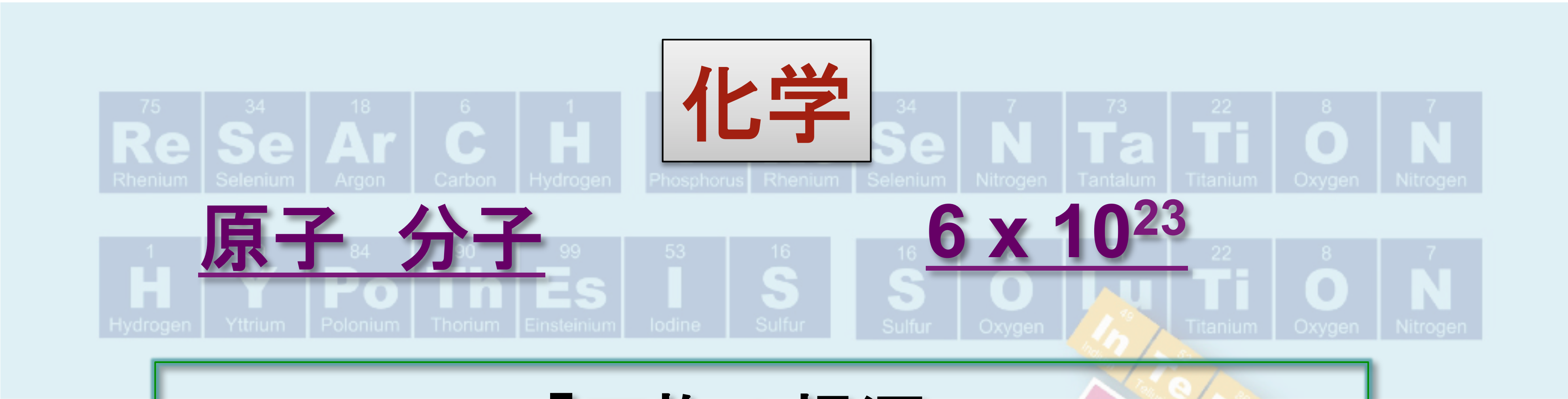
日本学術会議 公開シンポジウム「新しい国際単位系(SI)」
日本学術会議講堂　１２月4日 2018

「化学の標準変更について」

名古屋大学物質科学国際研究センター　　巽　和行

元素



化学

原子　分子

6×10^{23}

「万物の根源」

古代ギリシャ

Arkhe – アルケー

Classical Elements (Greek)

4大元素（空気、土、火、水）

The four elements
of “air”, “earth”, “fire”, and “water”

4大元素（万物の原型）

ギリシャのエンペドクレスの考案：　*木を燃やすと、炎が赤く輝き、その煙は空気と一体化し燃えた後には水が生じ燃えかすは土に帰する。*

IUPAC Periodic Table of the Elements

Key: atomic number / **Symbol** / name / conventional atomic weight / standard atomic weight

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 **H** hydrogen 1.008 [1.0078, 1.0082]																	2 **He** helium 4.0026
3 **Li** lithium 6.94 [6.938, 6.997]	4 **Be** beryllium 9.0122											5 **B** boron 10.81 [10.806, 10.821]	6 **C** carbon 12.011 [12.009, 12.012]	7 **N** nitrogen 14.007 [14.006, 14.008]	8 **O** oxygen 15.999 [15.999, 16.000]	9 **F** fluorine 18.998	10 **Ne** neon 20.180
11 **Na** sodium 22.990	12 **Mg** magnesium 24.305 [24.304, 24.307]											13 **Al** aluminium 26.982	14 **Si** silicon 28.085 [28.084, 28.086]	15 **P** phosphorus 30.974	16 **S** sulfur 32.06 [32.059, 32.076]	17 **Cl** chlorine 35.45 [35.446, 35.457]	18 **Ar** argon 39.948
19 **K** potassium 39.098	20 **Ca** calcium 40.078(4)	21 **Sc** scandium 44.956	22 **Ti** titanium 47.867	23 **V** vanadium 50.942	24 **Cr** chromium 51.996	25 **Mn** manganese 54.938	26 **Fe** iron 55.845(2)	27 **Co** cobalt 58.933	28 **Ni** nickel 58.693	29 **Cu** copper 63.546(3)	30 **Zn** zinc 65.38(2)	31 **Ga** gallium 69.723	32 **Ge** germanium 72.630(8)	33 **As** arsenic 74.922	34 **Se** selenium 78.971(8)	35 **Br** bromine 79.904 [79.901, 79.907]	36 **Kr** krypton 83.798(2)
37 **Rb** rubidium 85.468	38 **Sr** strontium 87.62	39 **Y** yttrium 88.906	40 **Zr** zirconium 91.224(2)	41 **Nb** niobium 92.906	42 **Mo** molybdenum 95.95	43 **Tc** technetium	44 **Ru** ruthenium 101.07(2)	45 **Rh** rhodium 102.91	46 **Pd** palladium 106.42	47 **Ag** silver 107.87	48 **Cd** cadmium 112.41	49 **In** indium 114.82	50 **Sn** tin 118.71	51 **Sb** antimony 121.76	52 **Te** tellurium 127.60(3)	53 **I** iodine 126.90	54 **Xe** xenon 131.29
55 **Cs** caesium 132.91	56 **Ba** barium 137.33	57-71 lanthanoids	72 **Hf** hafnium 178.49(2)	73 **Ta** tantalum 180.95	74 **W** tungsten 183.84	75 **Re** rhenium 186.21	76 **Os** osmium 190.23(3)	77 **Ir** iridium 192.22	78 **Pt** platinum 195.08	79 **Au** gold 196.97	80 **Hg** mercury 200.59	81 **Tl** thallium 204.38 [204.38, 204.39]	82 **Pb** lead 207.2	83 **Bi** bismuth 208.98	84 **Po** polonium	85 **At** astatine	86 **Rn** radon
87 **Fr** francium	88 **Ra** radium	89-103 actinoids	104 **Rf** rutherfordium	105 **Db** dubnium	106 **Sg** seaborgium	107 **Bh** bohrium	108 **Hs** hassium	109 **Mt** meitnerium	110 **Ds** darmstadtium	111 **Rg** roentgenium	112 **Cn** copernicium	113 **Nh** nihonium	114 **Fl** flerovium	115 **Mc** moscovium	116 **Lv** livermorium	117 **Ts** tennessine	118 **Og** oganesson
			57 **La** lanthanum 138.91	58 **Ce** cerium 140.12	59 **Pr** praseodymium 140.91	60 **Nd** neodymium 144.24	61 **Pm** promethium	62 **Sm** samarium 150.36(2)	63 **Eu** europium 151.96	64 **Gd** gadolinium 157.25(3)	65 **Tb** terbium 158.93	66 **Dy** dysprosium 162.50	67 **Ho** holmium 164.93	68 **Er** erbium 167.26	69 **Tm** thulium 168.93	70 **Yb** ytterbium 173.05	71 **Lu** lutetium 174.97
			89 **Ac** actinium	90 **Th** thorium 232.04	91 **Pa** protactinium 231.04	92 **U** uranium 238.03	93 **Np** neptunium	94 **Pu** plutonium	95 **Am** americium	96 **Cm** curium	97 **Bk** berkelium	98 **Cf** californium	99 **Es** einsteinium	100 **Fm** fermium	101 **Md** mendelevium	102 **No** nobelium	103 **Lr** lawrencium

INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY

For notes and updates to this table, see www.iupac.org. This version is dated 28 November 2016.

Classical Elements

四大元素（空気、土、火、水）

五大思想（水、土、火、風、空）

↓

科学的元素・原子の世界

人間のロマン　　vs.　　科学のロマン

"The truth may be puzzling. It may be counterintuitive.
It may not be consonant with what we desperately want to be true.
But our preferences do not determine what's true."

By Carl Sagan

原子論(Atomism)

＊古代ギリシャ（レウキッポス、デモクリトス、エピクロス）

＊イスラム理論神学：*もはやそれ以上分割できない部分*

ドルトン(Dalton)の原子説

1808年

質量保存の法則、定比例の法則を合理的に説明

＊すべての元素は原子（Atom）と呼ばれる
最小で分割不可能な粒子からできている。

＊物質は異なる原子が一定の割合で結合してできる。

＊同じ元素の原子は、大きさ、質量、形が同一である。

＊化学変化は原子の集まり方が変わるだけで、
原子は無くなることも新しく生まれることもない。

ドルトンの原子説の破綻：ゲイ・リュサックの気体反応の法則、アボガドロの法則

ドルトンの原子説の破綻：ゲイ・リュサックの気体反応の法則

分子論

＊アボガドロの法則　(1811)

同一圧力、同一温度、同一体積のすべての種類の気体には同じ数の分子が含まれる。

＊*証明：*アルベルト・アインシュタイン（ブラウン運動の理論）

ジャン・ペラン（アボガドロ定数の測定）

/質量保存の法則/

＊The amount of chemical substances is traditionally measured by *mass* or *volume*.

＊ Since the introduction of relative atomic masses (also called “atomic weights”) by John Dalton, chemists are able to express their observations in a quantity that is proportional to the number of elementary entities.

INTERNATIONAL UNION OF PURE AND APPLIED CHEMISTRY

Advancing the Worldwide Role of Chemistry

IUPAC serves the international scientific endeavor in the dual function of a fundamental science and mission-oriented Union. The Union is in a unique position to contribute to the central interdisciplinary chemical sciences.

On the revision of the International System of Units

16 Nov 2018 – Today, on this final day of the 26th meeting of the General Conference on Weights and Measures (CGPM) at the Palais des Congrès in Versailles, a...

posted on 16 November 2018

posted in Announcements, Recent Releases

tagged with IUPAC Recommendations, SI, mole, Division I

The Revision of the International System of Units
vs
Chemistry (IUPAC)

[1] Roberto Marquardt, Juris Meija, Zoltán Mester, Marcy Towns, Ron Weir, Richard Davis and Jürgen Stohner,
"Definition of the mole (IUPAC Recommendation 2017)",
Pure Appl. Chem. 90(1), pp. 175-180 (2018).

[2] Roberto Marquardt, Juris Meija, Zoltán Mester, Marcy Towns, Ron Weir, Richard Davis and Jürgen Stohner,
"A critical review of the proposed definitions of fundamental chemical quantities and their impact on chemical communities (IUPAC Technical Report)",
Pure Appl. Chem. 89(7), pp. 951-981 (2017).

The Revision of the International System of Units
vs
Chemistry (IUPAC)

The quantities m_u (atomic mass constant), M_u (molar mass constant), A_r (relative atomic mass or "atomic weight"), m_a (atomic mass), M (molar mass), and **N_A (Avogadro constant)** are particularly important in chemistry, as chemists often determine amount of substance by weighing. These quantities are related for one particular entity X as follows:

$$M(\mathrm{X})=A_r(\mathrm{X})M_u \qquad (1)$$

$$M(\mathrm{X})=N_A m_a(\mathrm{X}) \qquad (2)$$

$$m_a(\mathrm{X})=A_r(\mathrm{X})m_u \qquad (3)$$

Combining eqs. (1)–(3) results in

$$M_u=N_\mathrm{A} m_u \qquad (4)$$

Since the introduction of relative atomic masses ("atomic weights") by John Dalton, chemists are able to express their observations in a quantity that is proportional to the number of elementary entities.

The Revision of the International System of Units
vs
Chemistry (IUPAC)

“Mole（mol）”の定義（1971年）

1. モルは、0.012 キログラム（12グラム）の炭素12の中に存在する原子の数と等しい “*elementary entities*” を含む系の物質量である。

2. モルを用いるとき、“*elementary entities*” は原子、分子、イオン、電子その他の粒子、またはこれらの粒子の集合体である。

モルを定義することで、物質量と“*elementary entities*”の数をつなげる定数が定義される。そのような定数としてアボガドロ定数があり、1mol に含まれる構成要素の数をアボガドロ定数となる。アボガドロ定数を表す記号は N_A が用いられる。ある試料に含まれる“*elementary entities*” *X* のamount *n* (*X*) は、“*elementary entities*”のnumber *N* (*X*) と以下の関係で結ばれる。

$n(\mathrm{X})=N(\mathrm{X})/N_A$

amount *n* (*X*) の単位は mol であり、number *N* (*X*) は無次元量であるため、アボガドロ定数は mol^{-1} の単位をもつ。

Table 2: Change of the numerical value of the quantity which is presently known to be the Avogadro constant over time.

Name	Year	Numerical value	Notes
J.C. Magnenus	~1646	$\approx 2\times10^{22}$[a]	Diffusion of incense Burnt in a church [20, 25]
Loschmidt	~1865	5.8×10^{23}[a]	Mean free path in gases [23]
Röntgen, Rayleigh	~1890	$(6-7)\times10^{23}$	[20]
Ostwald	~1899	6.3×10^{23}[a]	[23]
Planck	1900	6.175×10^{23}	Black-body radiation [20]
Einstein,	1905/6	6.17×10^{23}	[20]
Smoluchowski	1908	6.0×10^{23}	
	1911	6.56×10^{23}	[23]
Perrin	1909	6.5×10^{23}	[20, 21]
Rutherford	1909	6.16×10^{23}	Counting α-particles [23]
Millikan	1917	6.064×10^{23}	Faraday's law [23]
DuNouy	~1924	6.003×10^{23}	[23]
Kappler	1931	6.059×10^{23}	[23]
Birge	1941	$6.023\,38\times10^{23}$	Crystal lattice/XRCD[b] [23]
De Bièvre	2001	$6.022\,133\,9\times10^{23}$	[28]
Andreas *et al.*	2011	$6.022\,140\,78(18)\times10^{23}$	Crystal lattice/XRCD[b] [29]
CODATA	2014	$6.022\,140\,857(74)\times10^{23}$	Recommended [3]
CODATA	2017	$6.02214076 \times 10^{23}$	

The Revision of the International System of Units
vs
Chemistry (IUPAC)

新しい“Mole（モル）”の定義

系に含まれる構成要素の数を定義値とすることでモルを定義する。

新定義: モル (mol) は物質量の単位である。1 モルは正確に$6.02214076 \times 10^{23}$ の要素粒子を含む。この数値の単位は mol^{-1}で固定された数値である（アボガドロ数）。

⇩

モルはキログラムの定義に依存しない

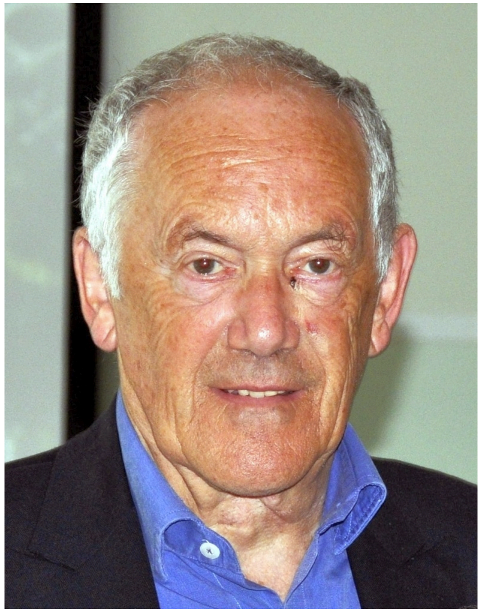
以下の値は不確かさのある値となる。

＊^{12}C のモル質量：　現行の定義では正確に 0.012 kg/mol である。
＊モル質量：　現行の定義では正確に 0.001 kg/mol である。
＊0.012 kg の^{12}C の物質量：　現行の定義では正確に 1 mol である。

The Revision of the International System of Units
vs
Chemistry (IUPAC)

"Mole（モル）"

Professor Peter W. Atkins, founding Chair of IUPAC Committee on Chemistry Education, commented as followed: "I have always been puzzled by the widespread view that the mole is a difficult subject: it has always seemed to me that many instructors tell their students that it is a sophisticated concept, and the students then wonder what all the fuss is about, suspecting that they have misunderstood it or have not appreciated its subtlety. The new definition cuts to the core of the meaning of 1 mole, and is therefore to be welcomed. Although there are subtleties in its determination, there can no longer be any excuse for misunderstanding its definition."



Prof. Peter Atkins
Oxford

"It is as easy to count atomies as to resolve the propositions of a lover"

by William Shakespeare <*As You like It*>

IUPAC
Division II

IUPAC周期表の原子量の新しい定義

New Definition of Atomic Weights

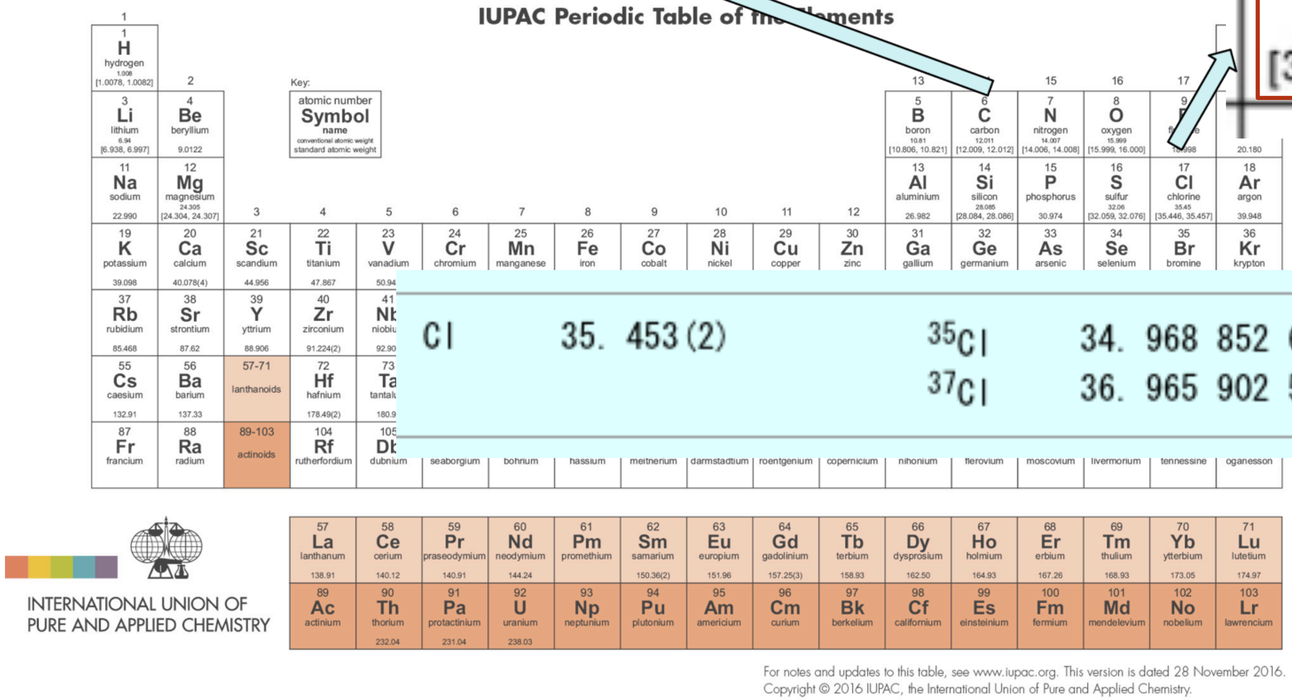
C	12. 0107 (8)	^{12}C	12 . 000 000 0 (0)	98. 93 (8)
		^{13}C	13 . 003 354 8378 (10)	1. 07 (8)

6
C
carbon
12.011
[12.009, 12.012]

17

9
F
fluorine
18.998

17
Cl
chlorine
35.45
[35.446, 35.457]

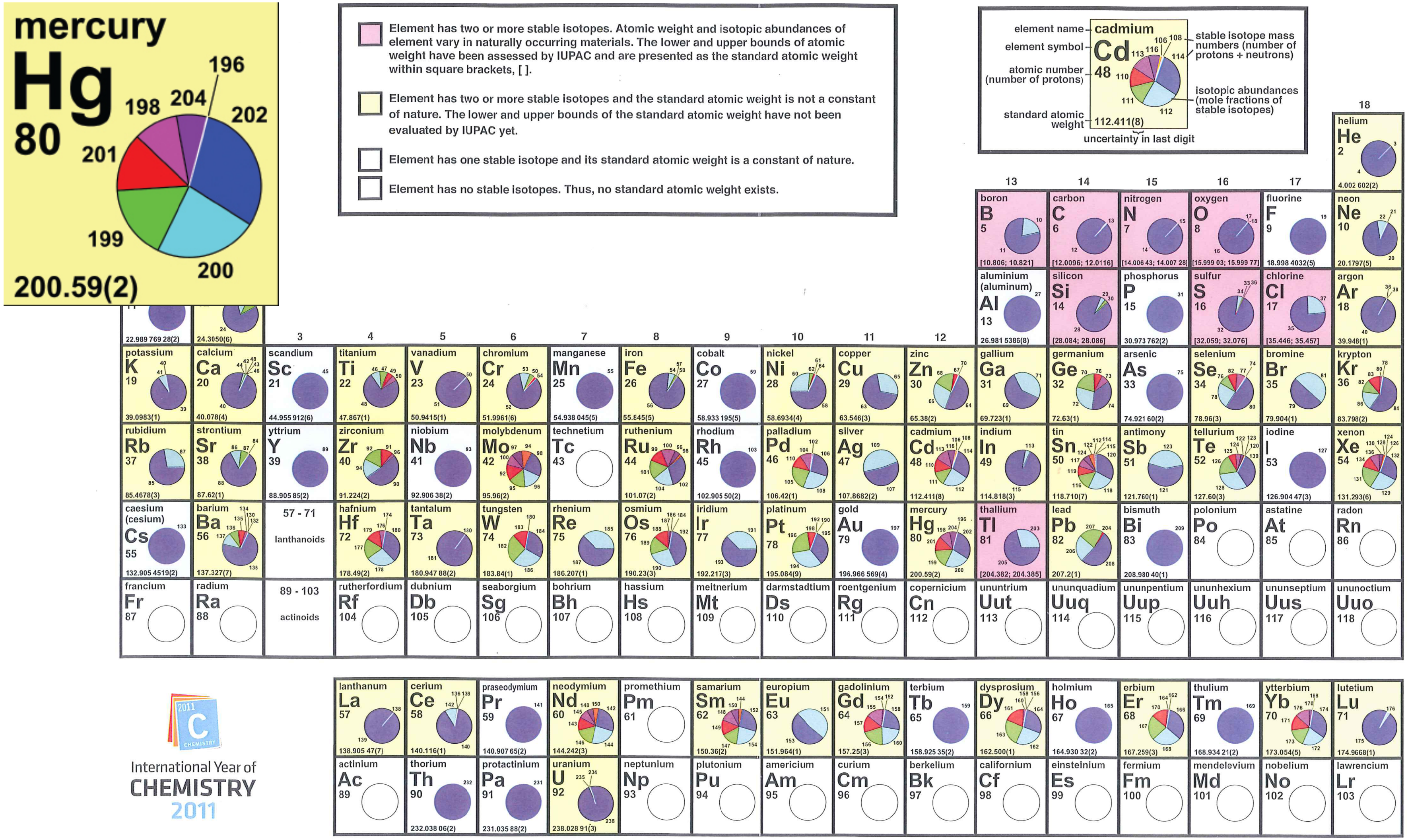


Cl	35. 453 (2)	^{35}Cl	34. 968 852 68 (4)	75. 76 (10)
		^{37}Cl	36. 965 902 59 (5)	24. 24 (10)

IUPAC
Division II

IUPAC周期表の新たな原子量表記

Isotopic Abundances and Standard Atomic Weights

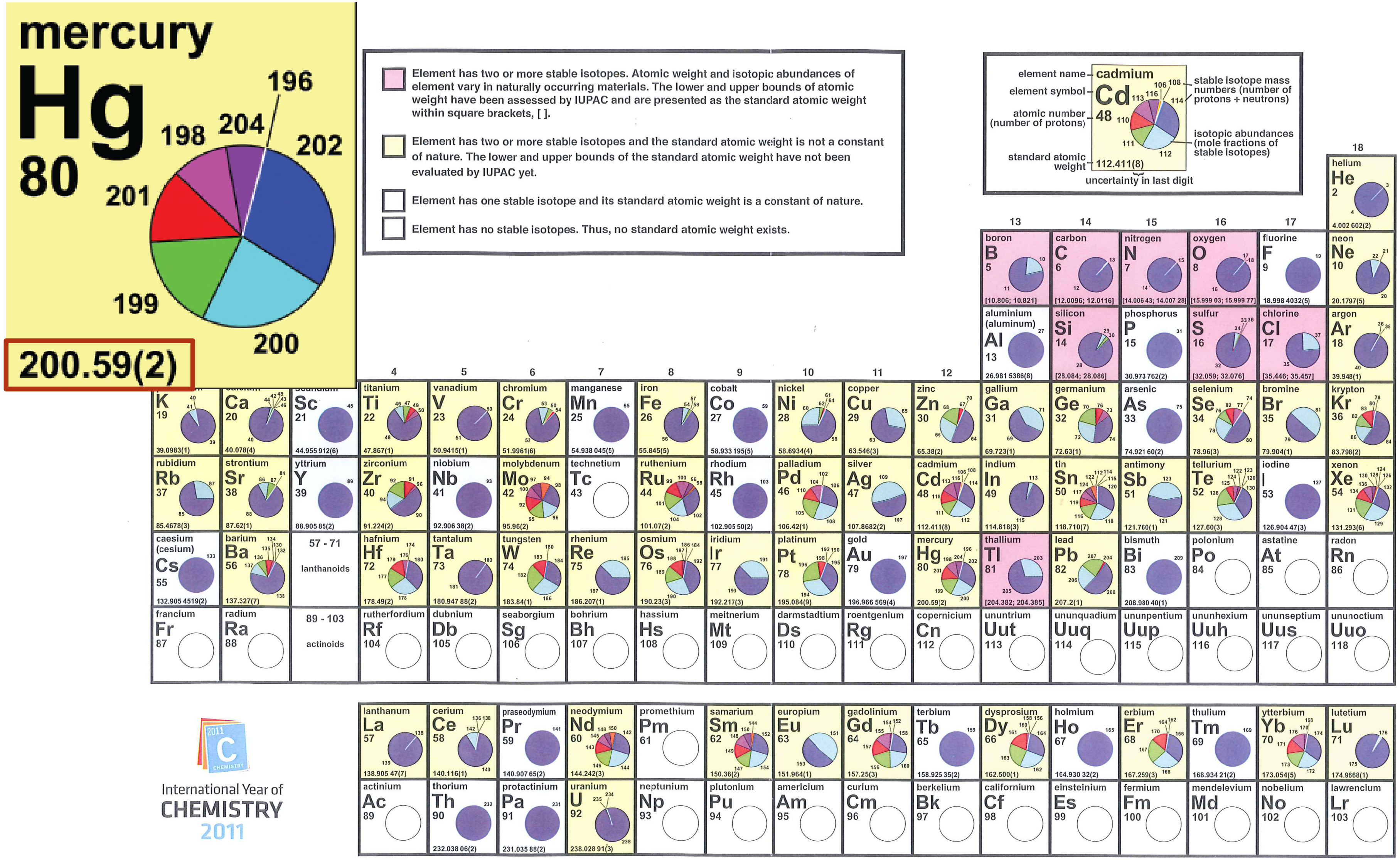


International Year of CHEMISTRY 2011

IUPAC
Division II

IUPAC周期表の新たな原子量表記

Isotopic Abundances and Standard Atomic Weights



International Year of CHEMISTRY 2011

CHEMISTRY International July--August 2011 Vol. 33 No. 4, Supplement

www.ciaaw.org

IUPAC
Division II

IUPAC周期表の原子量の新しい定義

New Definition of Atomic Weights

ナイアガラの滝の水、イグアスの滝の水、ビクトリアの滝の水

水の重さが異なる！

O	15. 999 4(3)	^{16}O	15. 994 914 619 56(16)	99. 757(16)
		^{17}O	16. 999 131 70(12)	0. 038(1)
		^{18}O	17. 999 161 0(7)	0. 205(14)

Division II

Council

ご清聴ありがとうございました。