

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：  
4価トリウム、ウラン、ネプツニウム、  
プルトニウムの熱力学データの再選定

JAEA Thermodynamic Database for Performance Assessment of  
Geological Disposal of High-level and TRU Wastes:  
Refinement of Thermodynamic Data for Tetravalent Thorium,  
Uranium, Neptunium and Plutonium

藤原 健壮 北村 暁 油井 三和  
Kenso FUJIWARA, 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

March 2010

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

JAEA-Review

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](mailto: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](mailto: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：  
4 価トリウム、ウラン、ネプツニウム、プルトニウムの熱力学データの再選定

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

藤原 健壮, 北村 暁, 油井 三和+

(2009 年 12 月 17 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、トリウム、ウラン、ネプツニウムおよびプルトニウム各 4 価の熱力学データを選定した。熱力学データの選定は、経済協力開発機構/原子力機関 (OECD/NEA) が公開しているアクチノイド元素の熱力学データベースの内容を基に行った。また、OECD/NEA が公開した熱力学データベース以降に報告された熱力学データについて再考察し JAEA-TDB として選定した。

JAEA Thermodynamic Database for Performance Assessment of Geological Disposal of  
High-level and TRU Wastes:  
Refinement of Thermodynamic Data for Tetravalent Thorium, Uranium, Neptunium and  
Plutonium

Kenso FUJIWARA , Akira KITAMURA and Mikazu YUI<sup>+</sup>

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

(Received December 17, 2009)

Within the scope of the JAEA thermodynamic database project for performance assessment of geological disposal of high-level and TRU radioactive wastes, the refinement of the thermodynamic data for the inorganic compounds and complexes of Thorium(IV), Uranium(IV), Neptunium(IV) and Plutonium(IV) was carried out. Refinement of thermodynamic data for the element was performed on a basis of the thermodynamic database for actinide published by the Nuclear Energy Agency in the Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA). Additionally, the latest data after publication of thermodynamic data by OECD/NEA were reevaluated to determine whether the data should be included in the JAEA-TDB.

Keywords: Thermodynamic Database, Performance Assessment, Geological Disposal, High-Level Radioactive Waste, TRU Waste, Tetravalent, Thorium, Uranium, Neptunium, Plutonium.

---

<sup>+</sup>Geological Isolation Research and Development Directorate

目 次

1	JNC-TDB の現状と課題	1
2	アクチニドの TDB に関する研究開発の国際動向	1
3	アクチニド元素に関するデータ選定方針	2
4	Th(IV)に関するデータ選定	3
4.1	Si との錯体	3
4.2	Ca との錯体	3
5	U(IV)に関するデータ選定	4
5.1	U(IV)の加水分解定数	4
5.2	UO <sub>2</sub> (am)の溶解度積	5
5.3	U(IV)の水和炭酸錯体、炭酸錯体	5
6	Np(IV)に関するデータ選定	6
6.1	Np(IV)の加水分解定数	6
6.2	NpO <sub>2</sub> (am)の溶解度積	7
6.3	Np(IV)の水和炭酸錯体	7
7	Pu(IV)に関するデータ選定	8
7.1	Pu(IV)の加水分解定数	8
7.2	Pu(IV)の水和炭酸錯体	9
8	データの選定結果	9
9	結言	9
	謝辞	9
	参考文献	10

Contents

1	Present status and subject of JNC-TDB .....	1
2	International research and development of thermodynamic database .....	1
3	Basic principle on selection of actinide thermodynamic data .....	2
4	Selection of thermodynamic data of Th(IV) .....	3
4.1	Complex with Si .....	3
4.2	Complex with Ca .....	3
5	Selection of thermodynamic data of U(IV) .....	4
5.1	Hydrolysis constants of U(IV) .....	4
5.2	Solubility product of $\text{UO}_2(\text{am})$ .....	5
5.3	Carbonate Hydroxide of U(IV) .....	5
6	Selection of thermodynamic data of Np(IV) .....	6
6.1	Hydrolysis constants of Np(IV) .....	6
6.2	Solubility product of $\text{NpO}_2(\text{am})$ .....	7
6.3	Carbonate Hydroxide of Np(IV) .....	7
7	Selection of thermodynamic data of Pu (IV) .....	8
7.1	Hydrolysis constants of Pu(IV) .....	8
7.2	Carbonate Hydroxide of Pu(IV) .....	9
8	Selected thermodynamic data .....	9
9	Conclusions .....	9
	Acknowledgement .....	9
	References .....	10

表 目 次

Table 1 Selected stability constants of Th(IV) .....	4
Table 2 Hydrolysis constants of U(IV) .....	4
Table 3 Solubility products of $\text{UO}_2(\text{am})$ .....	5
Table 4 Hydrolysis constants of Np(IV) .....	7
Table 5 Solubility products of $\text{NpO}_2(\text{am})$ .....	7
Table 6 Hydrolysis constants of Pu(IV) .....	8
Table 7 Thermodynamic data of Th(IV) aqueous species selected in JAEA-TDB .....	13
Table 8 Thermodynamic data of Th(IV) solid species selected in JAEA-TDB .....	15
Table 9 Thermodynamic data of U(IV) aqueous species selected in JAEA-TDB .....	16
Table 10 Thermodynamic data of U solid species selected in JAEA-TDB .....	18
Table 11 Thermodynamic data of Np(IV) aqueous species selected in JAEA-TDB .....	20
Table 12 Thermodynamic data of Np solid species selected in JAEA-TDB .....	21
Table 13 Thermodynamic data of Pu(IV) aqueous species selected in JAEA-TDB .....	22
Table 14 Thermodynamic data of Pu solid species selected in JAEA-TDB .....	23

図 目 次

Fig. 1 Solubility of $\text{AnO}_2(\text{am})$ with $\text{An}\cdot\text{OH}\cdot\text{CO}_3$ .....	6
---	---

This is a blank page.



## 1. JNC-TDB の現状と課題

使用済燃料の再処理により発生するガラス固化体中には、様々なアクチニド元素が含まれる。その中にはネプツニウム-237(Np-237)のように半減期が非常に長く、地層処分の安全評価上重要な核種も多い。

アクチニド元素は水溶液中に溶解した場合、主に 3 価から 6 価のイオンで存在し、他の陰イオンと容易に錯生成するために、地層処分環境下での核種移行挙動評価においては、様々な溶液条件によって生成する錯体化学種（炭酸錯体等）の影響を考慮する必要がある。

これまでに JNC-TDB<sup>1)</sup>では、ウラン(U)、ネプツニウム(Np)、プルトニウム(Pu)、アメリシウム(Am)について、錯生成定数や溶解度積等の熱力学データの評価を行っている。しかしながら、近年の研究によって、新たな実験データや知見が得られ、それらに基づき様々な熱力学データが報告されており、それらの多くは OECD/NEA<sup>2)</sup>の熱力学データベースに新たに採用されている。JNC-TDB についても地層処分の安全評価に必要な様々な化学種について、新たに報告された熱力学データを取り込む必要がある。

本報では、アクチニド元素のうち IV 価の Th, U, Np および Pu の熱力学データの再選定結果について報告する。このうち U, Np, Pu の熱力学データについては 2003 年<sup>2)</sup>に、Th については 2009 年に OECD/NEA<sup>3)</sup>によって選定された値を、原則として引用することとする。また、OECD/NEA のデータベース発行以降に報告された新たな試験データについては、OECD/NEA が選定したデータと比較し、JAEA-TDB への採否を検討する。

## 2. アクチニドの TDB に関する研究開発の国際動向

OECD/NEA では 1992 年に U、1995 年に Am、2001 年に Np と Pu を選定しており、JNC-TDB はこれらをベースとしている。その後、2003 年にアクチニド元素のデータの再選定を行っており、2009 年に Th のデータを新たに選定している。選定しているデータは溶解度積及び加水分解種、フッ化物錯体、硫酸錯体、硝酸錯体、リン酸錯体、塩化物錯体等の錯生成定数である。この再選定の中で注目すべき点として、U の溶解度積を算出する際にモデル計算により得られた加水分解定数を用いていることがあげられる。また、Np, Pu の水和炭酸錯体について、OECD/NEA は不確実性が大きいとして選定していない。

Nagra-PSI<sup>4)</sup>では 2002 年にデータベースを開発しており、その際 OECD/NEA が 1992 年に選定したデータを基本に採用している。U(OH)<sub>4</sub>(aq)の錯生成定数や Th については、当時 OECD/NEA がデータを選定していなかったため、独自に選定している。

SKB<sup>5)</sup>では 2006 年に Nagra-PSI のデータベースを基にデータを選定している。新た

に選定しているデータは、主に溶解度の試験データに基づく加水分解定数と酸化物の溶解度積である。

### 3. アクチノイド元素に関するデータ選定方針

JAEA-TDBに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 ( $K^\circ$ )、反応の自由エネルギー ( $\Delta_r G^\circ_m = -RT \ln K^\circ$ ;  $R$ は気体定数,  $T$ は絶対温度) 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、エンタルピーやエントロピー、熱容量等の掲載を推奨するものとする。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) に基づくモデルを用いることとする。

熱力学データを掲載する化学種は、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。

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(たとえばNEA-TDB<sup>2)</sup>、Nagra/PSI-TDB<sup>4)</sup>)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うえで引用する。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うえで、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。

U、NpおよびPuの熱力学データについては2003年に、Thについては2009年にそれぞれOECD/NEAによって選定された値を原則として採用することとする。上記OECD/NEAのデータ選定後新たに報告された値、および、OECD/NEAで選定されなかったものの、その後新たに知見が得られた値については実験手法及び解析方法の妥当性を検討し、信頼性が高いと判断された値をJAEA-TDBとして採用する。

Th(IV)については、Si との錯体及び Th 水酸化物と Ca の錯体に関し、新たな錯生成定数が OECD/NEA のデータ選定後に報告されており、その値の採否について検討した。

U(IV)については、加水分解定数が OECD/NEA のデータ選定後新たに報告されており、その値の採否を検討するとともに、その加水分解定数を用いて  $UO_2(am)$  の溶解度積の再計算を行った。また、OECD/NEA では採用されていない水和炭酸錯体について、

新しい実験データに基づき採否を検討した。

Np(IV)については、加水分解定数が OECD/NEA のデータ選定後新たに報告されており、その値の採否を検討するとともに、その加水分解定数を用いて  $\text{NpO}_2(\text{am})$  の溶解度積の再計算を行った。また、OECD/NEA では採用されていない水和炭酸錯体について、新しい実験データに基づき採否を検討した。

4 価 Pu については、加水分解定数が OECD/NEA のデータ選定後新たに報告されており、その値の採否を検討した。また、OECD/NEA では採用されていない水和炭酸錯体について、新しい実験データに基づき採否を検討した。

#### 4. Th(IV)に関するデータ選定

##### 4.1 Si との錯体

OECD/NEA のデータ選定後 Rai et al<sup>6)</sup>は Th と Si の錯体種について報告している。pH<sub>c</sub>=10-12 の条件下で  $\text{Na}_2\text{SiO}_3$  濃度を  $10^{-3}\text{M} - 0.1\text{M}$  で 変化させて Th(IV)の濃度を測定し、溶存化学種はモデルを用いて同定、固相は XRD で測定している。その結果、実験で得られた溶解度の  $\text{Na}_2\text{SiO}_3$  濃度依存性から  $\text{Th}(\text{OH})_3(\text{H}_3\text{SiO}_4)_3^{2-}$  が生成し、溶解度を支配していると結論付けている。 $\text{Th}(\text{OH})_3(\text{H}_3\text{SiO}_4)_3^{2-}$  が高 pH 条件下で溶解度は  $10^{-5}\text{M}$  まで上昇しており、Si の影響があることは明らかであるので、JAEA-TDB では(1)式で示される錯生成定数(Table1)を採用する。



##### 4.2 Ca との錯体

OECD/NEA のデータ選定後、Altmaier et al<sup>7)</sup>は Th と Ca の錯体種について報告している。 $[\text{Ca}^{2+}] > 0.05 \text{ M}$  かつ pH<sub>c</sub>=10-12 の条件下で Th(IV)の濃度を測定した結果、pH<sub>c</sub> の上昇とともに溶解度が大きくなった。実験で得られた溶解度の pH<sub>c</sub> 依存性及び、EXAFS の測定結果から、Ca の配位数を確認していることと、pH<sub>c</sub> に対する溶解度の傾きから、イオンの価数が 4+になるような高次の化学種が存在していることを示している。

その原因が  $\text{Ca}_4[\text{Th}(\text{OH})_8]^{4+}$  の化学種が生成するためとしており、この溶存化学種については、EXAFS で確認をしている。実験で得られた溶解度の pH<sub>c</sub> に対する傾きが  $\text{Ca}_4[\text{Th}(\text{OH})_8]^{4+}$  の化学種が生成して溶解度を支配している裏付けとなっている。また、その溶解度データを用いて(2)式で示される標準状態の平衡定数を求めている。JAEA-TDB では化学種を EXAFS で化学種の確認を行っている点からこれらの錯生成定数(Table1)を採用する。

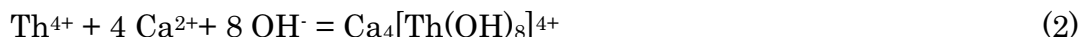


Table 1 Selected stability constants of Th(IV)

Species	log $\eta^\circ$	Reference
$\text{Th}(\text{OH})_3(\text{H}_3\text{SiO}_4)_3^{2-}$	$-27.8 \pm 0.7$	Rai et al. <sup>6)</sup>
$\text{Ca}_4[\text{Th}(\text{OH})_8]^{4+}$	$49.3 \pm 0.9$	Altmaier et al. <sup>7)</sup>

## 5. U(IV)に関するデータ選定

### 5.1 U(IV) の加水分解定数

OECD/NEA では、Kraus et al.<sup>8)</sup>の実験データに基づき  $\text{UOH}^{3+}$ の加水分解定数を選定しているが、 $\text{U}(\text{OH})_2^{2+}$ 及び $\text{U}(\text{OH})_3^+$ の加水分解定数については選定されていない。

OECD/NEA のデータ選定後、Fujiwara et al.<sup>11)</sup>は  $\text{UOH}^{3+}$ 、 $\text{U}(\text{OH})_2^{2+}$ 及び $\text{U}(\text{OH})_3^+$ の加水分解定数を報告している。この報告では U-233 をもちいて溶媒抽出法により加水分解定数を求めている。トレーサー濃度で試験を行っているので、多核錯体の影響はないと考えられ、抽出の平衡を確認し、U(VI)への酸化がデータに影響しないことを確認している。Table2 に OECD/NEA の選定値及び Neck et al.<sup>10)</sup>のモデル計算値を示す。三者の値はいずれも誤差内で一致している。抽出剤である TTA と U(IV)の錯生成の影響についてはこの論文では明確ではなく、今後議論が必要と考えられるが、加水分解定数を系統的に実験で求められている報告は他にないため、 $\text{UOH}^{3+}$ 、 $\text{U}(\text{OH})_2^{2+}$ 及び $\text{U}(\text{OH})_3^+$ の加水分解定数について JAEA-TDB では Fujiwara et al.<sup>11)</sup>の値を採用する。

OECD/NEA では、 $\text{U}(\text{OH})_4$ の加水分解定数について、Yajima et al.<sup>12)</sup>、Rai et al.<sup>9, 13)</sup>、Ryan et al.<sup>14)</sup>、の溶解度の実験結果と溶解度積から求めている。JAEA-TDB においても、これらの実験データと JAEA-TDB で選定された溶解度積 (5.2 参照) を用いて計算した加水分解定数の値を採用する。

Table 2 Hydrolysis constants of U(IV)

log $\eta^\circ$	Fujiwara et al. <sup>11)</sup>	OECD/NEA <sup>2)</sup>	Neck et al. <sup>10)</sup>	JAEA-TDB
$\text{UOH}^{3+}$	$13.71 \pm 0.31$	$13.46 \pm 0.06$	$13.6 \pm 0.2$	$13.71 \pm 0.31$
$\text{U}(\text{OH})_2^{2+}$	$26.22 \pm 0.21$		$26.9 \pm 1.0$	$26.22 \pm 0.21$
$\text{U}(\text{OH})_3^+$	$36.85 \pm 0.21$		$37.3 \pm 1.0$	$36.85 \pm 0.21$
$\text{U}(\text{OH})_4$		$46.00 \pm 1.4$	$46.00 \pm 1.4$	$45.20 \pm 1.4$

5.2 UO<sub>2</sub>(am) の溶解度積

OECD/NEA では溶解度の実験データ(Rai et al.<sup>9)</sup> 及び Neck et al.<sup>10)</sup>のモデルにより得られた UOH<sup>3+</sup>、U(OH)<sub>2</sub><sup>2+</sup>及び U(OH)<sub>3</sub><sup>+</sup>の加水分解定数を用いて溶解度積を選定している。JAEA-TDB では新たに採用した UOH<sup>3+</sup>、U(OH)<sub>2</sub><sup>2+</sup>及び U(OH)<sub>3</sub><sup>+</sup>の加水分解定数を用いて算出した 3 式で示される溶解度積(Table3)を採用する。

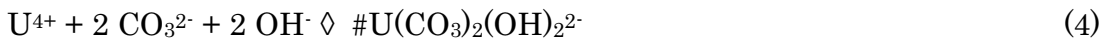


Table 3 Solubility products of UO<sub>2</sub>(am)

log <i>K<sub>s</sub></i> <sup>o</sup>	Reference
-54.5 ± 1.0	OECD/NEA <sup>2)</sup>
-53.7 ± 1.0	<b>JAEA-TDB</b>

5.3 U(IV) の水和炭酸錯体、炭酸錯体

U(IV)の水和炭酸錯体について、OECD/NEA<sup>2)</sup>は U(CO<sub>3</sub>)<sub>5</sub><sup>6-</sup>と U(OH)<sub>4</sub>(aq)の影響で非常に狭い pHc と炭酸濃度条件で存在し、存在している錯体の炭酸の配位数については、実験で明確に求められていないという不確定要素があり選定されていない。しかしながら、Th(IV)の熱力学データ選定時<sup>3)</sup>に Altmaire et al.<sup>15)</sup>水和炭酸錯体を採用している(Fig.1)。JNC-TDB では U(IV)の水和炭酸錯体の錯生成定数について Rai et al.<sup>16)</sup>の報告値を用いている(Fig.1)。Rai et al.<sup>16)</sup>の報告では、U(IV)溶解度の炭酸濃度及び pHc 依存性を調べ、溶存化学種を U(CO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(OH)<sub>2</sub><sup>2-</sup>と同定している。JAEA-TDB では Rai et al.<sup>16)</sup>の溶解度データを用いて計算した(4)式で示される錯生成定数(log *K<sub>f</sub>* = 41.56 ± 1.00)を採用する。誤差については、Rai et al.<sup>16)</sup>に明記されておらず、実験データのみを用いて解析すると 0.3 程度であるが、UO<sub>2</sub>(am)の溶解度積の誤差を踏まえた値とする。



(5)式で与えられる U(IV)の炭酸錯体について、OECD/NEA では Ciavatta et al.<sup>17)</sup>の値、JNC-TDB では Rai et al.<sup>16)</sup>の値を用いている。Ciavatta et al.<sup>17)</sup>の報告では、錯生成定数は VI 価の炭酸錯体と酸化還元電位から計算で求めている (log *K<sub>f</sub>* = 34.0 ± 0.90)。一方 Rai et al.<sup>16)</sup>の報告では溶解度の試験を行っており、OH<sup>-</sup>の濃度と炭酸濃度の依存性から化学種の同定と錯生成定数の算出を行っている。実験データから計算における不確実性が小さくなると判断し、JAEA-TDB では Rai et al.<sup>16)</sup>の報告値 (log *K<sub>f</sub>* = 31.5 ± 1.0)を採用する。

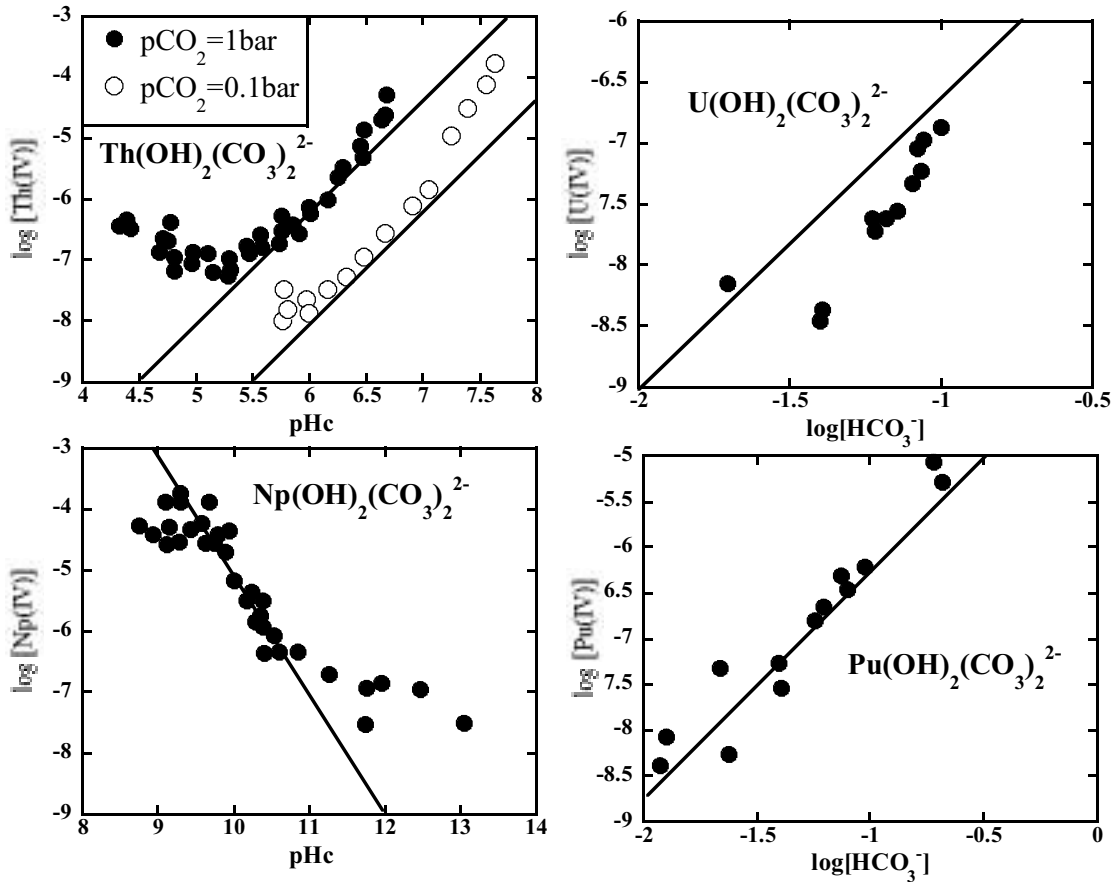


Fig.1 Solubility of AnO<sub>2</sub>(am) with An-OH-CO<sub>3</sub>

## 6. Np(IV)に関するデータ選定

### 6.1 Np(IV) の加水分解定数

OECD/NEA では、溶媒抽出法による Duplessis et al.<sup>18)</sup>の実験データに基づき  $NpOH^{3+}$ ,  $Np(OH)_2^{2+}$ の加水分解定数を選定している (Table 4)。 $Np(OH)_4$ の加水分解定数については Rai et al.<sup>19)</sup>、Eriksen et al.<sup>20)</sup>、Nakayama et al.<sup>21)</sup>の溶解度データと溶解度積より、再計算をして求めている。OECD/NEA のデータ選定後 Fujiwara et al.<sup>22)</sup>は  $NpOH^{3+}$ から  $Np(OH)_4$ の加水分解定数を報告している。この報告では Duplessis et al.<sup>18)</sup>と同様、TTA を用いた溶媒抽出を用いているが、Duplessis et al.<sup>18)</sup>では Np を IV 価に調整後、抽出時の分配比を測定しているが、その時間変化を調べていないのに対し、Fujiwara et al.<sup>22)</sup>では Np(IV)を抽出後逆抽出時の分配を測定し、その時間変化を調べており、分配の平衡到達及び、Np(V)への酸化がないことを確認している。両者の値には有意な差が認められるので、より信頼性が高いデータとして、JAEA-TDB では、Fujiwara et al.<sup>22)</sup>の値を選定する。また、 $Np(OH)_4(aq)$ の加水分解定数について

は、6.2 項で求めた溶解度積及び Rai et al.<sup>19)</sup>、Eriksen et al.<sup>20)</sup>、Nakayama et al.<sup>21)</sup>の溶解度データから求めた値( $\log \eta_s^\circ = 46.4 \pm 1.1$ )と Fujiwara et al.<sup>22)</sup>の実験値を比較すると誤差内で一致している。2つの値の誤差範囲の影響を考え、JAEA-TDB では後者の溶解度データで求めた加水分解定数の値を採用する。

Table 4 Hydrolysis constants of Np(IV)

log $\eta^p$	Duplessis et al. <sup>17)</sup>	Fujiwara et al. <sup>21)</sup>	OECD/NEA <sup>2)</sup>	JAEA-TDB
NpOH <sup>3+</sup>	14.55 ± 0.20	13.91 ± 0.23	14.55 ± 0.20	13.91 ± 0.23
Np(OH) <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	28.35 ± 0.30	27.13 ± 0.15	28.35 ± 0.30	27.13 ± 0.15
Np(OH) <sub>3</sub> <sup>+</sup>		37.70 ± 0.30		37.70 ± 0.30
Np(OH) <sub>4</sub>		46.16 ± 0.30	47.7 ± 1.1	46.4 ± 1.1

### 6.2 NpO<sub>2</sub>(am)の溶解度積

OECD/NEA では溶解度の実験データ(Rai et al.<sup>23)</sup>と Duplessis et al.<sup>17)</sup>により得られた NpOH<sup>3+</sup>、Np(OH)<sub>2</sub><sup>2+</sup>及び Neck et al.<sup>10)</sup>のモデルにより得られた Np(OH)<sub>3</sub><sup>+</sup>の加水分解定数を用いて算出した溶解度積(Table5)を選定している。JAEA-TDB では Rai et al.<sup>23)</sup>の実験データ及び、新たに採用した NpOH<sup>3+</sup>、Np(OH)<sub>2</sub><sup>2+</sup>及び Np(OH)<sub>3</sub><sup>+</sup>の加水分解定数を JAEA-TDB で選定した Fujiwara et al.の値を用いて算出した(6)式で表される溶解度積を採用する。



Table 5 Solubility products of NpO<sub>2</sub>(am)

log $K_s^\circ$	Reference
-56.7 ± 0.500	OECD/NEA <sup>2)</sup>
-55.4 ± 1.000	<b>JAEA-TDB</b>

### 6.3 Np(IV) の水和炭酸錯体

Np(IV)の水和炭酸錯体については、Rai et al.<sup>24)</sup>と Kitamura et al.<sup>25)</sup>、Eriksen et al.<sup>20)</sup>の溶解度実験データがある。OECD/NEA<sup>2)</sup>はそれらのデータから Np(OH)<sub>2</sub>(CO<sub>3</sub>)<sub>2</sub><sup>2+</sup>及び Np(OH)<sub>4</sub>CO<sub>3</sub><sup>2+</sup>あるいは Np(OH)<sub>4</sub>(CO<sub>3</sub>)<sub>2</sub><sup>4+</sup>の生成が強く示唆されるものの、試験手法が異なるため溶解度を制限する固相の特性が変わり、溶解度積の不確実性が大きいとして、データベースに採用していない。このうち Np(OH)<sub>3</sub>CO<sub>3</sub><sup>4-</sup>及び Np(OH)<sub>4</sub>CO<sub>3</sub><sup>2+</sup>の生成を報告しているが、固相を電着で調製する等、手法が異なることもあり、他の9つの報告

と整合的ではない。一方 Rai et al.<sup>24)</sup>は  $\text{Np}(\text{OH})_2(\text{CO}_3)_2^{2+}$ 、Kitamura et al.<sup>25)</sup>は  $\text{Np}(\text{OH})_2(\text{CO}_3)_2^{2+}$ (pH<11)と  $\text{Np}(\text{OH})_4(\text{CO}_3)_2^{2+}$ (pH>11)の生成を報告している。このうち  $\text{Np}(\text{OH})_2(\text{CO}_3)_2^{2+}$ について新たに採用された  $\text{NpO}_2(\text{am})$ の溶解度積を用いて錯生成定数を算出したところ、Rai et al.<sup>24)</sup> ( $\log \eta_{122^\circ} = 43.67 \pm 0.50$ )と Kitamura et al.<sup>25)</sup> ( $\log \eta_{122^\circ} = 45.1 \pm 0.5$ )と比較的整合的な値が得られた。したがって JAEA-TDB では、 $\text{Np}(\text{OH})_2(\text{CO}_3)_2^{2+}$ について、両者の平均値( $\log \eta_{122^\circ} = 44.39 \pm 1.21$ )を採用する。

## 7. Pu(IV)に関するデータ選定

### 7.1 Pu(IV) の加水分解定数

OECD/NEA では、溶媒抽出法による Metivier et al.<sup>26)</sup>の実験データに基づき  $\text{PuOH}^{3+}$ 、 $\text{Pu}(\text{OH})_2^{2+}$ 、 $\text{Pu}(\text{OH})_3^+$ 及び  $\text{Pu}(\text{OH})_4$ の加水分解定数を選定している。OECD/NEA のデータ選定後、Yun et al.<sup>27)</sup> は  $\text{PuOH}^{3+}$ 、 $\text{Pu}(\text{OH})_2^{2+}$ 及び  $\text{Pu}(\text{OH})_3^+$ の加水分解定数を報告している。この報告ではPu(III)、Pu(V)、Pu(VI)の濃度を吸光スペクトルで測定し、Pu(V)とPu(VI)の濃度比から試験溶液中の酸化還元電位を求め、Pu(III)とPu(IV)の標準酸化還元電位を用いてPu(IV)濃度を求めている。そのPu(IV)濃度のpH依存性から加水分解定数を求めている。Metivier et al.<sup>26)</sup>の実験ではPu(IV)の平衡状態を確認していない。低pH条件下ではPu(IV)がPu(III)、Pu(V)、Pu(VI)に不均化しやすいことを踏まえると、Puの各原子価間の平衡状態を確認しない場合、溶存種の不確実性が非常に高くなる。一方Yun et al.<sup>27)</sup>の報告では、不均化して安定した溶液の各原子価のPu濃度を評価しているため、Puの酸化還元や不均化の影響が無視できる。JAEA-TDBでは、Yun et al.<sup>27)</sup>の報告値を選定する。Pu(OH)<sub>4</sub>の加水分解定数について、OECD/NEAではコロイドの影響を考慮して溶解度データに基づく値ではなく、溶媒抽出法によるMetivier et al.<sup>26)</sup>のデータに基づく値を採用している。JAEA-TDBにおいても、Metivier et al.<sup>26)</sup>のデータに基づく値を採用している。

Table 6 Hydrolysis constants of Pu(IV)

$\log \eta^{\circ}$	Yun et al. <sup>26)</sup>	Metivier et al. <sup>25)</sup>	JAEA-TDB
$\text{PuOH}^{3+}$	$14.0 \pm 0.2$	$14.6 \pm 0.2$	$14.0 \pm 0.2$
$\text{Pu}(\text{OH})_2^{2+}$	$26.8 \pm 0.6$	$28.6 \pm 0.3$	$26.8 \pm 0.6$
$\text{Pu}(\text{OH})_3^+$	$38.9 \pm 0.9$	$39.7 \pm 0.4$	$38.9 \pm 0.9$
$\text{Pu}(\text{OH})_4$		$47.5 \pm 0.5$	$47.5 \pm 0.5$



## 7.2 Pu(IV) の水和炭酸錯体

Pu(IV)の水和炭酸錯体については、Rai et al.<sup>28)</sup>と Yamamura et al.<sup>29)</sup>がある。OECD/NEA<sup>2)</sup>はそれらのデータから  $\text{Pu}(\text{OH})_2(\text{CO}_3)_2^{2+}$ と  $\text{Pu}(\text{OH})_4(\text{CO}_3)_2^{4\#}$ の生成が強く示唆されるものの、溶解度積の不確か性が大きいとしてデータベースに採用していない。このうち  $\text{pH}<11$  のデータについては、得られた実験データは加水分解種の影響がないと考えられるので、溶解度は有意な値であると考えられる。

したがって JAEA-TDB では、JAEA-TDB では  $\text{Pu}(\text{OH})_2(\text{CO}_3)_2^{2+}$ について、両者の平均値 ( $\log\eta_{122}^\circ = 47.18 \pm 1.25$ )を採用する。

## 8. データの選定結果

以上の議論で最終的に選定された熱力学データ（暫定値を含む）を、Table 7～14に示す。暫定値については実験で得られたデータを基に再計算し選定をした。

## 9. 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、トリウム、ウラン、ネプツニウム、プルトニウム各 4 価の熱力学データをレビューおよび選定した。データは NEA-TDB の選定値からデータの拡充を行った。Th(IV)については、Ca や Si との錯体を新たに選定した。U(IV), Np(IV), Pu(IV)については加水分解定数と水和炭酸錯体を新たに採用し値を求めた。

## 謝辞

本熱力学データを整備するにあたり、Rai Enviro-Chem 社の Rai 博士より貴重なコメントを受けた。ここに感謝の意を示します。

## 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, Japan Nuclear Cycle Development Institute, JNC TN8400 99-070 (1999).
2. R. Guillaumont, Th. Fanghaenel, J. Fuger, I. Grenthe, V. Neck, D. A. Palmer, M. H. Rand: Update on the Chemical Thermodynamics of Uranium, Neptunium, Plutonium, Americium and Technetium, (OECD/NEA) (2003).
3. M. Rand, J. Fuger, I. Grenthe, V. Neck, D. Rai: Chemical Thermodynamics of Thorium, (OECD/NEA) (2009).
4. 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).
5. 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).
6. D. Rai, M. Yui, D. A. Moore, G. J. Lumetta, K. M. Rosso, Y. Xia, A. R. Felmy, F. N. Skomurski: "Thermodynamic Model for  $\text{ThO}_2(\text{am})$  Solubility in Alkaline Silica Solutions", *J. Sol. Chem.*, 37, pp. 1725-1746(2008).
7. M. Altmaier, V. Neck, Th. Fanghänel: "Solubility of Zr(IV), Th(IV) and Pu(IV) hydrous oxides in  $\text{CaCl}_2$  solutions and the formation of ternary Ca-M(IV)-OH complexes", *Radiochim. Acta*, 96, pp. 541-550(2008).
8. K. A. Kraus, F. Nelson: "Hydrolytic behavior of metal ions: I. The acid constants of uranium(IV) and plutonium(IV)", *J. Am. Chem. Soc.*, 7, pp. 3901-3906(1950).
9. Rai, D., Felmy, A. R., Sterner, S. M., Moore, D. A., Mason, M. J., The solubility of Th(IV) and U(IV) hydrous oxides in concentrated NaCl and  $\text{MgCl}_2$  solutions, *Radiochim. Acta*, 79, pp. 239-247(1997).
10. V. Neck, J. I. Kim: "Solubility and hydrolysis of tetravalent actinides", *Radiochim. Acta*, 89, pp. 1-16(2001).
11. K. Fujiwara, H. Yamana, T. Fujii, H. Moriyama: Determination of uranium(IV) hydrolysis constants and solubility product of  $\text{UO}_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ ", *Radiochim. Acta*, 91, 345-350(2003).
12. T. Yajima, Y. Kawamura, S. Ueta: "Uranium(IV) solubility and hydrolysis constants under reduced conditions", Scientific basis for nuclear waste management XVIII, held in Kyoto, 1994, 353, pp. 1137-1142, (1995).
13. D. Rai, A. R. Felmy, J. L. Ryan: "Uranium(IV) hydrolysis constants and solubility

- product of  $\text{UO}_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}(\text{am})$ ”, *Inorg. Chem.* 29, pp. 260-264(1990).
14. J. L. Ryan, D. Rai, D.: “The solubility of uranium(IV) hydrous oxide in sodium hydroxide solutions under reducing conditions”, *Polyhedron*, 2, pp.947-952(1983).
  15. “Solubility of  $\text{ThO}_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}(\text{am})$  in carbonate solution and the formation of ternary Th(IV) hydroxide-carbonate complexes”, 93, pp. 83-92(2005).
  16. D. Rai, A. R. Felmy, N. J. Hess, D. A. Moore, M. Yui: “A thermodynamic model for the solubility of  $\text{UO}_2(\text{am})$  in the aqueous  $\text{K}^+\text{-Na}^+\text{-HCO}_3^-\text{-CO}_3^{2-}\text{-OH}^-\text{-H}_2\text{O}$  system”, *Radiochim. Acta*, 82, pp. 17-25(1998).
  17. L. Ciavatta, D. Ferri, I. Grenthe, F. Salvatore, K. Spahiu: Studies on metal carbonate equilibria: 4. Reduction of the tris (carbonato) dioxouranate(VI) ion,  $\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3^{4-}$ , in hydrogen carbonate solutions, *Inog. Chem.*, 22, pp.2088-2092(1983).
  18. J. Duplessis, R. Guillaumont: “Hydrolyse du neptunium tetravalent”, *Radiochem. Radioanal. Lett.*, 31, pp.293-302(1977).
  19. Rai, D., Ryan, J. L., Neptunium(IV) hydrous oxide solubility under reducing and carbonate conditions, *Inorg. Chem.*, 24, pp.247-251(1985).
  20. Eriksen, T. E., Ndalamba, P., Cui, D., Bruno, J., Caceci, M. S., Spahiu, K., Solubility of the redox sensitive radionuclides  $^{99}\text{Tc}$  and  $^{237}\text{Np}$  under reducing conditions in neutral to alkaline solutions. Effect of carbonate, SKB, SKB Technical Report, Report TR-93-18, 32 pp.3893-3900(1998).
  21. Nakayama, S., Yamaguchi, T., Sekine, K., Solubility of neptunium(IV) hydrous oxide in aqueous solutions, *Radiochim. Acta*, 74, pp.15-19(1996).
  22. K. Fujiwara, Y. Kohara: “Hydrolysis constants of tetravalent neptunium by using solvent extraction method”, *Radiochim Acta* 96, pp.613-616(2008).
  23. D. Rai, J. L. Swanson, J. L., Ryan: “Solubility of  $\text{NpO}_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}(\text{am})$  in the presence of Cu(I)/Cu(II) redox buffer”, *Radiochim. Acta*, 42, pp.35-41(1987).
  24. Rai, D., Hess, N. J., Felmy, A. R., Moore, D. A., Yui, M.: “A thermodynamic model for the solubility of  $\text{NpO}_2(\text{am})$  in the aqueous  $\text{K}^+\text{-HCO}_3^-\text{-CO}_3^{2-}\text{-OH}^-\text{-H}_2\text{O}$  system”, *Radiochim. Acta*, 84, pp. 159-169(1999).
  25. A. Kitamura, Y. Kohara: Carbonate complexation of neptunium(IV) in highly basic solutions”, *Radiochim. Acta*, 92, pp. 583-588(2004).
  26. Metivier, H., Guillaumont, R., Hydrolyse du plutonium tétravalent, *Radiochem. Radioanal. Lett.*, 10, pp.27-35(1972).
  27. J. I. Yun, H. R. Cho, V. Neck, M. Altmaier, A. Seibert, C. M. Marquardt, C. Walther, Th. Fanghänel: “Investigation of the hydrolysis of plutonium(IV) by a combination of spectroscopy and redox potential measurements”, *Radiochim. Acta*, 95, pp.89-95(2007).

28. Rai, D., Hess, N. J., Felmy, A. R., Moore, D. A., Yui, M., Vitorge, P., A thermodynamic model for the solubility of PuO<sub>2</sub>(am) in the aqueous K<sup>+</sup>-HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>-CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>-OH<sup>-</sup>-H<sub>2</sub>O system, *Radiochim. Acta*, 86, pp.89-99(1999).
29. T. Yamaguchi, Y. Sakamoto, T. Ohnuki: "Effect of the complexation on solubility of Pu(IV) in aqueous carbonate system", *Radiochim. Acta*, 66/67, pp. 9-14(1994).

Table 7 Thermodynamic data of Th(IV) aqueous species selected in JAEA-TDB

Compound	$-fG_m^{\circ}$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#	Reaction	log <sub>10</sub> K <sup>o</sup>	$-fG_m^{\circ}$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#
Th(cr)	0.000			
Th <sup>4+</sup>	-704.783 ± 1.765			
ThOH <sup>3+</sup>	-927.653 ± 6.018	Th <sup>4+</sup> + H <sub>2</sub> O(l) ⇌ #ThOH <sup>3+</sup> + H <sup>+</sup>	-2.500 ± 0.500	14.270 ± 2.854
Th(OH) <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	-1143.673 ± 6.018	Th <sup>4+</sup> + 2 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ #Th(OH) <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + 2 H <sup>+</sup>	-6.200 ± 0.500	35.390 ± 2.854
Th(OH) <sub>3</sub> <sup>+</sup>	-1554.024 ± 6.638	Th <sup>4+</sup> + 4 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ #Th(OH) <sub>3</sub> <sup>+</sup> + 4 H <sup>+</sup>	-17.400 ± 0.700	99.320 ± 3.996
Th <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub> <sup>6+</sup>	-1850.168 ± 10.974	2 Th <sup>4+</sup> + 2 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ #Th <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub> <sup>6+</sup> + 2 H <sup>+</sup>	-5.900 ± 0.500	33.677 ± 2.854
Th <sub>2</sub> (OH) <sub>3</sub> <sup>5+</sup>	-2082.171 ± 10.658	2 Th <sup>4+</sup> + 3 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ #Th <sub>2</sub> (OH) <sub>3</sub> <sup>5+</sup> + 3 H <sup>+</sup>	-6.800 ± 0.200	38.815 ± 1.142
Th <sub>4</sub> (OH) <sub>8</sub> <sup>8+</sup>	-4599.809 ± 21.317	4 Th <sup>4+</sup> + 8 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ #Th <sub>4</sub> (OH) <sub>8</sub> <sup>8+</sup> + 8 H <sup>+</sup>	-20.400 ± 0.400	116.444 ± 2.283
Th <sub>4</sub> (OH) <sub>12</sub> <sup>4+</sup>	-5512.980 ± 21.228	4 Th <sup>4+</sup> + 12 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ #Th <sub>4</sub> (OH) <sub>12</sub> <sup>4+</sup> + 12 H <sup>+</sup>	-26.600 ± 0.200	151.834 ± 1.142
Th <sub>6</sub> (OH) <sub>14</sub> <sup>10+</sup>	-7338.604 ± 32.523	6 Th <sup>4+</sup> + 14 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ #Th <sub>6</sub> (OH) <sub>14</sub> <sup>10+</sup> + 14 H <sup>+</sup>	-36.800 ± 1.200	210.056 ± 6.850
Th <sub>6</sub> (OH) <sub>15</sub> <sup>9+</sup>	-7575.744 ± 32.927	6 Th <sup>4+</sup> + 15 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ #Th <sub>6</sub> (OH) <sub>15</sub> <sup>9+</sup> + 15 H <sup>+</sup>	-36.800 ± 1.500	210.056 ± 8.562
ThF <sup>3+</sup>	-1036.936 ± 5.411	Th <sup>4+</sup> + F <sup>-</sup> ⇌ #ThF <sup>3+</sup>	8.870 ± 0.150	-50.630 ± 0.856
ThF <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	-1357.046 ± 5.631	Th <sup>4+</sup> + 2 F <sup>-</sup> ⇌ #ThF <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	15.630 ± 0.230	-89.217 ± 1.313
ThF <sub>3</sub> <sup>+</sup>	-1667.337 ± 5.763	Th <sup>4+</sup> + 3 F <sup>-</sup> ⇌ #ThF <sub>3</sub> <sup>+</sup>	20.670 ± 0.160	-117.985 ± 0.913
ThF <sub>4</sub> (aq)	-1976.887 ± 6.066	Th <sup>4+</sup> + 4 F <sup>-</sup> ⇌ #ThF <sub>4</sub> (aq)	25.580 ± 0.180	-146.012 ± 1.027
ThCl <sup>3+</sup>	-845.704 ± 5.330	Th <sup>4+</sup> + Cl <sup>-</sup> ⇌ #ThCl <sup>3+</sup>	1.700 ± 0.100	-9.704 ± 0.571
ThSO <sub>4</sub> <sup>2+</sup>	-1484.006 ± 5.620	Th <sup>4+</sup> + SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ⇌ #ThSO <sub>4</sub> <sup>2+</sup>	6.170 ± 0.320	-35.219 ± 1.827
Th(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> (aq)	-2248.102 ± 5.580	Th <sup>4+</sup> + 2 SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ⇌ #Th(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> (aq)	9.690 ± 0.270	-55.311 ± 1.541
Th(SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	-2998.147 ± 5.461	Th <sup>4+</sup> + 3 SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ⇌ #Th(SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	10.748 ± 0.076	-61.352 ± 0.434
ThNO <sub>3</sub> <sup>3+</sup>	-822.997 ± 5.436	Th <sup>4+</sup> + NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ⇌ #ThNO <sub>3</sub> <sup>3+</sup>	1.300 ± 0.200	-7.420 ± 1.142
Th(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	-939.499 ± 5.829	Th <sup>4+</sup> + 2 NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ⇌ #Th(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	2.300 ± 0.400	-13.128 ± 2.283

Table 7 (continued)

Compound	$-fG_m^{\circ}$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#	Reaction	$\log_{10} K^{\circ}$	$-rG_m^{\circ}$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#
ThH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>3+</sup>	-1873.843 ± 5.822	Th <sup>4+</sup> + H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> (aq) ⇌ #ThH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>3+</sup> + H <sup>+</sup>	3.450 ± 0.320	-19.693 ± 1.827
ThH <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> <sup>4+</sup>	-1864.938 ± 5.804	Th <sup>4+</sup> + H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> (aq) ⇌ #ThH <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> <sup>4+</sup>	1.890 ± 0.310	-10.788 ± 1.769
Th(H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	-3038.907 ± 6.430	Th <sup>4+</sup> + 2 H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> (aq) ⇌ #Th(H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + 2 H <sup>+</sup>	6.200 ± 0.320	-35.390 ± 1.827
Th(H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> )(H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> ) <sup>3+</sup>	-3034.455 ± 6.430	Th <sup>4+</sup> + 2 H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> (aq) ⇌ #Th(H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> )(H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> ) <sup>3+</sup> + H <sup>+</sup>	5.420 ± 0.320	-30.938 ± 1.827
Th(CO <sub>3</sub> ) <sub>5</sub> <sup>6-</sup>	-3521.231 ± 6.917	Th <sup>4+</sup> + 5 CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> ⇌ #Th(CO <sub>3</sub> ) <sub>5</sub> <sup>6-</sup>	31.000 ± 0.700	-176.949 ± 3.996
Th(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>	-2285.078 ± 6.070	Th <sup>4+</sup> + 2 CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> + 2 OH <sup>-</sup> ⇌ #Th(CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub> <sup>2-</sup>	36.800 ± 0.500	-210.056 ± 2.854
Th(CO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> OH <sup>5-</sup>	-3176.808 ± 6.217	Th <sup>4+</sup> + 4 CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> + OH <sup>-</sup> ⇌ #Th(CO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> OH <sup>5-</sup>	35.600 ± 0.500	-203.206 ± 2.854
ThCO <sub>3</sub> (OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	-2092.167 ± 6.327	Th <sup>4+</sup> + CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> + 4 OH <sup>-</sup> ⇌ #ThCO <sub>3</sub> (OH) <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	40.400 ± 0.600	-230.605 ± 3.425
<b>Ca<sub>4</sub>[Th(OH)<sub>8</sub>]<sup>2+</sup></b>		<b>Th<sup>4+</sup> + 4 Ca<sup>2+</sup> + 8 OH<sup>-</sup> ⇌ #Ca<sub>4</sub>[Th(OH)<sub>8</sub>]<sup>2+</sup></b>	<b>49.300 ± 0.900</b>	<b>-281.405 ± 5.137</b>
<b>Th(OH)<sub>3</sub>(H<sub>3</sub>SiO<sub>4</sub>)<sub>3</sub><sup>2-</sup></b>		<b>Th<sup>4+</sup> + 3 H<sub>4</sub>SiO<sub>4</sub> + 3 H<sub>2</sub>O ⇌ #Th(OH)<sub>3</sub>(H<sub>3</sub>SiO<sub>4</sub>)<sub>3</sub><sup>2-</sup> + 2 H<sup>+</sup></b>	<b>-27.800 ± 0.700</b>	<b>158.683 ± 3.996</b>

Table 8 Thermodynamic data of Th(IV) solid species selected in JAEA-TDB

Compound	$-fG_m^{\circ}$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#	Reaction	$\log_{10} K^{\circ}$	$-rG_m^{\circ}$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#
ThO <sub>2</sub> (am,fresh)		Th <sup>4+</sup> + 4 OH <sup>-</sup> $\diamond$ 2H <sub>2</sub> O(l)#ThO <sub>2</sub> (am,fresh)	46.700 ± 0.900	-266.566 ± 5.137
ThO <sub>2</sub> (am,aged)		Th <sup>4+</sup> + 4 OH <sup>-</sup> $\diamond$ 2H <sub>2</sub> O(l)#ThO <sub>2</sub> (am,aged)	47.500 ± 0.900	-271.132 ± 5.137
<b>ThO<sub>2</sub>(cr)</b>	<b>-1168.988 ± 3.504</b>	<b>Th<sup>4+</sup> + 4 OH<sup>-</sup> <math>\diamond</math> 2H<sub>2</sub>O(l)#ThO<sub>2</sub>(cr)</b>	<b>54.240* ± 1.113</b>	<b>-309.605 ± 6.359</b>
ThF <sub>4</sub> (cr,hyd)#	-2005.736 ± 10.001	Th <sup>4+</sup> + 4 HF(aq) $\diamond$ #ThF <sub>4</sub> (cr,hyd) + 4 H <sup>+</sup>	19.110 ± 0.400	-109.081 ± 2.283
Th(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·9H <sub>2</sub> O(cr)	-4391.269 ± 5.404	Th <sup>4+</sup> + 9H <sub>2</sub> O(l)#2 SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> $\diamond$ #Th(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·9H <sub>2</sub> O(cr)	11.250 ± 0.096	-64.215 ± 0.548
Na <sub>6</sub> Th(CO <sub>3</sub> ) <sub>5</sub> ·12H <sub>2</sub> O(cr)#	-8002.562 ± 7.301	Th <sup>4+</sup> + 5 CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> + 12H <sub>2</sub> O(l)#6Na <sup>+</sup> $\diamond$ #Na <sub>6</sub> Th(CO <sub>3</sub> ) <sub>5</sub> ·12H <sub>2</sub> O(cr)	42.200 ± 0.800	-240.879 ± 4.566

\*log K value of the reaction based on Gibbs free energy dfG in OECD/NEA<sup>3)</sup>

Table 9 Thermodynamic data of U(IV) aqueous species selected in JAEA-TDB

Compound	$\div_f G_m^\circ$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#	Reaction	log <sub>10</sub> K <sup>o</sup>	$\div_r G_m^\circ$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#
U(cr)	0.000			
U <sup>4+</sup>	-529.860 ± 1.765			
UOH <sup>3+</sup>	<b>-765.345 ± 2.500</b>	U <sup>4+</sup> + H <sub>2</sub> O(l) ⇌ #UOH <sup>3+</sup> + H <sup>+</sup>	<b>-0.2900 ± 0.310</b>	<b>1.655 ± 1.769</b>
U(OH) <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	<b>-834.140 ± 2.135</b>	U <sup>4+</sup> + 2 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ #U(OH) <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + 2 H <sup>+</sup>	<b>-1.7800 ± 0.210</b>	<b>10.160 ± 1.199</b>
U(OH) <sub>3</sub> <sup>+</sup>	<b>-972.124 ± 2.137</b>	U <sup>4+</sup> + 3 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ #U(OH) <sub>3</sub> <sup>+</sup> + 3 H <sup>+</sup>	<b>-5.1500 ± 0.210</b>	<b>29.369 ± 1.199</b>
U(OH) <sub>4</sub> (aq)	<b>-1101.660 ± 8.185</b>	U <sup>4+</sup> + 4 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ #U(OH) <sub>4</sub> (aq) + 4 H <sup>+</sup>	<b>-10.8000 ± 1.400</b>	<b>57.080 ± 7.991</b>
UF <sup>3+</sup>	-865.153 ± 3.474	U <sup>4+</sup> + F <sup>-</sup> ⇌ #UF <sup>3+</sup>	9.420 ± 0.510	-53.770 ± 2.911
UF <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	-1187.431 ± 4.632	U <sup>4+</sup> + 2 F <sup>-</sup> ⇌ #UF <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	16.560 ± 0.710	-94.525 ± 4.053
UF <sub>3</sub> <sup>+</sup>	-1499.378 ± 5.466	U <sup>4+</sup> + 3 F <sup>-</sup> ⇌ #UF <sub>3</sub> <sup>+</sup>	21.890 ± 0.830	-124.949 ± 4.738
UF <sub>4</sub> (aq)	-1806.302 ± 6.388	U <sup>4+</sup> + 4 F <sup>-</sup> ⇌ #UF <sub>4</sub>	26.340 ± 0.960	-150.350 ± 5.480
UF <sub>5</sub> <sup>-</sup>	-2095.760 ± 5.739	U <sup>4+</sup> + 5 F <sup>-</sup> ⇌ #UF <sub>5</sub> <sup>-</sup>	27.730 ± 0.740	-158.284 ± 4.224
UF <sub>6</sub> <sup>2-</sup>	-2389.098 ± 6.028	U <sup>4+</sup> + 6 F <sup>-</sup> ⇌ #UF <sub>6</sub> <sup>2-</sup>	29.800 ± 0.700	-170.100 ± 3.996
UCl <sup>3+</sup>	-670.895 ± 1.918	U <sup>4+</sup> + Cl <sup>-</sup> ⇌ #UCl <sup>3+</sup>	1.720 ± 0.130	-9.818 ± 0.742
UBr <sup>3+</sup>	-642.044 ± 2.109	U <sup>4+</sup> + Br <sup>-</sup> ⇌ #UCl <sup>3+</sup>	1.460 ± 0.200	-8.334 ± 1.142
UI <sup>3+</sup>	-588.719 ± 2.462	U <sup>4+</sup> + I <sup>-</sup> ⇌ #UCl <sup>3+</sup>	1.250 ± 0.300	-7.135 ± 1.712
USO <sub>4</sub> <sup>2+</sup>	-1311.423 ± 2.113	U <sup>4+</sup> + SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ⇌ #USO <sub>4</sub> <sup>2+</sup>	6.580 ± 0.190	-37.559 ± 1.085
U(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> (aq)	-2077.860 ± 2.262	U <sup>4+</sup> + SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ⇌ #USO <sub>4</sub> <sup>2+</sup>	10.510 ± 0.200	-59.992 ± 1.142
UNO <sub>3</sub> <sup>3+</sup>	-649.045 ± 1.960	U <sup>4+</sup> + NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ⇌ #UNO <sub>3</sub> <sup>3+</sup>	1.470 ± 0.130	-8.391 ± 0.742
U(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	-764.576 ± 2.793	U <sup>4+</sup> + 2 NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ⇌ #U(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	2.300 ± 0.350	-13.128 ± 1.998
U(CO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> <sup>4-</sup>	-2841.926 ± 5.958	U <sup>4+</sup> + 4 CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> ⇌ #U(CO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> <sup>4-</sup>	35.120 ± 0.934	-200.466 ± 5.331
U(CO <sub>3</sub> ) <sub>6</sub> <sup>6-</sup>		<b>U<sup>4+</sup> + 5 CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> ⇌ #U(CO<sub>3</sub>)<sub>6</sub><sup>6-</sup></b>	<b>31.500 ± 1.000</b>	<b>-179.803 ± 5.708</b>



Table 9 (continued)

Compound	$\div_f G_m^\circ$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#	Reaction	$\log_{10} K^\circ$	$\div_r G_m^\circ$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#
$U(CO_3)_2(OH)_2^{2-}$		$U^{4+} + 2 CO_3^{2-} + 2 OH^- \rightleftharpoons U(CO_3)_2(OH)_2^{2-}$	$41.560 \pm 1.000$	$-235.912 \pm 5.708$

Table 10 Thermodynamic data of U solid species selected in JAEA-TDB

Compound	${}_{-r}G_m^{\circ}$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#	Reaction	$\log_{10} K^{\circ}$	${}_{-r}G_m^{\circ}$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#
UO <sub>2</sub> (am)	-906.781 ± 5.982	U <sup>4+</sup> + 4 OH <sup>-</sup> ⇌ 2 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ UO <sub>2</sub> (am)	53.700 ± 1.000	-311.087 ± 5.708
UO <sub>2</sub> (cr)	-1031.833 ± 1.004	U <sup>4+</sup> + 4 OH <sup>-</sup> ⇌ 2 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ UO <sub>2</sub> (cr)	60.857* ± 0.360	-347.373 ± 2.053
ζ-UO <sub>3</sub>	-1135.330 ± 1.482	UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + 2 OH <sup>-</sup> ⇌ H <sub>2</sub> O(l) ⇌ ζ-UO <sub>3</sub>	18.479* ± 0.402	-105.479 ± 2.296
η-UO <sub>3</sub>	-1142.301 ± 1.307	UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + 2 OH <sup>-</sup> ⇌ H <sub>2</sub> O(l) ⇌ η-UO <sub>3</sub>	19.700* ± 0.383	-112.450 ± 2.187
ν-UO <sub>3</sub>	-1145.739 ± 1.207	UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + 2 OH <sup>-</sup> ⇌ H <sub>2</sub> O(l) ⇌ ν-UO <sub>3</sub>	20.303* ± 0.373	-115.888 ± 2.129
ζ-UO <sub>3</sub> ·0.9H <sub>2</sub> O	-1374.560 ± 2.460	UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + 2 OH <sup>-</sup> ⇌ 0.1 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ ζ-UO <sub>3</sub> ·0.9H <sub>2</sub> O	23.000* ± 0.529	-131.283 ± 3.021
η-UO <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub>	-1398.683 ± 1.765	UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + 2 OH <sup>-</sup> ⇌ η-UO <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub>	23.071* ± 0.436	-131.692 ± 2.488
UO <sub>3</sub> ·2H <sub>2</sub> O(cr)	-1636.506 ± 1.705	UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + 2 OH <sup>-</sup> + H <sub>2</sub> O(l) ⇌ UO <sub>3</sub> ·2H <sub>2</sub> O(cr)	23.191* ± 0.428	-132.375 ± 2.446
U(OH) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> (cr)	-1766.223 ± 3.385	U <sup>4+</sup> + 2 OH <sup>-</sup> + SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ⇌ U(OH) <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> (cr)	31.170 ± 0.500	-177.920 ± 2.854
U(HPO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O(cr)	-3844.453 ± 3.717	U <sup>4+</sup> + 2 H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> (aq) + 4 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ U(HPO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O(cr) + 4 H <sup>+</sup>	11.790 ± 0.150	-67.298 ± 0.856
UF <sub>6</sub> (cr)	-2069.205 ± 1.842	UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + 6 F <sup>-</sup> + 2 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ UF <sub>6</sub> (cr) + 4 OH <sup>-</sup>	-73.210* ± 0.853	417.854 ± 4.869
UO <sub>2</sub> FOH·2H <sub>2</sub> O(cr)	-1961.032 ± 8.408	UO <sub>2</sub> FOH·H <sub>2</sub> O(cr) + H <sub>2</sub> O(g) ⇌ UO <sub>2</sub> FOH·2H <sub>2</sub> O(cr)	1.883 ± 0.666	-10.750 ± 3.800
UO <sub>2</sub> (IO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> (cr)	-1250.206 ± 2.410	UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + IO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ⇌ UO <sub>2</sub> (IO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> (cr)	-7.880 ± 0.100	-44.979 ± 0.571
UO <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> (cr)	1685.775 ± 2.642	UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> ⇌ UO <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	-1.889* ± 0.560	10.780 ± 3.195
UO <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·2.5H <sub>2</sub> O(cr)	-2298.475 ± 1.803	UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> + 2.5 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ UO <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·2.5H <sub>2</sub> O(cr)	1.589 ± 0.019	-9.070 ± 0.110
UO <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·3H <sub>2</sub> O(cr)	-2416.561 ± 1.811	UO <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·3.5H <sub>2</sub> O(cr) ⇌ UO <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·2.5H <sub>2</sub> O(cr) + 0.5 H <sub>2</sub> O(g)	-0.831 ± 0.023	4.743 ± 0.131
UO <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·3.5H <sub>2</sub> O(cr)	-2535.595 ± 1.806	UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> + 3.5 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ UO <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·3.5H <sub>2</sub> O(cr)	1.585 ± 0.019	-9.050 ± 0.110
UO <sub>2</sub> HPO <sub>4</sub> ·4H <sub>2</sub> O(cr)	-3064.749 ± 2.414	UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> (aq) + 4 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ UO <sub>2</sub> HPO <sub>4</sub> ·4H <sub>2</sub> O(cr)	2.500 ± 0.090	-14.270 ± 0.514
(UO <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O(cr)	-6138.968 ± 6.355	3 UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + 2 H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> (aq) + 4 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ (UO <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ·4H <sub>2</sub> O(cr) + 6 H <sup>+</sup>	5.960 ± 0.300	-34.020 ± 1.712
UO <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (cr)	-1564.701 ± 1.794	UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> ⇌ UO <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (cr)	14.760 ± 0.020	-84.251 ± 0.114
CaU <sub>6</sub> O <sub>19</sub> ·11H <sub>2</sub> O(cr)	-10305.460 ± 13.964	6 UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + Ca <sup>2+</sup> + 18 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ CaU <sub>6</sub> O <sub>19</sub> ·11H <sub>2</sub> O(cr) + 14 H <sup>+</sup>	-40.500 ± 1.600	231.176 ± 9.133

Table 10 (continued)

Compound	$\div_f G_m^\circ$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#	Reaction	$\log_{10} K^\circ$	$\div_r G_m^\circ$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#
Na <sub>4</sub> UO <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> (cr)	-3737.836 ± 2.342	UO <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> <sup>4-</sup> + 4 Na <sup>+</sup> ⇌ Na <sub>4</sub> UO <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> (cr)	5.340 ± 0.1600	-30.481 ± 0.913
K <sub>2</sub> U <sub>6</sub> O <sub>19</sub> ·11H <sub>2</sub> O(cr)	-10337.081 ± 10.956	6 UO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + 2 K <sup>+</sup> + 18 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ K <sub>2</sub> U <sub>6</sub> O <sub>19</sub> ·11H <sub>2</sub> O(cr) + 14 H <sup>+</sup>	-37.100 ± 0.540	211.768 ± 3.082

\*log K value of the reaction based on Gibbs free energy dfG in OECD/NEA<sup>2)</sup>

Table 11 Thermodynamic data of Np(IV) aqueous species selected in JAEA-TDB

Compound	$-_fG_m^{\circ}$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#	Reaction	log <sub>10</sub> <i>K</i> <sup>o</sup>	$-_rG_m^{\circ}$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#
Np(cr)	0.000			
Np <sup>4+</sup>	-491.774 ± 5.586			
<b>NpOH<sup>3+</sup></b>		<b>Np<sup>4+</sup> + H<sub>2</sub>O(l) ⇌ #NpOH<sup>3+</sup> + H<sup>+</sup></b>	<b>-0.090 ± 0.300</b>	<b>0.514 ± 1.712</b>
<b>Np(OH)<sub>2</sub><sup>2+</sup></b>		<b>Np<sup>4+</sup> + 2 H<sub>2</sub>O(l) ⇌ #Np(OH)<sub>2</sub><sup>2+</sup> + 2 H<sup>+</sup></b>	<b>-0.870 ± 0.150</b>	<b>4.966 ± 1.141</b>
<b>Np(OH)<sub>3</sub><sup>+</sup></b>		<b>Np<sup>4+</sup> + 3 H<sub>2</sub>O(l) ⇌ #Np(OH)<sub>3</sub><sup>+</sup> + 3 H<sup>+</sup></b>	<b>-4.300 ± 0.300</b>	<b>24.544 ± 1.712</b>
<b>Np(OH)<sub>4</sub>(aq)</b>		<b>Np<sup>4+</sup> + 4 H<sub>2</sub>O(l) ⇌ #Np(OH)<sub>4</sub>(aq) + 4 H<sup>+</sup></b>	<b>-9.600 ± 1.100</b>	<b>54.797 ± 6.279</b>
NpF <sup>3+</sup>	-824.441 ± 5.686	Np <sup>4+</sup> + F <sup>-</sup> ⇌ #NpF <sup>3+</sup>	8.960 ± 0.140	-51.144 ± 0.799
NpF <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	-1144.436 ± 6.005	Np <sup>4+</sup> + 2 F <sup>-</sup> ⇌ #NpF <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	15.700 ± 0.300	-89.616 ± 1.712
NpCl <sup>3+</sup>	-631.553 ± 5.844	Np <sup>4+</sup> + Cl <sup>-</sup> ⇌ #NpCl <sup>3+</sup>	1.500 ± 0.300	-8.562 ± 1.712
NpI <sup>3+</sup>	-552.059 ± 6.036	Np <sup>4+</sup> + I <sup>-</sup> ⇌ #NpI <sup>3+</sup>	1.500 ± 0.400	-8.562 ± 2.283
NpSO <sub>4</sub> <sup>2+</sup>	1274.887 ± 5.809	Np <sup>4+</sup> + HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ⇌ #NpSO <sub>4</sub> <sup>2+</sup> + H <sup>+</sup>	4.870 ± 0.150	-27.798 ± 0.856
Np(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> (aq)	-2042.873 ± 6.360	Np <sup>4+</sup> + 2 HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ⇌ #Np(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> (aq) + 2 H <sup>+</sup>	7.090 ± 0.250	-40.470 ± 1.427
NpNO <sub>3</sub> <sup>3+</sup>	-613.413 ± 5.667	Np <sup>4+</sup> + NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ⇌ #NpNO <sub>3</sub> <sup>3+</sup>	1.900 ± 0.150	-10.845 ± 0.856
Np(CO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> <sup>4-</sup>	-2812.775 ± 8.240	NpO <sub>2</sub> (am) + 4 CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> + 2 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ #Np(CO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> <sup>4-</sup> + 4 OH <sup>-</sup>	-17.790 ± 0.220	101.550 ± 1.256
Np(CO <sub>3</sub> ) <sub>5</sub> <sup>6-</sup>	-3334.567 ± 8.425	Np(CO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> <sup>4-</sup> + CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> ⇌ #Np(CO <sub>3</sub> ) <sub>5</sub> <sup>6-</sup>	-1.0700 ± 0.300	-1.070 ± 0.300
<b>Np(CO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(OH)<sub>2</sub><sup>2-</sup></b>		<b>Np<sup>4+</sup> + 2 CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> + 2 OH<sup>-</sup> ⇌ #Np(CO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(OH)<sub>2</sub><sup>2-</sup></b>	<b>44.390 ± 1.210</b>	<b>-235.912 ± 5.708</b>

Table 12 Thermodynamic data of Np solid species selected in JAEA-TDB

Compound	$-_fG_m^{\circ}$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#	Reaction	$\log_{10} K^{\circ}$	$-_rG_m^{\circ}$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#
<b>NpO<sub>2</sub>(am)</b>		<b>Np<sup>4+</sup> + 4 OH<sup>-</sup> <math>\diamond</math> 2H<sub>2</sub>O(l) <math>\#</math> NpO<sub>2</sub>(am)</b>	<b>55.400 <math>\pm</math> 0.500</b>	<b>-316.224 <math>\pm</math> 2.854</b>
NpO <sub>2</sub> OH(am, aged)			-4.700 $\pm$ 0.500	26.828 $\pm$ 2.854
NpO <sub>2</sub> OH(am, fresh)			-5.300 $\pm$ 0.200	30.253 $\pm$ 1.142
Na <sub>3</sub> NpF <sub>8</sub> (cr)#	-3521.239 $\pm$ 21.305	NpF <sub>6</sub> (g) + 3 NaF(cr) $\diamond$ #Na <sub>3</sub> NpF <sub>8</sub> (cr) + 0.5 F <sub>2</sub> (g)	7.786 $\pm$ 1.350	-44.954 $\pm$ 7.705
Na <sub>3</sub> NpO <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> (cr)#	-2830.592 $\pm$ 6.365	NpO <sub>2</sub> <sup>+</sup> + 2 CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> + 3 Na <sup>+</sup> $\diamond$ #Na <sub>3</sub> NpO <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> (cr)	14.220 $\pm$ 0.500	-81.168 $\pm$ 2.854
NaNpO <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> ·3.5H <sub>2</sub> O(cr)#	-2590.397 $\pm$ 5.808	NpO <sub>2</sub> <sup>+</sup> + CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> + 3.5 H <sub>2</sub> O + Na <sup>+</sup> $\diamond$ #NaNpO <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> ·3.5H <sub>2</sub> O(cr)	11.000 $\pm$ 0.240	-62.788 $\pm$ 1.370
KNpO <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (s)#	-1793.235 $\pm$ 5.746	NpO <sub>2</sub> <sup>+</sup> + CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> + K <sup>+</sup> $\diamond$ #KNpO <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (s)	13.150 $\pm$ 0.190	-75.061 $\pm$ 1.085
K <sub>3</sub> NpO <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> (s)#	-2899.340 $\pm$ 5.746	NpO <sub>2</sub> <sup>+</sup> + 2 CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> + 3 K <sup>+</sup> $\diamond$ #K <sub>3</sub> NpO <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> (s)	15.460 $\pm$ 0.160	-88.246 $\pm$ 0.913
NpO <sub>3</sub> ·H <sub>2</sub> O(cr)	-1238.997 $\pm$ 6.062	NpO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + 2 H <sub>2</sub> O(l) $\diamond$ #NpO <sub>3</sub> ·H <sub>2</sub> O(cr) + 2 H <sup>+</sup>	-5.470 $\pm$ 0.400	31.223 $\pm$ 2.283
NpO <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (s)	-1407.156 $\pm$ 6.233	NpO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> $\diamond$ #NpO <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (s)	14.596 $\pm$ 0.469	-83.317 $\pm$ 2.678
(NH <sub>4</sub> ) <sub>4</sub> NpO <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> (s)	-2850.284 $\pm$ 6.106	NpO <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> <sup>4+</sup> + 4 NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> $\diamond$ # (NH <sub>4</sub> ) <sub>4</sub> NpO <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> (s)	7.443 $\pm$ 0.297	-42.485 $\pm$ 1.698
K <sub>4</sub> NpO <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> (s)#	-3660.395 $\pm$ 7.641	NpO <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> <sup>4+</sup> + 4 K <sup>+</sup> $\diamond$ #K <sub>4</sub> NpO <sub>2</sub> (CO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> (s)	7.033 $\pm$ 0.876	-40.147 $\pm$ 5.001

Table 13 Thermodynamic data of Pu(IV) aqueous species selected in JAEA-TDB

Compound	$-_fG_m^{\circ}$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#	Reaction	log <sub>10</sub> K <sup>o</sup>	$-_rG_m^{\circ}$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#
Pu(cr)	0.000			
Pu <sup>4+</sup>	-477.988 ± 2.705			
<b>PuOH<sup>3+</sup></b>		<b>Pu<sup>4+</sup> + H<sub>2</sub>O(l) ⇌ #PuOH<sup>3+</sup> + H<sup>+</sup></b>	<b>0.000 ± 0.200</b>	<b>0.000 ± 1.142</b>
<b>Pu(OH)<sub>2</sub><sup>2+</sup></b>		<b>Pu<sup>4+</sup> + 2 H<sub>2</sub>O(l) ⇌ #Pu(OH)<sub>2</sub><sup>2+</sup> + 2 H<sup>+</sup></b>	<b>-1.200 ± 0.600</b>	<b>6.850 ± 1.712</b>
<b>Pu(OH)<sub>3</sub><sup>+</sup></b>		<b>Pu<sup>4+</sup> + 3 H<sub>2</sub>O(l) ⇌ #Pu(OH)<sub>3</sub><sup>+</sup> + 3 H<sup>+</sup></b>	<b>-3.100 ± 0.900</b>	<b>17.695 ± 2.283</b>
Pu(OH) <sub>4</sub> (aq)		Pu <sup>4+</sup> + 4 H <sub>2</sub> O(l) ⇌ #Pu(OH) <sub>4</sub> (aq) + 4 H <sup>+</sup>	-8.500 ± 0.500	48.518 ± 2.854
PuF <sup>3+</sup>	-809.970 ± 2.850	Pu <sup>4+</sup> + F <sup>-</sup> ⇌ #PuF <sup>3+</sup>	8.840 ± 0.100	-50.459 ± 0.571
PuF <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	-1130.651 ± 3.246	Pu <sup>4+</sup> + 2 F <sup>-</sup> ⇌ #PuF <sub>2</sub> <sup>2+</sup>	15.700 ± 0.200	-89.616 ± 1.142
PuCl <sup>3+</sup>	-619.480 ± 3.204	Pu <sup>4+</sup> + Cl <sup>-</sup> ⇌ #PuCl <sup>3+</sup>	1.800 ± 0.300	-10.274 ± 1.712
PuBr <sup>3+</sup>	-590.971 ± 3.206	Pu <sup>4+</sup> + Br <sup>-</sup> ⇌ #PuBr <sup>3+</sup>	1.600 ± 0.300	-9.133 ± 1.712
PuSO <sub>4</sub> <sup>2+</sup>	-1261.329 ± 3.270	Pu <sup>4+</sup> + HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ⇌ #PuSO <sub>4</sub> <sup>2+</sup> + H <sup>+</sup>	4.910 ± 0.220	-28.026 ± 1.256
Pu(SO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> (aq)	-2029.601 ± 4.225	Pu <sup>4+</sup> + 2 HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup> ⇌ #PuSO <sub>4</sub> <sup>2+</sup> + 2 H <sup>+</sup>	7.180 ± 0.320	-40.984 ± 1.827
PuNO <sub>3</sub> <sup>3+</sup>	-599.913 ± 2.868	Pu <sup>4+</sup> + NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ⇌ #PuNO <sub>3</sub> <sup>3+</sup>	1.950 ± 0.150	-11.131 ± 0.856
PuH <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> <sup>4+</sup>	-1641.055 ± 3.569	Pu <sup>4+</sup> + H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> (aq) ⇌ #PuH <sub>3</sub> PO <sub>4</sub> <sup>4+</sup>	2.400 ± 0.300	-13.699 ± 1.712
Pu(CO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> <sup>4-</sup>	-2800.785 ± 7.013	Pu <sup>4+</sup> + 4 CO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ⇌ #Pu(CO <sub>3</sub> ) <sub>4</sub> <sup>4-</sup>	37.000 ± 1.100	-211.198 ± 6.279
Pu(CO <sub>3</sub> ) <sub>5</sub> <sup>6-</sup>	-3320.979 ± 7.261	Pu <sup>4+</sup> + 5 CO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ⇌ #Pu(CO <sub>3</sub> ) <sub>5</sub> <sup>6-</sup>	35.650 ± 1.130	-203.492 ± 6.450
<b>Pu(CO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(OH)<sub>2</sub><sup>2-</sup></b>		<b>Pu<sup>4+</sup> + 2 CO<sub>3</sub><sup>2-</sup> + 2 OH<sup>-</sup> ⇌ #Pu(CO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(OH)<sub>2</sub><sup>2-</sup></b>	<b>47.180 ± 1.250</b>	<b>-269.304 ± 7.185</b>

Table 14 Thermodynamic data of Pu solid species selected in JAEA-TDB

Compound	$\Delta_f G_m^\circ$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#	Reaction	log <sub>10</sub> <i>K</i> <sup>o</sup>	$\Delta_r G_m^\circ$ (kJ·mol <sup>-1</sup> )#
PuO <sub>2</sub> (am)		Pu <sup>4+</sup> + 4 OH <sup>-</sup> $\diamond$ 2H <sub>2</sub> O(l) $\#$ PuO <sub>2</sub> (am)	58.330 $\pm$ 0.520	-332.950 $\pm$ 2.968
PuO <sub>2</sub> OH(am)		PuO <sub>2</sub> <sup>+</sup> + H <sub>2</sub> O(l) $\diamond$ PuO <sub>2</sub> OH(am) $\#$ + 2 H <sup>+</sup>	-5.000 $\pm$ 0.500	28.540 $\pm$ 2.854
Pu(HPO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> (am)		Pu <sup>4+</sup> + 2 HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup> $\diamond$ Pu(HPO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> (am)	30.450 $\pm$ 0.510	-173.810 $\pm$ 2.911
PuO <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub> ·H <sub>2</sub> O(cr)#	-1442.380 $\pm$ 6.368	PuO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + 3 H <sub>2</sub> O(l) $\diamond$ # PuO <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub> ·H <sub>2</sub> O(cr) + 2 H <sup>+</sup>	-5.500 $\pm$ 1.000	31.394 $\pm$ 5.708
PuO <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (s)	-1373.876 $\pm$ 3.912	PuO <sub>2</sub> <sup>2+</sup> + CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> $\diamond$ # PuO <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (s)	14.650 $\pm$ 0.470	-83.623 $\pm$ 2.683

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

組立量	SI基本単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m <sup>2</sup>
体積	立方メートル	m <sup>3</sup>
速度	メートル毎秒	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s <sup>2</sup>
波数	毎メートル	m <sup>-1</sup>
密度, 質量密度	キログラム毎立方メートル	kg/m <sup>3</sup>
面積密度	キログラム毎平方メートル	kg/m <sup>2</sup>
比体積	立方メートル毎キログラム	m <sup>3</sup> /kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m <sup>2</sup>
磁界の強さ	アンペア毎メートル	A/m
量濃度 <sup>(a)</sup> , 濃度	モル毎立方メートル	mol/m <sup>3</sup>
質量濃度	キログラム毎立方メートル	kg/m <sup>3</sup>
輝度	カンデラ毎平方メートル	cd/m <sup>2</sup>
屈折率 <sup>(b)</sup>	(数字の)	1
比透磁率 <sup>(b)</sup>	(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 <sup>(b)</sup>	rad	1 <sup>(b)</sup>	m/m
立体角	ステラジアン <sup>(b)</sup>	sr <sup>(e)</sup>	1 <sup>(b)</sup>	m <sup>2</sup> /m <sup>2</sup>
周波数	ヘルツ <sup>(d)</sup>	Hz		s <sup>-1</sup>
力	ニュートン	N		m kg s <sup>-2</sup>
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m <sup>2</sup>	m <sup>-1</sup> kg s <sup>-2</sup>
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N m	m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup>
仕事率, 工率, 放射束	ワット	W	J/s	m <sup>2</sup> kg s <sup>-3</sup>
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	m <sup>2</sup> kg s <sup>-3</sup> A <sup>-1</sup>
静電容量	ファラド	F	C/V	m <sup>2</sup> kg <sup>-1</sup> s <sup>4</sup> A <sup>2</sup>
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	m <sup>2</sup> kg s <sup>-3</sup> A <sup>-2</sup>
コンダクタンス	ジーメンズ	S	A/V	m <sup>2</sup> kg <sup>-1</sup> s <sup>3</sup> A <sup>2</sup>
磁束	ウェーバ	Wb	Vs	m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup> A <sup>-1</sup>
磁束密度	テスラ	T	Wb/m <sup>2</sup>	kg s <sup>-2</sup> A <sup>-1</sup>
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup> A <sup>-2</sup>
セルシウス温度	セルシウス度 <sup>(e)</sup>	°C		K
光強度	ルーメン	lm	cd sr <sup>(e)</sup>	cd
放射線量の放射能 <sup>(f)</sup>	ベクレル <sup>(d)</sup>	Bq		m <sup>2</sup> cd s <sup>-1</sup>
吸収線量, 比エネルギー分与, カーマ	グレイ	Gy	J/kg	s <sup>-1</sup>
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 <sup>(g)</sup>	Sv	J/kg	m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup>
酵素活性	カタール	kat		s <sup>-1</sup> 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
粘り度	パスカル秒	Pa s	m <sup>-1</sup> kg s <sup>-1</sup>
力のモーメント	ニュートンメートル	N m	m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup>
表面張力	ニュートン毎メートル	N/m	kg s <sup>-2</sup>
角速度	ラジアン毎秒	rad/s	m m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> =s <sup>-1</sup>
角加速度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s <sup>2</sup>	m m <sup>-1</sup> s <sup>-2</sup> =s <sup>-2</sup>
熱流密度, 放射照度	ワット毎平方メートル	W/m <sup>2</sup>	kg s <sup>-3</sup>
熱容量, エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup> K <sup>-1</sup>
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 <sup>2</sup> s <sup>-2</sup> K <sup>-1</sup>
比エネルギー	ジュール毎キログラム	J/kg	m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup>
熱伝導率	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s <sup>-3</sup> K <sup>-1</sup>
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m <sup>3</sup>	m <sup>-1</sup> kg s <sup>-2</sup>
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	m kg s <sup>-3</sup> A <sup>-1</sup>
電荷密度	クーロン毎立方メートル	C/m <sup>3</sup>	m <sup>-3</sup> s A
表面電荷	クーロン毎平方メートル	C/m <sup>2</sup>	m <sup>-2</sup> s A
電束密度, 電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m <sup>2</sup>	m <sup>-2</sup> s A
誘電率	ファラド毎メートル	F/m	m <sup>-3</sup> kg <sup>-1</sup> s <sup>4</sup> A <sup>2</sup>
透磁率	ヘンリー毎メートル	H/m	m kg s <sup>-2</sup> A <sup>-2</sup>
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mol	m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup> mol <sup>-1</sup>
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 <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup> K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup>
照射線量 (X線及びγ線)	クーロン毎キログラム	C/kg	kg <sup>-1</sup> s A
吸収線量	グレイ毎秒	Gy/s	m <sup>2</sup> s <sup>-3</sup>
放射強度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m <sup>4</sup> m <sup>-2</sup> kg s <sup>-3</sup> =m <sup>2</sup> kg s <sup>-3</sup>
放射輝度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	W/(m <sup>2</sup> sr)	m <sup>2</sup> m <sup>-2</sup> kg s <sup>-3</sup> =kg s <sup>-3</sup>
酵素活性濃度	カタール毎立方メートル	kat/m <sup>3</sup>	m <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup> mol

表5. SI接頭語

乗数	接頭語	記号	乗数	接頭語	記号
10 <sup>24</sup>	ヨタ	Y	10 <sup>1</sup>	デシ	d
10 <sup>21</sup>	ゼタ	Z	10 <sup>-2</sup>	センチ	c
10 <sup>18</sup>	エクサ	E	10 <sup>-3</sup>	ミリ	m
10 <sup>15</sup>	ペタ	P	10 <sup>-6</sup>	マイクロ	μ
10 <sup>12</sup>	テラ	T	10 <sup>-9</sup>	ナノ	n
10 <sup>9</sup>	ギガ	G	10 <sup>-12</sup>	ピコ	p
10 <sup>6</sup>	メガ	M	10 <sup>-15</sup>	フェムト	f
10 <sup>3</sup>	キロ	k	10 <sup>-18</sup>	アト	a
10 <sup>2</sup>	ヘクト	h	10 <sup>-21</sup>	ゼプト	z
10 <sup>1</sup>	デカ	da	10 <sup>-24</sup>	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 <sup>2</sup> =10 <sup>4</sup> m <sup>2</sup>
リットル	L, l	1L=1l=1dm <sup>3</sup> =10 <sup>3</sup> cm <sup>3</sup> =10 <sup>-3</sup> m <sup>3</sup>
トン	t	1t=10 <sup>3</sup> 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 <sup>-19</sup> J
ダルトン	Da	1Da=1.660 538 86(28)×10 <sup>-27</sup> 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 <sup>11</sup> 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 <sup>5</sup> 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 <sup>-10</sup> m
海里	M	1 M=1852m
バイン	b	1 b=100fm <sup>2</sup> =(10 <sup>-12</sup> cm) <sup>2</sup> =10 <sup>-28</sup> m <sup>2</sup>
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。
ベレル	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 <sup>-7</sup> J
ダイン	dyn	1 dyn=10 <sup>-5</sup> N
ポアズ	P	1 P=1 dyn s cm <sup>-2</sup> =0.1Pa s
ストークス	St	1 St=1cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> =10 <sup>-4</sup> m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup>
スチルブ	sb	1 sb=1cd cm <sup>-2</sup> =10 <sup>-4</sup> cd m <sup>-2</sup>
フオトル	ph	1 ph=1cd sr cm <sup>-2</sup> 10 <sup>4</sup> lx
ガリ	Gal	1 Gal=1cm s <sup>-2</sup> =10 <sup>-2</sup> ms <sup>-2</sup>
マクスウェル	Mx	1 Mx=1G cm <sup>2</sup> =10 <sup>-8</sup> Wb
ガウス	G	1 G=1Mx cm <sup>-2</sup> =10 <sup>-4</sup> T
エルステッド <sup>(c)</sup>	Oe	1 Oe ≙ (10 <sup>3</sup> /4π)A m <sup>-1</sup>

(c) 3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 <sup>10</sup> Bq
レントゲン	R	1 R=2.58×10 <sup>-4</sup> C/kg
ラド	rad	1 rad=1cGy=10 <sup>-2</sup> Gy
レム	rem	1 rem=1 cSv=10 <sup>-2</sup> Sv
ガンマ	γ	1 γ=1 nT=10 <sup>-9</sup> T
フェルミ	f	1フェルミ=1 fm=10 <sup>-15</sup> m
メートル系カラット		1メートル系カラット = 200 mg = 2×10 <sup>-4</sup> 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 <sup>-6</sup> m

