^{2-}$	97.580 ± 12.149	$4\mathrm{Se}^{2-} \Leftrightarrow \mathrm{Se_4}^{2^-} + 6\mathrm{e}^-$	73.023 ± 0.333	-416.820 ± 1.900		
$\mathrm{SeO_3}^{2-}$	-362.392 ± 1.756	$\mathrm{HSeO}_{3}^{-} \Leftrightarrow \mathrm{H}^{+} + \mathrm{SeO}_{3}^{2-}$	-8.360 ± 0.230	-47.719 ± 1.313		
$\mathrm{SeO_4}^{2-}$	-439.485 ± 1.431	$\mathrm{HSeO_4^-} \Leftrightarrow \mathrm{H^+} + \mathrm{SeO_4^{}}$	-1.750 ± 0.100	9.989 ± 0.571	-20.800 ± 3.200	-103.267 ± 10.902
HSe	43.471 ± 2.024	$\mathrm{H_2Se(aq)} \Leftrightarrow \mathrm{H^+} + \mathrm{HSe^-}$	-3.850 ± 0.050	21.976 ± 0.285		
H ₂ Se(aq)	21.495 ± 2.003	$H_2Se(g) \Leftrightarrow H_2Se(aq)$	-1.100 ± 0.100	6.279 ± 0.057	-14.700 ± 0.300	-70.363 ± 1.024
HSeO ₃ ⁻	-410.112 ± 1.166	$\mathrm{H}_{2}\mathrm{SeO}_{3}(\mathrm{aq}) \Leftrightarrow \mathrm{H}^{+} + \mathrm{HSeO}_{3}^{-}$	-2.640 ± 0.140	15.069 ± 0.799		
HSeO4 ⁻	-449.474 ± 1.312	$\rm H_2O(l) + H_2SeO_3(aq) \Leftrightarrow 3H^+ + HSeO_4^- + 2e^-$	-37.289 ± 0.175	212.847 ± 1.000		
H ₂ SeO ₃ (aq)	-425.181 ± 0.849	$3H_2O(l) + Se(cr) \Leftrightarrow 2H_2(g) + H_2SeO_3(aq)$	-50.147 ± 0.147	286.240 ± 0.840		
$Se_2Cl_2(1)$	-45.846 ± 4.273	$\operatorname{Se}(\operatorname{cr}) + \operatorname{Se}\operatorname{Cl}_2(\operatorname{g}) \Leftrightarrow \operatorname{Se}_2\operatorname{Cl}_2(\operatorname{l})$	3.150 ± 0.437	-17.979 ± 2.494	-63.000 ± 2.000	-151.000 ± 5.000
SeCN ⁻	136.051 ± 3.800	$HCN(aq) + Se(mono) \Leftrightarrow H^+ + SeCN^-$	-3.574 ± 0.497	20.400 ± 2.838		
PbSeO ₃ (cr)	-457.981 ± 5.985	$Pb^{2^+} + SeO_3^{2^-} \Leftrightarrow PbSeO_3(cr)$	12.500 ± 1.000	-71.351 ± 5.708		
$PbSeO_4(cr)$	-503.108 ± 2.060	$Pb^{2+} + SeO_4^{2-} \Leftrightarrow PbSeO_4(cr)$	6.900 ± 0.250	-39.385 ± 1.427	-4.720 ± 2.530	116.269 ± 9.742
$Tl_2SeO_4(cr)$	-526.546 ± 1.772	$2 \mathrm{Tl}^{+} + \mathrm{SeO}_{4}^{2^{-}} \Leftrightarrow \mathrm{Tl}_{2}^{2} \mathrm{SeO}_{4}(\mathrm{cr})$	3.900 ± 0.150	-22.261 ± 0.856	-43.000 ± 5.000	-69.558 ± 17.014
TISeCN(aq)	93.662 ± 4.156	$TI^+ + SeCN^- \Leftrightarrow TISeCN(aq)$	1.750 ± 0.290	-9.989 ± 1.655		
ZnSeO ₄ (aq)	-599.017 ± 1.493	$\operatorname{Zn}^{2^+} + \operatorname{SeO}_4^{2^-} \Leftrightarrow \operatorname{ZnSeO}_4(\operatorname{aq})$	2.160 ± 0.060	-12.329 ± 0.342	4.600 ± 4.000	56.781 ± 13.465
ZnSeO ₄ 6H ₂ O(cr)	-2018.309 ± 1.524	$\mathrm{Zn}^{2^+} + 6\mathrm{H}_2\mathrm{O}(\mathrm{l}) + \mathrm{SeO}_4^{2^-} \Leftrightarrow \mathrm{ZnSeO}_46\mathrm{H}_2\mathrm{O}(\mathrm{cr})$	1.538 ± 0.068	-8.779 ± 0.388		
$ZnSeCN^+$	-18.058 ± 3.824	$Zn^{2+} + SeCN^{-} \Leftrightarrow ZnSeCN^{+}$	1.210 ± 0.060	-6.907 ± 0.324	-5.950 ± 0.340	3.209 ± 1.619

Table 1 Proposed thermodynamic data on Se for JAEA-TDB. Except for tentative values, all thermodynamic data are taken from NEA-TDB¹¹.

JAEA-Review 2009-051

Compound	$\Delta_{\rm f} G^{\rm o}_{\rm m} ({\rm kJ.mol^{-1}})$	Reaction	$\log_{10} K^{\circ}$	$\Delta_r G^o_m$ (kJ.mol ⁻¹)	$\Delta_r H^o_m (kJ.mol^{-1})$	$\Delta_r S^o_m(J.K^{\text{-l}}.mol^{\text{-l}})$
Zn(SeCN) ₂ (aq)	115.311 ± 7.630	$Zn^{2+} + 2SeCN^{-} \Leftrightarrow Zn(SeCN)_{2}(aq)$	1.680 ± 0.110	-9.590 ± 0.628	-6.350 ± 1.200	10.865 ± 4.542
CdSeO ₄ (aq)	-530.175 ± 1.652	$\mathrm{Cd}^{2^+} + \mathrm{SeO}_4^{2^-} \Leftrightarrow \mathrm{CdSeO}_4(\mathrm{aq})$	2.270 ± 0.060	-2.957 ± 0.342	8.300 ± 4.000	71.297 ± 13.465
$CdSeCN^{+}$	45.533 ± 3.889	$Cd^{2+} + SeCN^{-} \Leftrightarrow CdSeCN^{+}$	2.240 ± 0.060	-12.786 ± 0.324	-10.050 ± 0.200	9.177 ± 1.330
Cd(SeCN) ₂ (cr)	161.834 ± 8.153	$Cd^{2+} + 2SeCN^{-} \Leftrightarrow Cd(SeCN)_2(cr)$	5.700 ± 0.500	-32.536 ± 2.854		
Cd(SeCN) ₂ (aq)	175.305 ± 7.668	$Cd^{2+} + 2SeCN^{2} \Leftrightarrow Cd(SeCN)_{2}(aq)$	3.340 ± 0.120	-19.065 ± 0.685	-26.350 ± 2.000	-24.434 ± 7.091
Cd(SeCN) ^{3⁻}	308.674 ± 11.488	$Cd^{2+} + 3SeCN^{-} \Leftrightarrow Cd(SeCN)_{3}^{-}$	3.810 ± 0.210	-21.748 ± 1.199	-3.350 ± 14.000	61.706 ± 47.128
Cd(SeCN)4 ²⁻	440.216 ± 15.232	$Cd^{2+} + 4SeCN^{2} \Leftrightarrow Cd(SeCN)^{2-}$	4.600 ± 0.110	-26.257 ± 0.628	-40.000 ± 14.000	-46.094 ± 47.003
$\mathrm{HgSe_2}^{2-}$	65.334 ± 5.641	$HSe^{-} + \alpha - HgSe \Leftrightarrow H^{+} + HgSe_{2}^{2-}$	-12.800 ± 0.600	73.063 ± 3.425		
HgSeO ₃ (cr)	-290.195 ± 5.980	$\mathrm{Hg}^{2^{+}} + \mathrm{SeO}_{3}^{2^{-}} \Leftrightarrow \mathrm{HgSeO}_{3}(\mathrm{cr})$	16.200 ± 1.000	-92.470 ± 5.708		
$\mathrm{Hg(SeO_3)}^{2-}$	-644.882 ± 6.291	$\mathrm{HgSeO_3(cr)} + \mathrm{SeO_3}^{2-} \Leftrightarrow \mathrm{Hg(SeO_3)}^{2-}$	-1.350 ± 0.150	7.706 ± 0.856		
Hg ₂ SeO ₃ (cr)	-295.587 ± 5.998	$\mathrm{Hg_{2}^{2^{+}}+SeO_{3}^{2^{-}} \Leftrightarrow \mathrm{Hg_{2}SeO_{3}(cr)}}$	15.200 ± 1.000	-86.762 ± 5.708		
Hg(SeCN) ₂ (aq)	309.481 ± 9.510	Hg^{2^+} + 2SeCN ⁻ \Leftrightarrow Hg(SeCN) ₂ (aq)	22.300 ± 1.000	-127.289 ± 5.708		
Hg(SeCN)3 ⁻	419.846 ± 12.754	$\mathrm{Hg}^{2^+} + 3\mathrm{SeCN}^{-} \Leftrightarrow \mathrm{Hg}(\mathrm{SeCN})_{3^-}$	26.800 ± 1.000	-152.976 ± 5.708		
$\mathrm{Hg(SeCN)_4}^{2-}$	541.627 ± 15.470	$\mathrm{Hg}^{2^+} + 4\mathrm{SeCN}^{-} \Leftrightarrow \mathrm{Hg}(\mathrm{SeCN})_4^{2^-}$	29.300 ± 0.500	-167.246 ± 2.854	-193.000 ± 3.000	-86.381 ± 13.888
CuSeO ₄ 5H ₂ O(cr)	-1574.100 ± 2.420	$Cu^{2^+} + 5H_2O(l) + SeO_4^{2^-} \Leftrightarrow CuSeO_45H_2O(cr)$	2.440 ± 0.200	-13.928 ± 1.142		
Ag ₂ SeO ₃ (cr)	-298.400 ± 2.440	$2Ag^{2^+} + SeO_3^{2^-} \Leftrightarrow Ag_2SeO_3(cr)$	15.800 ± 0.300	-90.187 ± 1.712		
$Ag_2SeO_4(cr)$	-330.150 ± 3.200	$2Ag^{2+} + SeO_4^{2-} \Leftrightarrow Ag_2SeO_4(cr)$	7.860 ± 0.500	-44.865 ± 2.854		
AgSeCN(cr)	133.247 ± 4.783	$Ag^{2+} + SeCN^{-} \Leftrightarrow AgSeCN(cr)$	13.998 ± 0.508	-79.900 ± 2.900	-108.100 ± 1.700	-94.583 ± 11.275
Ag(SeCN) ₃ ²⁻	406.193 ± 11.529	$Ag^{2^+} + 3SeCN^- \Leftrightarrow Ag(SeCN)_3^{2^-}$	13.850 ± 0.300	-79.056 ± 1.172		
NiSeO ₃ 2H ₂ O(cr)	-915.553 ± 6.022	$\mathrm{Ni}^{2^+} + 2\mathrm{H}_2\mathrm{O}(\mathrm{l}) + \mathrm{SeO}_3^{2^-} \Leftrightarrow \mathrm{Ni}\mathrm{SeO}_32\mathrm{H}_2\mathrm{O}(\mathrm{cr})$	5.800 ± 1.000	-33.107 ± 5.708		
NiSeO ₄ (aq)	-500.499 ± 1.650	$\mathrm{Ni}^{2^+} + \mathrm{SeO}_4^{2^-} \Leftrightarrow \mathrm{NiSeO}_4(\mathrm{aq})$	2.670 ± 0.050	-15.240 ± 0.285		

Table 1 (continued)

JAEA-Review 2009-051

Compound	$\Delta_{\rm f} {\rm G}^{\rm o}_{\rm m} ({\rm kJ.mol^{-1}})$	Reaction	$\log_{10} K^{\circ}$	$\Delta_r G^o_m (kJ.mol^{-1})$	$\Delta_r H^o_m (kJ.mol^{-1})$	$\Delta_r S^o_m (J.K^{-1}.mol^{-1})$
$NiSeO_4 6H_2O(cr)$	-1915.983 ± 1.664	$Ni^{2+} + 6H_2O(1) + SeO_4^{2-} \Leftrightarrow NiSeO_46H_2O(cr)$	1.381 ± 0.045	-7.883 ± 0.257		
NiSeCN ⁺	80.175 ± 3.893	$Ni^{2+} + SeCN^{-} \Leftrightarrow NiSeCN^{+}$	1.770 ± 0.060	-10.103 ± 0.342	-12.800 ± 0.400	-9.045 ± 1.766
Ni(SeCN) ₂ (aq)	213.544 ± 7.681	$Ni^{2^+} + 2SeCN^{-} \Leftrightarrow Ni(SeCN)_2(aq)$	2.240 ± 0.140	-12.786 ± 0.799	-25.000 ± 4.000	-40.966 ± 13.681
$FeSe_2(cr)$	$-101.352 \pm 15.056^{*}$	$\mathrm{Fe}^{2^+} + 2\mathrm{HSe}^{-} \Leftrightarrow \mathrm{FeSe}_2(\mathrm{cr}) + 2\mathrm{H}^{+} + 2\mathrm{e}^{-}$	<i>17.220</i> ±2.754 [*]	-98.294 15.718*		
eta -Fe $_{1.04}$ Se	$-70.124 \pm 4.033^{*}$	$1.04 \mathrm{Fe}^{2^+} + \mathrm{HSe}^- + 0.08e^- \Leftrightarrow \beta - \mathrm{Fe}_{1.04} \mathrm{Se} + \mathrm{H}^+$	$3.503 \pm 0.870^{*}$	-19.995 ±4.969*		
γ -Fe $_3$ Se $_4$	$-243.998 \pm 30.019^{*}$	$3Fe^{2+} + 4HSe^{-} \Leftrightarrow r \cdot Fe_{3}Se_{4} + 4H^{+} + 2e^{-}$	<i>25.908</i> ±5.547 [*]	<i>-147.882</i> ±31.665*		
$lpha$ -Fe $_7\mathrm{Se}_8$	$-489.287\pm20.360^{*}$	$7 \text{Fe}^{2^+} + 8 \text{HSe}^- \iff \alpha - \text{Fe}_7 \text{Se}_8 + 8 \text{H}^+ + 2 \text{e}^-$	<i>36.274</i> ±5.175 [*]	<i>-207.055</i> ±29.541 [*]		
$\rm UO_2SeO_4(aq)$	-1407.676 ± 2.672	$SeO_4^{2-} + UO_2^{2+} \Leftrightarrow UO_2SeO_4(aq)$	2.740 ± 0.250	-15.640 ± 1.427		
MgSeO ₃ 6H ₂ O(cr)	-2273.830 ± 2.600	$Mg^{2^+} + 6H_2O(l) + SeO_3^{2^-} \Leftrightarrow MgSeO_3 {\bf 6}H_2O(cr)$	5.820 ± 0.250	-33.221 ± 1.427		
MgSeO4(aq)	-907.418 ± 2.266	$\mathrm{Mg}^{2^+} + \mathrm{SeO}_4^{2^-} \Leftrightarrow \mathrm{MgSeO}_4(\mathrm{aq})$	2.200 ± 0.200	-12.558 ± 1.142		
MgSeO ₄ 6H ₂ O(cr)	-2324.200 ± 2.000	$Mg^{2^+} + 6H_2O(l) + SeO_4^{2^-} \Leftrightarrow MgSeO_4 \bullet H_2O(cr)$	1.133 ± 0.044	-6.467 ± 0.251		
CaSeO ₃ H ₂ O(cr)	-1188.870 ± 2.495	$Ca^{2+} + H_2O(l) + SeO_3^{2-} \Leftrightarrow CaSeO_3 H_2O(cr)$	6.400 ± 0.250	-36.531 ± 1.427		
CaSeO ₄ (aq)	-1003.707 ± 1.865	$Ca^{2^+} + SeO_4^{2^-} \Leftrightarrow CaSeO_4(aq)$	2.000 ± 0.100	-11.416 ± 0.571		
CaSeO ₄ 2H ₂ O(cr)	-1481.900 ± 2.300	$Ca^{2^+} + 2H_2O(l) + SeO_4^{2^-} \Leftrightarrow CaSeO_4 2H_2O(cr)$	2.680 ± 0.250	-15.298 ± 1.427		
SrSeO ₃ (cr)	-962.200 ± 3.400	$\mathrm{Sr}^{2^+} + \mathrm{SeO}_3^{2^-} \Leftrightarrow \mathrm{SrSeO}_3(\mathrm{cr})$	6.300 ± 0.500	-35.961 ± 2.854		
BaSeO ₃ (cr)	-957.200 ± 3.400	$\mathrm{Ba}^{2^+} + \mathrm{SeO}_3^{2^-} \Leftrightarrow \mathrm{BaSeO}_3(\mathrm{cr})$	6.500 ± 0.250	-37.102 ± 1.427		
BaSeO ₄ (cr)	-1040.294 ± 3.007	$\mathrm{Ba}^{2^+} + \mathrm{SeO}_4^{2^-} \Leftrightarrow \mathrm{BaSeO}_4(\mathrm{cr})$	7.560 ± 0.100	-43.153 ± 0.571		
$\rm NH_4HSe(cr)$	-24.162 ± 5.344	$H_2Se(g) + NH_3(g) \Leftrightarrow NH_4HSe(cr)$	4.024 ± 0.866	-22.972 ± 4.942	-115.100 ± 3.500	-309.000 ± 11.700
$(NH_4)_2SeO_4(cr)$	-593.100 ± 1.600	$2\mathrm{NH}_4^+ + \mathrm{SeO}_4^{2^-} \Leftrightarrow (\mathrm{NH}_4)_2 \mathrm{SeO}_4(\mathrm{cr})$	-0.911 ± 0.065	5.200 ± 0.371		
$\rm Li_2SeO_4H_2O(cr)$	-1252.400 ± 1.500	$2Li^{+} + H_{2}O(l) + SeO_{4}^{2-} \Leftrightarrow Li_{2}SeO_{4}H_{2}O(cr)$	-1.762 ± 0.065	10.058 ± 0.371		
Na ₂ SeO ₄ -10H ₂ O(cr)	-3338.700 ± 1.600	$2Na^+ + 10H_2O(l) + SeO_4^{2-} \Leftrightarrow Na_2SeO_4 \textbf{\cdot} 10H_2O(cr)$	0.681 ± 0.087	-3.887 ± 0.497		

Table 1 (continued)

JAEA-Review 2009-051

Compound	$\Delta_{f}G^{\circ}_{m}(kJ.mol^{-1})$	Reaction	$\log_{10} K^{\mathrm{o}}$	$\Delta_r G^o_m (kJ.mol^{-1})$	$\Delta_r H^o_m$ (kJ.mol ⁻¹)	$\Delta_r S^o_m (J.K^{-1}.mol^{-1})$
$\rm K_2SeO_4(cr)$	-999.300 ± 1.500	$2K^{+} + \mathrm{SeO}_{4}^{2^{-}} \Leftrightarrow \mathrm{K}_{2}\mathrm{SeO}_{4}(\mathrm{cr})$	-0.904 ± 0.065	5.160 ± 0.371		
$Cs_2SeO_4(cr)$	-1018.800 ± 1.800	$2Cs^{+} + SeO_{4}^{2^{-}} \Leftrightarrow Cs_{2}SeO_{4}(cr)$	-0.636 ± 0.065	3.630 ± 0.371		
*tentative value. 7	Fo determine the tentative v	alues, thermodynamic data of Fe were q	luoted from Chase, Jr^2	⁴⁾ and Robie and Herr	iigway ⁹⁾ .	

Table 1 (continued)

Table 2	Thermodynamic of	data of Fe(cr) and Fe ²⁺	⁺ used to calculate the tentative values
---------	------------------	-------------------------------------	---

	$S^{\circ}_{m}(Fe(cr)) (J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1})$	$\Delta_{\rm f} {\rm G^{\circ}}_{\rm m} ({\rm Fe}^{2+}) ({\rm kJ} \cdot {\rm mol}^{-1})$
Chase, Jr. ²⁴⁾	27.32 ± 0.13	unlisted
Robie and Hemingway ⁹⁾	27.09 ± 0.13	-90.0 ± 2.0

表 1. SI 基本单位					
甘木昌	SI 基本ì	単位			
巫平里	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	れるSI組立単位の例
和立音 2	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 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	Z方メートル A/m ²
磁界の強さアンペア毎メ	マートル A/m
量濃度 ^(a) ,濃度 モル毎立方>	$\ell = h / \nu$ mol/m ³
質量濃度 キログラム毎:	立法メートル kg/m ³
輝 度 カンデラ毎4	Z方メートル cd/m ²
屈折率(b)(数字の)	1 1
比透磁率 (6) (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) これらは電気元量あるいは次元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 組立甲位	
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
亚 面 鱼	ラジア、/(b)	rad	1 ^(b)	m/m
· 協 方 立 休 鱼	ステラジア、(b)	cm ^(c)	1 (b)	m^{2/m^2}
周 波 数	ヘルツ ^(d)	Hz	1	s ¹
л ", ", ", ", ", ", ", ", ", ", ", ", ",	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	$m^2 kg s^{-3} A^{-1}$
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	$kg s^{2} A^{1}$
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
光束	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,	グレイ	Gv	J/kg	$m^2 s^{-2}$
カーマ		~,	or ing	
線量当量,周辺線量当量,方向	シーベルト ^(g)	Sv	J/kg	$m^2 e^{-2}$
性線量当量,個人線量当量	2 · · · · · · · ·	51	OING	
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

(a)SE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。
(e)セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度で表すために使用される。
(f)数単位変種の大きさは同一である。したがって、温度差や温度問隔を表す数値はとちらの単位で表しても同じである。
(f)数単性核種の放射能(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		
粘质	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 sA		
表 面 電 荷	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² sA		
電 束 密 度 , 電 気 変 位	クーロン毎平方メートル	C/m^2	m ⁻² sA		
誘 電 率	ファラド毎メートル	F/m	$m^{-3} kg^{-1} s^4 A^2$		
透磁率	ヘンリー毎メートル	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 sA		
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	接頭語	記号	乗数	接頭語	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}	ナーノ	n	
10^{9}	ギガ	G	10^{-12}	ピョ	р	
10^{6}	メガ	М	10^{-15}	フェムト	f	
10^3	キロ	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=60s			
時	h	1h =60 min=3600 s			
日	d	1 d=24 h=86 400 s			
度	۰	1°=(п/180) rad			
分	,	1'=(1/60)°=(п/10800) rad			
秒	"	1"=(1/60)'=(п/648000) rad			
ヘクタール	ha	1ha=1hm ² =10 ⁴ m ²			
リットル	L, 1	1L=11=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
	まとわて粉は	ぶ 中 瞬時 ほう や て そ の	

衣される数値が美駅的に待られるもの						
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	1	レ	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	- 4	Å	1 Å=0.1nm=100pm=10 ⁻¹⁰ m			
海		里	М	1 M=1852m			
バ	-	ン	b	1 b=100fm ² =(10 ⁻¹² cm)2=10 ⁻²⁸ m ²			
1	ッ	ŀ	kn	1 kn=(1852/3600)m/s			
ネ	-	パ	Np	ar送佐1			
ベ		N	В	し51単位との数値的な関係は、 対数量の定義に依存。			
デ	ジベ	N	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	$^{\mathrm{sb}}$	$1 \text{ sb} = 1 \text{ cd} \text{ cm}^{-2} = 10^4 \text{ cd} \text{ m}^{-2}$				
フォト	ph	1 ph=1cd sr cm ⁻² 10 ⁴ lx				
ガル	Gal	$1 \text{ Gal} = 1 \text{ cm s}^{-2} = 10^{-2} \text{ ms}^{-2}$				
マクスウェル	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 ^(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	ユ		IJ	ĺ	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq
$\boldsymbol{\nu}$	\sim	ŀ	ゲ	\sim	R	$1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{C/kg}$
ラ				ド	rad	1 rad=1cGy=10 ⁻² Gy
$\boldsymbol{\nu}$				ム	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv
ガ		$\boldsymbol{\mathcal{V}}$		7	γ	1 γ =1 nT=10-9T
フ	I		N	"		1フェルミ=1 fm=10-15m
メー	- トル	~系	カラゞ	ット		1メートル系カラット = 200 mg = 2×10-4kg
\mathbb{P}				ル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標	準	大	気	圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
力			IJ	1	cal	1cal=4.1858J(「15℃」カロリー), 4.1868J (「IT」カロリー)4.184J(「熱化学」カロリー)
Ξ	ク		П	\sim	μ	$1 \mu = 1 \mu m = 10^{-6} m$

この印刷物は再生紙を使用しています