

## 物理量・数値・単位と分率の表記についての提言

岩本 振武

### 1 はじめに

本会の論文誌「分析化学」と「*Analytical Sciences*」も含め、学術論文誌等の投稿規定には、物理量などの表記は国際単位系 (SI) に従い、化合物等の名称は命名法規則に従うようにとの「原則」が明記してあるのが普通である。原則の規範としては、単位系関係では国際純正・応用化学連合 (IUPAC) のグリーンブック<sup>1)</sup> (物理化学で用いられる量・単位・記号)、命名法関係では IUPAC レッドブック<sup>2)</sup> (無機)・ブルーブック<sup>3)</sup> (有機) などがあり、論文投稿者が規定に忠実であろうとするならば、それらを参照して記述の正確さを期さなければならない。編集者には、掲載される論文の内容だけでなく、表記の妥当性についても審査することが望まれる。もちろんその場合、著者の主張に合理性があれば、規定に拘泥することなく、原理原則との妥協の余地は残されるべきであろう。特に分析化学の場合、結果そのものが重要であり、表記に多少の瑕疵<sup>かし</sup>があるように見えてもその公表に意義のあることがあり得る。命名法も含め、これらの諸規定は「勧告」であって、絶対的な「強制」ではない。その表現が受容されるかどうかは別として、当然のことながら著者には「表現の自由」がある。

実は、分析化学の概念と用語を規定する IUPAC オレンジブック<sup>4)</sup>が 1998 年に出版されているのであるが、その内容は些<sup>いささ</sup>か古く、2012 年から改訂作業が続けられている。日本の化学界にとって具合が悪いことには、IUPAC 命名法の内容を要約して日本化学会が刊行している「化合物命名法—IUPAC 勧告に準拠—」<sup>5)</sup>が「オレンジブック」と俗称されており、IUPAC オレンジブックと重複してしまっていることである。

それはさておき、分析化学には応用物理化学の性格が色濃く認められるので、グリーンブックを参照すれば、おおよそのところは事が足りることになる。その内容は、インターネットで「IUPAC Green Book」を検索し、第 3 版第 2 刷の PDF を開けば通読が可能となっている。建前としては、それを熟読すれば万事解決するは

ずであるが、世の中そう簡単にはいかないのが通例である。本誌においても、グリーンブックの原則には合致しない記号や単位の表記は、ほぼ毎号にわたって散見されている。

グリーンブックの初版は 1988 年に刊行され、原著者の一人でもある朽津耕三東大名誉教授が訳出した「物理化学で用いられる量・単位・記号」<sup>6)</sup>を 1991 年に講談社が出版している。原著第 2 版の邦訳は出版されていないが、2007 年の第 3 版は産総研計量標準総合センター訳として 2009 年に同じく講談社が出版した<sup>7)</sup>。残念なことに、その第 3 版訳書は版元品切れ、再刊の予定もない絶版状態になっている。座右に置いて日常的に参照するのは甚だしく困難なのが現状である。しかし、この PDF 版<sup>8)</sup>が公開されており、「計量標準総合センター」→「出版物・報告書」→「各種報告書・翻訳出版物」と検索を続ければ自由に入手が可能である。

率直に言って、このような状況は日本語の参考書を頼りにする人達には甚だ望ましくない。学界、官界、業界と同様、教育界においても単位の問題は重要であり、広い意味での情報の伝達・交換にかかわる関係者には必須の参考書となるからである。

第 3 版では、第 1 版で取り上げられていなかった %、ppm、ppb などの分率記号についての記載が新たに加えられている。定量分析の実際は試料中の目的成分の存在比、つまり分率を求めることにある。本稿ではその点にも意を配り、自説を交えながら第 3 版の内容に沿って単位・分率の表記について解説してみよう。

### 2 グリーンブックの構成

#### 2.1 国際単位系

国際単位系の原典はフランス語で書かれた *Système international d'unités* であり、略称の SI または SI 単位系はこの正式名称に由来する。この単位系では、長さ、質量、時間、電流、熱力学温度、物質質量、光度を基本物理量として設定し、名称と定義は当然のこととして、それぞれに記号、単位名称、単位記号が与えられている。例えば、名称が「長さ」である物理量に対しては

物理量記号  $l$ , 単位名称 メートル, 単位記号  $m$

である。基本物理量以外の物理量については、基本物理量の積あるいは商となる組立物理量として定義されるのが基本である。

汎用性の高い組立物理量についても名称、記号、組立単位名称、組立単位記号が例示されている。例えば

名称 エネルギー, 記号  $E$ , 単位名称 ジュール,  
単位記号  $J (= Nm = m^2 kg s^{-2})$

のように、である。しかし、実際の科学分野では、それぞれの課題に応じて、様々な組立物理量での記載が必要となる。課題に即応してどのように新しい組立物理量を導入するかは、SIの原則に従えばよいのである。

## 2・2 グリーンブックの有用性

グリーンブックの各章からは当然であるが、巻末の記号索引と事項索引から、各種物理量や比率などのIUPAC公認名称と記号についての情報を容易に得ることができる。自ら組立物理量を定義して記号を設定しようとするときに、既定の公認名称・記号と矛盾・重複がないことを検証するのは著者の義務である。学生時代に学習した、あるいは専門分野で慣用されている名称・記号などが、SIやIUPACの規範と照合して妥当であるかどうかの検証も容易である。例えば、「ギブズ自由エネルギー」ではなく、「ギブズエネルギー」が公認名称であり、秒の単位記号は「sec」ではなく、「s」である。直径の公認略号は「 $d$ 」であって、「 $\phi$ 」や「 $\varnothing$ 」ではない。

物理量・比率の記号と単位記号はローマ字あるいはギリシャ字と、いくつかの限定された記号で表記されている。従って、異なる物理量等の記号が同一文字となる例も少なくない。そのような事例を知るためにも、グリーンブックへの参照は日常的に必須の作業であると筆者は考えている。

## 3 表記の実際

### 3・1 表記の基本

「物理量=数値×単位」が表記の基本原則である。これと同形の代数式は  $a = bc$  であり、変形すれば  $b = a/c = ac^{-1}$  が導かれる。乗除算と分数の基礎知識があれば、容易に理解できる。しかし、その実践に当たっては、表記の原則に従うことが強く望まれる。

ここで、ワープロでの原稿作成を想定して表記の実際を説明してみよう。まず、日本語文であっても、理工系文書の英数字は Times New Roman で入力することが望ましい。国際的論文誌などで広く採用されているからである。国内市販パソコンでのワープロソフトでは、あらかじめ Century で設定されていることが多いので、

既定値を Times New Roman に変更することをお勧めする。例えば Times New Roman での *cis-trans* は、Century では *cis-trans* になってしまう。

小数点「 $.$ 」を起点とした大小両方向それぞれについて、5桁以上になる大桁数の数値は、英数モードの1バイト文字を使用し、起点から3桁目ごとに英数半角1字分の空白を入れながら連記する。4桁までの数値では空白を入れない。

例  $n = 1\ 234\ 567\ 890.987\ 654\ 321\ 0$   
 $\tilde{\nu} = 3145\ \text{cm}^{-1}$

SIにおける諸定義での数値表記はこの形式になっているので、自然科学関係の文書はすべてそれに従うのが最善であろう。例えば、長さの単位であるメートル（単位記号  $m$ ）の定義は、

「1秒の299 792 458分の1の時間に光が真空中を伝わる行程の長さ」

である。また、SIと併用することが認められている非SI単位の一つである電子ボルトの単位記号  $eV$  に与えられたSI単位による値は

$$eV = 1.602\ 176\ 487(40) \times 10^{-19}\ \text{J}$$

と表記されている。

大桁数数値の3桁目ごとに「 $.$ 」を入れる表記は避けるべきである。フランス語のように小数点を「 $,$ 」とする言語も少なくないからである。SIでは小数点を「 $.$ 」とすることも認められている。

通常の日本語モードでの全角英数字は、漢字や仮名と同じ2バイト文字であり、日本語モードのソフトが実働していない機器では判読不能である。なお、ここでの英数字とは、ギリシャ文字や数学記号なども含まれる。

組立単位記号は、べき指数を含めた各構成単位記号の間に英数半角1字分の空白を入れて連記する。

例  $J = Nm (= m\ kg\ s^{-2}\ m) = m^2\ kg\ s^{-2}$

グリーンブックには推奨される数学記号表記についての章もあり、その中で「 $a$ に $b$ を乗ずる」に対しては、

$$a\ b, ab, a \cdot b, a \times b$$

の4種類の表記が推奨されている。組立単位記号については、 $ab$ および $a \cdot b$ 形式の表記が認められている。「 $a \cdot b$ 」の中黒点は終止符（ピリオド）を1/2行上げた小さい点に相当する。大きすぎるとラジカドットになるので、表記の際には適切なフォントを選ぶ必要がある。また、斜線を用いた商（除算）形式の  $\text{Pa} = \text{N}/\text{m}^2$  のような表記も認められてはいるが、SIでの諸定義ではすべて、中黒点と斜線は使わない、負のべき指数を含めての、英数半角1字分の空白を入れながらの連

乗形式の表記が採用されている。圧力の単位パスカルについて再記すると、以下ようになる。

$$\text{Pa} = \text{N m}^{-2} (= \text{m kg s}^{-2} \text{m}^{-2}) = \text{m}^{-1} \text{kg s}^{-2}$$

この乗算連記方式を採用すると、数値＝物理量記号/単位記号の表記において、斜線「/」の多重使用を避けることもできる。上記での丸括弧は演算の途中過程を注記する意味で用いている。数値表記の際に分母となる組立単位記号を括弧でまとめる表記は、グリーンブックには見当たらない。例えば

$$234.5 = \Delta E / (\text{m}^2 \text{kg s}^{-2})$$

のような表記は、誤りとは言えないにしても、避けるべきである。

数値×単位記号で物理量を表記するときには、数値と単位記号との間に英数半角1字分の空白を入れる。ただし、角度・時刻の単位記号「°」, 「′」, 「″」は例外で、空白は入れない。

例 質量  $m = 43.21 \text{ kg}$   
運動量 (絶対値)  $p = 5.678 \text{ kg m s}^{-1}$   
角度  $\theta = 138^\circ 43' 39''$

後者に関連してしばしば誤解されるのがセルシウス温度  $t$  の表記である。数値と単位記号 °C との間には英数半角1字分の空白を入れるのが正しい表記である。

例  $t = -237.15 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $t = 112.4 \text{ }^\circ\text{C}$   
( $t/^\circ\text{C} = T/\text{K} - 273.15$ )

単位記号 °C は、それぞれ1バイトの記号<sup>9)</sup>「°」と文字「C」で構成されている。日本語ワープロでの2バイト文字「C」はSIが定めている単位記号ではない。物理量であるセルシウス温度の単位がセルシウス度である。英語では degree Celsius と読む「°C」の日本語での正式な読み方は「セルシウス度」であり、例えば「28.5 °C」を「セッシン 28.5 ド」読むのは誤りである。「28.5 セルシウス度」なら間違いなく正しいが、「28.5 ドシー」でも誤りとは言えないだろうと考えられる。

### 3.2 書体の定め

日本語では漢字と仮名、漢字では楷書・行書・草書・隸書など、書体あるいは字体の書き分けがあるが、英数字にも様々な書体がある。SIでの諸記号の定義には、書体の指定も含まれている。その原則は簡単ではあるけれども、日常的に慣れていないと案外守り難い。

英数字書体には、大別してセリフ体とサンセリフ体の2種がある。1, Aのように、字の端にヒゲ (serif) のあるのがセリフ体、1, Aのようにヒゲのないのがサンセリフ体である。日本語では太字体をゴシック体ということが多いが、ゴシック体は典型的なサンセリフ体の字

体であり、太字はボールド体である。Times New Roman のボールド体が **Times New Roman** であり、Arial のボールド体が **Arial** である。

一般にローマンといわれる立字体とイタリックといわれる斜字体の使い分けも定義されている。例えば、ベクトルである力、電場、座標ベクトルの記号は太字イタリックの  $\mathbf{F}$ ,  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{r}$  であるが、それらのベクトルの絶対値は並字イタリックの  $F$ ,  $E$ ,  $r$  で示す。また、要素  $A_{ij}$  の作る行列の記号は  $\mathbf{A}$ 、正方行列  $\mathbf{A}$  の行列式の記号は  $\det \mathbf{A}$  あるいは  $|\mathbf{A}|$  である。テンソル量の記号は太字イタリックのサンセリフ体で  $\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{T}$  のように表記する。

物理量、代数項、比率など、変動する数値を持つ量の記号はイタリックとする。記号に上付き下付きなどで添記する文字は、物理量等に由来する場合はイタリック、そうでなければローマンとする。

例 定圧熱容量  $C_p$ : 下付き  $p$  は圧力に由来する。  
 $i$  番目の物質の分圧  $p_i$ : 下付き  $i$  は不特定の順番に由来する。  
液間電位差  $E_j^{A/B}$ : 上付き A/B は液相 A と液相 B に由来し、下付き  $j$  は junction に由来する。

物理量由来の量の記号でイタリックになっていない例外が pH である。歴史的重みというべきであろう。

単位記号と、それに付記される d, c, m,  $\mu$ , n, p, f, a, z, y の分量接頭語と da, h, k, M, G, T, P, E, Z, Y の倍量接頭語はすべてローマンである。物理量記号とは異なり、単位記号への付記が許容されるのはこれらの接頭語に限定される。

グリーンブックでは自然対数の底 e, 円周率  $\pi$ , -1 の平方根 i はローマンとしている。また、微分記号 d, 偏微分記号  $\partial$ , 変化量を与える記号  $\Delta$  もローマンとしている。

対称についての記号には、点群・分子構造ではシェーンフリース記号、結晶構造ではハーマン・モーガン記号がある。国際結晶学連合 (IUCr) が刊行している *International Tables for Crystallography*<sup>10)</sup>での表記とグリーンブックでの表記には差がある。前者では、ラテン・ギリシャを問わず、文字はイタリック、アラビア数字はローマンである。IUPAC 無機化学命名法ではイタリックにしている結晶格子記号  $P$ ,  $F$ ,  $I$ ,  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $R$  をグリーンブックではローマンとしている。結晶学が化学だけに限定されている領域ではないので、対称の記号については IUCr の規定に従うのは一つの便法だと言えよう。

空間群の記号で例えば  $P\bar{1}$  を  $P-1$  と表記することがあるようだが、これは正しくない。数式オブジェクトなどのソフトを利用して正しく表記すべきである。

原子間距離、結合距離、結晶の軸長(単位周期の長さ)などの単位として便利なのはオングストロームであるが、その記号 Å<sup>11)</sup>を「記号と特殊文字」から選ぶとき

には注意を要する。A の上の「°」の上に「´」が付く文字  $\acute{A}$  を誤って選択する例もあるからである。

学会発表や、所謂プレゼン用イラストでの静止画・動画の電子画像やポスターなどでイタリックやボールドを使用する際には、物理量等の記号・単位記号・数値の表記規則に反しないよう配慮すべきである。大文字と小文字の使い分けにも注意が必要である。投稿論文の図表においては、イタリックやボールドの規則に反する用法は避けるべきである。測定機器からの出力にはしばしば規則に反する表記が見られるので、特に注意を払う必要がある。

### 3・3 数学記号

数値に与えられる正負の符号は数値との間に空白を入れずに表記するが、加減乗除算記号、等号・不等号などの数学記号と数値との間には英数半角1字分の空白を入れる。負符号をハイフンで代用することは避けるべきである。

例  $-83.9 + 1.98 \text{ V} - 17.8 \text{ }^\circ\text{C} (= 0.0 \text{ }^\circ\text{F})$   
 $ax^2 + bx + c = 0, b^2 - 4ac \geq 0$   
 $\sin(\alpha \pm \beta) = \sin\alpha \cos\beta \pm \cos\alpha \sin\beta$   
 $\sin^2\theta + \cos^2\theta = 1$   
 $2.303 \log_{10}x \approx \log_e x \quad (2.303 \lg x \approx \ln x)$   
 $y = \int f(x) dx$

図表などでの数値の説明の際に、例えば  $\log_{10}x$  や  $\sin\theta$  の頭字を大文字にして  $\text{Log}_{10}x$  や  $\text{Sin}\theta$  のように表記してはならない。定められた記号は  $\log$  であり、 $\sin$  であって、 $\text{Log}$  や  $\text{Sin}$  ではない。私見であるが、日本の研究者が書く英文には、大文字と括弧の無用な使用例が多いように見受けられる。

## 4 分率と無次元量

### 4・1 分率記号は単位記号ではなく数値

通常の定量分析では、試料中での目的成分の分率、つまり相対値の決定を行う。比較する量が物質のときはモル分率  $x$ 、質量のときは質量分率  $w$ 、体積のときは体積分率  $\phi$  を求める。これらの分率は無次元量（正確には「次元1の量」）で、単位と直接には関係しない。しかし、主成分から極超微量成分まで、実際の分率の数値範囲は広い。数値範囲に応じた分率記号が実用されているが、グリーンブック第3版には新たに単位記号に準じて使用される下記の分率記号が記載されている。

百分率 part per hundred	pph, %	$10^{-2}$
千分率 part per thousand, permille	ppt, ‰	$10^{-3}$
百万分率 part per million	ppm	$10^{-6}$
億分率 part per hundred million	pphm	$10^{-8}$
十億分率 part per billion	ppb	$10^{-9}$

兆分率 part per trillion	ppt	$10^{-12}$
千兆分率 part per quadrillion	ppq	$10^{-15}$

原著 3.10 Dimensionless Quantities の冒頭<sup>12)</sup>、「無次元量、正しくは次元1の量は、数学的厳密さで定義された特別の記号あるいは略号で表記されることが多い。％がその例である。」とした後に、あえて原文のまま引用するが、“These symbols are then treated as units, and are used as such in calculation.”とある。訳書では“then”に対応する訳語（「そこで」あるいは「それゆえ」）が欠落している。分率は決して単位ではない。それをわざわざ単位に準じて扱うとしたのは化学の分野、特に分析化学で実際に多用されているからであろう。

単位記号ではないとされていたときの表記は、例えば 75.3% のように、数値と記号との間に空白のない表記が多かった。単位記号に準じた場合の表記は、75.3 % のように、数値と記号との間に英数半角1字分の空白を入れる。

ところが、例えば 75.3 % の真値は 0.753 となる数値であるから、 $75.3 \% = 0.753$  であり、% 記号は  $10^{-2}$  と等価である。さらに例えば、収率  $\text{Yield} = 24.6 \% = 0.246$  のとき、対応する図表に記入される 24.6 の数値は、 $\text{Yield}/\%$  ( $= \text{Yield}/10^{-2}$ ) としてわざわざ分数形にするのではなく、 $10^2 \text{ Yield}$  とするのが簡潔な表記となる。グリーンブックでは、 $\text{Yield}/\%$  のような、分母に分率記号をおく表記は避けるべきだとしている。

また、単位記号への分量・倍量接頭語以外の文字・記号の添記を避けるのと同じように、単位記号に準じて使用される分率記号への他の文字・記号の添記も避けるべきだとされている。vol%, wt%, mol%, % (V/V), % (m/m) などが避けるべき表記の例である。これらはすべて、それぞれの物理量の分率として表記すべきだとされている。

### 4・2 無次元量の扱い

アボガドロ定数は物質 1 mol 中の要素粒子の個数であり、個数は無次元量（次元1）であるから、その SI 単位記号は  $1/\text{mol} = \text{mol}^{-1}$  となる。X 線強度を示すときなどに用いられる cps は単位時間中の個数であるから、SI 単位記号は  $1/\text{s} = \text{s}^{-1}$  となる。回転速度を示す rpm は 1 分間の回転数（無次元量）であるから、SI 単位記号は  $1/\text{min} = \text{min}^{-1}$  となる。

## 5 いくつかの実際問題

### 5・1 ギリシャ文字の字体

日本の出版・印刷業界には自社規格に強いこだわりがあるらしい。日本語ワープロソフトもその影響を受け、2 バイト文字のギリシャ文字は斜字体（イタリック）になっているように見える。 $10^{-6}$  を示す分量接頭記号  $\mu$  は、実社会に流通している印字のほとんどで  $\mu$  となっ

ている。円周率の  $\pi$  でも同じ現象が見られる。大学入試センター試験の試験問題でも、数年前まではマイクロリットルの単位記号を「 $\mu$  l」と表記していた科目があった。学界だけでなく、初等中等教育を含めた一般社会でも、自然科学における記号では、立字体と斜字体ではその文字が意味する内容が異なることの認識が必要であろう。

## 5・2 濃度とリットルの単位記号

SI の原則に従った物質 B の物質濃度は

記号  $c_B$ , [B] 定義  $[B] = n_B/V$  SI 単位  $\text{mol m}^{-3}$

と記載され、グリーンブックには「しばしば  $M = \text{mol L}^{-1}$  も用いられる」と注記がある。大文字  $M$  はかなり小さく印字されている。たしかにそのような用法もあるが、一般には本文と同ポイントの  $M$  が使われている。リットルの単位記号としては、小文字の  $l$  も公認されているが、そして単位記号には個人名に由来するもの以外は、大文字を用いない原則には反するが、1 との誤読の恐れのない  $L$  の使用が推奨されている。

なお、 $c$  の SI 単位  $\text{mol m}^{-3}$  は  $\text{mM}$  でもある。この濃度領域は、体積密度の SI 単位  $\text{kg m}^{-3} = 10^3 \text{ g (10}^2 \text{ cm)}^{-3} = 10^{-3} \text{ g cm}^{-3} = \text{mg cm}^{-3}$  と較べると実用性は高そうである。

記号 [B] は新たに定義された。濃度平衡定数などの説明では汎用されてきた記号であるが、錯イオン  $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$  の濃度のような例には不適である。

## 5・3 平衡定数と対数表記

熱力学的に定義される平衡定数  $K$  は無次元量であり、 $\text{p}K$  の表記も簡単である。

$$K = \exp(-\Delta G^\circ/RT) \quad \text{p}K = -\log_{10} K$$

しかし、溶液化学に登場する酸解離定数  $K_a$  のような濃度平衡定数  $K_c$  の扱いには注意が必要である。

$$K_c = \prod_B c_B^{\nu_B}$$

$$\text{SI 単位 } (\text{mol m}^{-3})^{\sum \nu_B} = \text{mol}^{\sum \nu_B} \text{m}^{-3 \sum \nu_B}$$

であるが、 $\text{p}K_c$  形式の表記では、対数の真数は無次元であるから

$$\text{p}K_c = -\log_{10} (K_c / \text{mol}^{\sum \nu_B} \text{m}^{-3 \sum \nu_B})$$

と表記しなければならない。しかし、実際に用いられる濃度単位は  $M$  であろうから、データ集や教科書に収載されているのは

$$\text{p}K_c = -\log_{10} (K_c / M^{\sum \nu_B})$$

の値である。

表記の類似例にモル吸光係数  $\epsilon$  の場合がある。 $\epsilon$  の SI

単位は、濃度を  $\text{mol m}^{-3}$ 、液層の厚さを  $m$  とするので  $\text{m}^2 \text{ mol}^{-1}$  であるが、常用されるモル吸光係数では、濃度は  $M = \text{mol dm}^{-3}$ 、液層の厚さは  $\text{cm}$  であり、組立単位記号  $M^{-1} \text{cm}^{-1}$  を用いるのが便利であろう。そうしたときのモル吸光係数の対数表記は  $\log (\epsilon / M^{-1} \text{cm}^{-1})$  となる。

なお、例えば紫外吸収帯について  $\epsilon / M^{-1} \text{cm}^{-1} = 32800$  のように 5 桁の数値を表記する例があるが、有効数字としては正しい表記とは言えない。 $\epsilon / M^{-1} \text{cm}^{-1} = 3.28 \times 10^4$  のような形式にすべきである。であれば、図表などで数値は  $\log (\epsilon / M^{-1} \text{cm}^{-1})$  とするのが便利であろう。

一般に紫外・可視吸収スペクトル図の横軸数値は波長  $/\text{nm}$  あるいは  $\lambda/\text{nm}$  である。縦軸目盛の数値を 1 桁としたとき、数値が対数表記の  $\log (\epsilon / M^{-1} \text{cm}^{-1})$  であれば問題はない。しかし、 $\epsilon / M^{-1} \text{cm}^{-1}$  であるときは、数値 50000 あるいは  $5.00 \times 10^4$  が目盛 5 に対応するので、目盛 5 =  $10^{-4} \times (5.00 \times 10^4)$  となり、縦軸目盛の説明は  $10^{-4} \epsilon / M^{-1} \text{cm}^{-1}$  あるいは  $\epsilon / 10^4 M^{-1} \text{cm}^{-1}$  となる。

無次元量である吸光度 Absorbance の場合は記号  $A$  だけを記載する。

## 5・4 化学シフトと波数

グリーンブック初版では、化学シフト chemical shift は

$$\delta = 10^6 (\nu - \nu_0) / \nu_0$$

と定義されていた。これが第 3 版では、

原子核 A の化学シフト chemical shift for the nucleus A

$$\delta_A = (\nu_A - \nu_{\text{ref}}) / \nu_{\text{ref}}$$

と変更されている。例えば、プロトンでの 3.69 ppm の化学シフトは、かつては  $\delta = 3.69$  であったが、第 3 版に従うと 3.69 ppm であり、測定データや図表などで 3.69 と表記した数値は  $10^6 \delta_H$  に相当する。しかし、化学シフトの数値が ppm であるとの認識は強固に定着しており、 $10^6 \delta_H$  の  $10^6$  を省略することに支障はないように考えられる。その辺は規則運用の柔軟性の範囲内と言えよう。

赤外・ラマン分光測定に登場する波数 Wavenumber の記号も柔軟性の例である。分光学専門分野からは、波数の記号は  $\tilde{\nu}$  であり (SI 単位記号は  $\text{m}^{-1}$ )、振動数の記号である  $\nu$  の使用は誤りだとされる。しかし、現実には  $\nu/\text{cm}^{-1}$  が定着している。

## 5・5 相対値と任意単位

通常の熱重量分析 (TGA) 曲線の縦軸は、質量減量の相対値 relative mass loss であると言える。縦軸目盛

数値の説明は、1から減少していく曲線であれば、例えば質量減量を $\Delta m$ と定義して、 $\Delta m/m$ であり、100から減少していく曲線であれば $10^2 \Delta m/m$ である。 $\Delta m$ を単に質量の変化であるとする、目盛数値に負符号をつけることになるので、注意を要する。また、weightは質量massに重力加速度を乗じたベクトル量の力であるから、質量と混用してはならない。

横軸を温度 $T$ とした通常の示差熱分析(DTA)曲線における縦軸の物理的意味は温度差 $\Delta T$ であるが、実測されているのは電位差 $\Delta E$ である。市販測定装置の出力図には、DTA/ $\mu V$ とか、熱量換算値としてのheat flow/ $\mu V$ などと印刷されるものがある。これらはいずれもSIの観点からは誤りであり、 $\Delta E/\mu V$ と表記されるべきである。ただし、説明すべき値が $\Delta T$ ならば $\Delta T/K$ 、heat fluxならば $P/W$ とすべきである。しかし、それぞれの単位に対応する厳密な数値の出力図への記録は通常の市販装置での日常的測定では極めて困難であるから、 $\Delta T/a.u.$ 、 $P/a.u.$ と表記しておくのが無難である。a.u.は任意単位arbitrary unitの略号で、例えば粉末X線回折線強度のような量の表記にも使用できる。

#### 5.6 「度」の記号

分子構造や結晶構造での結合角や軸角での角度単位記号としては $^\circ$ が多用されている。しかし、角度(時刻)の単位記号はまさに記号であって、他のSI単位記号はすべて文字である。角度変化の微細な議論では、60進法での $'$ 、 $''$ を用いるのではなく、10進法での数値の扱いが適切であることがある。となると、例えば $10^{-3^\circ}$ (= $m^\circ$ ?)のような単位での表記が必要となる。第3版ではdegreeの単位記号として新たにdegが定義され、それに従えば $10^{-3^\circ} = mdeg$ となる。

セルシウス温度について、 $^\circ$ をさらに上付きにした $24.8^\circ C$ や、小文字oを上付きにした $24.8^\circ C$ のような表記は避けるべきである。

#### 5.7 物理量の自己定義

グリーンブックで定義されていない物理量、あるいは定義されている物理量を修飾して用いるときは、SI単位による自己の定義を提示する必要がある。専門分野で慣用され、常識化している用例であっても、定義が公認されていないときには、一般読者の理解を得るためにも定義の提示が必要である。

一般的物理量であっても、ある特定の系だけを対象とするときには、その系に限定した物理量を別に定義すると表記が容易になることがある。例えば、ある反応系で物質Aの濃度の時間変化率 $r_A$ が共存物質Bに含まれる金属D(D: Pd, Pt)の質量に依存するとしよう。このとき、 $r_A$ の組立単位を例えば $M s^{-1} g_{Pd}^{-1}$ 、 $M s^{-1} g_{Pt}^{-1}$ のように書き分けてはならない。単位記号に他の文字を

添記してしまうからである。この場合、Dに依存するAの濃度の時間変化率を例えば $r_{A/D}$ のように独自に定義し、 $r_{A/Pd}$ 、 $r_{A/Pt}$ それぞれを組立単位 $M s^{-1} g^{-1}$ で表記するのが適切であろう。

## 6 これからの課題

### 6.1 日本語文での数値・単位記号表記

新聞雑誌・人文社会系教科書などの一般日本語文では、数値と単位記号との間に空白を入れない表記が広く採用されている。しかし、例えば経済産業省関係の文書では、273.15 Kのような、SIの原則に合致する表記の歓迎すべき採用例がある。

文部科学省関係では、中等教育でSIの表記を導入することが望まれる。例えば、平成28年度大学入試センター試験の物理の問題に「速さ2 m/sで $x$ の正方向へ進む正弦波の $x=0$ での変位 $y$  [m]と時刻 $t$  [s]との関係を示すグラフ」があり、その縦軸は「変位 $y$  [m]」、横軸は「時刻 $t$  [s]」と説明されている。速さはSIに従って表記されているのに、物理量である変位と時刻の記号の後の括弧内に単位記号が示されている。これは全く必要のない表記で、グラフの軸の説明を $y/m$ 、 $t/s$ とするだけで良いのである。

大学入試センター試験の理科諸科目の問題の印刷形式が、数式の表記などで部分的にはSIの原則に合致していることは歓迎すべきであるが、例えばSI原則に従えば $Q/J$ とすべき物理量の数値を $Q$  [J]と表記する、いわば陋習<sup>ろしゅう</sup>が残されたままになっている。教科書の表記に従っているからであろうが、教科書からまず改善すべきであろう。

驚くべきことには、平成28年度の物理の問題中に「電気容量がそれぞれ $4 \mu F$ 、 $3 \mu F$ 、 $1 \mu F$ 」なる表記例があった。中等教育にとどまらず、高等教育においても陋習を払拭し得ないとしたら、その影響は高等教育も含めた学校教員や研究者に及び、さらに次代にも及ぶことになる。

初中等教育の教科書における表記での抜本的な改革が望まれるが、日常的に多忙で研修時間に不足している現職教員からは、「理屈ではそうかもしれないが、子供たちには理解困難である」との反論が少なくない。これは研修を怠る「逃げ」に近く、教員には十分な研修時間が与えられるべきである。

### 6.2 分析・測定機器業界への提言

測定・解析結果の図および表での出力表示はもちろんのこと、取扱説明書や機器・計器の諸表示についても、SI原則に従ったグリーンブックでの定義<sup>のつと</sup>に従って表記することに尽力して頂きたい。原稿作成全般に言えることではあるが、電子投稿論文の作成においては、図表等に関しては機器からの出力の電子コピーを添付すること

がデータの精確さの保証になるのであるから、著者が余計な改訂作業をせずに済むことが望まれる。

例えば、紫外・可視吸収スペクトルの横軸（波長）の説明を Wavelength [nm] や  $\lambda$  [nm] のままにするのは論外である。正しくは Wavelength/nm あるいは  $\lambda/\text{nm}$  であって、「/」の前後には空白を入れない。機器からの出力では無用の空白を入れた表記が多く、ワープロソフトにも自動的に空白を入れるモードを既定値に設定しているものがあるので注意を要する。

イタリックにすべき文字はイタリックとする。字体・書式は可能な限り SI 原則に従い、理由もなくサンセリフ体やボールド体を使うことは避けるべきである。

「数値＝物理量/単位」の右辺の分母は単位記号とするのが原則である。例えば、赤外・ラマン分光計では Wavenumber/cm<sup>-1</sup> とする。分母を単位名称とすると、Wavenumber/reciprocal centimeter としなければならなくなる。

また、計算機プログラム言語記法からの影響と考えられる負符号<sup>-13)</sup>の - (ハイフン)、乗算記号<sup>14)</sup>の x あるいは X (エックス) での代用は避ける。本文中で角度の単位記号に ° を用いているのであれば、対応する粉末 X 線回折図の横軸は 2 $\theta$ /° とするのが 2 $\theta$ /deg に優先する。出力の既定値としては 2 $\theta$ /° とするのが妥当ではないだろうか。

## 7 終わりに

5・5 で熱分析装置の出力表示に触れたが、熱測定化学を先導された故関 集三 大阪大学名誉教授は国内での国際単位系表記に関する啓蒙的普及にも積極的に尽力された。筆者が浅学を顧みず本稿を草したのは、微力ながらも関集三教授への学恩に謝したい志からであった。

### 文 献

- 1) E. R. Cohen, T. Cvitaš, J. G. Frey, B. Holmström, K. Kuchitsu, R. Marquardt, I. Mills, F. Pavese, M. Quack, J. Stohner, H. L. Strauss, M. Takami, A. J. Thor: “*Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry, Third Edition*”, (2008), (IUPAC & RSC Publishing, Cambridge).

- 2) N. G. Connelly, T. Damhus, R. M. Hartshorn, A. T. Hutton: “*Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 2005*”, (2005), (IUPAC & RSC Publishing, Cambridge); {日本化学会化合物命名法委員会訳著 “無機化学命名法—IUPAC 2005 年勧告—”, (2019), (東京化学同人)}.
- 3) A. Favre, W. H. Powell: “*Nomenclature of Organic Chemistry—IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013*”, (2013), (IUPAC & RSC Publishing, Cambridge). (日本化学会命名法専門委員会訳著 “有機化学命名法—IUPAC2013 勧告および優先 IUPAC 名”, (2017), (東京化学同人)}.
- 4) J. Inczedy: “*Compendium of Analytical Nomenclature: Definitive Rules 1997, Third Edition*”, (1998), (IUPAC & Blackwell Science).
- 5) 日本化学会命名法専門委員会編: “化合物命名法 (第 2 版)—IUPAC 勧告に準拠—” (2016), (東京化学同人).
- 6) 朽津耕三訳: “物理化学で用いられる量・単位・記号” (1991), (講談社); {I. Mills, T. Cvitaš, K. Homann, N. Kallay, K. Kuchitsu: “*Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry*”, (1988), (IUPAC & Blackwell Science)}.
- 7) 日本化学会・監修 (独)産業技術総合研究所計量標準総合センター・訳: “物理化学で用いられる量・単位・記号 第 3 版” (2009), (講談社).
- 8) 産業技術総合研究所計量標準総合センター, <https://www.nmij.jp/public/report/translation/IUPAC/>
- 9) Unicode 名: Degree Sign; 文字コード: 00B0.
- 10) M. I. Aroyo, ed.: “*International Tables for Crystallography, Vol. A*”, (2016), (IUCr & Wiley).
- 11) Unicode 名: Latin Capital Letter A with Ring Above; 文字コード: 00C5.
- 12) 文献 1), p. 97; 文献 7), p. 118.
- 13) Unicode 名: Minus Sign; 文字コード: 2212.
- 14) Unicode 名: Multiplication Sign; 文字コード: 00D7.



岩本振武 (Toschitake IWAMOTO)

東京大学名誉教授。東京大学大学院化学系研究科化学専門課程博士課程修了。理学博士。《現在の研究テーマ》無機化学命名法に基づく無機化学種名の適切な表記と国際単位系の原則に従った物理量等の適切な表記の実践。《趣味》日本国内のありふれた景観の鑑賞。

E-mail: toscht1@yahoo.co.jp