

JAEA-TDB における有機物関連の 熱力学データの整備

Thermodynamic Data of Compounds and Complexes of Metal Elements
with Organic Ligands for JAEA-TDB

三原 守弘

Morihiro MIHARA

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

本レポートは独立行政法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。
本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ (<http://www.jaea.go.jp>)
より発信されています。

独立行政法人日本原子力研究開発機構 研究技術情報部 研究技術情報課
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根2番地4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to
Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Department,
Japan Atomic Energy Agency
2-4 Shirakata Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, 319-1195 Japan
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2010

JAEA-TDB における有機物関連の熱力学データの整備

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

三原 守弘

(2009 年 12 月 17 日 受理)

日本原子力研究開発機構では、高レベル放射性廃棄物や TRU 廃棄物の地層処分の安全評価の核種移行解析において、設定された地下水中における放射性核種の溶解限度を設定している。この溶解限度の設定のために、放射性核種の熱力学データベースを用いた化学平衡モデルに基づく計算により種々の地下水条件における溶解度を求めている。現在、1999 年に整備・開発された熱力学データベース (JNC-TDB) を 2009 年度中に改定し、日本原子力研究開発機構の熱力学データベース (JAEA-TDB) として整備することを予定している。この改定では、JNC-TDB で対象とされていなかった有機物関連の熱力学データも考慮することとしている。

本報告書は、この JAEA-TDB の整備・開発の一環としてまとめられたものであり、特に、TRU 廃棄物に由来する有機物の熱力学データについて示すものである。整備対象とされた有機物は、シュウ酸、クエン酸、エチレンジアンミン四酢酸およびイソサッカリン酸である。これらの有機物に関しては、経済協力開発機構原子力機関 (OECD/NEA) で整備されており、JAEA-TDB においてもこれらの値を採用した。さらに、OECD/NEA が選定していない有機物の熱力学データについては、既往の報告値や LFER (Liner free energy relationship) などの元素の化学的な類似性を考慮して値を設定した。

Thermodynamic Data of Compounds and Complexes of Metal Elements
with Organic Ligands for JAEA-TDB

Morihiro MIHARA

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

(Received December 17, 2009)

The thermodynamic database is used to evaluate solubility-limiting values of radio-nuclides in various types of groundwater for safety assessment of geological disposal for high-level radioactive waste and TRU waste. It is planned that JAEA-TDB has been developed modifying JNC-TDB released in 1999 by the end of FYJ 2009. The JAEA-TDB is planned to include thermodynamic data of compounds and complexes of metal elements with organic ligands which were not included in JNC-TDB.

This report shows the selected thermodynamic data of compounds and complexes of metal elements with organic ligands which might be included in TRU waste in JAEA-TDB. Selected organics are oxalic acid, citric acid, ethylenediaminetetraacetic acid (EDTA) and iso-saccharinic acid (ISA) which were of interest in the OECD/NEA. The thermodynamic data evaluated by OECD/NEA were selected for JAEA-TDB. However, selected values by OECD/NEA are limited to evaluate the solubility calculation of radio-nuclides. Therefore, other published values and estimated values by LFER, Liner free energy relationship, are also selected as tentative values for JAEA-TDB.

Keywords: Thermodynamic Data, Organic Ligand, Oxalic Acid, Citric Acid, Ethylenediaminetetraacetic Acid, Iso-saccharinic Acid, JAEA-TDB

目次

1. はじめに	1
2. 有機物の配位を考慮する金属元素	2
3. 対象とする有機物	4
4. 整備の基本方針	5
5. シュウ酸 (Oxalic acid)	9
6. クエン酸 (Citric acid)	14
7. エチレンジアミン四酢酸 (EDTA)	19
8. イソサッカリン酸 (ISA)	23
9. おわりに	25
謝辞	25
参考文献	26

Contents

1. Introduction	1
2. Selected metal elements	2
3. Selected organic	4
4. Fundamental procedure of data selection	5
5. Oxalic acid	9
6. Citric acid	14
7. Ethylenediaminetetraacetic acid (EDTA)	19
8. Iso-saccharinic acid (ISA)	23
9. Afterword	25
Acknowledgements	25
References	26

表目次

表-2.1	地層処分に関連する金属元素の化学的類似性分類	3
表-4.1	マスター化学種および標準生成自由エネルギー	6
表-5.1	JAEA-TDB に選定したシュウ酸に関わる熱力学データ (溶存化学種)	10
表-5.2	JAEA-TDB に選定したシュウ酸に関わる熱力学データ (固相)	10
表-5.3	JAEA-TDB に選定したシュウ酸に関わる平衡定数 (溶存化学種)	11
表-5.4	JAEA-TDB に選定したシュウ酸に関わる溶解度積 (固相)	11
表-5.5	JAEA-TDB に選定したシュウ酸に関わる平衡定数 (溶存化学種: 暫定値)	12
表-6.1	JAEA-TDB に選定したクエン酸に関わる熱力学データ (溶存化学種)	15
表-6.2	JAEA-TDB に選定したクエン酸に関わる熱力学データ (固相)	15
表-6.3	JAEA-TDB に選定したクエン酸に関わる平衡定数 (溶存化学種)	16
表-6.4	JAEA-TDB に選定したクエン酸に関わる溶解度積 (固相)	17
表-6.5	JAEA-TDB に選定したクエン酸に関わる平衡定数 (溶存化学種: 暫定値)	17
表-7.1	JAEA-TDB に選定した EDTA に関わる熱力学データ (溶存化学種)	20
表-7.2	JAEA-TDB に選定した EDTA に関わる熱力学データ (固相)	20
表-7.3	JAEA-TDB に選定した EDTA に関わる平衡定数 (溶存化学種)	21
表-7.4	JAEA-TDB に選定した EDTA に関わる溶解度積 (固相)	22
表-7.5	JAEA-TDB に選定した EDTA に関わる平衡定数 (溶存化学種: 暫定値)	22
表-8.1	JAEA-TDB に選定したイソサッカリン酸に関わる平衡定数 (溶存化学種)	24
表-8.2	JAEA-TDB に選定したイソサッカリン酸に関わる溶解度積 (固相)	24
表-8.3	JAEA-TDB に選定したイソサッカリン酸に関わる平衡定数 (溶存化学種: 暫定値)	24

図目次

図-3.1	OECD/NEA で熱力学データの整備対象とされた有機物の構造式	4
図-4.1	CyDTA のランタノイドの平衡定数 (β) とランタノイドイオン半径の逆数との関係	7
図-4.2	EDTA と CyDTA の金属との平衡定数の対数值との関係	8
図-5.1	Ox^{2-} と OH^- の各元素の $\log \beta$ の関係	13
図-6.1	Cl^- および HCl^{2-} と OH^- の各元素の $\log \beta$ の関係	14
図-7.1	EDTA の溶存化学種の pH 依存性	19
図-7.2	Ed^{4+} および HEd^{3+} と OH^- の各元素の $\log \beta$ の関係	20
図-8.1	イソサッカリン酸とグルコン酸の $\log \beta$ の関係	23

1. はじめに

核燃料サイクル開発機構（現日本原子力研究開発機構）は、原子力委員会バックエンド対策専門部会の方針¹⁾に基づき、1999年にわが国における高レベル放射性廃棄物の地層処分の信頼性を示すため、その安全評価について取りまとめを行った²⁾。この安全評価では、ガラス固化体を封入した金属製の容器が破損した後、固化体から地下水に溶出した放射性核種が処分施設内に沈殿、緩衝材中を収着・拡散、地層中を移流・分散（収着を考慮）により移動し、生物圏に達するといったシナリオ（地下水シナリオ）を想定し、線量評価が実施されている。評価では、ガラス固化体から溶出した放射性核種の地下水に対する溶解限度の設定が重要となる。この溶解限度については、様々な地下水条件において評価が行える化学平衡モデルに基づき得られた溶解度が設定されている。化学平衡モデルには、地層処分施設の化学的条件（たとえば、中性領域からアルカリ性領域）および温度条件（地表温度～100℃以下）に対応した放射性核種（元素）などの熱力学データが必要となる。Yui et al.³⁾は、上述した高レベル放射性廃棄物の地層処分の安全評価に用いるために、熱力学データベース（Japan Nuclear Cycle development institute's Thermodynamic Data Base; JNC-TDB^{*}）を整備・開発し、PHREEQC⁴⁾などの化学平衡計算コードで使用できるフォーマットで、誰もが自由に使用できるようにウェブ公開している（website: <http://migrationdb.jaea.go.jp/>）。

また、TRU 廃棄物の地層処分の安全評価についても、核燃料サイクル開発機構は、電気事業連合会と共同でとりまとめを実施し⁵⁾、その安全性を示している。この評価においても、放射性元素の溶解限度を JNC-TDB を用いて、評価している⁶⁾。しかし、JNC-TDB は、高レベル放射性廃棄物の処分を対象として開発されてきた経緯もあり、JNC-TDB には TRU 廃棄物処分における評価対象放射性元素や廃棄物や処分施設に起因する有機物に関連した熱力学データが整備されていない。

このような、熱力学データの開発は、わが国のみならず地層処分に取り組む国々の共通の研究課題である。このため、経済協力開発機構原子力機関（OECD/NEA）にて、熱力学データの整備のガイドラインを設定し^{7,8,9,10)}、それに基づき熱力学データの整備が行われている^{11,12,13)}。1999年に整備した JNC-TDB では、U, Am および Tc については、OECD/NEA が整備した熱力学データ^{11,12,13)}が採用されており、その他の対象元素については、独自のガイドラインに基づくデータの選定が行われた。しかし、2000年以降に OECD/NEA が整備した Np^{14,15)}、Pu^{14,15)}、Ni¹⁶⁾、Se¹⁷⁾、Zr¹⁸⁾、有機物¹⁹⁾および Th²⁰⁾については、JNC-TDB には反映されていない。したがって、これらの熱力学データを逐次取り込みながら日本原子力研究開発機構の熱力学データベース（Japan Atomic Energy Agency's Thermodynamic Data Base; JAEA-TDB）を整備・開発する必要がある。OECD/NEA の熱力学データの選定では、実験的に得ら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、上述のガイドラインに基づく値のみを選定している。したがって、その存在が確実と考えられる溶存化学種についても、実験的に取得された熱力学データが上述のガイドラインを満たさなければ値が選定されない。現状の OECD/NEA のデータのみでは、安全評価に使用するための溶解度を算定することは困難である。OECD/NEA の整備以降の文献の調査や JAEA-TDB 独自の考え方に基づく、TDB の開発を行い、データの網羅性を高める必要がある。さらには、TRU 廃棄物の地層処分における評価に使用することにも考慮し、整備対象とする放射性元素の範囲を拡げ、放射性元素と配位する有機物のデータも含める必要がある。

本報告書は、この JAEA-TDB の整備・開発の一環としてまとめられたものであり、特に、TRU 廃棄物に由来する有機物と金属元素との熱力学データの設定方法および設定値を示すものである。

*:熱力学データとは、標準生成自由エネルギー、標準生成エンタルピー、標準エントロピー、標準熱容量のことを言うが、JNC-TDB では、標準生成自由エネルギーから得られる溶存化学種の化学反応の平衡定数や固相の溶解度積、反応のエンタルピーが記載されている。

2. 有機物の配位を考慮する金属元素

有機物と配位する元素は、陽イオンとして存在する金属元素が主体であり、特に地層処分の地下水シナリオで評価対象とされている放射性元素である。高レベル放射性廃棄物および TRU 廃棄物の地層処分において核種移行対象とされている核種は以下のとおりである^{2,5)}。

C-14, Cl-36, Co-60, Ni-59, Ni-63, Se-79, Sr-90, Zr-93
Nb-94 (Nb-93m), Mo-93, Tc-99, Pd-107, Sn-126, I-129, Cs-135, Cs-137, Sm-131
Cm-244→Pu-240→U-236→Th-232→Ra-228→Th-228
Cm-245→Pu-241→Am-241→Np-237→U-233→Th-229
Cm-246→Pu-242→U-238→U-234→Th-230→Ra-226→Pb-210 (Po-210)
Am-243→Pu-239→U-235→Pa-231→Ac-227

註：下線の核種は高レベル放射性廃棄物の地層処分における核種移行対象核種。TRU 廃棄物の処分では、上記 Sm-131 のみ対象核種外である。() 内の核種については、親核種と放射性平衡として評価されており、核種移行評価は実施されていない。

上述した評価対象核種の内、有機配位子と錯体生成すると考えられる金属元素は以下の 21 元素となる。

Co, Ni, Sr, Zr, Nb, Mo, Tc, Pd, Sn, Cs, Sm, Cm, Pu, U, Th, Ra, Am, Np, Pb, Pa, Ac

また、処分施設内においてもアルカリ金属やアルカリ土類金属などが存在し、これらの金属元素が有機物と錯体生成する可能性がある。核種移行対象の金属元素に加え、Na, K, Mg, Ca, Al 及び Fe の 6 種類の金属元素と有機物との錯体生成を考慮する。

合計 27 元素について、次章で選定した有機配位子との熱力学データを選定する。地層処分の化学的環境は還元性であるが、地下水シナリオにおける隆起・侵食を考慮すると酸化性条件も考慮する必要がある。表-2.1 に示すような還元性および酸化性条件における酸化状態の金属元素⁶⁾を対象に有機物との熱力学データを選定する。酸化状態 VII 価の Tc については、有機物の配位の影響を考慮しなくても可溶性であるため、考慮しないものとする。

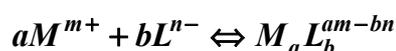
表-2.1 地層処分に関連する金属元素の化学的類似性分類

グループ	元 素		備考
	還 元	酸化性	
アルカリ金属	Na, K, <u>Cs</u>		可溶性
アルカリ土類金属	Mg, Ca, <u>Sr</u> , <u>Ra</u>		
遷移金属元素	II	<u>Co</u> , <u>Ni</u> , <u>Pb</u> , <u>Pd</u> Fe	
	III	Al	
		Fe	
	IV	<u>Sn</u> , <u>Zr</u> <u>Tc</u> , <u>Mo</u>	
	V	Nb	
	VI	<u>Mo</u>	
	VII	<u>Tc</u>	可溶性
ランタノイド + アクチノイド	III	<u>Sm</u> , <u>Ac</u> , <u>Am</u> , <u>Cm</u> <u>Pu</u>	
	IV	<u>Th</u> <u>Pu</u> , <u>U</u> , <u>Np</u> , <u>Pa</u>	—
	V	—	<u>Np</u> , <u>Pa</u>
	VI	—	<u>Pu</u> , <u>U</u>

註：下線の金属元素は、核種移行解析での対象元素である。

4. 整備の基本方針

OECD/NEA で整備された有機物の熱力学データ¹⁹⁾を JAEA-TDB に採用する。熱力学データとして、標準生成自由エネルギー ($\Delta_f G_m^0$, 単位は $J \cdot mol^{-1}$), 標準生成エンタルピー ($\Delta_f H_m^0$, 単位は $J \cdot mol^{-1}$), 標準エントロピー (S_m^0 , 単位は $J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$) の値を示すものとする。固相については、標準熱容量 ($C_{p,m}^0$, 単位は $J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$) の値も記載する。OECD/NEA では、有機物に関わる平衡定数の記載もされているが、マスターとなる溶存化学種 (以下、「マスター化学種」と言う。) が化学平衡計算コードに利用が容易なように統一されていない。このため、マスター化学種を統一し、選定した標準生成自由エネルギーから、298.15K における平衡定数 (K^0) を求めるものとする。マスター化学種である m 価の金属イオン M^{m+} , 溶存有機物 L^{n-} が配位する以下の錯体生成反応を例にする。ここで、 m , n , a および b は正の定数である。



各々溶存化学種の活量を [] で示すと $\log K^0$ は以下の式で表される。

$$\log K^0 = \log [M_a L_b^{am-bn}] - a \log [M^{m+}] - b \log [L^{n-}]$$

有機錯体 ($M_a L_b^{am-bn}$) の生成反応における標準生成自由エネルギー変化 $\Delta_r G_m^0$ (単位は $kJ \cdot mol^{-1}$) は、有機錯体 ($M_a L_b^{am-bn}$) の標準生成自由エネルギー $\Delta_f G_m^0 (M_a L_b^{am-bn})$, 金属イオンの標準生成自由エネルギー $\Delta_f G_m^0 (M^{m+})$, 溶存有機物の標準生成自由エネルギー $\Delta_f G_m^0 (L^{n-})$ から以下の式で表すことができる。

$$\Delta_r G_m^0 = \Delta_f G_m^0 (M_a L_b^{am-bn}) - a \Delta_f G_m^0 (M^{m+}) - b \Delta_f G_m^0 (L^{n-})$$

標準生成自由エネルギーの変化 $\Delta_r G_m^0$ より、以下の式で $\log K^0$ を得ることができる。

$$\log K^0 = -\frac{\Delta_r G_m^0}{2.30RT}$$

ここで、 R は気体定数 ($8.314 J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$), T は 25°C における絶対温度 (298.15K) である。設定したマスター化学種およびその $\Delta_f G_m^0$ を表-4.1 に示す¹⁹⁾

表-4.1 マスター化学種および標準生成自由エネルギー¹⁹⁾

溶存化学種	$\Delta_f G_m^0$	溶存化学種	$\Delta_f G_m^0$	溶存化学種	$\Delta_f G_m^0$
H ⁺	0	PO ₄ ³⁻	-1025.491	Pb ²⁺	-24.238
e ⁻	0	F ⁻	-281.523	Ra ²⁺	—
H ₂ O	-237.14	Li ⁺	-292.918	Th ⁴⁺	—
Ca ²⁺	-552.806	Br ⁻	-103.85	Pa ⁴⁺	—
Mg ²⁺	-455.375	I ⁻	-51.724	Np ⁴⁺	-491.774
Na ⁺	-261.953	TcO ₂ ⁺	—	MoO ₄ ²⁻	—
K ⁺	-282.51	U ⁴⁺	-529.86	Nb(OH) ₅	—
Fe ²⁺	-78.87	Co ²⁺	—	Pd ²⁺	—
Al ³⁺	-491.507	Am ³⁺	-598.698	Nd ³⁺	—
Sr ²⁺	-563.864	Pu ⁴⁺	—	Sb(OH) ₃	—
H ₄ SiO ₄	—	Cs ⁺	-291.456	Bi ₃₊	—
Cl ⁻	-131.217	Ni ²⁺	-45.773	Po ⁴⁺	—
CO ₃ ²⁻	-527.9	SeO ₄ ²⁻	—	Ac ³⁺	—
SO ₄ ²⁻	-744.004	Zr(OH) ₄	—	Cm ³⁺	—
NO ₃ ⁻	-110.794	Sn(OH) ₄	—	Tl ⁺	-32.4
B(OH) ₃	-969.268	Sm ³⁺	—	Ag ⁺	77.096

単位: kJ・mol⁻¹

一方、OECD/NEAの熱力学データには、存在が確実と考えられる溶存化学種についても、OECD/NEAのガイドラインを満たさなければ、値が選定されていないため、データの網羅性に欠けるといった問題がある。これを解決するために有機物のデータが豊富に収集されているSmith and Martellが編纂した有機物と金属錯体の平衡定数データベース^{21,22)}を引用するものとする(Smith and Martell, 1977; Smith and Martell, 1989, 各々「S&M1997」²¹⁾および「S&M1989」²²⁾と略す)。Smith and Martellのデータベースでは、アクチノイドも対象としてデータが収集されており、データの網羅性は高い。また、英国の熱力学データベースHATCHES²³⁾やスウェーデン王立工科大学で開発している熱力学データベースHYDRA²⁴⁾でも、有機物に関するデータのほとんどをSmith and Martell^{21,22)}から引用している。しかし、各実験データに対するレビューは記されていないので、データ選定の追跡性に欠けるといった問題点もある。このため、JAEA-TDBでは暫定値として扱うものとする。

Smith and Martell^{21,22)}によって収集されているデータは必ずしも、イオン強度0 mol・kg⁻¹の平衡定数が記載されているわけではない。25℃(一部のデータは、18℃~40℃)におけるイオン強度(I_m) 0 mol・kg⁻¹の値が存在する場合は、その値を採用するが、存在しない場合には、活量係数の補正を実施し、イオン強度0 mol・kg⁻¹の値を求めるものとする。OECD/NEAでは、SIT式による活量補正によりイオン強度0 mol・kg⁻¹の値を得ているが¹⁹⁾、Smith and Martell^{21,22)}では、試験溶液の記載が無い場合、SIT式を使用することができない。このため、溶存イオン種に拠らないDavies式²⁵⁾を用いて活量係数(γ_i)を算定し、イオン強度0 mol・kg⁻¹での値を求める。

ここで、 Z_i は対象とする溶存イオンの電子価である。但し、イオン強度が0.3 mol・kg⁻¹以上の平衡定数を採用する際には、Davies式でイオン強度を0.3 mol・kg⁻¹と固定し、活量係数を算定・補正するものとする。Rai et al.は、イオン強度1 mol・kg⁻¹におけるEDTAとFe³⁺の錯体生成反応の平衡定数を、SITを用いてlog K^0 を得ている²⁶⁾。上述のDavies式でEDTAとFe³⁺の錯体生成反応

の平衡定数を求めると、Rai et al. の報告値²⁶⁾との差異は0.1程度であり、大きな差が無く本手法が概ね適用できる。

$$\log_{10} \gamma_i = -0.5100 Z_i^2 \left(\frac{\sqrt{I_m}}{1 + \sqrt{I_m}} - 0.3 I_m \right)$$

上述した方法で選定できないデータについては、化学的に類似した金属元素のデータを参照する方法で値を設定するものとする。同族の金属元素の平衡定数は中心金属イオンの半径および電荷によって、生成定数の大小が決まることから²⁷⁾、半径の大きさの近い元素の平衡定数は、非常に近い値を示すものと考えられる。たとえば、ランタノイドイオンについて、カルボン酸イオンなどの平衡定数の対数値は、ランタノイドイオン半径の逆数と直線関係になることが知られている²⁷⁾。3価のランタノイドイオンとシクロヘキサン環骨格キレート剤 (CyDTA) との平衡定数 (β) とイオン半径の逆数との関係を図-4.1 に示す²⁷⁾。平衡定数の対数値とイオン半径の逆数は直線関係にあり、イオン半径が小さくなると平衡定数は大きくなる。平衡定数と金属イオン電荷とそのイオン半径の比で関係づけている例もある。²⁷⁾

上述に関連して、様々な反応の平衡定数や速度定数の間に一次の相関関係が見いだされている。この関係は LFER (Linear free energy relationship) と呼ばれている。LFER を利用し、内挿、あるいは外挿し、値が存在しない有機物と金属元素の平衡定数を求めるものとする。具体的には、異なる配位子の平衡定数の関係をプロットし、LFER が見られた場合に、一次の式をフィッティングによって求め、その式にて平衡定数を算定する。例えば、図-4.2 に示す EDTA と CyDTA の金属元素のとの平衡定数の対数値には、良好な直線関係が示されている²⁷⁾。CyDTA と金属元素の平衡定数から EDTA の値を推定することが可能である。後述する ISA とグルコン酸の金属元素との平衡定数の対数値についても良好な LFER が示されており、グルコン酸の平衡定数から ISA と金属元素の平衡定数が推定されている²⁸⁾。この方法で設定した値も暫定値とする。

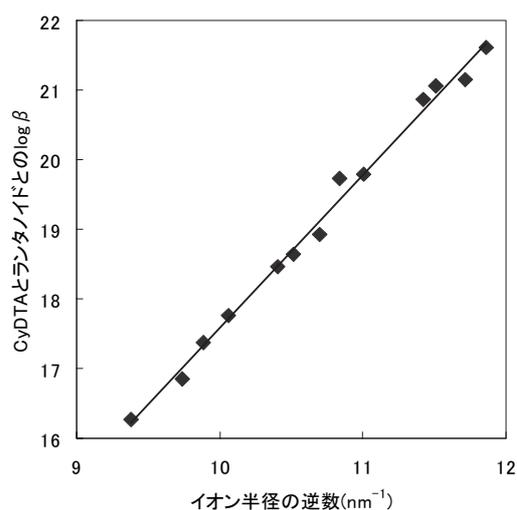


図-4.1 CyDTA のランタノイドの平衡定数 (β) とランタノイドイオン半径の逆数*との関係²⁷⁾

*: 文献 27) には、横軸の単位は記載されていないが、ランタノイドのイオン半径は 0.085~0.1nm であるので、横軸を nm の逆数と判断した。

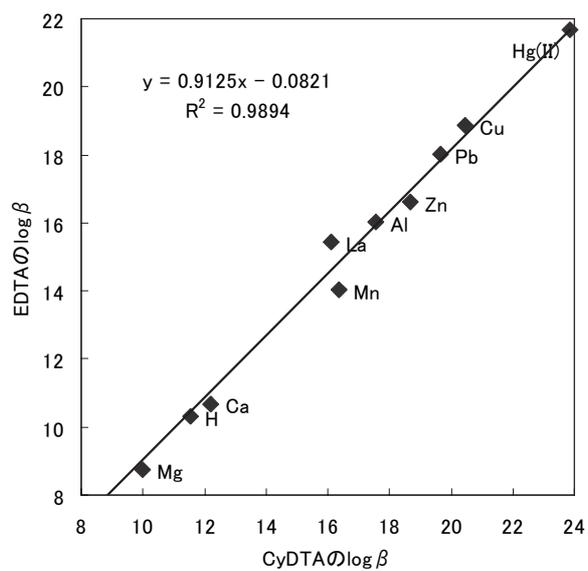


図-4.2 EDTA と CyDTA の金属との平衡定数の対数值との関係 ²⁷⁾

5. シュウ酸 (Oxalic acid)

シュウ酸は、構造式が HOOC-COOH ($\text{C}_2\text{H}_2\text{O}_4$, 分子量 $90.0355\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$) で表わされるもっとも単純なジカルボン酸である。無水のシュウ酸は、天然には存在せず、二水物 ($\text{C}_2\text{H}_2\text{O}_4\cdot 2\text{H}_2\text{O}$, 分子量 $126.066\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$) として、工業的にも作製される。JAEA-TDB では、シュウ酸を H_2Ox , シュウ酸配位子を Ox^{2-} と表記する。

Ox^{2-} の分子量は、 $88.0196\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ となり、OECD/NEA によって選定された標準生成自由エネルギー ($\Delta_f G_m^0$) は $-680.134 \pm 1.830\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, エンタルピー ($\Delta_f H_m^0$) は $-830.660 \pm 1.592\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, 標準生成エントロピー (S_m^0) は $47.597 \pm 3.020\text{J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$ である¹⁹⁾。JAEA-TDB に採用した溶存化学種および固相の熱力学データを表-5.1 および表-5.2 に示す。固相については、標準熱容量 ($C_{p,m}^0$) の値も記載する。なお、熱力学データの下段には、95%誤差を示す。表-5.1 および表-5.2 に記載された標準生成自由エネルギーから算定した平衡定数および溶解度積を表-5.3 および表-5.4 に示す。

次に Smith and Martell の値^{21,22)} を活量補正して得た平衡定数を表-5.5 に示す。Smith and Martell では、 Ox^{2-} 以外に、 HOx^- も金属の配位子として考慮されているが、OECD/NEA¹⁹⁾ で選定された表-5.3 に示す HOx^- の平衡定数は $10^{4.25}$ であり、pH4.25 以下でないと HOx^- は支配的な溶存化学種とはならない。地層処分の化学的な地下水の環境は、中性領域からアルカリ性領域と想定されるため^{2,5)}, HOx^- の平衡定数は考慮しないものとする。OECD/NEA¹⁹⁾ および Smith and Martell^{21,22)} にも記載されていない元素については、LFER により値を推定する。LFER については、各金属元素と OH^- との平衡定数の対数値と OECD/NEA が設定した Ox^{2-} が一つ配位した平衡定数 (β_1) および二つ配位した平衡定数 (β_2) の対数値をプロットし、直線関係が成立するか否かを確認した。図-5.1 にその結果を示す。 Ox^{2-} と OH^- の平衡定数の対数値に関して良好な直線関係が得られたため、図-5.1 に示される関係式で、他の元素の β_1 および β_2 を求めた。この β_1 および β_2 についても表-5.5 に併せて示す。この表-5.5 に示した値は JAEA-TDB では、暫定値として示すものである。Smith and Martell の値^{21,22)} のそのほとんどについて、誤差が示されていないため、表-5.5 には誤差の値を示していない。

表-5.1 JAEA-TDB に選定したシュウ酸に関する熱力学データ（溶存化学種）

溶存化学種	$\Delta_f G_m^0$ kJ. mol ⁻¹	$\Delta_f H_m^0$ kJ. mol ⁻¹	S_m^0 J. K ⁻¹ . mol ⁻¹
Ox ²⁻	-680.134 ±1.830	-830.660 ±1.592	47.597 ±3.020
HOx ⁻	-704.393 ±1.831	-823.360 ±1.588	153.447 ±3.045
H ₂ Ox(aq)	-712.384 ±1.839	-820.060 ±1.508	191.318 ±3.523
NiOx	-755.531 ±1.998	-885.672 ±1.843	15.159 ±3.561
Ni(Ox) ₂ ²⁻	-1449.650 ±3.761	-1724.132 ±3.317	83.499 ±6.423
AmOx ⁺	-1315.991 ±5.166	—	—
Am(Ox) ₂ ⁻	-2020.099 ±6.107	—	—
Am(Ox) ₃ ³⁻	-2713.304 ±9.237	—	—
NpO ₂ Ox ⁻	-1610.160 ±5.945	—	—
NpO ₂ (Ox) ₂ ³⁻	-2301.140 ±6.809	—	—
UO ₂ Ox(aq)	-1673.383 ±2.690	-1824.300 ±18.300	170.958 ±62.039
UO ₂ (Ox) ₂ ²⁻	-2379.317 ±4.145	—	—
UO ₂ (Ox) ₃ ⁴⁻	-3071.723 ±10.320	—	—
MgOx(aq)	-1155.830 ±2.277	—	—
Mg(Ox) ₂ ²⁻	-1845.154 ±3.922	—	—
CaOx(aq)	-1251.149 ±2.138	—	—
Ca(Ox) ₂ ²⁻	-1936.020 ±3.016	—	—

註：下段は、95%誤差

表-5.2 JAEA-TDB に選定したシュウ酸に関する熱力学データ（固相）

固相名	$\Delta_f G_m^0$ kJ. mol ⁻¹	$\Delta_f H_m^0$ kJ. mol ⁻¹	S_m^0 J. K ⁻¹ . mol ⁻¹	$C_{p,m}^0$ J. K ⁻¹ . mol ⁻¹
α-H ₂ Ox	-698.549 ±1.502	-828.800 ±1.500	115.600 ±0.200	105.900 ±0.200
β-H ₂ Ox	—	-827.500 ±1.500	—	—
H ₂ Ox:2H ₂ O(cr)	—	-1427.000 ±1.500	—	—
UO ₂ Ox:3H ₂ O(cr)	-2395.078 ±3.103	-2702.000 ±18.000	347.517 ±63.351	—
CaOx:H ₂ O(cr)	-1519.912 ±2.138	-1680.990 ±1.945	156.370 ±2.000	153.340 ±2.000
CaOx:2H ₂ O(cr)	-1754.598 ±2.139	-1970.520 ±2.180	205.678 ±5.006	—
CaOx:3H ₂ O(cr)	-1991.110 ±2.126	-2260.850 ±2.289	258.429 ±5.452	—

註：下段は、95%誤差

表-5.3 JAEA-TDB に選定したシュウ酸に関わる平衡定数（溶存化学種）

溶存化学種	化学反応式*	選定値 logK ^o	誤差	出典
H ₂ Ox	H ⁺ + Ox ²⁻ = HOx ⁻	4.250	±0.010	OECD/NEA
H ₂ Ox	2H ⁺ + Ox ²⁻ = H ₂ Ox ⁻	5.650	±0.032	OECD/NEA
MgOx	Mg ²⁺ + Ox ²⁻ = MgOx	3.560	±0.040	OECD/NEA
MgOx ₂ ²⁻	Mg ²⁺ + 2Ox ²⁻ = MgOx ₂ ²⁻	5.170	±0.080	OECD/NEA
CaOx	Ca ²⁺ + Ox ²⁻ = CaOx	3.190	±0.060	OECD/NEA
CaOx ₂ ²⁻	Ca ²⁺ + 2Ox ²⁻ = CaOx ₂ ²⁻	4.020	±0.199	OECD/NEA
NiOx	Ni ²⁺ + Ox ²⁻ = NiOx	5.190	±0.040	OECD/NEA
NiOx ₂ ²⁻	Ni ²⁺ + 2Ox ²⁻ = NiOx ₂ ²⁻	7.640	±0.070	OECD/NEA
AmOx ⁺	Am ³⁺ + Ox ²⁻ = AmOx ⁺	6.510	±0.150	OECD/NEA
AmOx ₂ ⁻	Am ³⁺ + 2Ox ²⁻ = AmOx ₂ ⁻	10.710	±0.200	OECD/NEA
AmOx ₃ ²⁻	Am ³⁺ + 3Ox ²⁻ = AmOx ₃ ²⁻	13.000	±1.000	OECD/NEA
NpO ₂ Ox ⁻	NpO ₂ ⁺ + Ox ²⁻ = NpO ₂ Ox ⁻	3.900	±0.100	OECD/NEA
	Np ⁴⁺ + Ox ²⁻ - 4H ⁺ - e ⁻ + 2H ₂ O = NpO ₂ Ox ⁻	-6.312	±1.393	
NpO ₂ Ox ₂ ³⁻	NpO ₂ ⁺ + 2Ox ²⁻ = NpO ₂ Ox ₂ ³⁻	5.800	±0.200	OECD/NEA
	Np ⁴⁺ + 2Ox ²⁻ - 4H ⁺ - e ⁻ + 2H ₂ O = NpO ₂ Ox ₂ ³⁻	-4.412	±1.403	
UO ₂ Ox	UO ₂ ²⁺ + Ox ²⁻ = UO ₂ Ox	7.130	±0.160	OECD/NEA
	U ⁴⁺ + Ox ²⁻ - 4H ⁺ - 2e ⁻ + 2H ₂ O = UO ₂ Ox	-1.908	±0.165	
UO ₂ Ox ₂ ²⁻	UO ₂ ²⁺ + 2Ox ²⁻ = UO ₂ Ox ₂ ²⁻	11.650	±0.150	OECD/NEA
	U ⁴⁺ + 2Ox ²⁻ - 4H ⁺ - 2e ⁻ + 2H ₂ O = UO ₂ Ox ₂ ²⁻	2.612	±0.156	
UO ₂ Ox ₃ ⁴⁻	UO ₂ ²⁺ + 3Ox ²⁻ = UO ₂ Ox ₃ ⁴⁻	13.800	±1.500	OECD/NEA
	U ⁴⁺ + 3Ox ²⁻ - 4H ⁺ - 2e ⁻ + 2H ₂ O = UO ₂ Ox ₃ ⁴⁻	4.762	±1.501	

*: 化学反応式が2種類記載されている場合は、下段にマスター化学種で記載された化学反応式を記載

表-5.4 JAEA-TDB に選定したシュウ酸に関わる溶解度積（固相）

固相名	化学式	化学反応式*	溶解度積 logK ^o _{sp}	誤差	出典
UO ₂ Ox:3H ₂ O(cr)	UO ₂ Ox:3H ₂ O	= UO ₂ Ox + 3H ₂ O	-1.800	±0.270	OECD/NEA
		= UO ₂ ²⁺ + Ox ²⁻ - 4H ⁺ - 2e ⁻ + 5H ₂ O	-8.930	±0.314	
CaOx:H ₂ O(cr)	CaOx:H ₂ O	=H ₂ O + Ca ²⁺ + Ox ²⁻	-8.730	±0.060	OECD/NEA
CaOx:2H ₂ O(cr)	CaOx:2H ₂ O	=2H ₂ O + Ca ²⁺ + Ox ²⁻	-8.300	±0.060	OECD/NEA
CaOx:3H ₂ O(cr)	CaOx:3H ₂ O	=3H ₂ O + Ca ²⁺ + Ox ²⁻	-8.190	±0.040	OECD/NEA

*: 化学反応式が2種類記載されている場合は、下段にマスター化学種で記載された化学反応式を記載

表-5.5 JAEA-TDB に選定したシュウ酸に関わる平衡定数（溶存化学種：暫定値）

溶存化学種	化学反応式	選定値 $\log K^0$	出典*
NaOx ⁻	Na ⁺ + Ox ²⁻ = NaOx ⁻	1.00	S&M1989
KOx ⁻	K ⁺ + Ox ²⁻ = KOx ⁻	0.90	S&M1989
SrOx	Sr ²⁺ + Ox ²⁻ = SrOx	2.33	S&M1977
SrOx ₂ ²⁻	Sr ²⁺ + 2Ox ²⁻ = SrOx ₂ ²⁻	2.98	S&M1977
RaOx	Ra ²⁺ + Ox ²⁻ = RaOx	2.78	LFER
RaOx ₂ ²⁻	Ra ²⁺ + 2Ox ²⁻ = RaOx ₂ ²⁻	3.44	LFER
FeOx	Fe ²⁺ + Ox ²⁻ = FeOx	4.13	S&M1977
FeOx ₂ ²⁻	Fe ²⁺ + 2Ox ²⁻ = FeOx ₂ ²⁻	6.23	S&M1977
CoOx	Co ²⁺ + Ox ²⁻ = CoOx	4.72	S&M1977
CoOx ₂ ²⁻	Co ²⁺ + 2Ox ²⁻ = CoOx ₂ ²⁻	7.00	S&M1977
PbOx	Pb ⁺ + 2Ox ²⁻ = PbOx	4.91	S&M1977
PbOx ₂ ²⁻	Pb + 2Ox ²⁻ = PbOx ₂ ²⁻	6.76	S&M1977
AlOx ⁺	Al ³⁺ + Ox ²⁻ = AlOx ⁺	7.72	S&M1977
AlOx ₂ ⁻	Al ³⁺ + 2Ox ²⁻ = AlOx ₂ ⁻	13.20	S&M1977
AlOx ₃ ³⁻	Al ³⁺ + 3Ox ²⁻ = AlOx ₃ ³⁻	16.74	S&M1977
ZrOx ²⁺	Zr ⁴⁺ + Ox ²⁻ = ZrOx ²⁺	10.52	LFER
ZrOx ₂	Zr ⁴⁺ + 2Ox ²⁻ = ZrOx ₂	18.15	LFER
TcOOx	TcO ²⁺ + Ox ²⁻ = TcOOx	9.50	LFER
TcOOx ₂ ²⁻	TcO ²⁺ + 2Ox ²⁻ = TcOOx ₂ ²⁻	16.21	LFER
SmOx ⁺	Sm ³⁺ + Ox ²⁻ = SmOx ⁺	6.30	LFER
SmOx ₂ ⁻	Sm ³⁺ + 2Ox ²⁻ = SmOx ₂ ⁻	10.13	LFER
AcOx ⁺	Ac ³⁺ + Ox ²⁻ = AcOx ⁺	5.65	S&M1977
AcOx ₂ ⁻	Ac ³⁺ + 2Ox ²⁻ = AcOx ₂ ⁻	8.80	S&M1977
CmOx ⁺	Cm ³⁺ + Ox ²⁻ = CmOx ⁺	6.54	S&M1977
CmOx ₂ ⁻	Cm ³⁺ + 2Ox ²⁻ = CmOx ₂ ⁻	10.57	S&M1977
ThOx ²⁺	Th ⁴⁺ + Ox ²⁻ = ThOx ²⁺	10.60	S&M1977
ThOx ₂	Th ⁴⁺ + 2Ox ²⁻ = ThOx ₂	20.20	S&M1977
ThOx ₃ ²⁺	Th ⁴⁺ + 3Ox ²⁻ = ThOx ₃ ²⁺	26.40	S&M1977
PuOx ²⁺	Pu ⁴⁺ + Ox ²⁻ = PuOx ²⁺	10.34	LFER
PuOx ₂	Pu ⁴⁺ + 2Ox ²⁻ = PuOx ₂	17.80	LFER
UOx ²⁺	U ⁴⁺ + Ox ²⁻ = UOx ²⁺	10.18	LFER
UOx ₂	U ⁴⁺ + 2Ox ²⁻ = UOx ₂	17.50	LFER
NpOx ²⁺	Np ⁴⁺ + Ox ²⁻ = NpOx ²⁺	10.29	LFER
NpOx ₂	Np ⁴⁺ + 2Ox ²⁻ = NpOx ₂	17.71	LFER
PuO ₂ Ox	PuO ₂ ²⁺ + Ox ²⁻ = PuO ₂ Ox	7.25	LFER
PuO ₂ Ox ₂ ²⁻	PuO ₂ ²⁺ + 2Ox ²⁻ = PuO ₂ Ox ₂ ²⁻	11.94	LFER

*: Smith and Martell^{21,22)}については、イオン強度 0mol・kg⁻¹の値に補正し記載

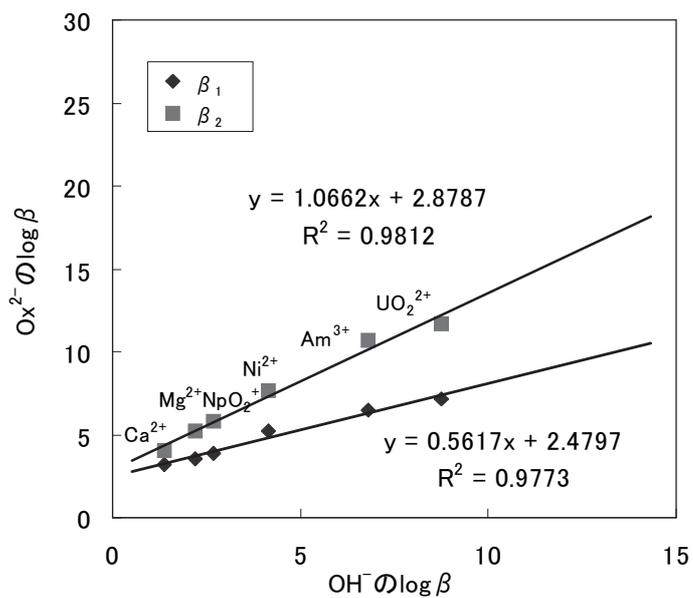


図-5.1 OX²⁻とOH⁻の各元素のlogβの関係

6. クエン酸 (Citric acid)

クエン酸は、構造式が $\text{HOOC}-\text{C}(\text{OH})-(\text{COOH})-\text{CH}_2-\text{COOH}$ ($\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$, 分子量 $192.123\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$) で表わされるトリカルボン酸である。JAEA-TDB では、クエン酸を H_3Ci , クエン酸配位子を Ci^{3-} と表記する。

Ci^{3-} の分子量は、 $190.1094\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ となり、OECD/NEA によって選定された標準生成自由エネルギー ($\Delta_f G_m^0$) は $-1162.258 \pm 2.014\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, 標準生成エンタルピー ($\Delta_f H_m^0$) は $-1519.920 \pm 2.070\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, 標準エントロピー (S_m^0) は $75.587 \pm 1.855\text{J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$ である¹⁹⁾。OECD/NEA が選定した熱力学データを JAEA-TDB にも採用する。採用した溶存化学種および固相の熱力学データ (298.15K) を表-6.1 および表-6.2 に示す。表-6.1 および表-6.2 で記載された標準生成自由エネルギーから算定した平衡定数および溶解度積を表-6.3 および表-6.4 にまとめる。

次に Smith and Martell の値^{21,22)} を活量補正して得た平衡定数を表-6.5 に示す。Smith and Martell では、 Ci^{3-} 以外に、 HCi^{2-} や H_2Ci^- も金属の配位子として考慮しているが、OECD/NEA で選定された表-6.3 に示す HCi^{2-} の平衡定数は $10^{6.36}$, H_2Ci^- は $10^{11.14}$ である。 H_2Ci^- は酸性領域において支配的であるが、 HCi^{2-} は中性領域においても支配的になる可能性がある。このため Ci^{3-} と HCi^{2-} を配位子として考慮する。OECD/NEA および Smith and Martell にも記載されていない元素については、LFER により値を推定する。LFER については、シュウ酸 (Ox^{2-}) の場合と同様に各金属元素と OH^- との平衡定数対数値と OECD/NEA が設定した Ci^{3-} および HCi^{2-} と各金属元素の平衡定数 (β_1) の対数値をプロットし、直線関係が成立するか否かを確認した。図-6.1 にその結果を示す。 Ci^{3-} および HCi^{2-} と OH^- の平衡定数の対数値に関して、 Ox^{2-} の場合のように 1 に近い決定係数は得られていないが、比較的良好な直線関係が得られた。クエン酸の場合も図-6.1 に示される関係式で、他の元素の β を求めた。この β についても表-6.5 に併せて示す。この表-6.5 に示した値は JAEA-TDB では、暫定値として示すものである。Smith and Martell の値^{21,22)} のそのほとんどについて、誤差が示されていないため、表-6.5 には誤差の値を示していない。

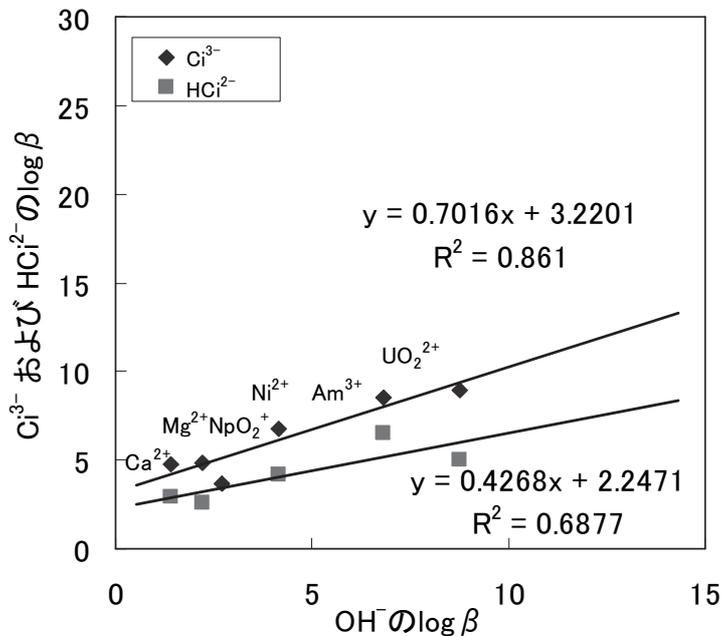


図-6.1 Ci^{3-} および HCi^{2-} と OH^- の各元素の $\log \beta$ の関係

表-6.1 JAEA-TDB に選定したクエン酸に関わる熱力学データ（溶存化学種）

溶存化学種	$\Delta_f G_m^0$ kJ.mol ⁻¹	$\Delta_f H_m^0$ kJ.mol ⁻¹	S_m^0 J.K ⁻¹ .mol ⁻¹
Ci ³⁻	-1162.258 ±2.014	-1519.920 ±2.070	75.587 ±1.855
HCi ²⁻	-1198.561 ±2.011	-1516.620 ±2.048	208.417 ±1.510
H ₂ Ci ⁻	-1225.845 ±2.010	-1519.020 ±2.026	291.879 ±1.110
H ₃ Ci(aq)	-1243.712 ±2.009	-1523.520 ±2.003	336.710 ±0.428
NiCi ⁻	-1246.617 ±2.204	—	—
NiCi ₂ ⁴⁻	-2418.807 ±4.694	—	—
NiHCi	-1268.079 ±2.228	—	—
NiH ₂ Ci ⁺	-1283.320 ±2.583	—	—
AmCi(aq)	-1809.759 ±5.288	—	—
AmCi ₂ ³⁻	-3002.555 ±8.451	—	—
AmHCi ⁺	-1834.361 ±7.696	—	—
Am(HCi) ₂ ⁻	-3057.466 ±8.448	—	—
NpO ₂ Ci ²⁻	-2091.029 ±5.984	—	—
UO ₂ Ci ⁻	-2165.953 ±2.838	—	—
(UO ₂) ₂ Ci ₂ ²⁻	-4351.198 ±6.049	—	—
UO ₂ HCi(aq)	-2179.652 ±6.299	—	—
MgCi ⁻	-1645.089 ±2.423	—	—
MgHCi(aq)	-1668.777 ±2.447	—	—
MgH ₂ Ci ⁺	-1688.698 ±2.580	—	—
CaCi ⁻	-1742.463 ±2.278	-2062.920 ±6.425	111.282 ±20.242
CaHCi(aq)	-1768.035 ±2.304	—	—
CaH ₂ Ci ⁺	-1787.385 ±2.445	—	—

註：下段は、95%誤差

表-6.2 JAEA-TDB に選定したクエン酸に関わる熱力学データ（固相）

固相名	$\Delta_f G_m^0$ kJ.mol ⁻¹	$\Delta_f H_m^0$ kJ.mol ⁻¹	S_m^0 J.K ⁻¹ .mol ⁻¹	$C_{p,m}^0$ J.K ⁻¹ .mol ⁻¹
H ₃ Ci(cr)	-1236.695 ±2.019	-1541.730 ±2.010	252.100 ±0.200	225.400 ±0.200
H ₃ Ci:H ₂ O(cr)	-1473.272 ±2.009	-1838.460 ±2.000	283.600 ±0.200	268.050 ±0.100
Ca ₃ Ci ₂ :4H ₂ O(cr)	-5033.670 ±5.149	—	—	—

註：下段は、95%誤差

表-6.3 JAEA-TDB に選定したクエン酸に関わる平衡定数（溶存化学種）

溶存化学種	化学反応式*	選定値 logK ^o	誤差	出典
H ₂ Si ²⁻	H ⁺ + Si ³⁻ = H ₂ Si ²⁻	6.360	±0.020	OECD/NEA
H ₂ Si ⁻	2H ⁺ + Si ³⁻ = H ₂ Si ⁻	11.140	±0.022	OECD/NEA
H ₃ Si (aq)	3H ⁺ + Si ³⁻ = H ₃ Si (aq)	14.270	±0.024	OECD/NEA
MgSi ⁻	Mg ²⁺ + Si ³⁻ = MgSi ⁻	4.810	±0.030	OECD/NEA
MgH ₂ Si (aq)	Mg ²⁺ + H ₂ Si ²⁻ = MgH ₂ Si (aq)	2.600	±0.070	OECD/NEA
	Mg ²⁺ + H ⁺ + Si ³⁻ = MgH ₂ Si (aq)	8.960	±0.073	
MgH ₂ Si ⁺	Mg ²⁺ + H ₂ Si ⁻ = MgH ₂ Si ⁺	1.310	±0.160	OECD/NEA
	Mg ²⁺ + 2H ⁺ + Si ³⁻ = MgH ₂ Si ⁺	12.450	±0.162	
CaSi ⁻	Ca ²⁺ + Si ³⁻ = CaSi ⁻	4.800	±0.030	OECD/NEA
CaH ₂ Si (aq)	Ca ²⁺ + H ₂ Si ²⁻ = CaH ₂ Si (aq)	2.920	±0.070	OECD/NEA
	Ca ²⁺ + H ⁺ + Si ³⁻ = CaH ₂ Si (aq)	9.280	±0.073	
CaH ₂ Si ⁺	Ca ²⁺ + H ₂ Si ⁻ = CaH ₂ Si ⁺	1.530	±0.160	OECD/NEA
	Ca ²⁺ + 2H ⁺ + Si ³⁻ = CaH ₂ Si ⁺	12.670	±0.162	
NiSi ⁻	Ni ²⁺ + Si ³⁻ = NiSi ⁻	6.760	±0.080	OECD/NEA
NiSi ₂ ⁴⁻	Ni ²⁺ + 2Si ³⁻ = NiSi ₂ ⁴⁻	8.500	±0.400	OECD/NEA
NiH ₂ Si ⁻	Ni ²⁺ + H ₂ Si ²⁻ = NiH ₂ Si ⁻	4.160	±0.100	OECD/NEA
	Ni ²⁺ + H ⁺ + Si ³⁻ = NiH ₂ Si ⁻	10.520	±0.102	
NiH ₂ Si ⁺	Ni ²⁺ + H ₂ Si ⁻ = NiH ₂ Si ⁺	2.050	±0.250	OECD/NEA
	Ni ²⁺ + 2H ⁺ + Si ³⁻ = NiH ₂ Si ⁺	13.190	±0.251	
AmSi (aq)	Am ³⁺ + Si ³⁻ = AmSi (aq)	8.550	±0.200	OECD/NEA
AmSi ₂ ³⁻	Am ³⁺ + 2Si ³⁻ = AmSi ₂ ³⁻	13.900	±1.000	OECD/NEA
AmH ₂ Si ⁺	Am ³⁺ + H ₂ Si ²⁻ = AmH ₂ Si ⁺	6.500	±1.000	OECD/NEA
	Am ³⁺ + H ⁺ + Si ³⁻ = AmH ₂ Si ⁺	12.860	±1.000	
Am(H ₂ Si) ₂ ⁻	Am ³⁺ + 2H ₂ Si ²⁻ = Am(H ₂ Si) ₂ ⁻	10.800	±1.000	OECD/NEA
	Am ³⁺ + 2H ⁺ + 2Si ³⁻ = Am(H ₂ Si) ₂ ⁻	23.520	±1.001	
NpO ₂ Si ²⁻	NpO ₂ ⁺ + Si ³⁻ = NpO ₂ Si ²⁻	3.680	±0.050	OECD/NEA
	Np ⁴⁺ + H ₂ O - 4H ⁺ - e ⁻ + Si ³⁻ = NpO ₂ Si ²⁻	-6.532	±1.668	
UO ₂ Si ⁻	UO ₂ ²⁺ + Si ³⁻ = UO ₂ Si ⁻	8.960	±0.170	OECD/NEA
	U ⁴⁺ + 2H ₂ O - 4H ⁺ - 2e ⁻ + Si ³⁻ = UO ₂ Si ⁻	-0.078	±0.175	
(UO ₂) ₂ Si ₂ ²⁻	2UO ₂ ²⁺ + 2Si ³⁻ = (UO ₂) ₂ Si ₂ ²⁻	21.300	±0.500	OECD/NEA
	2U ⁴⁺ + 4H ₂ O - 8H ⁺ - 4e ⁻ + 2Si ³⁻ = (UO ₂) ₂ Si ₂ ²⁻	3.224	±507	
UO ₂ H ₂ Si (aq)	UO ₂ ²⁺ + H ₂ Si ²⁻ = UO ₂ H ₂ Si (aq)	5.000	±1.000	OECD/NEA
	U ⁴⁺ + 2H ₂ O - 3H ⁺ - 2e ⁻ + Si ³⁻ = UO ₂ H ₂ Si (aq)	2.322	±1.001	

*:化学反応式が2種類記載されている場合は、下段にマスター化学種で記載された化学反応式を記載

表-6.4 JAEA-TDB に選定したクエン酸に関わる溶解度積（固相）

固相名	化学式	化学反応式*	溶解度積 $\log K_{sp}^0$	誤差	出典
H ₃ Ci (cr)	H ₃ Ci	=3H ⁺ + Ci ³⁻	-13.04	±0.500	OECD/NEA
H ₃ Ci:H ₂ O (cr)	H ₃ Ci:H ₂ O	=H ₃ Ci + H ₂ O	1.320	±0.004	OECD/NEA
		=H ₂ O + 3H ⁺ + Ci ³⁻	-12.950	±0.024	
Ca ₃ Ci ₂ :4H ₂ O (cr)	Ca ₃ Ci ₂ :4H ₂ O	=4H ₂ O + 3Ca ²⁺ + 2Ci ³⁻	-17.900	±0.100	OECD/NEA

*:化学反応式が2種類記載されている場合は、下段にマスター化学種で記載された化学反応式を記載

表-6.5 JAEA-TDB に選定したクエン酸に関わる平衡定数（溶存化学種：暫定値）

溶存化学種	化学反応式*	選定値 $\log K^0$	出典**
NaCi ²⁻	Na ⁺ + Ci ³⁻ = NaCi ²⁻	1.34	S&M1977
KCi ²⁻	K ⁺ + Ci ³⁻ = KCi ²⁻	1.23	S&M1977
SrCi ⁻	Sr ²⁺ + Ci ³⁻ = SrCi ⁻	4.11	S&M1977
SrHCi (aq)	Sr ²⁺ + HCl ²⁻ = SrHCi (aq)	2.72	LFER
	Sr ²⁺ + H ⁺ + Ci ³⁻ = SrHCi (aq)	9.08	
RaCi ⁻	Ra ²⁺ + Ci ³⁻ = RaCi ⁻	3.59	LFER
RaHCi (aq)	Ra ²⁺ + HCl ²⁻ = RaHCi (aq)	2.64	LFER
	Ra ²⁺ + H ⁺ + Ci ³⁻ = RaHCi (aq)	9.00	
FeCi ⁻	Fe ²⁺ + Ci ³⁻ = FeCi ⁻	5.69	S&M1977
FeHCi (aq)	Fe ²⁺ + HCl ²⁻ = FeHCi (aq)	3.51	S&M1977
	Fe ²⁺ + H ⁺ + Ci ³⁻ = FeHCi (aq)	9.87	
CoCi ⁻	Co ²⁺ + Ci ³⁻ = CoCi ⁻	6.29	S&M1977
CoHCi (aq)	Co ²⁺ + HCl ²⁻ = CoHCi (aq)	3.88	S&M1977
	Co ²⁺ + H ⁺ + Ci ³⁻ = CoHCi (aq)	10.27	
PbCi ⁻	Pb ²⁺ + Ci ³⁻ = PbCi ⁻	5.70	S&M1977
PbCi ₂ ⁴⁻	Pb ²⁺ + 2Ci ³⁻ = PbCi ₂ ⁴⁻	6.91	S&M1977
PbCi ₃ ⁷⁻	Pb ²⁺ + 3Ci ³⁻ = PbCi ₃ ⁷⁻	4.55	S&M1977
PbHCi ⁻	Pb ²⁺ + HCl ²⁻ = PbHCi ⁻	4.05	S&M1977
	Pb ²⁺ + H ⁺ + Ci ³⁻ = PbHCi ⁻	10.41	
AlCi	Al ³⁺ + Ci ³⁻ = AlCi	9.91	S&M1989
AlCi ₂ ³⁻	Al ³⁺ + 2Ci ³⁻ = AlCi ₂ ³⁻	14.12	S&M1989
AlHCi ⁺	Al ³⁺ + HCl ²⁻ = AlHCi ⁺	6.50	S&M1989
	Al ³⁺ + H ⁺ + Ci ³⁻ = AlHCi ⁺	12.86	
ZrCi ⁺	Zr ⁴⁺ + Ci ³⁻ = ZrCi ⁺	13.27	LFER
ZrHCi ²⁺	Zr ⁴⁺ + HCl ²⁻ = ZrHCi ²⁺	8.52	LFER
	Zr ⁴⁺ + H ⁺ + Ci ³⁻ = ZrHCi ²⁺	14.88	
TcOCi ⁻	TcO ²⁺ + Ci ³⁻ = TcOCi ⁻	11.99	LFER

溶存化学種	化学反応式*	選定値 logK ⁰	出典**
TcOHCi (aq)	$\text{TcO}^{2+} + \text{HCi}^{2-} = \text{TcOHCi (aq)}$	7.75	LFER
	$\text{TcO}^{2+} + \text{H}^+ + \text{Ci}^{3-} = \text{TcOHCi (aq)}$	14.11	
SmCi (aq)	$\text{Sm}^{3+} + \text{Ci}^{3-} = \text{SmCi (aq)}$	7.99	LFER
SmHCi ²⁺	$\text{Sm}^{3+} + \text{HCi}^{2-} = \text{SmHCi}^{2+}$	5.31	LFER
	$\text{Sm}^{3+} + \text{H}^+ + \text{Ci}^{3-} = \text{SmHCi}^{2+}$	11.67	
AcCi (aq)	$\text{Ac}^{3+} + \text{Ci}^{3-} = \text{AcCi (aq)}$	7.99	LFER
AcHCi ²⁺	$\text{Ac}^{3+} + \text{HCi}^{2-} = \text{AcHCi}^{2+}$	5.31	LFER
	$\text{Ac}^{3+} + \text{H}^+ + \text{Ci}^{3-} = \text{AcHCi}^{2+}$	11.67	
AmCi (aq)	$\text{Am}^{3+} + \text{Ci}^{3-} = \text{AmCi (aq)}$	7.99	LFER
AmHCi ²⁺	$\text{Am}^{3+} + \text{HCi}^{2-} = \text{AmHCi}^{2+}$	5.31	LFER
	$\text{Am}^{3+} + \text{H}^+ + \text{Ci}^{3-} = \text{AmHCi}^{2+}$	11.67	
CmCi (aq)	$\text{Cm}^{3+} + \text{Ci}^{3-} = \text{CmCi (aq)}$	7.99	LFER
CmHCi ²⁺	$\text{Cm}^{3+} + \text{HCi}^{2-} = \text{CmHCi}^{2+}$	5.31	LFER
	$\text{Cm}^{3+} + \text{H}^+ + \text{Ci}^{3-} = \text{CmHCi}^{2+}$	11.67	
PuCi (aq)	$\text{Pu}^{3+} + \text{Ci}^{3-} = \text{PuCi (aq)}$	7.99	LFER
PuHCi ²⁺	$\text{Pu}^{3+} + \text{HCi}^{2-} = \text{PuHCi}^{2+}$	5.31	LFER
	$\text{Pu}^{3+} + \text{H}^+ + \text{Ci}^{3-} = \text{PuHCi}^{2+}$	11.67	
ThCi ⁺	$\text{Th}^{4+} + \text{Ci}^{3-} = \text{ThCi}^+$	11.29	LFER
ThHCi ²⁺	$\text{Th}^{4+} + \text{HCi}^{2-} = \text{ThHCi}^{2+}$	7.32	LFER
	$\text{Th}^{4+} + \text{H}^+ + \text{Ci}^{3-} = \text{ThHCi}^{2+}$	13.68	
PuCi ⁺	$\text{Pu}^{4+} + \text{Ci}^{3-} = \text{PuCi}^+$	13.04	LFER
PuHCi ²⁺	$\text{Pu}^{4+} + \text{HCi}^{2-} = \text{PuHCi}^{2+}$	8.39	LFER
	$\text{Pu}^{4+} + \text{H}^+ + \text{Ci}^{3-} = \text{PuHCi}^{2+}$	14.75	
UCi ⁺	$\text{U}^{4+} + \text{Ci}^{3-} = \text{UCi}^+$	12.84	LFER
UHCi ²⁺	$\text{U}^{4+} + \text{HCi}^{2-} = \text{UHCi}^{2+}$	8.26	LFER
	$\text{U}^{4+} + \text{H}^+ + \text{Ci}^{3-} = \text{UHCi}^{2+}$	14.62	
NpCi ⁺	$\text{Np}^{4+} + \text{Ci}^{3-} = \text{NpCi}^+$	12.98	LFER
NpHCi ²⁺	$\text{Np}^{4+} + \text{HCi}^{2-} = \text{NpHCi}^{2+}$	8.35	LFER
	$\text{Np}^{4+} + \text{H}^+ + \text{Ci}^{3-} = \text{NpHCi}^{2+}$	14.71	
NpO ₂ HCi ⁻	$\text{NpO}_2^+ + \text{HCi}^{2-} = \text{NpO}_2\text{HCi}^-$	3.56	LFER
	$\text{Np}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} - 4\text{H}^+ - \text{e}^- + \text{Ci}^{3-} = \text{NpO}_2\text{HCi}^-$	-0.29	
PuO ₂ Ci ⁻	$\text{PuO}_2^{2+} + \text{Ci}^{3-} = \text{PuO}_2\text{Ci}^-$	9.18	LFER
	$\text{Pu}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} - 4\text{H}^+ - 2\text{e}^- + \text{Ci}^{3-} = \text{PuO}_2\text{Ci}^-$	-24.09	
PuO ₂ HCi (aq)	$\text{PuO}_2^{2+} + \text{HCi}^{2-} = \text{PuO}_2\text{HCi (aq)}$	6.04	LFER
	$\text{Pu}^{4+} + 2\text{H}_2\text{O} - 4\text{H}^+ - 2\text{e}^- + \text{Ci}^{3-} = \text{PuO}_2\text{HCi (aq)}$	-20.87	

*:化学反応式が2種類記載されている場合は、下段にマスター化学種で記載された化学反応式を記載

** :Smith and Martell^{21,22)}については、イオン強度 0mol. kg⁻¹の値に補正し記載

7. エチレンジアミン四酢酸 (EDTA)

EDTA (Ethylene-Diamine-Tetra-Acetic acid) の化学式は, $C_{10}H_{16}N_2O_8$ (分子量 $292.242g \cdot mol^{-1}$) である。EDTA の他に Titriplex, Trilon B, Cheelox, Complexon II など, 40 程度の呼び名がある。JAEA-TDB では, EDTA を H_4Ed , EDTA 配位子を Ed^{4-} と表記する。

Ed^{4-} の分子量は, $288.214g \cdot mol^{-1}$ である。OECD/NEA では, 標準生成自由エネルギー ($\Delta_f G_m^0$) および標準生成エントロピー (S_m^0) は選定されていない。標準エンタルピー ($\Delta_f H_m^0$) のみ $-1704.800 \pm 3.751 kJ \cdot mol^{-1}$ が選定されている。他の溶存化学種についても標準エンタルピーのみが選定されており, これらの値¹⁹⁾を JAEA-TDB として採用する。採用した溶存化学種および固相の熱力学データ (298.15K) を表-7.1 および表-7.2 に示す。

OECD/NEA では, $\Delta_f G_m^0$ を設定していないが, 各溶存化学種の反応に対して平衡定数が記載されており¹⁹⁾, JAEA-TDB に採用する。表-7.3 および表-7.4 に値をまとめる。OECD/NEA で選定された Ed^{4-} と H^+ の平衡定数から, EDTA の溶存化学種の pH 依存性を検討した。図-7.1 にその結果を示す。これによると, 弱酸性領域では H_2Ed^{2-} が支配的であり, 中性から pH11 程度のアルカリ性領域までは HEd^{3-} が支配的となる。pH11 を超える高アルカリ性領域となる Ed^{4-} が支配的となる。したがって, 処分施設での環境条件を考慮すると配位子として, Ed^{4-} , HEd^{3-} および H_2Ed^{2-} を考慮する必要がある。これらの配位子を中心に Smith and Martell^{21, 22)} からデータを選定し, 表-7.5 にまとめた。また, 近年, Rai et al. は, Ed^{4-} と Pu(IV) との平衡定数を得ており, Pu(IV) については, Rai et al. の値²⁶⁾ を引用するものとする。EDTA について, 図-7.2 に示すように OH^- と金属元素の平衡定数の対数値と Ed^{4-} および HEd^{3-} の金属元素との平衡定数の対数値には, 明瞭な直線関係を求めることができなかつたため, LFER による平衡定数の算定を実施しなかつた。

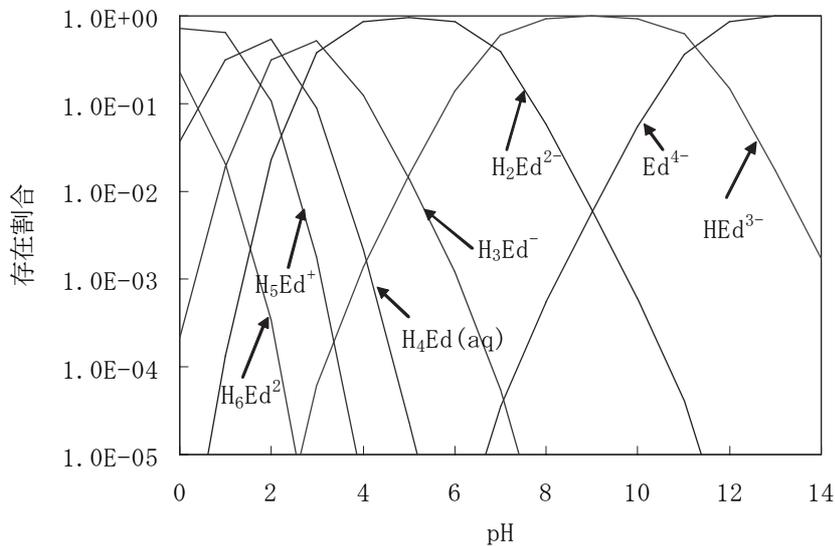


図-7.1 EDTA の溶存化学種の pH 依存性

表-7.1 JAEA-TDB に選定した EDTA に関わる熱力学データ (溶存化学種)

溶存化学種	$\Delta_f G_m^0$ kJ. mol ⁻¹	$\Delta_f H_m^0$ kJ. mol ⁻¹	S_m^0 J. K ⁻¹ . mol ⁻¹
Ed ⁴⁺	—	-1704. 800 ±3. 751	—
HEd ³⁻	—	-1724. 600 ±3. 718	—
H ₂ Ed ²⁻	—	-1739. 800 ±3. 696	—
H ₃ Ed ⁻	—	-1732. 700 ±3. 674	—
H ₄ Ed (aq)	—	-1730. 800 ±3. 354	—
NiEd ²⁻	—	-1785. 912 ±3. 873	—
AmEd ⁻	—	-2332. 100 ±4. 508	—
PuEd ⁻	—	-2305. 290 ±4. 401	—
MgEd ²⁻	—	-2152. 000 ±3. 820	—
CaEd ²⁻	—	-2270. 000 ±3. 903	—
NaEd ³⁻	—	-1949. 140 ±4. 803	—

註：下段は、95%誤差

表-7.2 JAEA-TDB に選定した EDTA に関わる熱力学データ (固相)

固相名	$\Delta_f G_m^0$ kJ. mol ⁻¹	$\Delta_f H_m^0$ kJ. mol ⁻¹	S_m^0 J. K ⁻¹ . mol ⁻¹	$C_{p,m}^0$ J. K ⁻¹ . mol ⁻¹
H ₄ Ed (cr)	—	-1759. 800 ±1. 500	—	—

註：下段は、95%誤差

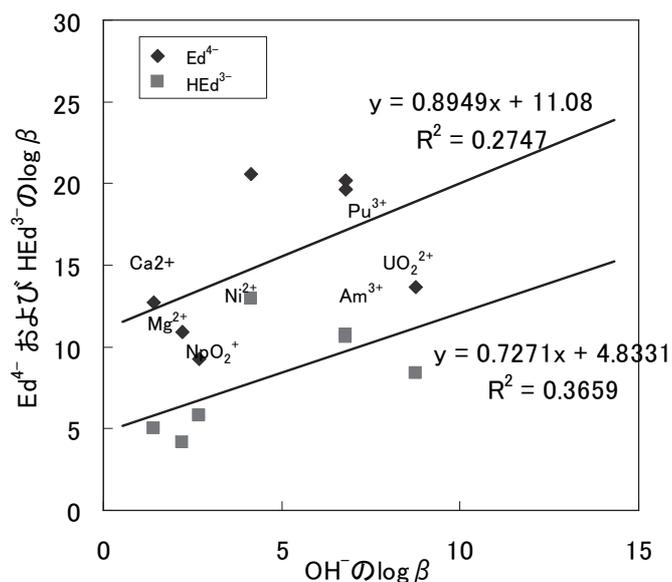


図-7.2 Ed⁴⁺および HEd³⁻と OH⁻の各元素の log β の関係

表-7.3 JAEA-TDB に選定した EDTA に関わる平衡定数 (溶存化学種)

溶存化学種	化学反応式*	選定値 logK ^o	誤差	出典
HEd ³⁻	H ⁺ + Ed ⁴⁻ = HEd ³⁻	11.240	±0.030	OECD/NEA
H ₂ Ed ²⁻	2H ⁺ + Ed ⁴⁻ = H ₂ Ed ²⁻	18.040	±0.036	OECD/NEA
H ₃ Ed ⁻	3H ⁺ + Ed ⁴⁻ = H ₃ Ed ⁻	21.190	±0.041	OECD/NEA
H ₄ Ed(aq)	4H ⁺ + Ed ⁴⁻ = H ₄ Ed(aq)	23.420	±0.065	OECD/NEA
H ₅ Ed ⁺	5H ⁺ + Ed ⁴⁻ = H ₅ Ed ⁺	24.720	±0.119	OECD/NEA
H ₆ Ed ²⁺	6H ⁺ + Ed ⁴⁻ = H ₆ Ed ²⁺	24.220	±0.233	OECD/NEA
KEd ³⁻	K ⁺ + Ed ⁴⁻ = KEd ³⁻	1.800	±0.300	OECD/NEA
NaEd ³⁻	Na ⁺ + Ed ⁴⁻ = NaEd ³⁻	2.800	±0.200	OECD/NEA
MgEd ²⁻	Mg ²⁺ + Ed ⁴⁻ = MgEd ²⁻	10.900	±0.100	OECD/NEA
MgHEd ⁻	Mg ²⁺ + HEd ³⁻ = MgHd ⁻	4.160	±0.374	OECD/NEA
	Mg ²⁺ + H ⁺ + Ed ⁴⁻ = MgHd ⁻	15.400	±0.224	
CaEd ²⁻	Ca ²⁺ + Ed ⁴⁻ = CaEd ²⁻	12.690	±0.060	OECD/NEA
CaHEd ⁻	Ca ²⁺ + HEd ³⁻ = CaHEd ⁻	4.990	±0.112	OECD/NEA
	Ca ²⁺ + H ⁺ + Ed ⁴⁻ = CaHEd ⁻	16.230	±0.108	
NiEd ²⁻	Ni ²⁺ + Ed ⁴⁻ = NiEd ²⁻	20.540	±0.130	OECD/NEA
NiHEd ⁻	Ni ²⁺ + HEd ³⁻ = NiHEd ⁻	12.960	±0.208	OECD/NEA
	Ni ²⁺ + H ⁺ + Ed ⁴⁻ = NiHEd ⁻	24.200	±0.206	
AmEd ⁻	Am ³⁺ + Ed ⁴⁻ = AmEd ⁻	19.670	±0.110	OECD/NEA
AmHEd(aq)	Am ³⁺ + HEd ³⁻ = AmHEd(aq)	10.600	±0.275	OECD/NEA
	Am ³⁺ + Ed ⁴⁻ + H ⁺ = AmHEd(aq)	21.840	±0.273	
PuEd ⁻	Pu ³⁺ + Ed ⁴⁻ = PuEd ⁻	20.180	±0.370	OECD/NEA
	Pu ⁴⁺ + e ⁻ + Ed ⁴⁻ = PuEd ⁻	37.874	±0.764	
PuHEd(aq)	Pu ³⁺ + HEd ³⁻ = PuHEd(aq)	10.780	±0.453	OECD/NEA
	Pu ⁴⁺ + e ⁻ + Ed ⁴⁻ + H ⁺ = PuHEd(aq)	39.714	±0.808	
NpEd(aq)	Np ⁴⁺ + Ed ⁴⁻ = NpEd(aq)	31.200	±0.600	OECD/NEA
NpO ₂ Ed ³⁻	NpO ₂ ⁺ + Ed ⁴⁻ = NpO ₂ Ed ³⁻	9.230	±0.130	OECD/NEA
	Np ⁴⁺ + 2H ₂ O - 4H ⁺ - e ⁻ + Ed ⁴⁻ = NpO ₂ Ed ³⁻	-0.982	±1.395	
NpO ₂ HEd ²⁻	NpO ₂ ⁺ + HEd ³⁻ = NpO ₂ HEd ²⁻	5.820	±0.110	OECD/NEA
	Np ⁴⁺ + 2H ₂ O - 4H ⁺ - e ⁻ + Ed ⁴⁻ + H ⁺ = NpO ₂ HEd ²⁻	6.848	±1.394	
NpO ₂ H ₂ Ed ⁻	NpO ₂ ⁺ + H ₂ Ed ²⁻ = NpO ₂ H ₂ Ed ⁻	4.470	±0.140	OECD/NEA
	Np ⁴⁺ + 2H ₂ O - 4H ⁺ - e ⁻ + Ed ⁴⁻ + 2H ⁺ = NpO ₂ H ₂ Ed ⁻	12.298	±1.396	
UEd(aq)	U ⁴⁺ + Ed ⁴⁻ = UEd(aq)	29.500	±0.200	OECD/NEA
UO ₂ Ed ²⁻	UO ₂ ²⁺ + Ed ⁴⁻ = UO ₂ Ed ²⁻	13.700	±0.200	OECD/NEA
	U ⁴⁺ + 2H ₂ O - 4H ⁺ - 2e ⁻ + Ed ⁴⁻ = UO ₂ Ed ²⁻	4.662	±0.204	
(UO ₂) ₂ Ed(aq)	2UO ₂ ²⁺ + Ed ⁴⁻ = (UO ₂) ₂ Ed(aq)	20.600	±0.400	OECD/NEA
	2U ⁴⁺ + 4H ₂ O - 8H ⁺ - 4e ⁻ + Ed ⁴⁻ = (UO ₂) ₂ Ed(aq)	2.524	±0.408	
UO ₂ HEd ⁻	UO ₂ ²⁺ + HEd ³⁻ = UO ₂ HEd ⁻	8.370	±0.100	OECD/NEA
	U ⁴⁺ + 2H ₂ O - 4H ⁺ - 2e ⁻ + H ⁺ + Ed ⁴⁻ = UO ₂ HEd ⁻	10.572	±0.112	

*: 化学反応式が 2 種類記載されている場合は、下段にマスター化学種で記載された化学反応式を記載

表-7.4 JAEA-TDB に選定した EDTA に関わる溶解度積 (固相)

固相名	化学式	化学反応式*	溶解度積 logK _{sp}	誤差	出典
H ₄ Ed(cr)	H ₄ Ed	= H ₄ Ed(aq)	-3.800	±0.190	OECD/NEA
		=4H ⁺ + Ed ⁴⁻	-27.220	±0.201	

*: 化学反応式が 2 種類記載されている場合は, 下段にマスター化学種で記載された化学反応式を記載

表-7.5 JAEA-TDB に選定した EDTA に関わる平衡定数 (溶存化学種: 暫定値)

溶存化学種	化学反応式*	選定値** logK	出典
SrEd ²⁻	Sr ²⁺ + Ed ⁴⁻ = SrEd ²⁻	10.46	S&M1989
SrHEd ⁻	Sr ²⁺ + HEd ³⁻ = SrHEd ⁻	3.58	S&M1989
	Sr ²⁺ + H ⁺ + Ed ⁴⁻ = SrHEd ⁻	14.82	
FeEd ²⁻	Fe ²⁺ + Ed ⁴⁻ = FeEd ²⁻	16.02	S&M1989
FeHEd ⁻	Fe ²⁺ + HEd ³⁻ = FeHEd ⁻	8.01	S&M1989
	Fe ²⁺ + H ⁺ + Ed ⁴⁻ = FeHEd ⁻	19.25	
CoEd ²⁻	Co ²⁺ + Ed ⁴⁻ = CoEd ²⁻	18.17	S&M1989
CoHEd ⁻	Co ²⁺ + HEd ³⁻ = CoHEd ⁻	10.36	S&M1989
	Co ²⁺ + H ⁺ + Ed ⁴⁻ = CoHEd ⁻	21.60	
CoH ₂ Ed(aq)	Co ²⁺ + H ₂ Ed ²⁻ = CoH ₂ Ed(aq)	5.53	S&M1989
	Co ²⁺ + 2.0H ⁺ + 1.0Ed ⁴⁻ = CoH ₂ Ed(aq)	23.57	
PbEd ²⁻	Pb ²⁺ + Ed ⁴⁻ = PbEd ²⁻	19.68	S&M1989
PbHEd ⁻	Pb ²⁺ + HEd ³⁻ = PbHEd ⁻	11.37	S&M1989
	Pb ²⁺ + H ⁺ + Ed ⁴⁻ = PbHEd ⁻	22.61	
PbH ₂ Ed(aq)	Pb ²⁺ + H ₂ Ed ³⁻ = PbH ₂ Ed(aq)	6.53	S&M1989
	Pb ²⁺ + 2H ⁺ + Ed ⁴⁻ = PbH ₂ Ed(aq)	24.57	
PbH ₃ Ed ⁺	Pb ²⁺ + H ₃ Ed ⁻ = PbH ₃ Ed ⁺	4.58	S&M1989
	Pb ²⁺ + 3H ⁺ + Ed ⁴⁻ = PbH ₃ Ed ⁺	25.77	
ThEd(aq)	Th ⁴⁺ + Ed ⁴⁻ = ThEd(aq)	26.63	S&M1989
ThHEd ⁺	Th ⁴⁺ + HEd ³⁻ = ThHEd ⁺	17.37	S&M1989
	Th ⁴⁺ + H ⁺ + Ed ⁴⁻ = ThHEd ⁺	28.61	
PuOHEd ⁻	Pu ⁴⁺ + Ed ⁴⁻ + OH ⁻ = PuOHEd ⁻	38.20	Rai et al., 2008
	Pu ⁴⁺ + Ed ⁴⁻ + H ₂ O - H ⁺ = PuOHEd ⁻	24.20	
Pu(OH) ₂ Ed ²⁻	Pu ⁴⁺ + Ed ⁴⁻ + 2OH ⁻ = Pu(OH) ₂ Ed ²⁻	47.22	Rai et al., 2008
	Pu ⁴⁺ + Ed ⁴⁻ + 2H ₂ O - 2H ⁺ = Pu(OH) ₂ Ed ²⁻	19.22	
Pu(OH) ₃ Ed ³⁻	Pu ⁴⁺ + Ed ⁴⁻ + 3OH ⁻ = Pu(OH) ₃ Ed ³⁻	51.71	Rai et al., 2008
	Pu ⁴⁺ + Ed ⁴⁻ + 3H ₂ O - 3H ⁺ = Pu(OH) ₃ Ed ³⁻	9.71	

*: 化学反応式が 2 種類記載されている場合は, 下段にマスター化学種で記載された化学反応式を記載

** : Smith and Martell^(21,22)については, イオン強度 0mol.kg⁻¹の値に補正し記載

8. イソサッカリン酸 (ISA)

ISA は、アルカリ性溶液中でのセルロースの分解生成物として、重要な有機物の一つである。ISA イオンは、広い pH 領域において、金属と錯体生成する。放射性核種の移動に関して、溶解度に対する ISA の研究がレビューされている¹⁹⁾。しかし、これらの研究は、熱力学データを得ることを目的とするよりは、むしろ、ISA の存在により、液相の放射性核種濃度の最大値を求めることを主眼とした研究である。

ISA の化学式は、 $C_6H_{12}O_6$ (分子量 $180.1577\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$) である。JAEA-TDB では、ISA を HI_s 、ISA 配位子を Is^- と表記する。 Is^- の分子量は、 $179.1497\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ となる。OECD/NEA では、 Is^- の 298.15K における標準生成自由エネルギー ($\Delta_f G_m^0$)、標準生成エンタルピー ($\Delta_f H_m^0$)、標準エントロピー (S_m^0) といった熱力学データは、選定されていない¹⁹⁾。

OECD/NEA では、上述の熱力学データを選定していないが、水素イオンおよびカルシウムイオンとの平衡定数およびカルシウム固相の溶解度積を選定している¹⁹⁾。OECD/NEA の 2005 年のレビュー以降の文献として、Gaona et al. は、酸化状態 IV 価のアクチノイドと ISA やグルコン酸 (Gluconic acid) の平衡定数のレビュー、再計算を実施している²⁷⁾。アクチノイドの Pu(IV)、Np(IV) および U(IV) については、OECD/NEA で整備された熱力学データ¹⁵⁾を用いて、平衡定数が算定されている。また、IV 価のアクチノイド元素以外 (Am, Ni, Eu および Tb) についても記載されており、金属と ISA およびグルコン酸の平衡定数の対数値が、アクチノイド IV 価の元素を含めて直線関係にあることを示している。この直線関係を図-8.1 に示す。Th(IV) 以外のアクチノイドについては、OECD/NEA での熱力学データベースにより ISA とアクチノイドとの平衡定数が再計算されていることから、Gaona et al. の値²⁷⁾を選定するものとする。また、Smith and Martell^{21, 22)}でグルコン酸の値が示されている場合は、図-8.1 で示す式にて、ISA の平衡定数を推定する。Rai et al. は、OECD/NEA で整備された Th の熱力学データを用いて Th と ISA の平衡定数を得ていることから²⁸⁾、Rai et al. の値を JAEA-TDB に採用する。これらの設定値を表-8.3 にまとめる。

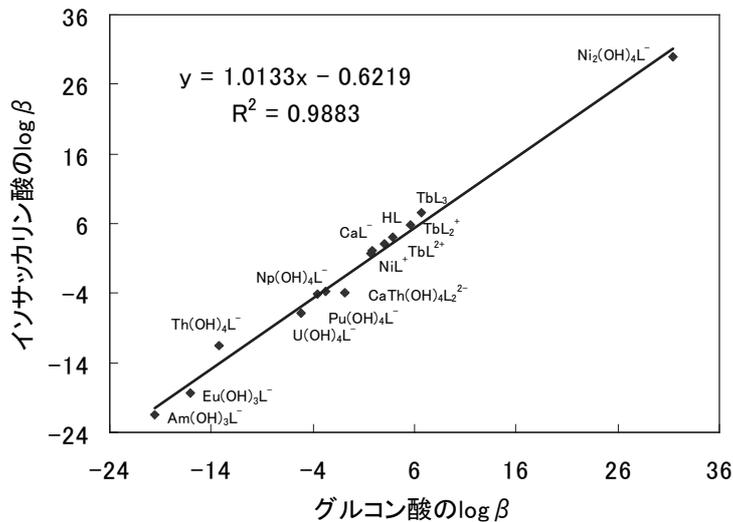


図-8.1 イソサッカリン酸とグルコン酸の log β の関係 (Gaona et al. のデータ²⁷⁾を再プロット)

表-8.1 JAEA-TDB に選定したイソサッカリン酸に関わる平衡定数（溶存化学種）

溶存化学種	化学反応式	選定値 logK	誤差	出典
HI _s (aq)	$H^+ + Is^- = HI_s(aq)$	4.00	±0.500	OECD/NEA
CaIs ⁺	$Ca^{2+} + Is^- = CaIs^+$	1.70	±0.300	OECD/NEA

表-8.2 JAEA-TDB に選定したイソサッカリン酸に関わる溶解度積（固相）

固相名	化学式	化学反応式	溶解度積 logK _{sp}	誤差	出典
CaIs ₂ (cr)	CaIs ₂	$=1.0Ca^{2+} + 1.0Is^-$	-6.40	±0.200	OECD/NEA

表-8.3 JAEA-TDB に選定したイソサッカリン酸に関わる平衡定数（溶存化学種：暫定値）

溶存化学種	化学反応式*	選定値 logK	出典
MgIs ⁺	$Mg^{2+} + Is^- = MgIs^+$	0.60	LFER
SrIs ⁺	$Sr^{2+} + Is^- = SrIs^+$	0.91	LFER
FeIs ⁺	$Fe^{2+} + Is^- = FeIs^+$	0.94	LFER
NiIs ⁺	$Ni^{2+} + Is^- = NiIs^+$	2.20	Gaona et al., 2008
PbIs ⁺	$Pb^{2+} + Is^- = PbIs^+$	2.44	LFER
Am(OH) ₃ Is ⁻	$Am(OH)_3 + Is^- = Am(OH)_3Is^-$	-21.50	Gaona et al., 2008
	$Am^{3+} + 2H_2O - 2H^+ + Is^- = Am(OH)_3Is^-$	-47.70	
Pu(OH) ₄ Is ⁻	$Pu(OH)_4 + Is^- = Pu(OH)_4Is^-$	-3.80	Gaona et al., 2008
	$Pu^{4+} + 4H_2O - 4H^+ + Is^- = Pu(OH)_4Is^-$	-12.30	
Pu(OH) ₄ Is ₂ ²⁻	$Pu(OH)_4 + 2Is^- = Pu(OH)_4Is_2^{2-}$	0.40	Gaona et al., 2008
	$Pu^{4+} + 4H_2O - 4H^+ + 2Is^- = Pu(OH)_4Is_2^{2-}$	-8.10	
Np(OH) ₄ Is ⁻	$Np(OH)_4 + Is^- = Np(OH)_4Is^-$	-4.06	Gaona et al., 2008
	$Np^{4+} + 4H_2O - 4H^+ + Is^- = Np(OH)_4Is^-$	-13.66	
Np(OH) ₄ Is ₂ ²⁻	$Np(OH)_4 + 2Is^- = Np(OH)_4Is_2^{2-}$	-2.20	Gaona et al., 2008
	$Np^{4+} + 4H_2O - 4H^+ + 2Is^- = Np(OH)_4Is_2^{2-}$	-11.80	
U(OH) ₄ Is ⁻	$U(OH)_4 + Is^- = U(OH)_4Is^-$	-6.80	Gaona et al., 2008
	$U^{4+} + 4H_2O - 4H^+ + Is^- = U(OH)_4Is^-$	-17.60	
U(OH) ₄ Is ₂ ²⁻	$U(OH)_4 + 2Is^- = U(OH)_4Is_2^{2-}$	-4.90	Gaona et al., 2008
	$U^{4+} + 4H_2O - 4H^+ + 2Is^- = U(OH)_4Is_2^{2-}$	-15.70	
ThOHI _s ²⁺	$Th^{4+} + OH^- + Is^- = ThOHI_s^-$	7.80	Rai et al., 2009
	$Th^{4+} + H_2O - H^+ + Is^- = Th(OH)_4Is^-$	-6.20	
Th(OH) ₃ Is ₂ ⁻	$Th^{4+} + 3OH^- + 2Is^- = Th(OH)_3Is_2^-$	-28.30	Rai et al., 2009
	$Th^{4+} + 3H_2O - 3H^+ + 2Is^- = Th(OH)_3Is_2^-$	-70.30	
Th(OH) ₄ Is ₂ ²⁻	$Th^{4+} + 4OH^- + 2Is^- = Th(OH)_4Is_2^{2-}$	-49.90	Rai et al., 2009
	$Th^{4+} + 4H_2O - 4H^+ + 2Is^- = Th(OH)_4Is_2^{2-}$	-105.90	

*:化学反応式が2種類記載されている場合は、下段にマスター化学種で記載された化学反応式を記載

9. おわりに

4種類の有機物の熱力学データを JAEA-TDB に選定した。OECD/NEA の選定値を基本にして値を設定したが、OECD/NEA のみのデータだけでは、網羅性に欠けるため JAEA-TDB の独自の考え方に基づき熱力学データ（平衡定数）を暫定値として設定した。一部、LFER を適用して平衡定数の推定を試みている。今後、今回整備した熱力学データを用いた溶解度計算を行い、溶解度試験結果と比較することで、JAEA-TDB の適用性を検討し、熱力学データの設定の信頼性を高める必要がある。

謝 辞

本有機物関連の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、EDTA 等に関して貴重な情報の提供を受けた。ここに感謝の意を示します。

参考文献

- 1) 原子力委員会バックエンド対策専門部会：高レベル放射性廃棄物の地層処分の今後の進め方について，1997.
- 2) 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－ 分冊3 地層処分システムの安全評価，JNC TN1400 99-023, 1999.
- 3) Yui, M., Azuma, J. and Shibata, M. : JNC Thermodynamic Database for Performance Assessment of High-level Radioactive Waste Disposal System, JNC TN8400 99-070, 1999.
- 4) Parkhurst, D. K. and Appelo, C. A. J. : User' s Guide to PHREEQC (Version 2) - a Computer Program for Speciation, Batch-reaction, One-dimensional transport, and Inverse Geochemical Calculations, Water-Resources Investigations Report 99-4259, 1999.
- 5) 電気事業連合会，核燃料サイクル開発機構：TRU 廃棄物処分技術検討書－第2次 TRU 廃棄物処分研究開発とりまとめ－，JNC TY1400 2005-013, FEPC TRU-TR2-2005-02, 2005.
- 6) 三原守弘：TRU 廃棄物処分システムの安全評価における核種移行データセット，JAEA-Review 2006-011, 2006.
- 7) Osthols, E. and Wannner, H. : TDB-0: The NEA thermodynamic database project, Nuclear Energy Agency in Organization for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA), 2008.
- 8) Wannner, H. : TDB-1: Guidelines for the review procedure and data selection, Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA) ,2000.
- 9) Grenthe, I. and Wannner, H. : TDB-2: Guidelines for the extrapolation to zero ionic strength, Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA),2000.
- 10) Wannner, H. : TDB-3: Guidelines for the assignment of uncertainties, Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA) ,1999.
- 11) Grenthe, I. (Chair), Fuger, J., Konings, R. J. M., Lemire, R. J., Muller, A. B., Nguyen-Trung, C. and Wannner, H. : Chemical Thermodynamics of Uranium, Chemical Thermodynamics Series Volume 1, Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA),1992.
- 12) Silva, R. J. (Chair), Bidoglio, G., Rand, M. H., Robouch, P. B., Wannner, H. and Puigdomenech, I. : Chemical Thermodynamics of Americium, Chemical Thermodynamics Series Volume 2 , Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA),1995.
- 13) Rard, J. A. (Chair), Malcolm H. Rand, Giorgio Anderegg and Hans Wannner : Chemical Thermodynamics of Technetium, Chemical Thermodynamics Series Volume 3, Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA), 1999.
- 14) Lemire, R. J. (Chair), Fuger, J., Nitsche, H., Potter, P., Rand, M. H., Rydberg, J., Spahiu, K., Sullivan, J. C. , Ullman, W. J. , Vitorge, P. and Wannner, H. : Chemical Thermodynamics of Neptunium and Plutonium Chemical, Thermodynamics Series Volume 4, Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA), 2001.
- 15) Guillaumont, R. (Chair), Fanghanel, T., Fuger, J., Grenthe, I., Neck, V., Palmer, D.

- A. and Rand, M. H. : Update on the Chemical Thermodynamics of Uranium, Neptunium, Plutonium, Americium and Technetium, Chemical Thermodynamics Series Volume 5, Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA), 2003.
- 16) Gamsjager, H. (Chair), Bugajski, J., Gajda, T., Lemire, R. and Preis, W. : Chemical Thermodynamics of Nickel, Chemical Thermodynamics Series Volume 6, Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA), 2005.
- 17) Olin, A. (Chair), Nolang, B., Ohman, L., Osadchii, E. and Rosen, E. : Chemical Thermodynamics of Selenium, Chemical Thermodynamics Series Volume 7, Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA), 2005.
- 18) Brown, P. L. (Chair), Curti, E. and Grambow, B. : Chemical Thermodynamics of Zirconium, Chemical Thermodynamics Series Volume 8, Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA), 2005.
- 19) Hummel, W. (Chair), Anderegg, G., Puigdomenech, I., Rao, L. and Tochiyama, O. : Chemical Thermodynamics of Compounds and Complexes of U, Np, Pu, Am, Tc, Se, Ni and Zr with Selected Organic Ligands, Chemical Thermodynamics Series Volume 9, Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA), 2005.
- 20) Rand, M. (Chair), Fuger, J., Grenthe, I., Neck, V. and Rai, D. : Chemical thermodynamics of Thorium, Chemical Thermodynamics Series Volume 11, Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA), 2009.
- 21) Smith R. and Martell A. : Critical Stability Constants Volume 3: Other Organic Ligands, Plenum Press, 1977.
- 22) Smith R. and Martell A. : Critical Stability Constants Volume 6: Second Supplement, Plenum Press, 1989.
- 23) Heath, T. : HATCHES the Harwell/Nirex Thermodynamic Database for Chemical Equilibrium Studies Version NEA17, 2006.
- 24) Puigdomenech, I. : HYDRA; Hydrochemical Equilibrium-Constant Database, version13, www.kemi.kth.se/MEDUSA, 2009.
- 25) Grenthe, I. and Puigdomenech, I. (Scientific Editors) : Modelling in Aquatic Chemistry, Nuclear Energy Agency in Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD/NEA), p. 330, 1997.
- 26) Rai, D., Moore, D. A., Rosso, K. M., Felmy, A. R. and Bolton Jr., H. : Environmental Mobility of Pu(IV) in the Presence of Ethylenediaminetetraacetic Acid: Myth or Reality?, J Solution Chem, Vol.37, pp. 957-986, 2008.
- 27) 大瀧仁志, 田中元治, 舟橋重信 : 溶液反応の化学 第7刷, 学会出版センター, 1997.
- 28) Gaona, X., Montoya, V., Colàs, E., Grivé, M. and Duro, L. : Review of the complexation of tetravalent actinides by ISA and gluconate under alkaline to hyperalkaline conditions, Journal of Contaminant Hydrology, 102, pp.217-227, 2008.
- 29) Rai, D. Yui, M., Moore, D. A. and Rao, L. : Thermodynamic Model for ThO₂(am) Solubility in Isosaccharinate Solutions, J Solution Chem, Vol.38, pp. 1573-1587, 2009.

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
物質の量	モル	mol
光度	カンデラ	cd

表2. 基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

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

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

表3. 固有の名称と記号で表されるSI組立単位

組立量	SI組立単位			
	名称	記号	他のSI単位による表し方	SI基本単位による表し方
平面角	ラジアン ^(b)	rad	1 ^(b)	m/m
立体角	ステラジアン ^(b)	sr ^(c)	1 ^(b)	m ² /m ²
周波数	ヘルツ ^(d)	Hz		s ⁻¹
力	ニュートン	N		m kg s ⁻²
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m ²	m ⁻¹ kg s ⁻²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N m	m ² kg s ⁻²
仕事率, 工率, 放射束	ワット	W	J/s	m ² kg s ⁻³
電荷, 電流量	クーロン	C		s A
電位差 (電圧), 起電力	ボルト	V	W/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻¹
静電容量	ファラド	F	C/V	m ⁻² kg ⁻¹ s ⁴ A ²
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻²
コンダクタンス	ジーメンズ	S	A/V	m ⁻² kg ⁻¹ s ³ A ²
磁束	ウエーバ	Wb	Vs	m ² kg s ⁻² A ⁻¹
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²	kg s ⁻² A ⁻¹
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	m ² kg s ⁻² A ⁻²
セルシウス温度	セルシウス度 ^(e)	°C		K
光照度	ルーメン	lm		cd sr ^(c)
放射線量	ルクス	lx		lm/m ²
放射線種の放射能 ^(f)	ベクレル ^(d)	Bq		m ² cd s ⁻¹
吸収線量, 比エネルギー分与, カーマ	グレイ	Gy	J/kg	m ² s ⁻²
線量当量, 周辺線量当量, 方向性線量当量, 個人線量当量	シーベルト ^(g)	Sv	J/kg	m ² s ⁻²
酸素活性化	カタール	kat		s ⁻¹ mol

(a) SI接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはやコヒーレントではない。
 (b) ラジアンとステラジアンは数字の1に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号である数字の1は明示されない。
 (c) 測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。
 (d) ヘルツは周期現象についての、ベクレルは放射性核種の統計的過程についてのみ使用される。
 (e) セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。セルシウス度とケルビンの単位の大きさは同一である。したがって、温度差や温度間隔を表す数値はどちらの単位で表しても同じである。
 (f) 放射性核種の放射能 (activity referred to a radionuclide) は、しばしば誤った用語で「radioactivity」と記される。
 (g) 単位シーベルト (PV,2002,70,205) についてはCIPM勧告2 (CI-2002) を参照。

表4. 単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI組立単位		
	名称	記号	SI基本単位による表し方
粘力のモーメント	パスカル秒	Pa s	m ⁻¹ kg s ⁻¹
表面張力	ニュートンメートル	N m	m ² kg s ⁻²
角速度	ニュートン毎メートル	N/m	kg s ⁻²
角加速度	ラジアン毎秒	rad/s	m m ⁻¹ s ⁻¹ =s ⁻¹
熱流密度, 放射照度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s ²	m m ⁻¹ s ⁻² =s ⁻²
熱容量, エントロピー	ワット毎平方メートル	W/m ²	kg s ⁻³
比熱容量, 比エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	m ² kg s ⁻² K ⁻¹
比エネルギー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	m ² s ⁻² K ⁻¹
熱伝導率	ジュール毎キログラム	J/kg	m ² s ⁻²
体積エネルギー	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s ⁻³ K ⁻¹
電界の強さ	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ¹ kg s ⁻²
電荷密度	ジュール毎平方メートル	J/m ²	m kg s ⁻³ A ⁻¹
表面電荷	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ³ s A
電束密度, 電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ² s A
誘電率	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ² s A
透磁率	ファラド毎メートル	F/m	m ³ kg ⁻¹ s ⁴ A ²
モルエネルギー	ヘンリー毎メートル	H/m	m kg s ⁻² A ⁻²
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル	J/mol	m ² kg s ⁻² mol ⁻¹
照射線量 (X線及びγ線)	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	m ² kg s ⁻² K ⁻¹ mol ⁻¹
吸収線量率	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ s A
放射線強度	グレイ毎秒	Gy/s	m ² s ⁻³
放射輝度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m ² m ⁻² kg s ⁻³ =m ² kg s ⁻³
酵素活性濃度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	W/(m ² sr)	m ² m ⁻² kg s ⁻³ =kg s ⁻³
	カタール毎立方メートル	kat/m ³	m ³ s ⁻¹ mol

表5. SI接頭語

乗数	接頭語	記号	乗数	接頭語	記号
10 ²⁴	ヨタ	Y	10 ⁻¹	デシ	d
10 ²¹	ゼタ	Z	10 ⁻²	センチ	c
10 ¹⁸	エクサ	E	10 ⁻³	ミリ	m
10 ¹⁵	ペタ	P	10 ⁻⁶	マイクロ	μ
10 ¹²	テラ	T	10 ⁻⁹	ナノ	n
10 ⁹	ギガ	G	10 ⁻¹²	ピコ	p
10 ⁶	メガ	M	10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ³	キロ	k	10 ⁻¹⁸	アト	a
10 ²	ヘクト	h	10 ⁻²¹	ゼプト	z
10 ¹	デカ	da	10 ⁻²⁴	ヨクト	y

表6. SIに属さないが、SIと併用される単位

名称	記号	SI単位による値
分	min	1 min=60s
時	h	1 h=60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86 400 s
度	°	1°=(π/180) rad
分	'	1'=(1/60)°=(π/10800) rad
秒	"	1"=(1/60)'=(π/648000) rad
ヘクタール	ha	1 ha=1 hm ² =10 ⁴ m ²
リットル	L, l	1 L=1 dm ³ =10 ³ cm ³ =10 ⁻³ m ³
トン	t	1 t=10 ³ kg

表7. SIに属さないが、SIと併用される単位で、SI単位で表される数値が実験的に得られるもの

名称	記号	SI単位で表される数値
電子ボルト	eV	1 eV=1.602 176 53(14)×10 ⁻¹⁹ J
ダルトン	Da	1 Da=1.660 538 86(28)×10 ⁻²⁷ kg
統一原子質量単位	u	1 u=1 Da
天文単位	ua	1 ua=1.495 978 706 91(6)×10 ¹¹ m

表8. SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

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

表9. 固有の名称をもつCGS組立単位

名称	記号	SI単位で表される数値
エルグ	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J
ダイン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N
ポアズ	P	1 P=1 dyn s cm ⁻² =0.1 Pa s
ストークス	St	1 St=1 cm ² s ⁻¹ =10 ⁻⁴ m ² s ⁻¹
スチルブ	sb	1 sb=1 cd cm ⁻² =10 ⁻⁴ cd m ⁻²
ファラ	ph	1 ph=1 cd sr cm ⁻² 10 ⁴ lx
ガリ	Gal	1 Gal=1 cm s ⁻² =10 ⁻² ms ⁻²
マクスウェル	Mx	1 Mx=1 G cm ² =10 ⁻⁸ Wb
ガウス	G	1 G=1 Mx cm ⁻² =10 ⁻⁴ T
エルステッド ^(c)	Oe	1 Oe ≐ (10 ³ /4π) A m ⁻¹

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

表10. SIに属さないその他の単位の例

名称	記号	SI単位で表される数値
キュリー	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq
レントゲン	R	1 R=2.58×10 ⁻⁴ C/kg
ラド	rad	1 rad=1 cGy=10 ⁻² Gy
レム	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv
ガンマ	γ	1 γ=1 nT=10 ⁻⁹ T
フェルミ	f	1 f=1 fm=10 ⁻¹⁵ m
メートル系カラット		1メートル系カラット=200 mg=2×10 ⁻⁴ kg
トル	Torr	1 Torr=(101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm=101 325 Pa
カロリ	cal	1 cal=4.1858 J (「15°C」カロリ), 4.1868 J (「IT」カロリ), 4.184 J (「熱化学」カロリ)
マイクロン	μ	1 μ=1 μm=10 ⁻⁶ m

