

平成 31 年度

高レベル放射性廃棄物等の
地層処分に関する技術開発事業

TRU 廃棄物処理・処分に関する
技術開発

Appendix

令和 2 年 3 月

公益財団法人原子力環境整備促進・資金管理センター
国立研究開発法人日本原子力研究開発機構

平成 31 年度
高レベル放射性廃棄物等の地層処分に係る技術開発事業
TRU廃棄物処理・処分に係る技術開発 Appendix

目 次

Appendix I 廃棄体パッケージ閉じ込め性能に係る試験と評価に係る補足資料

1. はじめに	I-1
2. 廃棄体パッケージの製作技術の整備	I-1
2.1 廃棄体パッケージ容器の製作手法の検討	I-1
2.1.1 はじめに	I-1
2.1.2 遠隔製作性の検討（2重蓋構造）	I-2
2.1.3 溶接条件の検証詳細	I-57
2.1.4 解析に用いた物性値	I-80
2.2 廃棄体パッケージ内充填材の仕様の検討	I-85
2.2.1 はじめに	I-85
2.2.2 廃棄体パッケージ内充填材のセメント系材料からの水素ガス発生 の抑制に関する検討	I-85
2.2.3 廃棄体パッケージ内充填材の仕様の具体化のための検討	I-122
2.2.4 セメント系材料の熱変質による物性値への影響確認試験	I-206

Appendix II 陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発に係る補足資料

1. はじめに	II-1
2. これまでの成果の概要	II-1
2.1 アルミナ HIP 固化体のこれまでの技術開発の成果	II-1
2.1.1 ヨウ素放出抑制のために低空隙率化したアルミナ HIP 固化体の製造	II-1
2.1.2 pH 及び HS ⁻ を指標とした浸漬試験データの蓄積	II-3
2.1.3 ヨウ素放出モデルの検討	II-3
2.2 BPI ガラス固化体のこれまでの技術開発の成果	II-5
2.2.1 BPI ガラス固化体の化学構造の詳細検討	II-5
2.2.2 BPI ガラス固化体のヨウ素放出特性	II-6
3. 平成 31 年度の実施内容の詳細	II-9
3.1 アルミナ HIP 固化体の固相分析に於ける濃度プロファイルの抽出方法	II-9
3.2 BPI ガラス固化体の炭酸塩影響試験の詳細	II-16
3.3 BPI ガラス固化体の浸漬試験の条件	II-18

Appendix III 地球化学モデリングのための熱力学データベース開発

1. 熱力学データベースの更新	III-1
-----------------------	-------

Appendix IV 化学反応－物質輸送解析に用いたパラメータ

1. 鉱物設定	IV-1
1.1 緩衝材	IV-1
1.2 セメント	IV-2

1.3 二次鉱物の設定.....	IV-4
2. 初期間隙水設定	IV-4
3. その他の設定.....	IV-5
3.1 物質輸送特性	IV-5
3.2 鉱物の溶解速度式.....	IV-5
3.2.1 一般鉱物の溶解速度式.....	IV-5
3.2.2 モンモリロナイトの溶解速度式	IV-6
3.2.3 炭酸を含む鉱物の溶解速度式.....	IV-6
3.2.4 石英の溶解速度式	IV-7
3.2.5 反応速度が温度, pH に依存しないものと仮定した鉱物の溶解速度式	IV-7
3.3 鉱物の比表面積.....	IV-8

Appendix V 化学反応—物質輸送解析の計算結果

1. 解析結果	V-1
1.1 Case1 (蒸留水, HFSC, 1cm, 80°C, 安定・準安定ゼオライト考慮)	V-2
1.2 Case2 (蒸留水, HFSC, 1cm, 80°C, 準安定ゼオライトのみ考慮)	V-4
1.3 Case3 (蒸留水, HFSC, 1cm, 80°C, 安定ゼオライトのみ考慮)	V-6
1.4 Case4 (蒸留水, OPC, 1cm, 80°C, 安定・準安定ゼオライト考慮)	V-8
1.5 Case5 (蒸留水, OPC, 1cm, 80°C, 準安定ゼオライト考慮)	V-10
1.6 Case6 (蒸留水, OPC, 1cm, 80°C, 安定ゼオライト考慮)	V-12
1.7 計算結果のまとめ	V-14

Appendix VI 微小部蛍光 X 線及び透過 X 線分析結果

1. XGT-9000 による分析結果	VI-1
1.1 分析方法及び条件	VI-1
1.2 分析結果.....	VI-1
2. XGT-5200S による分析結果.....	VI-6
2.1 分析方法及び条件	VI-6
2.2 分析結果.....	VI-6

Appendix VII 廃棄体由来の発生ガスに関する現象解析モデルの妥当性検討に係る補足資料

1. 処分坑道の力学連成ガス移行評価モデルの高度化に係る補足資料.....	VII-1
1.1 本検討の全体計画	VII-1
1.2 小規模モックアップによる再冠水試験等の実施	VII-2
1.2.1 モックアップ供試体の成型.....	VII-2
1.2.2 パイロット供試体の成型	VII-5
2. 長期変遷を考慮したガス移行場の状態設定評価	VII-7
2.1 状態設定に係る緩衝材の化学変質試験	VII-7
2.1.1 はじめに	VII-7
2.1.2 既往の検討概要	VII-7
2.1.3 検討の手法	VII-9
2.1.4 円板—球混合系における空隙構造解析	VII-11
2.1.5 球—円板混合系における透水試験.....	VII-32

2.2 状態設定に係る緩衝材の力学挙動試験	VII-35
2.2.1 はじめに	VII-35
2.2.2 供試体諸元	VII-35
2.2.3 モンモロナイト含有率をパラメータとした三軸CU 試験	VII-37
2.2.4 ベントナイトのせん断挙動のモデル化	VII-50
2.3 HMC 連成解析によるガス移行場の状態設定の検討	VII-57
2.3.1 はじめに	VII-57
2.3.2 HMC 連成解析の高度化の検討	VII-57
2.3.3 化学解析手法の検討	VII-70
2.3.4 力学解析手法の検討	VII-91
3. 核種移行を考慮したガス移行影響評価モデルの構築のための検討	VII-97
3.1 ガス発生挙動の定量評価	VII-97

目 次

【Appendix I】

図 2.1-1	全体製作手順概略	I-2
図 2.1-2	TRU等廃棄物の受入・検査・封入施設の模式図	I-2
図 2.1-3	溶接厚さ再設定容器の概略構造（2重蓋構造）	I-3
図 2.1-4	遠隔ボルト締結方法	I-9
図 2.1-5	廃棄体パッケージB容器 位置決めガイド構造例	I-13
図 2.1-6	容器内部ガイドにて位置決め	I-15
図 2.1-7	容器外面ガイドにて位置決め	I-16
図 2.1-8	外部装置にて位置決め	I-17
図 2.1-9	容器内部にガイドを設置	I-19
図 2.1-10	容器外部にガイドを設置	I-20
図 2.1-11	外部装置にて位置決め	I-21
図 2.1-12	PCa 挿入構造検討（容器側面にラフガイド設置）	I-24
図 2.1-13	PCa 挿入構造検討（容器内部にラフガイド設置）	I-24
図 2.1-14	PCa 挿入構造検討（容器内部にガイドピン設置）	I-25
図 2.1-15	PCa 挿入構造検討（外部装置の設置）	I-25
図 2.1-16	容器内部構造の概略（容器内部にラフガイド設置）	I-26
図 2.1-17	遠隔製作性を考慮した廃棄体パッケージB（ドラム缶用）の容器構造	I-28
図 2.1-18	廃棄体パッケージB容器処分場地上施設における製作手順（概要）	I-29
図 2.1-19	天井クレーンの概念図	I-32
図 2.1-20	天井クレーンによるドラム缶の搬送イメージ	I-32
図 2.1-21	天井クレーンによる容器蓋の搬送イメージ	I-33
図 2.1-22	天井クレーンによる容器本体の搬送イメージ	I-33
図 2.1-23	容器本体の落下時の衝撃吸収治具	I-33
図 2.1-24	溶接装置の概念図	I-34
図 2.1-25	溶接装置の溶接可能範囲（清掃装置は省略）	I-34
図 2.1-26	溶接部清掃装置の概念図	I-35
図 2.1-27	蓋溶接設備における溶接装置と清掃装置の配置	I-35
図 2.1-28	遠隔ボルト締結装置概念図	I-36
図 2.1-29	ボルト締結装置によるボルト締結イメージ	I-36
図 2.1-30	溶接部検査装置の概念図	I-37
図 2.1-31	溶接部解体装置の概念図	I-37
図 2.1-32	廃棄体パッケージ輸送車両の概念図	I-38
図 2.1-33	TRU等廃棄物（廃棄体パッケージB容器） 地上施設内装置配置概略	I-38

図 2.1-34	T R U等廃棄物（廃棄体パッケージB 容器） 地上施設内装置配置概略(3D)	I-39
図 2.1-35	廃棄体パッケージB 製作手順図（2D）	I-40
図 2.1-36	廃棄体パッケージB 製作手順図（3D）	I-48
図 2.1-37	溶接条件検証の試験フロー図.....	I-57
図 2.1-38	条件選定用試験体形状（平蓋構造）	I-58
図 2.1-39	条件選定用試験体のビード外観（平蓋構造）	I-59
図 2.1-40	条件選定要試験体 RT フィルム（平蓋構造）	I-59
図 2.1-41	条件選定用試験体断面マクロ（平蓋構造）	I-59
図 2.1-42	伝熱試験体形状及び熱電対貼付位置（平蓋構造）	I-60
図 2.1-43	伝熱試験体熱電対貼付状況(TM-3）（平蓋構造）	I-61
図 2.1-44	伝熱試験体外観(TM-1）（平蓋構造）	I-61
図 2.1-45	初層溶接時温度履歴(TM-1）（平蓋構造）	I-61
図 2.1-46	初層溶接時温度履歴(TM-3）（平蓋構造）	I-62
図 2.1-47	機械試験用試験体形状（平蓋構造）	I-62
図 2.1-48	継手性能試験体の製作状況（平蓋構造）	I-64
図 2.1-49	継手性能試験体のビード外観（平蓋構造）	I-64
図 2.1-50	継手性能試験体 RT フィルム（平蓋構造）	I-64
図 2.1-51	断面マクロ写真（MT-4）（平蓋構造）	I-65
図 2.1-52	断面マクロ写真（平蓋構造）	I-65
図 2.1-53	曲げ試験後試験片（平蓋構造）	I-65
図 2.1-54	溶接条件確認用試験体（2重蓋構造）	I-67
図 2.1-55	試験体溶接状況（2重蓋構造）	I-68
図 2.1-56	ビード外観及び断面マクロ（低入熱条件）（2重蓋構造）	I-68
図 2.1-57	ビード外観及び断面マクロ（施工性優先条件）（2重蓋構造）	I-69
図 2.1-58	伝熱計測用試験体（2重蓋構造）	I-70
図 2.1-59	熱電対貼付位置（低入熱条件）（2重蓋構造）	I-70
図 2.1-60	熱電対貼付状況（低入熱条件）（2重蓋構造）	I-71
図 2.1-61	熱電対貼付位置（施工性優先条件）（2重蓋構造）	I-71
図 2.1-62	熱電対貼付状況（施工性優先条件）（2重蓋構造）	I-72
図 2.1-63	伝熱計測試験体のビード外観（低入熱条件）（2重蓋構造）	I-72
図 2.1-64	伝熱計測試験体の断面マクロ（低入熱条件）（2重蓋構造）	I-73
図 2.1-65	伝熱計測試験体のビード外観（施工性優先条件）（2重蓋構造）	I-73
図 2.1-66	伝熱計測試験体の断面マクロ（施工性優先条件）（2重蓋構造）	I-74
図 2.1-67	継手性能確認用試験体（2重蓋構造）	I-75
図 2.1-68	継手性能試験体の溶接状況（2重蓋構造）	I-76
図 2.1-69	継手性能試験体のビード外観（2重蓋構造）	I-76

図 2.1-70	放射線透過試験 (RT) の結果 (2重蓋構造)	I-77
図 2.1-71	断面マクロ観察結果 (2重蓋構造)	I-78
図 2.1-72	側曲げ試験片の試験後外観 (SR なし) (2重蓋構造)	I-78
図 2.1-73	SM400 の熱物性値	I-80
図 2.1-74	SR 温度保持終了時の温度分布の比較 (モデル全体)	I-83
図 2.1-75	SR 温度保持終了時の温度分布の比較 (アスファルト)	I-83
図 2.2-1	OPC 試料の XRD 測定結果	I-90
図 2.2-2	FAC30 試料の XRD 測定結果	I-91
図 2.2-3	BFSC30 試料の XRD 測定結果	I-91
図 2.2-4	BFSC60 試料の XRD 測定結果	I-92
図 2.2-5	BFSC90 試料の XRD 測定結果	I-92
図 2.2-6	モルタル試料の XRD 測定結果	I-92
図 2.2-7	Ca(OH) ₂ 含有量	I-93
図 2.2-8	OPC 試料の TG-DTA 曲線	I-94
図 2.2-9	FAC30 試料の TG-DTA 曲線	I-95
図 2.2-10	BFSC30 試料の TG-DTA 曲線	I-96
図 2.2-11	BFSC60 試料の TG-DTA 曲線	I-96
図 2.2-12	BFSC90 試料の TG-DTA 曲線	I-97
図 2.2-13	モルタル試料の TG-DTA 曲線	I-97
図 2.2-14	溶封システムの系統図	I-98
図 2.2-15	試料を溶封システムに設置した状況写真	I-99
図 2.2-16	照射試験の状況	I-100
図 2.2-17	線量計 (アミノグレイ) 外観および線量計設置状況	I-101
図 2.2-18	真空システム系統図	I-101
図 2.2-19	真空システム外観写真	I-102
図 2.2-20	OPC、FAC30 の自由水量及び結合水量	I-104
図 2.2-21	BFSC、OPC モルタルの自由水量及び結合水量	I-104
図 2.2-22	OPC、モルタル及び FAC30 の自由水量と G _{H2} (W) の関係	I-108
図 2.2-23	BFSC の自由水量と G _{H2} (W) の関係	I-109
図 2.2-24	全水分量と G _{H2} (All) の関係	I-109
図 2.2-25	ハンドリングシステム・VisualConc 概要図	I-112
図 2.2-26	圧力容器の概要図	I-113
図 2.2-27	圧力測定試験に用いた装置の概要図	I-114
図 2.2-28	内圧測定試験状況 (測定開始前)	I-114
図 2.2-29	VisualConc における定量法による発生ガス量の測定方法の手順	I-115
図 2.2-30	1 回目照射試験の結果	I-117

図 2.2-31	2 回目照射試験の結果.....	I-117
図 2.2-32	廃棄体パッケージの組立手順の比較.....	I-122
図 2.2-33	熱伝導率試験体の型枠及び打設状況.....	I-134
図 2.2-34	熱伝導率の測定状況.....	I-135
図 2.2-35	熱拡散率試験体の型枠と打設状況.....	I-135
図 2.2-36	熱拡散率の測定状況.....	I-136
図 2.2-37	熱伝導率試験の測定結果.....	I-138
図 2.2-38	熱拡散率試験の測定結果.....	I-138
図 2.2-39	乾燥工程における含水率の経時変化.....	I-140
図 2.2-40	乾燥工程における空隙率の経時変化.....	I-140
図 2.2-41	乾燥工程における単位水量に対する逸散水の割合.....	I-141
図 2.2-42	乾燥工程における自由水に対する逸散水の割合.....	I-141
図 2.2-43	100×100×400mm 角柱の乾燥工程における実ひずみ.....	I-142
図 2.2-44	100×100×400mm 角柱の乾燥工程における乾燥収縮ひずみ.....	I-142
図 2.2-45	60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体概要図（左：配筋無し、右：配筋有り）	I-144
図 2.2-46	60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の寸法図（図中の単位は mm）.....	I-144
図 2.2-47	ゲージプラグ設置位置（図中の単位は mm）.....	I-145
図 2.2-48	型枠内部状況.....	I-146
図 2.2-49	60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の外観（No.1：無筋）.....	I-147
図 2.2-50	60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の外観（No.2：有筋）.....	I-148
図 2.2-51	60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の外観（No.3：繊維）.....	I-148
図 2.2-52	60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の寸法（No.1：無筋）.....	I-149
図 2.2-53	60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の寸法（No.2：有筋）.....	I-150
図 2.2-54	60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の寸法（No.3：繊維）.....	I-151
図 2.2-55	乾燥工程中の 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の温度.....	I-153
図 2.2-56	60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の質量の経時変化.....	I-153
図 2.2-57	60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の質量変化割合の経時変化.....	I-153
図 2.2-58	60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体側面壁のひずみの経時変化.....	I-157
図 2.2-59	解析モデル.....	I-158
図 2.2-60	60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体内の温度分布.....	I-158
図 2.2-61	高温乾燥時の温度膨張.....	I-159
図 2.2-62	60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体側面壁のひずみの経時変化.....	I-160
図 2.2-63	60cm 角廃棄体パッケージ内充填材乾燥試験体側面壁のひずみの経時変化.....	I-161
図 2.2-64	収縮ひずみ 60×10^{-6} を与えた場合の変形.....	I-162
図 2.2-65	乾燥後の 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体側面壁のひずみ分布.....	I-162

図 2.2-66	鉄筋要素のモデル	I-163
図 2.2-67	シールによるランダムパターンの作成及び二値化処理.....	I-164
図 2.2-68	シールによるランダムパターンに基づく解析結果.....	I-164
図 2.2-69	乾燥前後の画像の比較.....	I-165
図 2.2-70	実画像に基づく解析結果.....	I-165
図 2.2-71	60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体のひび割れ図	I-166
図 2.2-72	想定されるすき間充填材の施工方法.....	I-169
図 2.2-73	すき間充填材の練混ぜ.....	I-173
図 2.2-74	フレッシュ性状の測定状況.....	I-175
図 2.2-75	フレッシュ性状の経時変化の確認に使用したプロペラ式攪拌機.....	I-175
図 2.2-76	単位容積質量(生比重)測定.....	I-176
図 2.2-77	圧縮強度用試験体の養生状況.....	I-176
図 2.2-78	圧縮強度用試験体の状況（脱型後）	I-177
図 2.2-79	圧縮強度用試験体の状況（上端面の研磨処理後）	I-177
図 2.2-80	圧縮強度試験の状況	I-177
図 2.2-81	鉛直管試験の概要図	I-178
図 2.2-82	流し込み充填作業(5cmφ×89cmH)の状況	I-178
図 2.2-83	流し込み充填終了直後の状況.....	I-179
図 2.2-84	鉛直管試験装置（すき間充填材の充填直後）	I-179
図 2.2-85	試験体の切り出し状況(鉛直管試験).....	I-180
図 2.2-86	充填状況の確認試験装置の概要図.....	I-180
図 2.2-87	充填状況の確認試験装置の写真.....	I-181
図 2.2-88	JP ロート及び P ロート流下時間の経時変化の比較（左図：JP ロート、右図：P ロート）	I-185
図 2.2-89	SL フローの経時変化の比較.....	I-185
図 2.2-90	圧縮強度－材料水比及び試験体の見掛け密度の関係	I-187
図 2.2-91	沈下の状況（超低粘性型）	I-187
図 2.2-92	沈下の状況（低粘性型）	I-188
図 2.2-93	沈下の状況（高粘性型）	I-188
図 2.2-94	採取箇所的位置（概略図）	I-189
図 2.2-95	充填高さ到達時間の関係.....	I-192
図 2.2-96	すき間充填材の充填時の経過時間と圧力値の関係（超低粘性型）	I-193
図 2.2-97	すき間充填材の充填時の経過時間と圧力値の関係（低粘性型）	I-194
図 2.2-98	すき間充填材の充填時の経過時間と圧力値の関係（高粘性型）	I-194
図 2.2-99	すき間充填材の充填時の経過時間と圧力値の関係（型枠のすき間幅 10mm）	I-195
図 2.2-100	すき間充填材の充填時の経過時間と圧力値の関係（流量 1.4L/min）	I-195

図 2.2-101	P ロート流下時間と JP ロート流下時間の関係 (左図: 練り上がり直後のデータ、右図: 経時変化確認時のデータ)	I-197
図 2.2-102	P ロート流下時間と SL フローの関係 (左図: 練り上がり直後のデータ、右図: 経時変化確認時のデータ)	I-197
図 2.2-103	廃棄体パッケージ内の水分量の概算において仮定した廃棄体パッケージ.....	I-200
図 2.2-104	長さ変化の測定方向	I-208
図 2.2-105	OPC モルタル硬化体の質量変化、長さ変化率.....	I-209
図 2.2-106	FAC15 モルタル硬化体の質量変化、長さ変化率	I-210
図 2.2-107	FAC30 モルタル硬化体の質量変化、長さ変化率	I-210
図 2.2-108	SC10 モルタル硬化体の質量変化、長さ変化率.....	I-211
図 2.2-109	OPC-SiO ₂ ペースト硬化体試料の XRD	I-213
図 2.2-110	OPC-SiO ₂ ペースト硬化体試料 (3 年) の反射電子像	I-214
図 2.2-111	OPC-SiO ₂ ペースト硬化体試料 (3 年) の C/S 比分布	I-214
図 2.2-112	OPC-SiO ₂ ペースト硬化体試料 (3 年) の SEM 像.....	I-214
図 2.2-113	微粉 OPC ペースト-シリカ微粉末の XRD.....	I-216
図 2.2-114	シリカ微粉末を混合した OPC 硬化体試料	I-218
図 2.2-115	微粉碎した砂を混合した OPC 硬化体試料	I-218

【Appendix II】

図 2.1-1	アルミナ HIP 固化体の製造フロー	II-2
図 2.1-2	アルミナ HIP 固化体の低空隙率化の経緯	II-2
図 2.2-1	BPI ガラスの実測値及び RMC 計算による構造因子の比較.....	II-6
図 2.2-2	RMC 計算により得られた BPI ガラス固化体の構造モデル.....	II-6
図 2.2-3	ホウ素とヨウ素の規格化浸出量の比較	II-8
図 2.2-4	BPI ガラスの寿命評価.....	II-9
図 3.1-1	浸漬後の固化体断面の EPMA 分析結果 (固化体 10-1)	II-10
図 3.1-2	浸漬後の固化体断面の SEM-EDX 分析結果 (固化体 10-1)	II-11
図 3.1-3	深さ方向の元素濃度プロファイル (固化体 10-1)	II-12
図 3.1-4	浸漬後の固化体断面の EPMA 分析結果 (固化体 11-1)	II-13
図 3.1-5	浸漬後の固化体断面の SEM-EDX 分析結果 (固化体 11-1)	II-14
図 3.1-6	深さ方向の元素濃度プロファイル (固化体 11-1)	II-15
図 3.2-1	ホウ素の規格化浸出量の経時変化 (炭酸塩影響)	II-17
図 3.2-2	ヨウ素の規格化浸出量の経時変化 (炭酸塩影響)	II-17
図 3.2-3	ホウ素とヨウ素の規格化浸出量の比較	II-18
図 3.2-4	pH の経時変化 (炭酸塩影響)	II-18
図 3.3-1	NaCl 系での浸出試験結果 (ホウ素)	II-19

図 3.3-2	NaCl 系での浸出試験結果 (ヨウ素)	II-20
図 3.3-3	NaCl 系でのホウ素とヨウ素の規格化浸出量の比較.....	II-20
図 3.3-4	ホウ素とヨウ素の規格化浸出量の比較	II-21
図 3.3-5	Na ₂ SO ₄ 系の浸出試験結果 (ホウ素) (平成 20 年報告書再掲)	II-21
図 3.3-6	Na ₂ SO ₄ 系の浸出試験結果 (ヨウ素) (平成 20 年報告書再掲)	II-22
図 3.3-7	浸漬終了後の試料の外観	II-23
図 3.3-8	リン酸 1mM を添加したベントナイト平衡水中のホウ素の規格化浸出量の経時変化	II-23
図 3.3-9	リン酸 1mM を添加したベントナイト平衡水中のヨウ素の規格化浸出量の経時変化	II-24
図 3.3-10	リン酸 1mM を添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の XRD.....	II-24
図 3.3-11	リン酸 1mM を添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の SEM 像.....	II-25
図 3.3-12	リン酸 1mM を添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の SEM-EDS	II-25
図 3.3-13	リン酸 1mM を添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の EDS.....	II-26
図 3.3-14	Na ₂ S を 1mM 添加したベントナイト平衡水中のホウ素の規格化浸出量の経時変化	II-26
図 3.3-15	Na ₂ S を 1mM 添加したベントナイト平衡水中のヨウ素の規格化浸出量の経時変化	II-27
図 3.3-16	Na ₂ S を 30mM 添加した模擬海水中のホウ素の規格化浸出量の経時変化	II-27
図 3.3-17	Na ₂ S を 30mM 添加した模擬海水中のヨウ素の規格化浸出量の経時変化	II-28
図 3.3-18	Na ₂ S を 1mM 添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の XRD.....	II-28
図 3.3-19	Na ₂ S を 30mM 添加した模擬海水に浸漬した試料の XRD	II-29
図 3.3-20	Na ₂ S を 1mM 添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の SEM 画像	II-29
図 3.3-21	Na ₂ S を 1mM 添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の EDS	II-30
図 3.3-22	Na ₂ S を 30mM 添加した模擬海水に浸漬した試料の SEM 画像.....	II-30
図 3.3-23	Na ₂ S を 30mM 添加した模擬海水に浸漬した試料の EDS	II-31

【Appendix V】

付録図 1.1-1	鉱物組成図における凡例.....	V-1
付録図 1.1-2	Case1 における鉱物組成と固相元素濃度の時間変遷.....	V-2
付録図 1.1-3	Case1 における間隙水 pH と間隙水液相組成の時間変遷	V-3
付録図 1.1-4	Case2 における鉱物組成と固相元素濃度の時間変遷.....	V-4
付録図 1.1-5	Case2 における間隙水 pH と間隙水液相組成の時間変遷	V-5
付録図 1.1-6	Case3 における鉱物組成と固相元素濃度の時間変遷.....	V-6
付録図 1.1-7	Case3 における間隙水 pH と間隙水液相組成の時間変遷	V-7
付録図 1.1-8	Case4 における鉱物組成と固相元素濃度の時間変遷.....	V-8

付録図 1.1-9	Case4 における間隙水 pH と間隙水液相組成の時間変遷	V-9
付録図 1.1-10	Case5 における鉍物組成と固相元素濃度の時間変遷	V-10
付録図 1.1-11	Case5 における間隙水 pH と間隙水液相組成の時間変遷	V-11
付録図 1.1-12	Case6 における鉍物組成と固相元素濃度の時間変遷	V-12
付録図 1.1-13	Case6 における間隙水 pH と間隙水液相組成の時間変遷	V-13

【Appendix VI】

図 1-1	セメント-ベントナイト接触試験体の断面試料写真	VI-1
図 1-2	HFSC-ベントナイト接触試験体の分析結果 (XGT-9000) : 試料厚さによる比較	VI-2
図 1-3	OPC-ベントナイト接触試験体の分析結果 (XGT-9000) : 試料厚さによる比較	VI-3
図 1-4	HFSC-ベントナイト接触試験体の強度プロファイル(XGT-9000)	VI-4
図 1-5	OPC-ベントナイト接触試験体の強度プロファイル(XGT-9000)	VI-5
図 2-1	セメント-ベントナイト接触試験体の薄片試料写真	VI-6
図 2-2	HFSC-ベントナイト接触試験体の分析結果 (XGT-5200S) (Al, S, Si, Ca)	VI-7
図 2-3	HFSC-ベントナイト接触試験体の分析結果 (XGT-5200S) (Fe, K, Mg)	VI-8
図 2-4	OPC-ベントナイト接触試験体の分析結果 (XGT-5200S) (Al, S, Si, Ca)	VI-9
図 2-5	OPC-ベントナイト接触試験体の分析結果 (XGT-5200S) (Fe, K, Mg)	VI-10

【Appendix VII】

図 1-1	小規模モックアップ試験装置	VII-2
図 1-2	小規模モックアップ供試体の成型概要図	VII-3
図 1-3	小規模モックアップ供試体作製状況	VII-4
図 1-4	パイロット供試体の成型概要図 (計画図)	VII-5
図 1-5	パイロット供試体の完成図	VII-5
図 1-6	パイロット供試体作製状況	VII-6
図 2-1	モンテカルロシミュレーションにおける円板状粒子と球状粒子	VII-7
図 2-2	枯渇効果による積層クラスタ形成の概要	VII-7
図 2-3	球-円板系の凝集構造とその平衡相図	VII-8
図 2-4	合成ゼオライトの FESEM 観察	VII-10
図 2-5	Kunipia-F の AFM 粒子測定データ	VII-11
図 2-6	2つの円板状粒子の位置関係	VII-13
図 2-7	3次元平衡構造	VII-17
図 2-8	2次元粒子構造の抽出例	VII-17
図 2-9	局所平均化操作による粒子濃度場の計算例	VII-18
図 2-10	空隙抽出例	VII-19
図 2-11	球状粒子間の空隙抽出例	VII-20

図 2-12	円板状粒子間の空隙抽出例.....	VII-20
図 2-13	粒子層の流路モデル.....	VII-22
図 2-14	空隙セルの判別例	VII-23
図 2-15	Monte Carlo 解析結果 (その 1)	VII-24
図 2-16	Monte Carlo 解析結果 (その 2)	VII-25
図 2-17	Monte Carlo 解析結果 (その 3)	VII-26
図 2-18	ボロノイ分割結果 (その 1)	VII-27
図 2-19	ボロノイ分割結果 (その 2)	VII-28
図 2-20	ボロノイ分割結果 (その 3)	VII-29
図 2-21	球の充填率と空隙率の関係.....	VII-30
図 2-22	球の充填率と動水半径の関係.....	VII-31
図 2-23	各充填率における透過率の試算結果 (縦軸は任意)	VII-31
図 2-24	KF-HSZ 系の透水係数の粘土密度(a)、実効粘土密度(b)、ゼオライト濃度(c)依存性	VII-34
図 2-25	試供体作製手順.....	VII-35
図 2-26	供試体の側面写真一覧.....	VII-36
図 2-27	三軸飽和セルによる供試体の飽和過程 (浸潤量の経時変化)	VII-38
図 2-28	三軸飽和セルによる供試体の飽和過程 (飽和度の経時変化)	VII-38
図 2-29	膨潤圧の経時変化 (乾燥密度 1.3Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 20%)	VII-39
図 2-30	膨潤圧の経時変化 (乾燥密度 1.6Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 20%)	VII-40
図 2-31	三軸膨潤圧試験の摩擦と摩擦角の算出方法.....	VII-40
図 2-32	膨潤圧の経時変化 (乾燥密度 1.8Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 20%)	VII-41
図 2-33	膨潤圧の経時変化 (乾燥密度 1.3Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 80%)	VII-42
図 2-34	膨潤圧の経時変化 (乾燥密度 1.6Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 80%)	VII-42
図 2-35	膨潤圧の経時変化 (乾燥密度 1.8Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 80%)	VII-43
図 2-36	通水圧と通水量、軸応力の経時変化 (乾燥密度 1.3Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 20%)	VII-44
図 2-37	背圧付与時の側圧と軸応力の経時変化 (乾燥密度 1.3Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 20%)	VII-44
図 2-38	圧密曲線 (乾燥密度 1.3Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 20%)	VII-45
図 2-39	B 値の測定結果 (乾燥密度 1.3Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 20%)	VII-45
図 2-40	通水圧と通水量、軸応力の経時変化 (乾燥密度 1.6Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 20%)	VII-46
図 2-41	背圧付与時の側圧と軸応力の経時変化 (乾燥密度 1.6Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 20%)	VII-46
図 2-42	圧密曲線 (乾燥密度 1.6Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 20%)	VII-47

図 2-43	B 値の測定結果（乾燥密度 1.6Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 20%）	VII-47
図 2-44	通水圧と通水量、軸応力の経時変化（乾燥密度 1.8Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 20%）	VII-48
図 2-45	背圧付与時の側圧と軸応力の経時変化（乾燥密度 1.8Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 20%）	VII-48
図 2-46	圧密曲線（乾燥密度 1.8Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 20%）	VII-49
図 2-47	B 値の測定結果（乾燥密度 1.8Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 20%）	VII-49
図 2-48	せん断後の供試体の状況	VII-50
図 2-49	$\rho_d - \log P$ 平面における完全飽和線	VII-51
図 2-50	$e - \log P$ 平面における完全飽和線	VII-51
図 2-51	完全飽和線を用いた三軸膨潤圧試験結果の整理（ $\rho_d - \log P$ 平面）	VII-52
図 2-52	三軸膨潤圧試験から取得した K_0 値の経時変化	VII-53
図 2-53	三軸試験の圧密過程から取得した K_0 値と乾燥密度の関係	VII-53
図 2-54	三軸膨潤圧試験中の K_0 値の経時変化	VII-54
図 2-55	三軸試験の圧密過程から取得した K_0 値と乾燥密度の関係	VII-54
図 2-56	K_0 値と乾燥密度の関係のモデル化	VII-55
図 2-57	有効内部摩擦角と乾燥密度の関係のモデル化	VII-56
図 2-58	モンモリロナイト含有率とベントナイトの限界応力比の関係	VII-57
図 2-59	$C\kappa$ のモンモリロナイト含有率依存性のモデル化（Na 型モンモリロナイト）	VII-61
図 2-60	$C\kappa$ のモンモリロナイト含有率依存性のモデル化（Ca 型モンモリロナイト）	VII-62
図 2-61	解析モデルの概要	VII-78
図 2-62	COMSOL 解析モデル	VII-79
図 2-63	解析モデルの概要	VII-81
図 2-64	解析モデルの概要	VII-85
図 2-65	解析モデルの概要	VII-88
図 2-66	修正 Cam-Clay モデル、過年度の試験結果、平成 31 年度検討した構成則の性質	VII-94
図 2-67	平成 31 年度変更した External Material を用いた圧密解析結果	VII-95
図 2-68	平成 31 年度検討した構成則と修正カムクレイモデルの差	VII-96

表 目 次

【Appendix I】

表 1.1-1	Appendix I と本編 2.1 の対応	I-1
表 2.1-1	容器蓋（外蓋）吊り部の比較	I-6
表 2.1-2	容器蓋（内蓋）構造の比較	I-8
表 2.1-3	内蓋の固定方法の比較（内蓋に突起が生じない形状）	I-10
表 2.1-4	容器本体（側面）の吊り部の比較	I-12
表 2.1-5	容器内蓋の位置決め方法の比較	I-18
表 2.1-6	容器外蓋の位置決め方法の比較	I-22
表 2.1-7	充填材（PCa）の容器への挿入方法の比較	I-23
表 2.1-8	条件選定用試験体溶接条件（平蓋構造）	I-58
表 2.1-9	伝熱試験体溶接条件（平蓋構造）	I-60
表 2.1-10	継手性能確認試験体の概要（平蓋構造）	I-62
表 2.1-11	継手性能確認試験体 溶接条件（平蓋構造）	I-63
表 2.1-12	SR 条件（平蓋構造）	I-63
表 2.1-13	継手性能確認試験（平蓋構造）	I-63
表 2.1-14	機械試験結果一覧（平蓋構造）	I-66
表 2.1-15	溶接条件（低入熱条件）（2重蓋構造）	I-68
表 2.1-16	溶接条件（施工性優先条件）（2重蓋構造）	I-69
表 2.1-17	溶接条件及び内面側熱電対の最高到達温度（低入熱条件）（2重蓋構造）	I-73
表 2.1-18	溶接条件及び内面側熱電対の最高到達温度（施工性優先条件）（2重蓋構造）	I-74
表 2.1-19	継手性能確認試験体の概要（2重蓋構造）	I-74
表 2.1-20	SR 条件（2重蓋構造）	I-75
表 2.1-21	継手性能確認試験（2重蓋構造）	I-75
表 2.1-22	継手性能試験結果の一覧（2重蓋構造）	I-78
表 2.1-23	アスファルト固化体とセメント系材料の熱物性値	I-81
表 2.1-24	空気の熱伝導率	I-81
表 2.1-25	空気の密度	I-82
表 2.1-26	空気の比熱	I-82
表 2.2-1	セメントペースト試料の水準	I-86
表 2.2-2	モルタル試料の水準	I-86
表 2.2-3	使用材料	I-87
表 2.2-4	試料の乾燥条件と質量減少率	I-88
表 2.2-5	化学組成分析試料の一覧	I-88
表 2.2-6	セメント硬化体試料の化学組成分析結果	I-89

表 2.2-7	Ca(OH) ₂ 含有量及び CaCO ₃ 含有量	I-93
表 2.2-8	照射試験の条件	I-100
表 2.2-9	ガスクロマトグラフの仕様	I-102
表 2.2-10	自由水量及び結合水量測定結果	I-103
表 2.2-11	照射試験測定結果の一覧	I-105
表 2.2-12	試料及び試料中の水に対する吸収線量	I-107
表 2.2-13	G _{H2} (All)及び G _{H2} (W)	I-108
表 2.2-14	水素ガス発生と全水分との相関における統計的な計算値	I-109
表 2.2-15	各セメントの適用範囲 (図 2.2-24)	I-110
表 2.2-16	ハンドリングシステム VisualConc の仕様	I-111
表 2.2-17	圧力測定試料の情報	I-113
表 2.2-18	ガスクロマトグラフィー装置の仕様	I-116
表 2.2-19	照射による圧力上昇結果	I-118
表 2.2-20	発生ガス分析結果	I-119
表 2.2-21	γ線吸収線量	I-119
表 2.2-22	水素ガス発生量及び G 値	I-120
表 2.2-23	容器に充填材を打設後に廃棄体を設置する充填材先打設方式 (先打設方式) の概略工程	I-125
表 2.2-24	容器に廃棄体を入れすき間を充填する充填材後打設方式 (後打設方式) の概略工程	I-126
表 2.2-25	別工程で製作した内部充填材を容器に設置後に廃棄体を収納するプレキャスト方式 (プレキャスト方式) の概略工程	I-127
表 2.2-26	暫定配合選定における使用材料	I-131
表 2.2-27	設定した暫定配合	I-131
表 2.2-28	配合選定結果	I-133
表 2.2-29	選定配合で取得する基本物性	I-134
表 2.2-30	圧縮強度及び静弾性係数試験結果	I-137
表 2.2-31	熱伝導率、熱拡散率及び比熱の算出結果	I-138
表 2.2-32	熱拡散測定用試験体の寸法、質量及び見掛け密度	I-138
表 2.2-33	乾燥開始前の質量含水率及び空隙率試験結果の比較	I-139
表 2.2-34	廃棄体パッケージ内充填試験体成形時におけるコンクリートのフレッシュ性状	I-146
表 2.2-35	想定されるすき間	I-169
表 2.2-36	すき間充填材の施工方法の違いによる課題	I-170
表 2.2-37	すき間充填材の配合比 (水材料比) と練混ぜ時の計量値	I-173
表 2.2-38	物性試験の概略	I-174
表 2.2-39	型枠のすき間及び横幅の設定値と上部開口部をノギスにて実測した値	I-181

表 2.2-40	すき間充填材の充填状況の確認試験における測定項目	I-182
表 2.2-41	試験水準.....	I-182
表 2.2-42	圧縮強度測定及び鉛直管試験に供したすき間充填材のフレッシュ性状の測定結果	I-183
表 2.2-43	充填状況の確認試験に供したすき間充填材のフレッシュ性状の測定結果.....	I-183
表 2.2-44	すき間充填材の JP ロート流下時間のメーカー品質規格値及び PC グラウトの設計施 工指針—改訂版—に記載の SL フロー目安	I-183
表 2.2-45	超低粘性型のフレッシュ性状の経時変化.....	I-184
表 2.2-46	低粘性型のフレッシュ性状の経時変化	I-184
表 2.2-47	高粘性型のフレッシュ性状の経時変化	I-184
表 2.2-48	圧縮強度の測定結果	I-186
表 2.2-49	試験体の見掛け密度	I-186
表 2.2-50	沈下の有無の観察結果.....	I-187
表 2.2-51	圧縮強度結果(鉛直管試験:材齢 28 日).....	I-189
表 2.2-52	固化体見掛け密度(鉛直管試験:材齢 28 日).....	I-190
表 2.2-53	充填試験時の流量と到達時間の測定結果 (超低粘性型)	I-190
表 2.2-54	充填試験時の流量と到達時間の測定結果 (低粘性型)	I-191
表 2.2-55	充填試験時の流量と到達時間の測定結果 (高粘性型)	I-191
表 2.2-56	廃棄体パッケージ内充填材及びすき間充填材からの持ち込み水量の概算値.....	I-201
表 2.2-57	モルタル硬化体の定温度試験条件.....	I-207
表 2.2-58	モルタル硬化体における評価試料の一覧.....	I-207
表 2.2-59	OPC モルタル硬化体の測定結果.....	I-209
表 2.2-60	FAC15 モルタル硬化体の測定結果	I-210
表 2.2-61	FAC30 モルタル硬化体の測定結果	I-211
表 2.2-62	SC10 モルタル硬化体の測定結果.....	I-211
表 2.2-63	予察試験の水準.....	I-217

【Appendix II】

表 1	Appendix I と本編 2.1 の対応.....	II-1
表 2.2-1	BPI ガラス固化体の化学構造分析一覧表	II-5
表 2.2-2	BPI ガラス固化体の化学構造分析結果のまとめ.....	II-5
表 2.2-3	多様な環境条件における浸漬試験一覧	II-7
表 3.2-1	炭酸塩影響試験条件	II-16
表 3.2-2	浸漬液の分析結果	II-16
表 3.3-1	固相分析用リン酸及び HS ⁻ 影響試験条件.....	II-22

【Appendix III】

表 1-1	JAEATDB(2019)における主な更新内容.....	III-1
表 1-2	JAEATDB(2019)で追加された液相種の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ ($t=25^{\circ}\text{C}$ and $P=1\text{bar}$).....	III-2
表 1-3	金属-イオン複合体の熱力学特性の算出に用いた式($t=25^{\circ}\text{C}$ and $P=1\text{bar}$).....	III-3
表 1-4	JAEATDB(2019)で改訂された金属-イオン複合体の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ($t=25^{\circ}\text{C}$ and $P=1\text{bar}$).....	III-4
表 1-5	JAEATDB(2019)で追加されたシリカ化合物の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ($t=25^{\circ}\text{C}$ and $P=1\text{bar}$).....	III-4
表 1-6	JAEATDB(2019)で改訂されたリチウム化合物の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ($t=25^{\circ}\text{C}$ and $P=1\text{bar}$).....	III-5
表 1-7	JAEATDB(2019)で改訂されたスズ化合物の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ($t=25^{\circ}\text{C}$ and $P=1\text{bar}$).....	III-5
表 1-8	JAEATDB(2019)で改訂されたチタン化合物の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ($t=25^{\circ}\text{C}$ and $P=1\text{bar}$).....	III-6
表 1-9	JAEATDB(2019)で追加されたギ酸及びシアン酸化合物の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ($t=25^{\circ}\text{C}$ and $P=1\text{bar}$).....	III-7
表 1-10	JAEATDB(2019)で追加されたその他の化合物の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ($t=25^{\circ}\text{C}$ and $P=1\text{bar}$).....	III-8
表 1-11	JAEATDB(2019)で追加された鉛含有鉱物の熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t=25^{\circ}\text{C}$ and $P=1\text{bar}$).....	III-9
表 1-12	JAEATDB(2019)で改訂されたその他の鉱物の熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t=25^{\circ}\text{C}$ and $P=1\text{bar}$).....	III-10

【Appendix IV】

付録表 1.1-1	日本原子力研究開発機構(2018) ¹⁾ で用いられているクニゲル V1 の鉱物組成... IV-1	IV-1
付録表 1.1-2	緩衝材初期鉱物組成(80°C)..... IV-1	IV-1
付録表 1.1-3	OPC, シリカフェーム, フライアッシュの化学組成(wt.%)..... IV-2	IV-2
付録表 1.1-4	HFSC424 の未水和鉱物組成..... IV-2	IV-2
付録表 1.1-5	OPC の未水和鉱物組成..... IV-3	IV-3
付録表 1.1-6	HFSC424 の初期水和物組成(80°C)..... IV-3	IV-3
付録表 1.1-7	OPC の初期水和物組成(80°C)..... IV-3	IV-3
付録表 1.1-8	二次鉱物設定..... IV-4	IV-4
付録表 1.2-1	モンモリロナイトのイオン交換選択係数..... IV-4	IV-4
付録表 1.2-2	初期間隙水の組成(80°C)..... IV-4	IV-4
付録表 1.2-3	接触液の初期組成(80°C)..... IV-4	IV-4

付録表 1.3-1	(3)式を用いる場合の溶解速度式中の定数.....	IV-6
付録表 1.3-2	モンモリロナイトの溶解速度式中の定数.....	IV-6
付録表 1.3-3	炭酸を含む鉱物の溶解速度式中の定数.....	IV-7
付録表 1.3-4	石英の溶解速度式中の定数.....	IV-7
付録表 1.3-5	C/S比に依存したC-S-Hゲルの速度定数.....	IV-8
付録表 1.3-6	式を用いる場合の溶解速度式中の定数.....	IV-8
付録表 1.3-7	鉱物の初期比表面積*.....	IV-9

【Appendix V】

付録表 1.1-1	各ケースにおける計算結果のまとめ(1/4).....	V-14
付録表 1.1-2	各ケースにおける計算結果のまとめ(2/4).....	V-15
付録表 1.1-3	各ケースにおける計算結果のまとめ(3/4).....	V-16
付録表 1.1-4	各ケースにおける計算結果のまとめ(4/4).....	V-17

【Appendix VI】

表 1-1	分析条件.....	VI-1
表 2-1	分析条件.....	VI-6

【Appendix VII】

表 2-1	シミュレーション解析とそのベンチマーク試験の検討項目.....	VII-11
表 2-2	モンモリロナイト-ゼオライト混合系の透水係数測定条件(その1).....	VII-32
表 2-3	モンモリロナイト-ゼオライト混合系の透水係数測定条件(その2).....	VII-33
表 2-4	モンモリロナイト-ゼオライト混合系の透水係数.....	VII-34
表 2-5	供試体諸元.....	VII-36
表 2-6	モンモリロナイト含有率をパラメータとした三軸(CU)試験ケース一覧.....	VII-37
表 2-7	Kozeny-Carman 則の変数.....	VII-59
表 2-8	溶解速度反応式の変数.....	VII-59
表 2-9	回帰式のパラメータ.....	VII-61
表 2-10	Kozeny-Carman 則の変数.....	VII-63
表 2-11	比表面積に係る変数.....	VII-63
表 2-12	形状係数に係る変数.....	VII-64
表 2-13	イオン交換分配係数.....	VII-64
表 2-14	モンモリロナイトの溶解に係るパラメータ.....	VII-64
表 2-15	化学反応式と平衡定数.....	VII-65
表 2-16	初期鉱物組成.....	VII-66
表 2-17	空隙水の初期イオン濃度.....	VII-66

表 2-18	力学解析のパラメータ (ベントナイト層)	VII-66
表 2-19	力学解析のパラメータ (モルタル層)	VII-66
表 2-20	Kozeny-Carman 則のパラメータ (ベントナイト層)	VII-67
表 2-21	水理解析のパラメータ (モルタル層)	VII-67
表 2-22	モンモリロナイトの溶解に係るパラメータ	VII-67
表 2-23	化学反応式と平衡定数	VII-68
表 2-24	初期鉱物組成	VII-69
表 2-25	空隙水の初期イオン濃度	VII-69
表 2-26	力学解析のパラメータ (ベントナイト層)	VII-69
表 2-27	力学解析のパラメータ (モルタル層)	VII-69
表 2-28	Kozeny-Carman 則のパラメータ (ベントナイト層)	VII-70
表 2-29	水理解析のパラメータ (モルタル層)	VII-70
表 2-30	解析ケース 1 概要	VII-71
表 2-31	解析ケース 1-1 の解析条件	VII-71
表 2-32	解析ケース 1-2 の解析条件	VII-72
表 2-33	解析ケース 2 概要	VII-72
表 2-34	解析ケース 2 イオン交換分配係数	VII-73
表 2-35	解析ケース 2 化学反応式と平衡定数	VII-73
表 2-36	解析ケース 2 ベントナイトの初期鉱物組成	VII-74
表 2-37	解析ケース 2 初期イオン交換サイト量	VII-74
表 2-38	解析ケース 2 空隙水の初期濃度	VII-74
表 2-39	解析ケース	VII-75
表 2-40	解析ケース 1 化学反応式と平衡定数	VII-75
表 2-41	鉱物の初期濃度	VII-75
表 2-42	空隙水の初期元素濃度	VII-76
表 2-43	鉱物の初期濃度	VII-76
表 2-44	空隙水の初期元素濃度	VII-76
表 2-45	解析ケース 3 化学反応式と平衡定数	VII-77
表 2-46	鉱物の初期濃度	VII-77
表 2-47	空隙水の初期元素濃度	VII-78
表 2-48	パラメータ	VII-79
表 2-49	化学反応式 (平衡反応) と平衡定数	VII-80
表 2-50	化学反応式 (不可逆反応)	VII-80
表 2-51	鉱物の初期濃度	VII-80
表 2-52	溶液の初期濃度	VII-80
表 2-53	解析ケース	VII-81

表 2-54	各種パラメータ	VII-82
表 2-55	化学反応式と平衡定数	VII-82
表 2-56	ベントナイトの初期鉱物組成	VII-83
表 2-57	初期イオン交換サイト量	VII-83
表 2-58	解析ケース 1 通水液の初期濃度	VII-83
表 2-59	解析ケース 2 通水液の初期濃度	VII-84
表 2-60	解析ケース	VII-84
表 2-61	パラメータ	VII-85
表 2-62	化学反応式（平衡反応）と平衡定数	VII-86
表 2-63	化学反応式（不可逆反応）	VII-86
表 2-64	初期鉱物組成	VII-87
表 2-65	解析に用いた地下水の組成	VII-88
表 2-66	パラメータ	VII-89
表 2-67	化学反応式（平衡反応）と平衡定数	VII-89
表 2-68	化学反応式（不可逆反応）	VII-90
表 2-69	考慮した二次鉱物	VII-90
表 2-70	初期鉱物組成	VII-91
表 2-71	解析に用いた地下水の組成	VII-91
表 2-72	初期間隙率	VII-91
表 2-73	動作確認条件	VII-94
表 3-1	本検討におけるガス発生挙動評価のための評価条件の設定方針の整理（原環センター， 2019）	VII-97
表 3-2	単位壊変あたりの α 線/ β 線/ γ 線の放出エネルギー（ICRP，2008）	VII-98

廃棄体パッケージ閉じ込め性能に係る試験と評価に係る
補足資料

廃棄体パッケージ閉じ込め性能に係る試験と評価に係る補足資料

1. はじめに

Appendix I 「廃棄体パッケージ閉じ込め性能に係る試験と評価に係る補足資料」では、本編 2.1 「廃棄体パッケージの閉じ込め性能にかかる試験と評価」のうち、以下の項目において取得したデータ等を収録したものである。Appendix I の構成（章節）と本編 2.1 との対応を表 1.1-1 に示す。

表 1.1-1 Appendix I と本編 2.1 の対応

Appendix I の構成（章節）	本編 2.1 の項目
2. 廃棄体パッケージの製作技術の整備	
2.1 廃棄体パッケージ容器の製作手法の検討	2.1.2 廃棄体パッケージ容器の製作方法の検討
2.2 廃棄体パッケージ内充填材の仕様の検討	2.1.3 廃棄体パッケージ内充填材の仕様の検討

2. 廃棄体パッケージの製作技術の整備

2.1 廃棄体パッケージ容器の製作手法の検討

2.1.1 はじめに

本項では、2.1.2 「廃棄体パッケージの容器の製作方法の検討」における、以下の項目においての検討内容、取得したデータなどを示す。

- ・ (3) 2) (c) 「遠隔製作性の検討」
- ・ (4) 「溶接条件の検証」
- ・ (5) 「伝熱解析（溶接入熱）」、(6) 「伝熱解析（SR）」及び(7) 「残留応力解析」に用いた物性値

2.1.2 遠隔製作性の検討（2重蓋構造）

本項では、2重蓋構造の廃棄体パッケージB（ドラム缶用）について、遠隔製作性を考慮した容器構造及び廃棄体パッケージの製作手順を検討し、施工成立性を示す。

(1) 容器製作からパッケージ定置までの全体手順

廃棄体パッケージBの容器構造の検討にあたり、全体手順を考慮して遠隔製作性を考慮した吊り部やガイドなどを検討する必要がある。

容器製作から定置までの全体手順の概略を図 2.1-1 に示す。なお、処分場地上施設内作業の手順は、NUMO-SC（原子力発電環境整備機構, 2018）に記載の図（図 2.1-2 を参照）を基とする。

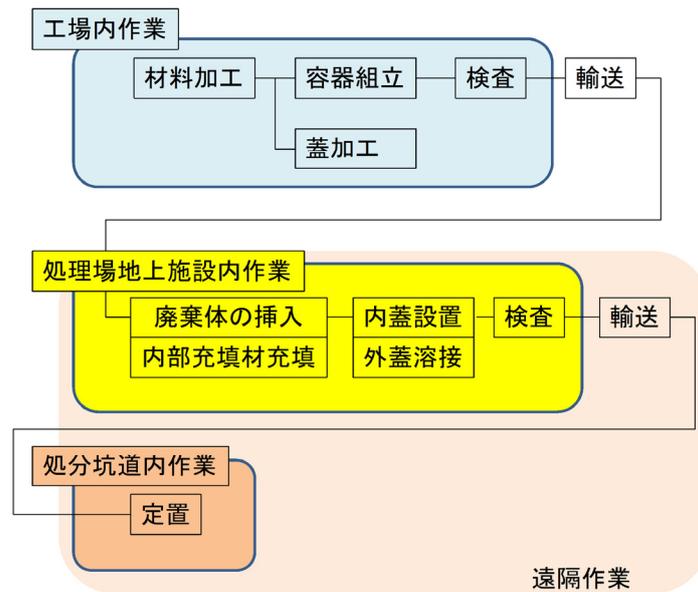


図 2.1-1 全体製作手順概略

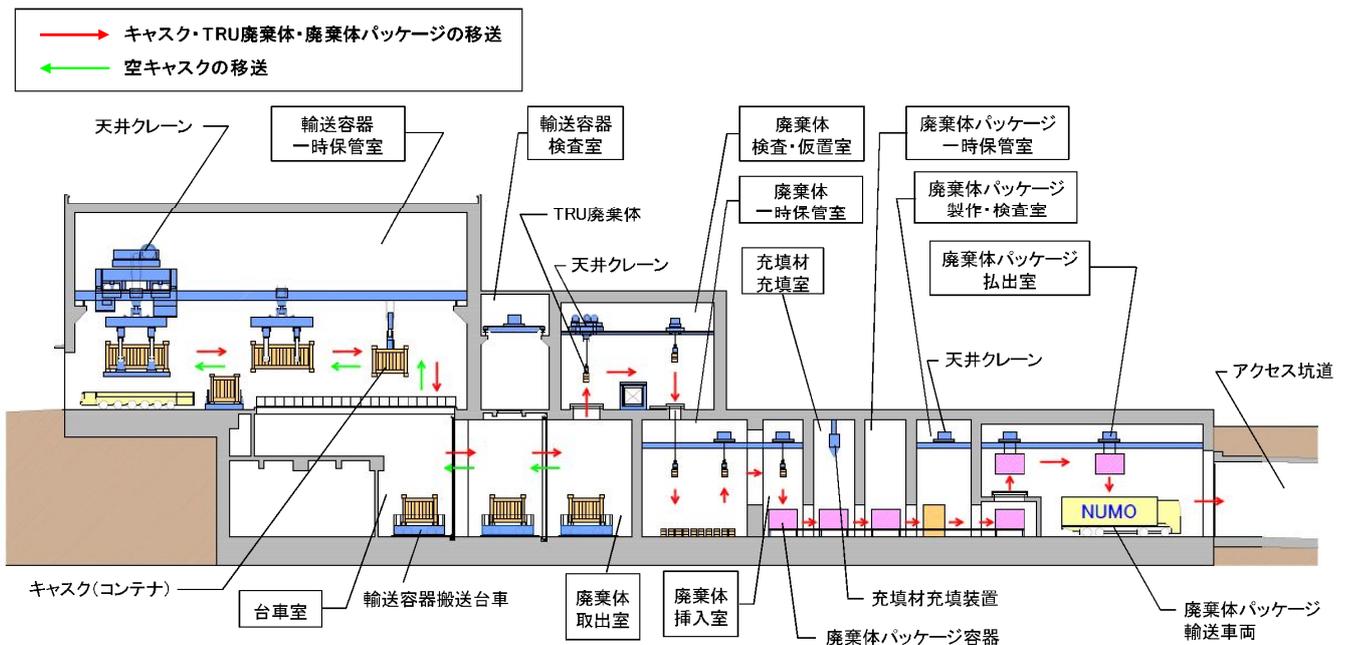


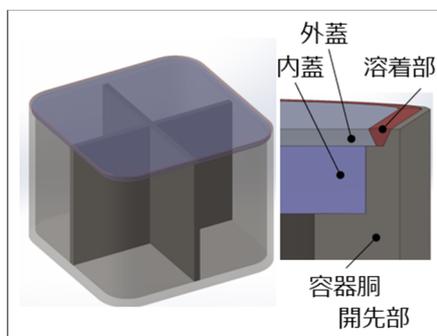
図 2.1-2 TRU 廃棄物の受入・検査・封入施設の模式図

(2) 遠隔製作における設計方針

廃棄体パッケージ B の 2 重蓋構造の概略構造（図 2.1-3 を参照）に対し、本項で示す設計方針を反映し、遠隔製作性を考慮した廃棄体パッケージ B の容器構造を検討する。

廃棄体パッケージ B は地上施設にて空容器を受入れ後、一連の製作工程を遠隔作業にて実施することになるため、各遠隔作業が安全かつ容易に実施できる容器構造にする必要がある。廃棄体パッケージ B の遠隔製作において考慮すべき項目を以下に示し、各項目に対する検討方針を 1) 項～ 8) 項に示す。

- 容器蓋のハンドリング
- 容器蓋の構造
- 内蓋の固定
- 容器本体のハンドリング
- 容器蓋の容器本体への位置決め方法
- 内部充填材の容器への挿入
- 廃棄体の容器への挿入
- 廃棄体パッケージの定置



溶接深さ（外蓋厚さ） 10mm, 内蓋厚さ40mm

図 2.1-3 溶接厚さ再設定容器の概略構造（2重蓋構造）

1) 容器蓋のハンドリング

容器蓋は、空の容器と共に搬送され、クレーンの遠隔操作により容器蓋単体で吊上げ、移送が可能な構造とする。容器蓋を単体でハンドリングするため、容器蓋部に遠隔吊上げ用の吊り部を設ける。容器蓋の吊り部は溶接部との干渉を防ぐため、上面に吊り部を設ける構造とする。また、蓋の重量は外蓋で 300kg、内蓋で 700kg 程度となるため、吊上げ時の安全性を考慮し、マグネットや真空吸着方式ではなく物理的に対象を把持する方法とする。

2) 容器蓋の構造

50mm 板厚の蓋の全厚溶接構造に対する代替案である 2 重蓋構造では、容器と溶接する外蓋は耐食層を、容器に設置する内蓋は耐圧層を担っている。本業務では内圧や落下事象の考慮を除いているため、内蓋を 10mm、外蓋を 40mm の合計で 50mm の板厚とする。また、内蓋に突起がある場合、内蓋と外蓋に生じる隙間が大きく、外蓋に掛かる外圧を内蓋に伝達できないため、内蓋上面に突起がない形状を検討する。

3) 内蓋の固定

上述の前提条件下では耐圧層は外圧に対するものであり、内蓋の固定は必ずしも必要ではない。ただし、内圧については別途検討を進めており、将来的には落下事象対策も含めた内蓋の固定に

について検討が必要となる可能性がある。これを踏まえてボルト締結による固定を検討に含める。

4) 容器本体のハンドリング

廃棄体パッケージB容器本体のハンドリングについて、蓋が溶接される前にもハンドリングする必要があることから、容器本体単体で吊り上げ、移送が可能な構造とする。容器本体の吊り部は、蓋との干渉を防ぐため、側面から吊り上げる方法とする。ただし、容器本体側面に吊り部を設けると、吊り部の突出代に加えて吊具の解除に空間が必要となり、処分坑道内定置時の必要スペース（現計画（原子力発電環境整備機構, 2018）では150mmの離間距離）が増加する可能性があるため、当該吊り部は容器側面からの突出が極力小さい方法を検討する。また、蓋溶接後の容器本体は当該吊り部にて吊り上げる方針とし、当該吊り部は遠隔操作にて吊り上げが可能な構造とする。

5) 容器蓋の位置決め方法

容器蓋は内蓋と外蓋で構成される。内蓋を容器本体にボルトで固定後、外蓋を容器本体に取り付け、溶接にて容器を密閉する。容器蓋の容器本体への位置決めは、クレーンの遠隔操作により容器蓋を容器本体に設置可能とし、外蓋については蓋溶接時の溶接品質を確保できる寸法精度を、内蓋についてはボルト締結可能な寸法精度を満足させる必要がある。これらを踏まえ、容器蓋と容器本体との取り合い部の構造を検討する。

6) 内部充填材の容器への挿入

廃棄体パッケージBの内部充填材は、容器内に廃棄体を挿入する前にPCaによる充填材を挿入する方法と、廃棄体収納後に砂・モルタル等を充填する方法が考えられる。内部充填材の容器への挿入は、砂・モルタル等の施工は精度を要求されないことから、精度が要求されるPCaの施工について検討する。なお、PCaの挿入は、基本的には遠隔操作を必要としないが、ここでは遠隔操作による施工を検討する。

7) 廃棄体の容器への挿入

廃棄体パッケージB容器は、複数の廃棄体（ドラム缶）を容器内へ収納した構造であり、遠隔操作にて安全かつ円滑に廃棄体をハンドリングするため、以下の機能を検討する。なお、内部充填材はPCaとする。

① ガイド機能

廃棄体を安全かつ容易に容器に挿入するため、ガイド機能を検討する。廃棄体の把持装置が廃棄体よりも外側に突き出す場合、ガイド構造が把持装置と干渉しないようにする。

② 廃棄体固定機能

廃棄体パッケージのハンドリング時の安全性という観点から、廃棄体を容器内に設置後、廃棄体を容器内に固定する方法を検討する。

8) 廃棄体パッケージの定置

廃棄体パッケージB容器は、処分坑道にて段積みで定置されるため、安定した状態で容器の段積み可能な構造とする。なお、廃棄体パッケージの定置方法は、クレーンによるハンドリングとする。

(3) 遠隔製作性を考慮した容器構造

設計方針に従い容器の把持方法・把持構造を以下に検討する。

1) 容器蓋のハンドリング

容器蓋（外蓋）のハンドリングにおいて重要となる容器蓋の上面に設置する吊り部について、以下の項目にて比較評価を行う。なお、容器蓋（内蓋）のハンドリングについては、項目 7.2.2 に示したとおり内蓋上面に突起がない形状を検討することから、次項で検討する。

① 信頼性

信頼性については、把持が確実に行われ、吊上げ搬送時に安定した状態で搬送が可能なことや、電源喪失時においても対象を落下させない把持方法であることを評価する。また、各把持方法の適用実績についても評価対象とする。

② 遠隔操作性

遠隔操作性については、アクセス性、視認性、位置決め性の観点から検討する。アクセス性では、クレーンの吊部が対象にアクセスする際の容易さについて評価する。視認性においては、吊上げ対象や吊具、吊上げ時の状態などが、遠隔操作上支障のない視認性が得られることを評価する。位置決め性では、対象物を把持、吊上げ、設置する際に遠隔操作で容易に位置決めが可能であることを評価する。

③ 救援性

対象を把持した状態で吊り部が故障した際に、把持を開放して、対象を元の状態に戻せるかどうかを評価する。

④ 突出代

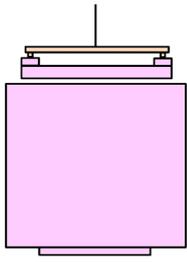
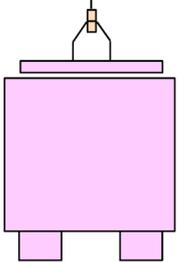
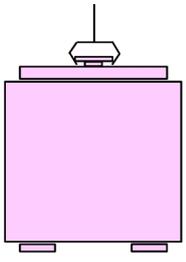
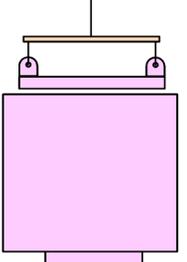
突出代は、処分坑道内定置時の段積みを考慮して、極力小さい構造であることを評価する。

⑤ 製作性

製作性については、容器蓋および本体を工場にて製作する際の容易性、品質安定性を評価する。

上記項目に基づく容器蓋（外蓋）の吊り部の比較評価結果を表 2.1-1 に示す。本評価結果より、容器蓋（外蓋）の吊り部は、ツイストロック、キャニスタ吊り部と甲乙つけがたいが、一般産業界での適用実績が多く突出代が比較的小さいツイストロック方式とし、以降の検討を実施する。

表 2.1-1 容器蓋（外蓋）吊り部の比較

検討項目	吊り部			
	ツイストロック	吊ベイル	キャニスタ吊り部	吊ピース
概要図				
① 信頼性	○ 対象を吊具に確実にロックした状態で搬送する方法であり、信頼性が高い。把持部のロック/解除の確認を確実に行う必要がある。遠隔操作での実績は確認できないが、一般産業界でのコンテナ等の移送に実績が多い。	◎ 吊り部にフックを掛けて搬送する方法であり、安定して搬送が可能である。高線量下での適用実績がある。	◎ メカニカルなカム機構により対象を吊具に確実にロックした状態で搬送する方法であり、信頼性が高い。把持部のロック/解除の確認を確実に行う必要がある。高線量下での適用実績がある。	○ 吊り部にフックを掛けて搬送する方法であり、安定して搬送が可能である。遠隔操作での実績は確認できないが、一般産業界でのコンテナ等の移送に実績が多い。
② 遠隔操作性	○ 四点吊りとした場合、各ロック位置への位置合わせにおいて他と比べて難しくなるが、広く実績のある方法であり操作性は問題ない範囲といえる。	◎ 視認性、アクセシビリティ、操作性の観点で、最も容易に吊具の着脱が可能。	○ 高レベル廃棄物のキャニスタの吊り方法であり、遠隔操作として実績のある方法である。把持方向に制限がなく、把持が容易である。	△ 四点吊りとした場合、遠隔操作で各吊ピースへ吊具フックを同時に掛けるのは容易ではない。
③ 救援性	○ ロック機構を2重化しておくことで、故障時は救援系に切り替えて運転継続が可能	◎ フックで直接掛けるため、把持部（吊具）の救援は不要	△ 故障時の把持機構の解放は、別途遠隔操作による強制解放作業が必要	◎ フックで直接掛けるため、把持部（吊具）の救援は不要
④ 突出代	○ 突出代は比較的小さい。	△ クレーンのフックを吊り部に通す必要がある。起倒式とした場合でも突出代が大きくなる。	○ 突出代は比較的小さい。	△ クレーンのフックを吊り部に通す必要があり、突出代が大きくなる。
⑤ 製作性	○ 蓋上面に対し、溶接で取り付け可能	◎ 構造が単純であり、蓋上面に対し、溶接で取り付け可能	○ 蓋上面に対し、溶接で取り付け可能	◎ 構造が単純であり、蓋上面に対し、溶接で取り付け可能
総合評価	○ 一般産業界での適用実績が多く、突出代が比較的小さく、適用可能である。	△ 突出代が大きくなることから、容器の2段乗せには不向き。2段乗せする場合、ベイル高さや容器下部の脚の長さの検討が必要となり、容器のサイズが変わる可能性がある。ただし、遠隔操作性、救援性及び製作性が高く、適用可能性はある。	○ 救援性がツイストロックより劣るが、高線量下での適用実績もあり、適用可能である。	△ 他の方式と比較すると遠隔操作性が低い。

2) 容器蓋の構造

容器蓋（内蓋）の構造について、以下の項目にて比較評価を行う。なお、ハンドリング設備を低減する観点から、把持方法は前項で検討したツイストロック方式とする。

①内蓋と外蓋は一体とみなせるか

内蓋と外蓋の隙間が生じる場合、一体とみなせないため、内蓋と外蓋が接触する構造であることを評価する。

②加工可能な構造か

加工可否、技術課題の有無を確認し、評価する。

③運転フローへの影響

廃棄体パッケージ B 容器の受入れから、廃棄体パッケージ定置におけるハンドリングフローについて、影響の有無を評価する。

上記項目に基づく容器蓋（内蓋）の構造の比較評価結果を表 2.1-2 に示す。本評価結果より、全項目において優位である貫通用の開口部を設ける構造とし、以降の検討を実施する。

なお、本検討の前提条件として内圧を考慮していないが、本前提条件変更時においては、気密確保の検討（外蓋厚さの増加、内蓋にパッキン適用等）が必要となる。

表 2.1-2 容器蓋（内蓋）構造の比較

検討項目		内蓋貫通用	内蓋に機構を設ける場合	遠隔脱可能とする場合
概要図	構造			
	吊具挿入時	開口部（貫通）にツイストロックを挿入する。 		
①内蓋と外蓋は一体とみなせるか		○ 蓋設置時、内蓋上面に突出代はないため、一体と見なせる。	○ 蓋設置時、内蓋上面に突出代はないため、一体と見なせる。	○ 蓋設置後、遠隔にて吊り部を取外すことで、突出代はなくなり、一体と見なせる。
②加工可能な構造か	加工可否	◎ 開口部のみのため、容易に製作できる。	△ ツイストロック機構を加工することは困難。	○ 実績がある構造のため、製作可能。
	技術課題	◎ 容易に加工可能であり、技術課題はない。	△ ツイストロック機構を溶接で埋め込む等の対策が必要であり、技術課題となる。	○ 実績のある形状のため、技術課題はない。
③運転フローへの影響		◎ フローへの影響はない。	◎ フローへの影響はない。	△ 遠隔ボルトおよびツイストロックを取外す工程（および取外した物品を移送する工程）が必要となる。
総合評価		◎ 全項目において優位である	△ ・加工が難しい。 ・取付け時の確認が困難。	○ マニピレータ等のボルト取外し装置が必要となるが、実現可能。

3) 内蓋の固定

落下事象対策の1案となる内蓋の固定方法について、遠隔操作による締結性を考慮したボルト（以下、「遠隔ボルト」という。図 2.1-4 参照）による固定を検討する。

ここで、内蓋の板厚が 40mm の場合、弊社にて実績のある遠隔ボルトを使用すると、ねじ頭が内蓋から突き出てしまい、内蓋と外蓋に隙間が生じるため、内蓋と外蓋は一体とみなせなくなる。そこで、内蓋に突起が生じない形状を、前項 7.3.2 と同様に以下の項目にて比較評価を行う。

- ①内蓋と外蓋は一体とみなせるか
- ②加工可能な構造か
- ③運転フローへの影響

上記項目に基づく内蓋の固定方法（内蓋に突起が生じない形状）の比較評価結果を表 2.1-3 に示す。本検討結果から、ボルト締結の可能性はあると考えられるが、技術課題を確認する必要がある。

なお、本検討の前提条件として内圧を考慮していないが、本前提条件変更時においては、気密確保の検討（外蓋厚さの増加、内蓋にパッキン適用等）、ボルトの本数、サイズの検討を行う必要がある。

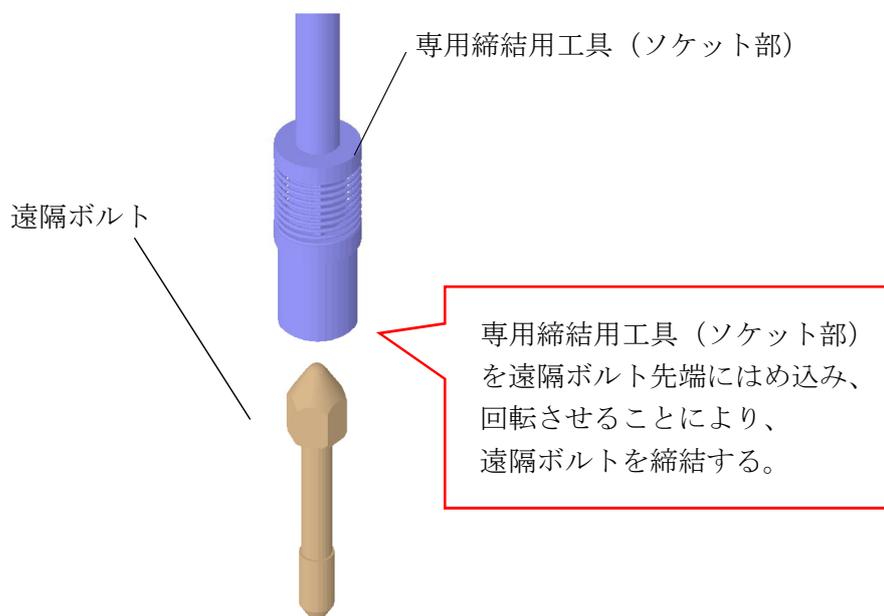


図 2.1-4 遠隔ボルト締結方法

表 2.1-3 内蓋の固定方法の比較（内蓋に突起が生じない形状）

検討項目	遠隔ボルトの変更		内蓋板厚の変更
	遠隔ボルト上端ねじ切れ タイプの使用	小型化の遠隔ボルトの 使用	
構造	遠隔ボルトのねじ頭がねじ切れる構造とする。	内蓋の板厚 40mm に対して、ねじ頭が突出しないような小型の遠隔ボルトを使用する。	現状使用している遠隔ボルトが使用可能となるよう、内蓋の板厚を厚くする。
①内蓋と外蓋は一体とみなせるか	○ 突出している部分については、ねじ切れるような構造とするため、蓋設置時に一体と見なせる。	○ 突出しないよう、ボルトを使用するため、蓋設置時に一体と見なせる。	○ 突出しないよう、蓋を厚くするため、蓋設置時に一体と見なせる。
②加工可能な構造か	加工可否 △ 加工は可能と考えるが、実績がないため、構造の検討を行う必要がある。	△ 製作可能であるが、使用するにあたり、締結力、ボルトの強度を確認する必要がある。	○ 製作可能。ただし、重量が大きくなる。
	技術課題 △ ねじが切れるタイプの遠隔ボルトの製作を検討する必要がある。	△ 製作可能であるが、締結力、ボルトの強度を確認する必要がある。	○ 容易に製作可能であり、技術課題はない。
③運転フローへの影響	△ 遠隔ボルトの締め付け用に、別途ロボットが必要となる。また、ねじ切った頭を取外す工程（および取外した物品を移送する工程）が必要となる。	△ 遠隔ボルトの締め付け用に、別途ロボットが必要となる。	△ 遠隔ボルトの締め付け用に、別途ロボットが必要となる。
その他	△ 施工実績が無い場合、締結及びねじ切りに必要な運転データを取得し、締結用工具を開発する必要がある。	△ 小型ボルトで要求を満足できるか不明。施工実績が無い場合、締結に必要な運転データを取得し、締結用工具もしくは専用の遠隔ボルトを開発する必要がある。	△ 内蓋の板厚が厚くなり、内蓋の構造が変更する。
総合評価	△ 構造検討を実施するとともに、運転データを取得し、締結用工具を開発する必要がある。	△ 小型ボルトの運転データを取得し、締結用工具もしくは専用の遠隔ボルトを開発する必要がある。	△ 技術課題はないが、内蓋の構造が変更となる。

4) 容器本体のハンドリング

容器本体のハンドリングにおいて重要となる容器側面に設置する吊り部について、項目 7.3.1 と同様の項目に加え、定置後回収性を追加して比較評価を行う。

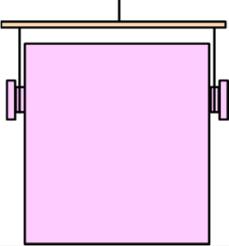
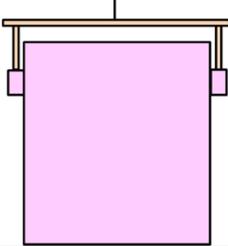
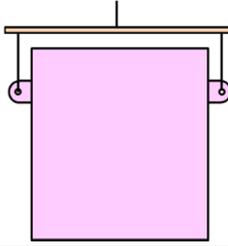
➤ 定置後回収性

定置後回収性においては、充填材による吊り部の目詰まりが発生しにくく、かつ遠隔操作にて充填材を除去しやすい把持方法で、定置後でも回収が可能であることを評価した。

なお、吊り部の腐食代は別途考慮する必要がある。

容器本体（側面）の吊り部の比較評価結果を表 2.1-4 に示す。本評価結果により、容器本体の吊り部は、全項目において優位であるトラニオン方式とし、以降の検討を実施する。

表 2.1-4 容器本体（側面）の吊り部の比較

検討項目	吊り部		
	トラニオン	ツイストロック	吊ピース
概要図			
信頼性	◎ 吊具を吊り部に引っ掛けて搬送する方法であり、安定して搬送が可能である。遠隔操作での実績は確認できないが、同類の廃棄体である使用済み燃料輸送容器、ガラス固化体輸送容器等に用いられており、実績がある。	○ 対象を吊具に確実にロックした状態で搬送する方法であり、信頼性が高い。遠隔操作での実績は確認できないが、一般産業界でのコンテナ等の移送に実績が多い。	○ 吊り部にフックを掛けて搬送する方法であり、安定して搬送が可能である。遠隔操作での実績は確認できないが、一般産業界でのコンテナ等の移送に実績が多い。
遠隔操作性	◎ 視認性、アクセス性、操作性の観点で、最も容易に吊具の着脱が可能。	○ 把持部のロック / 解除の確認を確実に行う必要がある。また、各ロック位置への位置合わせにおいて他と比べて難しくなるが、広く実績のある方法であり操作性は問題ない範囲といえる。	△ 二点または四点吊りとなり、遠隔操作で各吊ピースへ吊具フックを同時に掛けるのは容易ではない。
救援性	○ 容器を床に置くことで、遠隔操作で把持を解放可能	○ ロック機構を2重化しておくことで、故障時は救援系に切り替えて運転継続が可能	◎ フックで直接掛けるため、把持部（吊具）の救援は不要
突出代	○ 突出代は比較的小さい	△ ツイストロックの突起物を差し込み回転させる空間が必要のため、突出代が比較的大きくなる	△ 吊具のフックを吊り部に通す必要があり、突出代が比較的大きくなる
製作性	○ 容器側面に対し、溶接で取り付け可能	○ 容器側面に対し、溶接で取り付け可能	○ 容器側面に対し、溶接で取り付け可能
定置後回収性	○ 吊り部が目詰まりしても容易に除去可能	△ 吊り部が目詰まりしやすく、除去が困難	○ 吊り部が目詰まりしても容易に除去可能
総合評価	○ 全項目において優位である	△ 定置後に回収時、吊り部が目詰まりする可能性がある	△ 遠隔操作性に難あり

5) 容器蓋の位置決め方法

容器蓋の容器本体への位置決め要求精度に関して容器内蓋、外蓋では異なる。容器本体と溶接で固定する容器外蓋の場合、溶接方法を TIG としたとき、ルートギャップ裕度は 1mm 程度となる。一方、容器本体とボルト固定する容器内蓋は噛みこみ防止の観点から 1mm 以下の精度が必要となる。

上記精度を満たすためガイドなどを設置する。設置に用いるガイドの概念図を図 2.1-5 に示す。

要求される精度を満たせる位置決め方法として、以下の 3 案で容器内蓋、外蓋のそれぞれについて検討する。

- ・ 容器内部にガイドを設置
- ・ 容器外部にガイドを設置
- ・ 容器にはガイドを設けず、別途外部装置にて位置決め

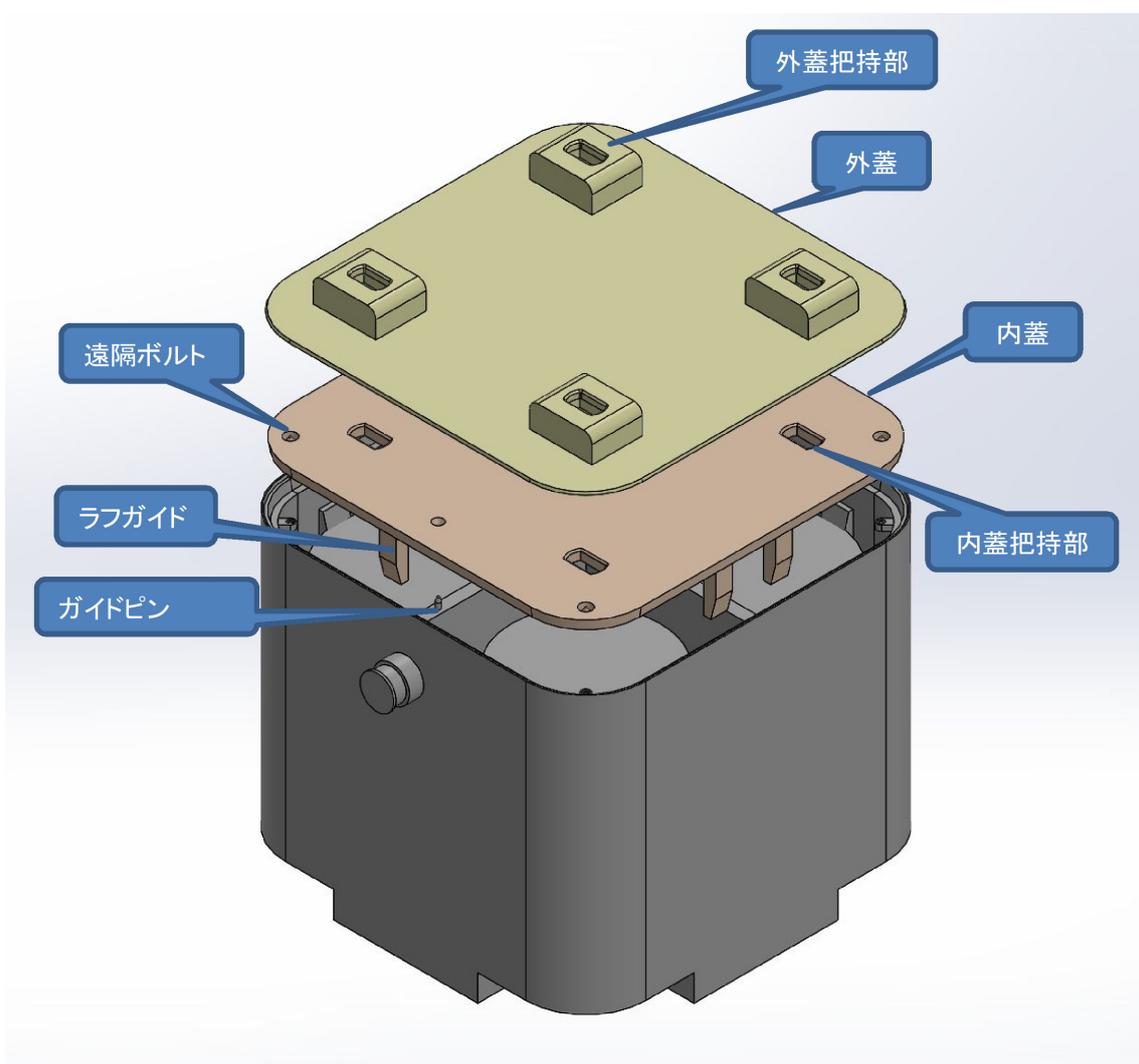


図 2.1-5 廃棄体パッケージ B 容器 位置決めガイド構造例

各案は遠隔製作性の観点から以下の項目にて比較評価を行う。なお、充填材への影響は内蓋に対してのみ評価した。

- ① 充填材への影響
充填材への影響については、内蓋に設置するガイドなどにより充填材との干渉などが発生するか評価する。
- ② 溶接への影響
溶接への影響については、内蓋により外蓋の溶接性への影響があるか、溶接が可能かを評価する。
- ③ 信頼性
信頼性については、設置状態において傾きやずれがなく、所定の位置へ設置可能かを評価する。
- ④ 遠隔操作性
遠隔操作性については、アクセス性、視認性、位置決め性の観点から検討する。アクセス性では、クレーンで容器本体に設置する際の容易さについて評価する。視認性においては、吊上げ対象や吊具、吊上げ時の状態、ガイド視認時に遠隔操作上支障のない視認性が得られることを評価する。位置決め性では、ガイドなどを利用した位置決め操作が容易であることを評価する。
- ⑤ 開発要素
位置決めを実現するため必要となる装置、容器と蓋の組み合わせにおける信頼性、遠隔操作性を満たす容器蓋および本体を工場にて製作する際の容易さ、品質安定のために必要となる開発要素の有無について評価する。

(a) 容器内蓋の位置決め方法

(i) 容器内部にガイドを設置

内蓋にラフガイドとピン穴を設ける。概念図を図 2.1-6 に示す。クレーンにて内蓋を容器本体内に吊下ろす際は、内蓋のラフガイドを容器内面に沿わせて吊り下ろす。その後、内蓋のガイド穴がガイドピンと取合うことで、遠隔ボルト取り付けの許容範囲内に位置決めできる。

位置決め構造

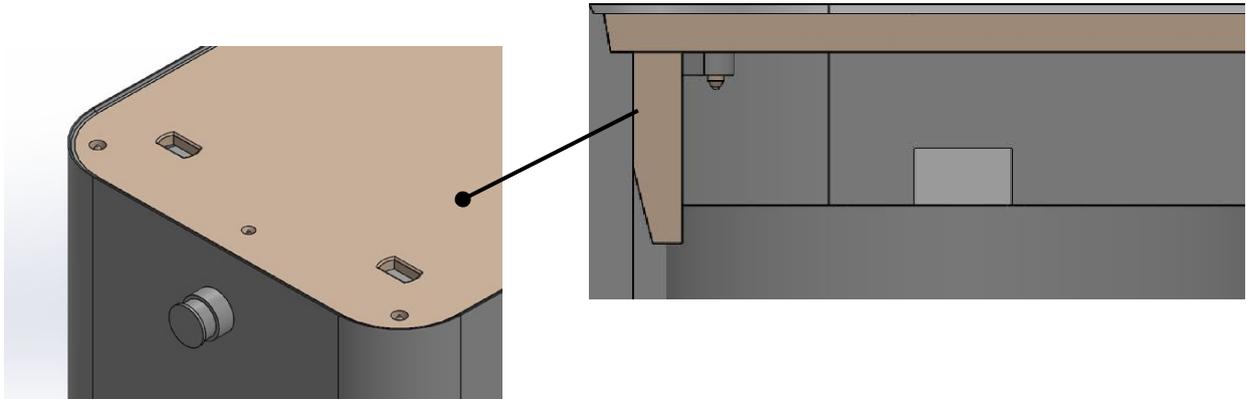


図 2.1-6 容器内部ガイドにて位置決め

① 充填材への影響

内蓋の底面にラフガイドを設け、それによりガイドしつつ、最終的には内蓋のピン穴を容器内部に用意したガイドピンに通し位置決めする構造とする。そのため内蓋底部に設置するガイド長さは容器内の充填材と干渉しない長さとする必要があるが、成立性は高い。

② 溶接への影響

容器蓋の底部にラフガイドを設けているため、ラフガイドが外蓋の設置、および外蓋溶接部へ影響することはない。

③ 信頼性

最終的な位置をガイドピン取合いで決めるため、据え付け時の位置はボルト取り付けに十分な精度を確保できる。また構造自体も実績ある取合い構造であり、信頼性は高い。

④ 遠隔操作性

ラフガイドが内部に設置されるため、設置途中での据え付け状態の視認は困難である。ただし、ラフガイドでの位置決め手順を事前に試験し決めておくことで実施できる可能性は高く、また最終的な位置決めを行うガイドピンは上方から視認可能である。したがって、遠隔操作での設置の成立性はある。

⑤ 開発要素

容器蓋は容器本体内部に挿入されること、容器本体とボルトおよびガイドピンで取合うことから、蓋サイズだけでなく、遠隔ボルト、ガイドピン位置など寸法を再現する必要がある。遠隔ボルトで締め込み可能な精度で取合う必要があり、製作にはテンプレートなどによる取合い確認が必要となる。ただし開発要素はなく成立性は十分ある。

(ii) 容器外部にガイドを設置

容器外部にガイドを設置する場合のガイドの概念図を図 2.1-7 に示す。容器外面にガイドを設置する。内蓋を設置する際、外部に設置したガイドに内蓋を沿わせて位置決めをする。

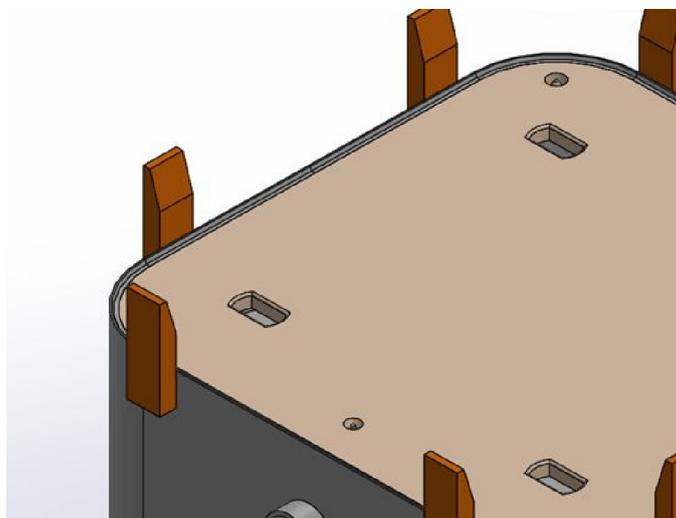


図 2.1-7 容器外面ガイドにて位置決め

① 充填材への影響

ラフガイドを容器外部に設置するため、容器本体内部の充填材への影響はない。

② 溶接への影響

容器外面にガイドを設置するため、外蓋溶接時にラフガイドが溶接作業の障害となる可能性がある。

③ 信頼性

最終的な位置をガイドピン取合いで決めるため設置時の位置はボルト取り付けに十分な精度を確保できる。また構造自体も実績ある取合い構造であり、信頼性は高い。

④ 遠隔操作性

外部にラフガイドが設置されるため、設置途中でのガイドと内蓋の視認は容易である。ただし、内蓋設置位置までは外蓋の溶接箇所の段差があり、外部へ設置したガイドではその段差を避けることができないため、ガイド機能を十分に果たせない。そのため内蓋へのガイドピン挿入はラフガイドなしでの実施となり遠隔操作が困難となる。また、外部のガイドを容器内部の内蓋付近まで延長した場合、外蓋の溶接箇所を遮るため成立しない。

⑤ 開発要素

外部へのガイドでは位置決め機能を果たせないことから、ガイドなしで遠隔ボルト締め付けに必要な精度を実現する搬送装置の開発が必要である。

(iii) 外部装置にて位置決め

容器にはガイドを設けず、別途外部装置にて位置決めをする。外部装置にて位置決めする場合の概念図を図 2.1-8 に示す。外部装置は容器外周に取り付けられ、内蓋を設置位置までガイドする構造とする。内蓋の最終的な位置決めは容器内部に設置したガイドピンにより行うものとする。外部装置は内蓋を設置後、取り外す。

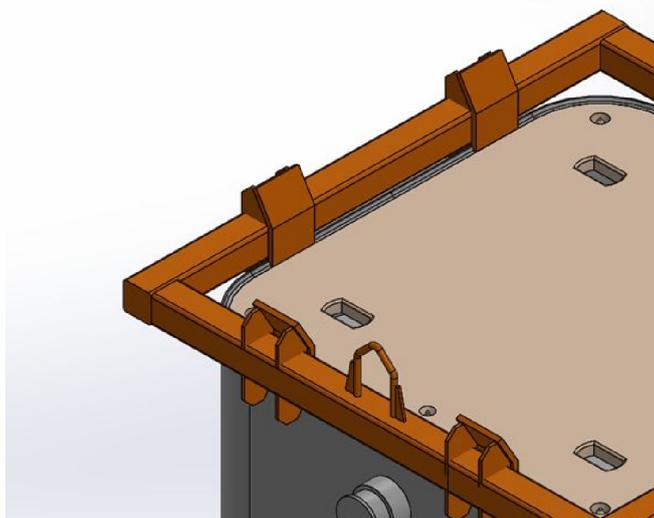


図 2.1-8 外部装置にて位置決め

① 充填材への影響

外部装置のラフガイドは、内蓋を滑らかに設置位置までガイドするため、その長さは内蓋設置箇所の近傍にまで及ぶ。ただし、内蓋上面以下には外部装置は設置しない。よって容器本体内部の充填材への影響はない。

② 溶接への影響

内蓋を外部装置にてガイドし設置した後、外部装置は取り外す。そのため外蓋の溶接には障害とならない。

③ 信頼性

ラフガイドでおおよその位置を決め、最終的な位置をガイドピン取合いで決めるため設置時の位置はボルト取り付けに十分な精度を確保できる。また構造自体も実績ある取合い構造であり、信頼性は高い。

④ 遠隔操作性

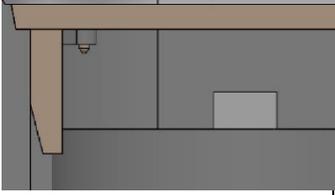
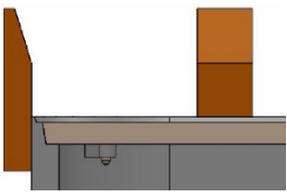
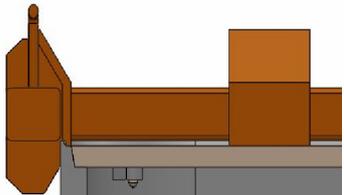
ラフガイドが外部に設置されるため、設置途中の視認は容易である。またガイドピンは上方から視認可能である。設置後に外部装置を取り外す必要があるが、外部装置の遠隔操作は、外部装置が容器本体上部に取り付いた状態であるため、視認性、アクセス性の問題もなく成立性は高い。

⑤ 開発要素

外部装置の精度によりラフガイドの精度が決まる。容器本体の製作精度が明確ではないこともあり、開発要素がないとは言えない。そのため外部装置の開発を行い、試験により要求精度を満たせることを確認する必要がある。

上記 3 案についてまとめた結果を表 2.1-5 に示す。なお、本書に示すハンドリングフローは、内部ガイドを想定したフローとしている。

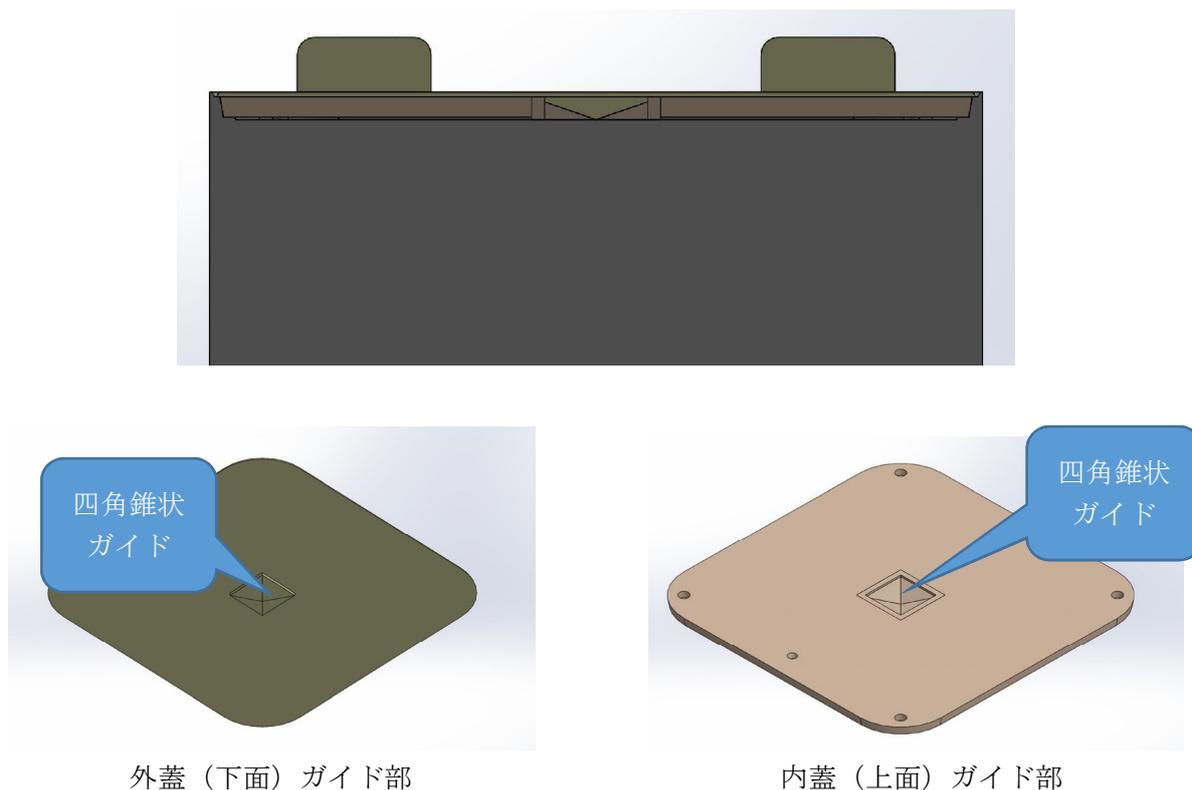
表 2.1-5 容器内蓋の位置決め方法の比較

検討項目	位置決め方法		
	容器内部にガイドを設置	容器外部にガイドを設置	外部装置にて位置決め
概要図			
①充填材への影響	○ 容器内部に設置するガイド長さを充填材と干渉しない長さとする必要がある。成立性は高い。	◎ ラフガイドを容器外部に設置するため、容器本体内部の充填材への影響はない。	◎ ラフガイドについては、充填材へ影響しない位置に設置するため、充填材への影響はない。
②溶接への影響	◎ 容器蓋の底面にラフガイドを設けているため、外蓋溶接部へ影響することはない。	△ 外蓋溶接時にラフガイドが溶接作業の障害となる可能性がある。	◎ 内蓋を設置後、外部装置は取り外すため、溶接の障害とならない。
③信頼性	◎ 最終的な位置をガイドピン取合いで決めるため、十分な精度を確保できる。	◎ 最終的な位置をガイドピン取合いで決めるため、十分な精度を確保できる。	◎ 最終的な位置をガイドピン取合いで決めるため、十分な精度を確保できる。
④遠隔操作性	○ ガイドに接触させる手順を決めておくことで実施できる可能性は高い。ガイドピンは上方から視認可能であり、遠隔操作での設置の成立性は十分ある。	× 外部へ設置したガイドでは設置位置までガイドできない。内蓋へのガイドピン挿入はラフガイドなしで実施となり遠隔操作が困難となる。	◎ ラフガイドの視認が容易であり、ラフガイド、ガイドピンでの位置決め構造自体も実績があるため成立性は高い。
⑤開発要素	◎ 開発要素はなく成立性は十分ある。	× 据え付け精度を実現する搬送装置の開発が必要となる。	○ 試験により要求精度を満たせることを確認する必要がある。
総合評価	○ 開発要素はなく成立性は十分ある。	× ガイドが機能せず遠隔操作性に難あり。	○ 開発要素に不確定要素があるが、成立性は高い。

(b) 容器外蓋の位置決め方法

(i) 容器内部にガイドを設置

容器内部にガイドを設け、外蓋を容器内に設置する構造とする。概念図を図 2.1-9 に示す。ガイド構造として内蓋上面に取り付けるガイドは四角錐状の凹みとし、外蓋の底部に取り付けるガイドは四角錐とする。クレーンにて蓋を本体に吊下ろす際、容器内面のテーパ部をラフガイドとし、設置時には内蓋、外蓋の四角錐状の凹凸を嵌合させることで外蓋を必要精度範囲内で設置する。



外蓋（下面）ガイド部

内蓋（上面）ガイド部

図 2.1-9 容器内部にガイドを設置

① 溶接への影響

四角錐状のガイドが取り合った状態では、容器本体に対する外蓋の位置、方向が決まるため、必要な位置精度を確保することができる可能性がある。ガイドも内側に設置されているため溶接作業の支障となることはない。

② 信頼性

四角錐状のガイドで取合うことで、容器本体に対する外蓋の位置、方向が決まるため、必要な精度で設置することができる可能性がある。

③ 遠隔操作性

容器内面のテーパ部が 10 mm 程度で短く、また最終的に取合う四角錐状のガイドを視認することができないため、遠隔操作での据え付けは成立性があるが困難となる。補助として外部装置などを設置することで、設置時の視野などを改善し、遠隔操作を容易にできる可能性がある。

④ 開発要素

内蓋と同じく、外蓋は容器本体内部に挿入されること、容器本体と四角錐の嵌合で取合うことから、蓋サイズだけでなく、ボルト、四角錐状突起位置などの寸法を再現する必要がある。そのため要求精度を満たすことが可能か試験により確認する必要がある。

(ii) 容器外部にガイドを設置

容器外部にガイドを設置する場合のガイドの概念図を図 2.1-10 に示す。内蓋を設置する際、外部に設置したガイドにより位置決めする。

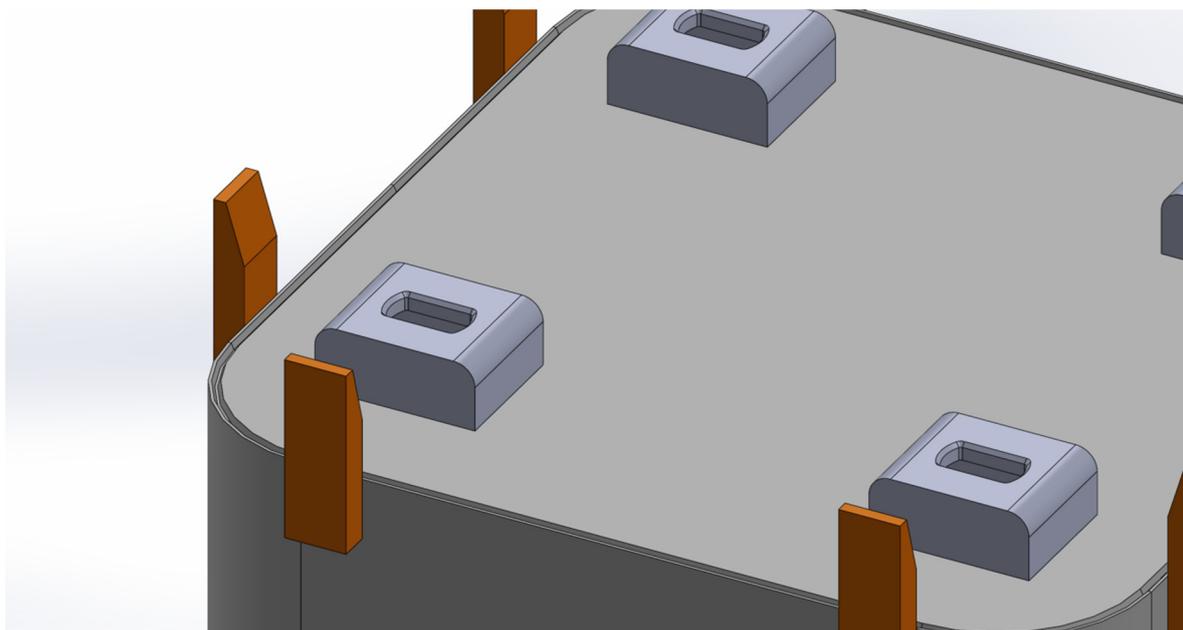


図 2.1-10 容器外部にガイドを設置

① 溶接への影響

容器外部にガイドを設置するため、外蓋溶接時にラフガイドが溶接作業の障害となる可能性がある。

② 信頼性

外蓋は溶接のルートギャップ分だけ容器本体内面より内側に設置する。したがって、外部のガイドに沿って容器内部へ蓋を移動させると、ルートギャップがなく、溶接位置に外蓋を設置することはできない。そのため目標位置へ設置させるには容器内側までガイドを伸ばす必要がある。しかし、外部から容器内側までガイドを伸ばすことは溶接箇所を遮ることになり不可能である。したがって、最終的な設置はガイドなしとなり、設置精度はクレーンの遠隔操作精度に依存する。そのため 1 mm程度の精度の確保は非常に困難であり、成立しない。

③ 遠隔操作性

外部にラフガイドを設置することでガイドと外蓋の位置を視認することは容易である。しかし、信頼性において記載したとおり、外部に設置したガイドでは要求精度を確保する遠隔操作は非常に困難であり、成立しない。

④ 開発要素

外部へのガイドでは位置決め機能を果たせないことから、ガイドなしで1 mm程度(溶接部詳細図参照)の据え付け精度を実現する搬送装置の開発が必要である。

(iii) 外部装置にて位置決め

容器にはガイドを設けず、別途外部装置にて設置位置までのガイドを行う。概念図を図 2.1-11 に示す。外蓋を設置後は外部装置を取り外す。

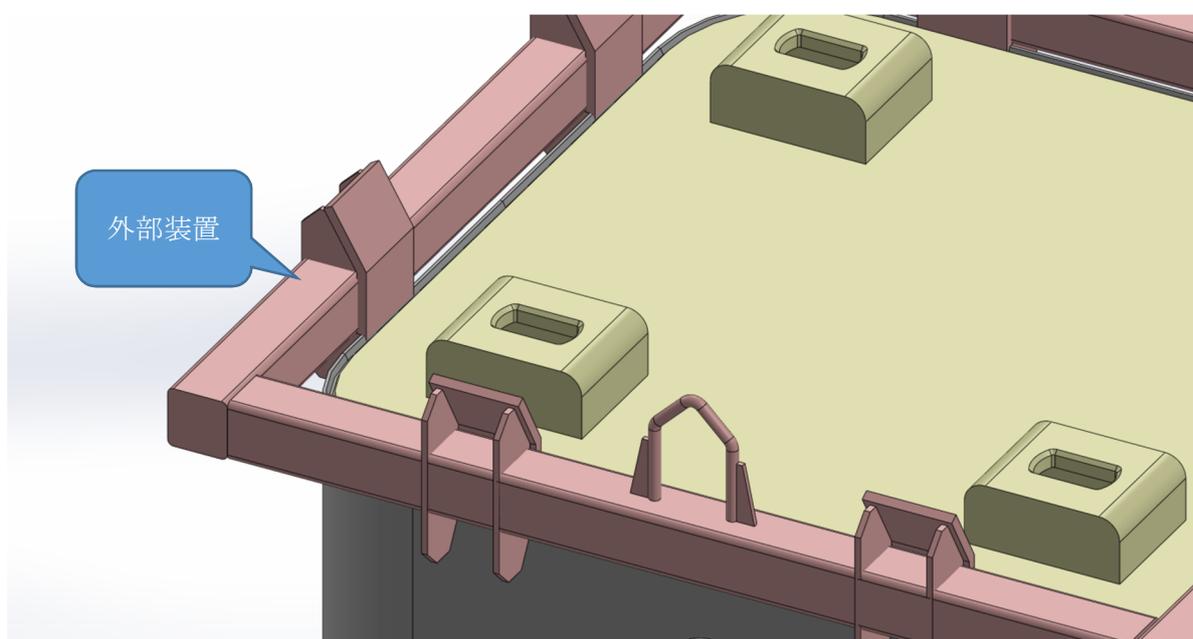


図 2.1-11 外部装置にて位置決め

① 溶接への影響

外蓋設置後はガイドとなる外部装置は取り外すため、溶接作業の障害となることはない。

② 信頼性

位置決め精度は外部装置の精度、およびその容器本体への設置精度に依存し、それらの精度を管理することが必要となる。ラフガイドだけで精度確保が十分でない場合は容器内部にガイドを設置した場合と同様、内蓋と外蓋で四角錐状の取合いを設けることで、必要な精度で外蓋を設置できる可能性がある。

③ 遠隔操作性

ラフガイドが外部に設置されるため、遠隔操作における視認は容易である。外蓋設置後、遠隔操作にて外部装置を取り外す必要があるが実施は可能である。ガイドはあるが、1 mm程度の精度で設置するためにはガイドと外蓋のクリアランスが狭くなる。そのため設置

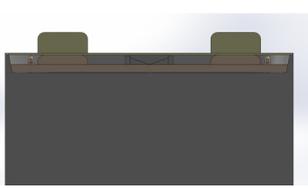
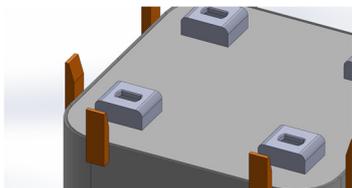
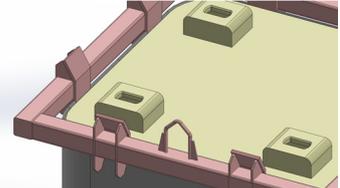
操作が困難となる可能性がある。容器内部にガイドを設置した場合と同様、内蓋と外蓋で四角錐状の取合いを設けることで、ガイドの精度を緩め、遠隔操作を容易にできる。

④ 開発要素

外蓋の設置精度は外部装置の設置、製作精度に依存する。そのため要求精度を満たすことが可能か、外部装置の開発、試験により確認する必要がある。

上記 3 案についてまとめた結果を表 2.1-6 に示す。「容器内部にガイドを設置」と「外部装置にて位置決め」が成立する可能性がある。

表 2.1-6 容器外蓋の位置決め方法の比較

検討項目	位置決め方法		
	容器内部にガイドを設置	容器外部にガイドを設置	外部装置にて位置決め
概要図			
溶接への影響	◎ ガイドは内部（内蓋および外蓋）に取り付けられるため溶接作業に支障はない。	△ 外蓋溶接時にラフガイドが溶接作業の障害となる可能性がある。	◎ 外部装置は取り外すため、溶接作業の障害にはならない。
信頼性	○ 四角錐状のガイドで取合うことで、必要な精度で設置することができる可能性がある。	× 設置はクレーンでの吊降し精度による。1mmの溶接ギャップ精度の確保は（溶接部詳細図 図 2.1-16 参照）非常に困難である。	○ 外部装置の精度管理、容器本体への設置精度管理を行うことで精度を確保できる可能性がある。
遠隔操作性	△ ガイドが短く、かつ四角錐状のガイドは設置時に視認できないため、操作は困難となる可能性がある。	× 視認は容易となるが、設置位置までガイドすることができず、要求精度を確保する遠隔操作は非常に困難であり、成立しない。	△ ラフガイドの視認が容易である。高精度の据え付けが必要であり、操作は困難となる可能性がある。
開発要素	○ 試験などにより確認する必要がある。	× 据え付け精度を実現する搬送装置の開発が必要となる。	○ 試験などにより確認する必要がある。
総合評価	○ 開発要素に不確定要素があるが、成立性が高い。	× 全項目において難あり。	○ 開発要素に不確定要素があるが、成立性が高い。

6) 内部充填材の容器への挿入

内部充填材（PCa）を遠隔で容器に挿入するためには、容器側面にラフガイド設置、容器内部にラフガイド設置、容器内部にガイドピン設置、外部装置にて位置決めが考えられ、それぞれについて検討する。検討はPCaと容器の隙間裕度、容器の設置性、視認性について比較評価する。なお、ここでは容器、およびPCaの製作精度などは考慮しないものとする。また、容器に設置されている蓋取付け用のボルト受け部下方については、PCaに切り欠きを入れる必要があるため、未充填部が発生するものとする。

検討結果を表 2.1-7 に示す。評価の結果、「容器内部のラフガイド設置」および「外部装置にて位置決め」に成立性がある。また、「容器内部のガイドピン設置」は、ラフガイドと組み合わせることで、精度を高めて設置できる可能性がある。「容器内部のラフガイド設置」について、容器内部構造の概略を図 2.1-16 に示す。

表 2.1-7 充填材（PCa）の容器への挿入方法の比較

検討項目	容器側面にラフガイド設置	容器内部にラフガイド設置	容器内部にガイドピン設置	外部装置にて位置決め
形状	図 2.1-13 参照	図 2.1-13 参照	図 2.1-14 参照	図 2.1-15 参照
容器の隙間裕度	20～50mm 程度 × 容器内側の段差で引っかかりが生じるため使用できない。クレーンでの設置となるため精度よく設置することは難しい。	10～20mm 程度 △ 精度よく設置することは難しいが、ある程度の精度で据え付け可能。ただし、ラフガイド部の厚み分未充填部となる。	0.5mm ○ ピンへの挿入のため、精度よく設置可能。	20～50mm 程度 △ 精度よく設置することは難しいが、ある程度の精度で据え付け可能。ただし、ラフガイド部の厚み分未充填部となる。
容器への設置性	× 容器内部の段差に引っかかり、挿入不可	○ ガイドにて容器に設置可能。	△ PCa をピンへ挿入する必要があり、ラフガイドに比べ操作が難しい。	○ ガイドにて容器に設置可能。
視認性	○ 外部にガイドがあり、視認は難しくない。	○ ラフガイドへの接触のみのため、視認は難しくない。	△ 挿入時、ガイドピンの視認は困難。ラフガイドなどである程度位置決めをする必要がある。	○ 外部装置への接触のみのため、視認は難しくない。
評価	× 容器内部の段差に引掛り、挿入不可。	○ 精度よく設置することは難しいが、容器を挿入することは可能。	△ ガイドピンの視認が困難である。ラフガイドと組み合わせることで、設置できる可能性はある。	○ 精度よく設置することは難しいが、容器を挿入することは可能。

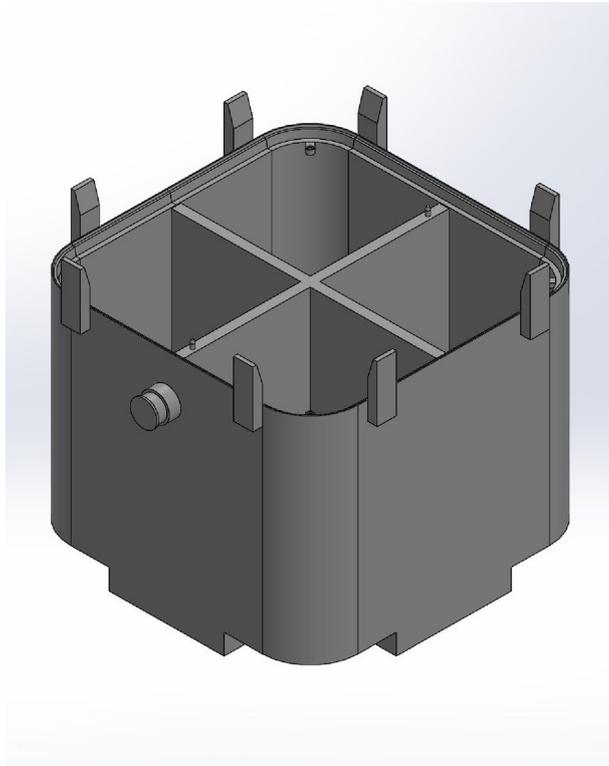


図 2.1-12 PCa 挿入構造検討（容器側面にラフガイド設置）

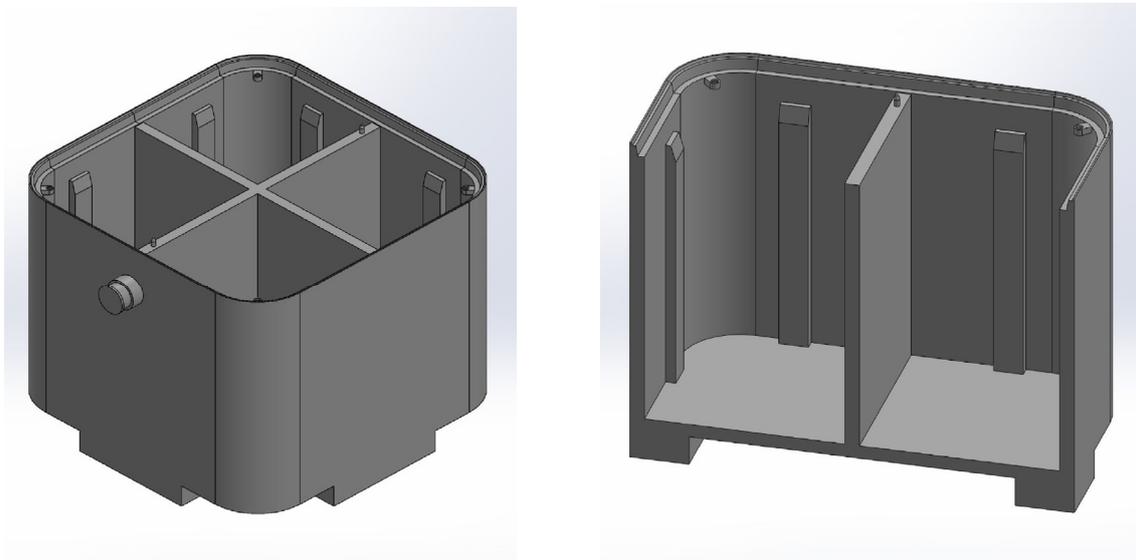


図 2.1-13 PCa 挿入構造検討（容器内部にラフガイド設置）

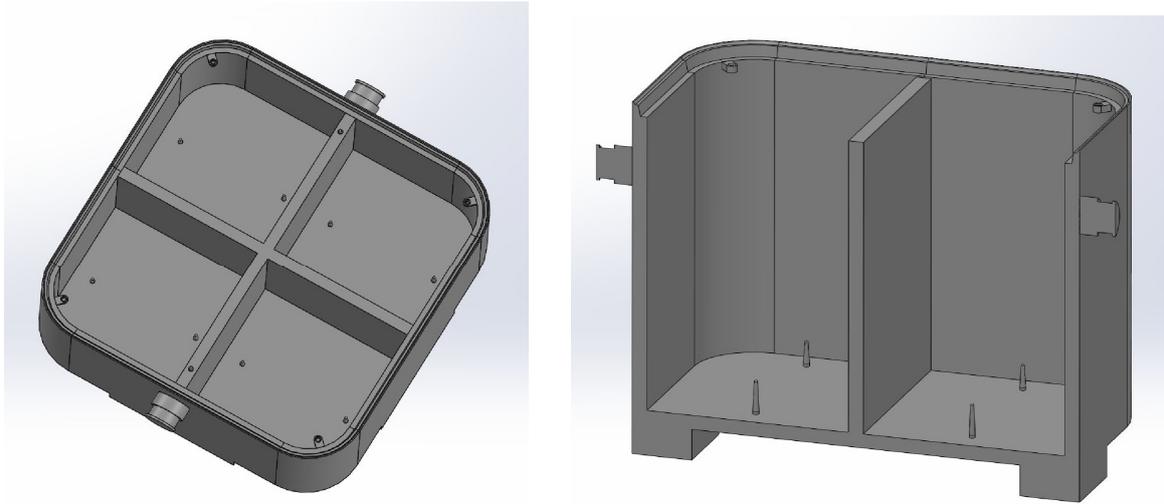


図 2.1-14 PCa 挿入構造検討（容器内部にガイドピン設置）

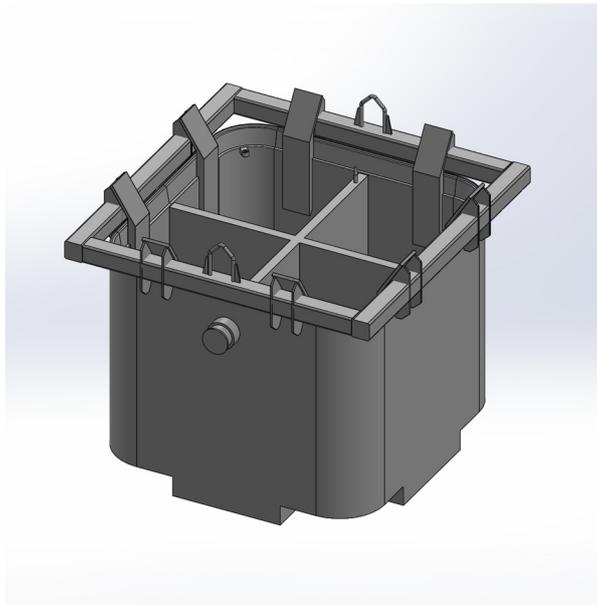
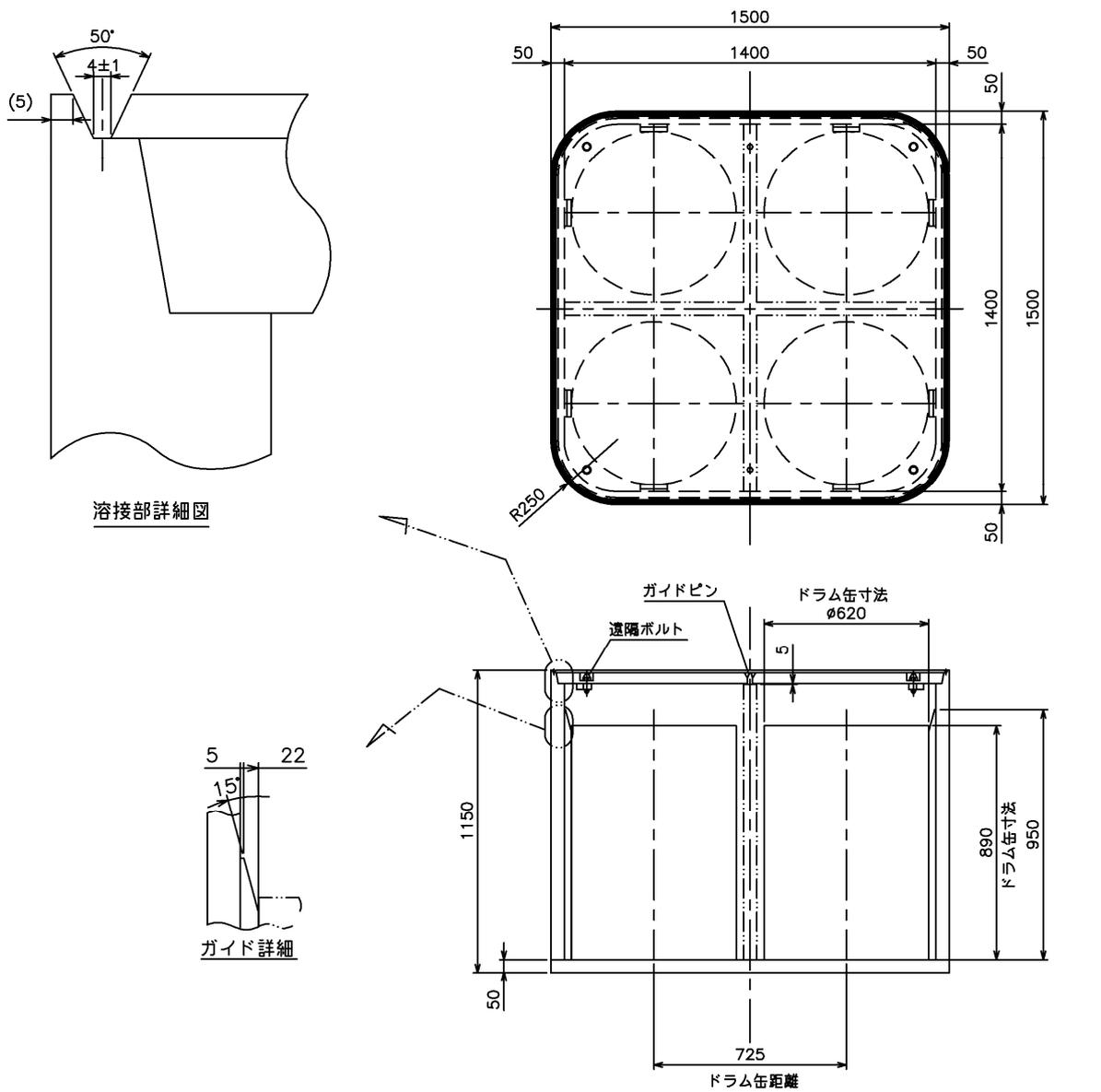


図 2.1-15 PCa 挿入構造検討（外部装置の設置）



単位 mm

図 2.1-16 容器内部構造の概略 (容器内部にラフガイド設置)

7) 廃棄体の容器への挿入

(a) ガイド機能

廃棄体（ドラム缶）の容器への挿入性について、内部充填材（PCa）の形状をガイド機構とすることで検討する。

PCa の形状として、PCa 上端部をすり鉢状、下端部はドラム缶の底部チャイムの寸法に合わせた形状とすることで、ドラム缶の遠隔挿入時のガイドとなり、ドラム缶の設置位置を決めることができる。

ただし、以降に示すドラム缶吊具（図 2.1-20 参照）による把持を考慮し、PCa 上端部はドラム缶よりも低い位置とする必要がある。

(b) 廃棄体固定機能

PCa を上記形状とした場合、廃棄体の設置位置が決まるが、廃棄体と PCa の間には若干隙間が生じる。この隙間による廃棄体パッケージのハンドリング時の安全性については確認が必要と考えられ、廃棄体を容器内に完全に固定する必要が生じる可能性もあることから、ドラム缶の固定方法を検討する。

固定方法としては、追加充填材による固定、容器蓋に押し付け機構を設ける等が考えられる。追加充填材による固定の場合には、ドラム缶の輪帯などの突起を考慮し、追加充填材が適切に PCa と廃棄体の隙間に充填されるような構造にする必要がある。容器蓋に押し付け機構を設ける場合には、押し付け荷重により廃棄体パッケージが損傷しないようにする必要がある。

8) 廃棄体パッケージの定置

蓋ハンドリング用ツイストロック受座が蓋表面からの突起物となるため、処分坑道定置において安定して段積み可能なようツイストロック受座を避ける形で容器脚を設けることとする。容器脚の位置は、段積み時の荷重を考慮し容器の端側に設置することとする。

9) 容器構造

以上の検討より、遠隔製作性を考慮した廃棄体パッケージ B（ドラム缶用）の容器構造を、図 2.1-17 に示す。

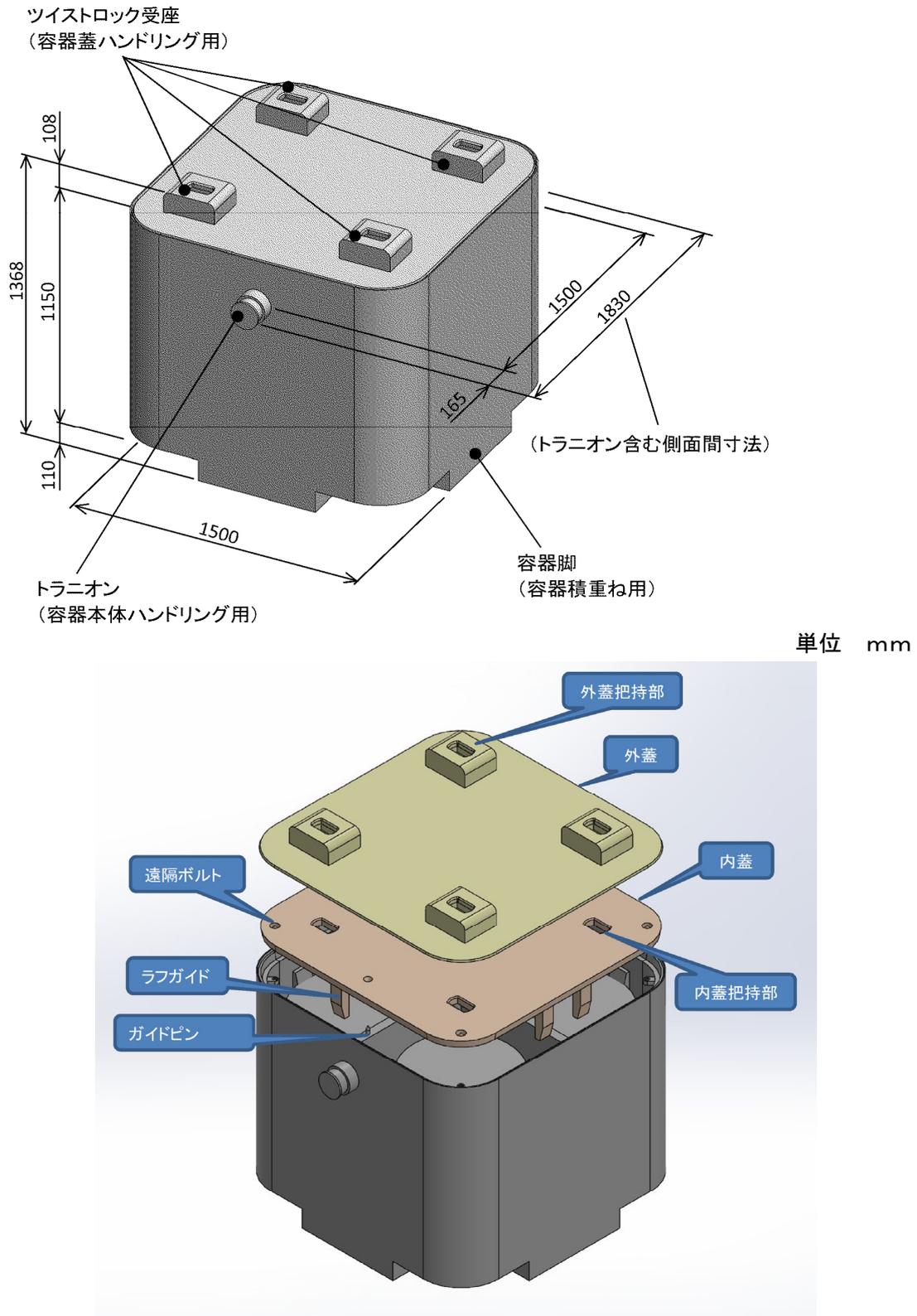
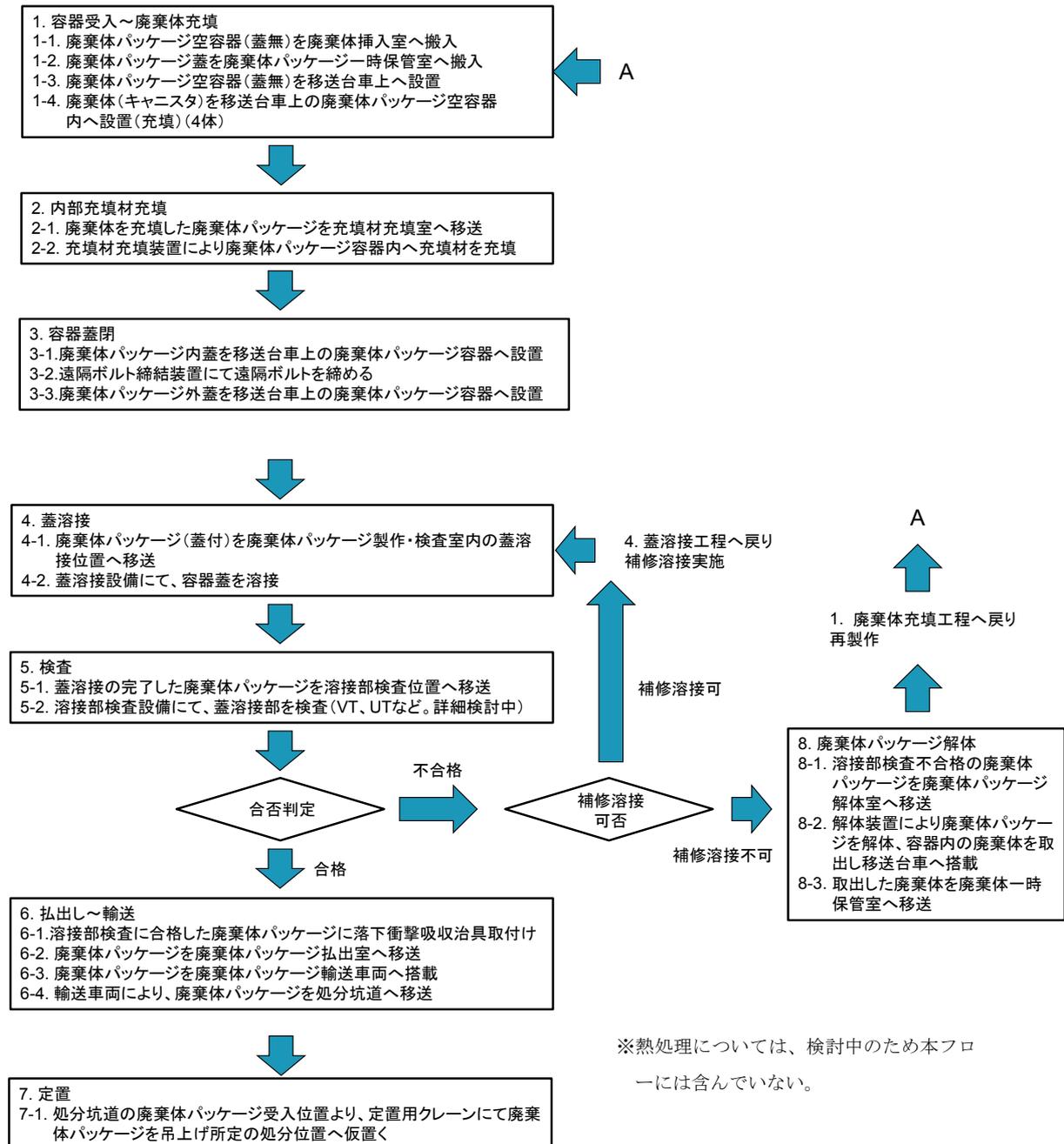


図 2.1-17 遠隔製作性を考慮した廃棄体パッケージ B（ドラム缶用）の容器構造

(4) 遠隔製作性を考慮した廃棄体パッケージの製作手順

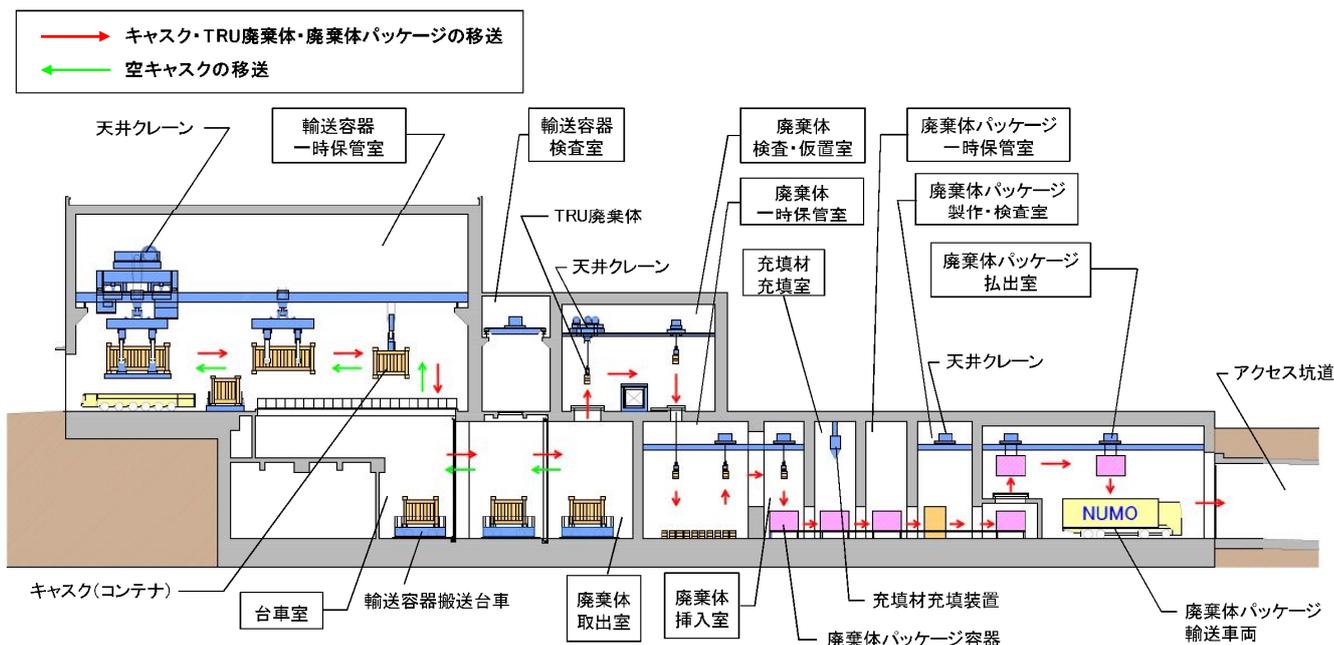
本項目では、廃棄体パッケージ B（ドラム缶用）の製作手順を検討する。廃棄体パッケージ B は 2 重蓋構造で、充填材は PCa を検討対象とする。

廃棄体パッケージ B の空容器の受入れから、廃棄体パッケージ 1 重蓋構造における廃棄体パッケージの製作手順の概要を図 2.1-18 に示す。なお、本図は、NUMO-SC (原子力発電環境整備機構, 2018) の内容に基づき検討し、詳細部を具体化したものである。参考に NUMO-SC に記載の TRU 廃棄物の受入・検査・封入施設の模式図を図 2.1-2 (再掲) に示す。



※熱処理については、検討中のため本フローには含んでいない。

図 2.1-18 廃棄体パッケージ B 容器 処分場地上施設における製作手順 (概要)



※充填材に PCa を使用する場合、廃棄体パッケージ一時保管室は不要

図 2.1-2 TRU 廃棄物の受入・検査・封入施設の模式図 (再掲)

1) 各設備の構成装置

各設備の主要構成装置について、検討した結果を示す。

① 搬送設備

処分場地上施設における主要対象搬送物として、廃棄体 (3 種)、廃棄体パッケージ空容器、廃棄体パッケージ容器蓋および廃棄体パッケージの計 6 種が挙げられる。各対象搬送物は、施設内天井クレーンより遠隔搬送可能な仕様とする。

廃棄体パッケージ空容器および廃棄体パッケージの移送は、原則移送台車により次工程を行う各部屋へ移送可能とする。また、部屋間の移送では、部屋間に設置された扉・ハッチ・床ポート (※) を一時的に開いて実施する。

(※) 扉・ハッチ・床ポート

扉に関しては、電動スライド開閉式とする。床ポートとは、部屋間の境界に設置し、放射線の気密・しゃへい等の機能を持ち、電動等で開閉可能な装置である。ハッチについては、天井クレーンを用いて開閉する機構とする。

(a) 移送台車

位置制御および速度制御が可能な電動移送台車とする。充填材充填や蓋溶接、検査など、各作業プロセスにおいて高い停止位置精度が要求される作業位置については、リミットスイッチや固定装置等により位置決めを行うことが可能な仕様とする。

(b) 天井クレーン

位置制御および速度制御が可能な仕様とする。クレーンの各モータは2重化されており、モータ故障時でも救援することが可能となっている。天井クレーンの概念図を図 2.1-19に示す。天井クレーンにおける各対象搬送物の搬送方法概要を以下に示す。

- 廃棄体パッケージ（空容器）

天井クレーンにトラニオン取合いの専用吊具を取付け、遠隔搬送を行う。
- 内部充填材（PCa）

天井クレーンに専用吊具を取付け、遠隔搬送を行う。当該の吊具等は、内部充填材の仕様検討と共に実施する必要がある。
- 廃棄体（ドラム缶）

天井クレーンにドラム缶把持専用吊具を取付け、遠隔搬送を行う。ドラム缶専用吊具は、ドラム缶のフチを外面から把持し、垂直に吊り上げることでハンドリングする。ドラム缶ハンドリング時の概念を図 2.1-20に示す。
- 廃棄体パッケージ容器蓋
天井クレーンにツイストロック機構付の専用吊具を取付け、遠隔搬送を行う。本吊具はロック解除用の油圧シリンダが2重化されており、故障時にも救援用シリンダでロックを解除することができる。ツイストロックによる容器蓋のハンドリングの概念を図 2.1-21に示す。
- 廃棄体パッケージ
廃棄体パッケージ（空容器）と同様に、トラニオン取合いの専用吊具を取付け、遠隔搬送を行う。トラニオンによるハンドリングの概念を図 2.1-22に示す。
- 廃棄体パッケージ落下衝撃吸収治具
廃棄体パッケージ落下時に蓋部への衝撃を緩和する目的として設置する治具を図 2.1-23に示す。廃棄体パッケージ上面に被せる構造とし、廃棄体パッケージと共に搬送する。蓋部への衝撃を治具部が受けることで蓋部への衝撃を緩和する。また、衝撃吸収部は蓋材質より柔らかい金属、あるいは樹脂製材料とする。

なお、今回は検討対象外としたが、他の廃棄体（キャニスタ及びハル缶）に対して想定する搬送方法概要も以下に示す。

- 廃棄体（キャニスタ）

天井クレーンに専用吊具を取付け、遠隔搬送を行う。当該専用吊具は、高レベル廃棄物用のキャニスタと同様、昇降ダブルアクションによりキャニスタを把持する爪がロック／開放可能な構造とする。
- 廃棄体（ハル缶）

天井クレーンに専用吊具を取付け、遠隔搬送を行う。

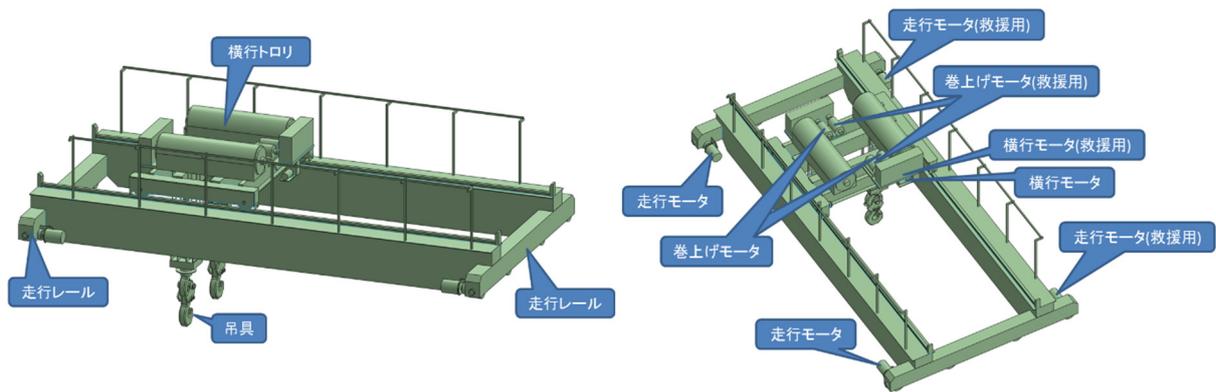


図 2.1-19 天井クレーンの概念図

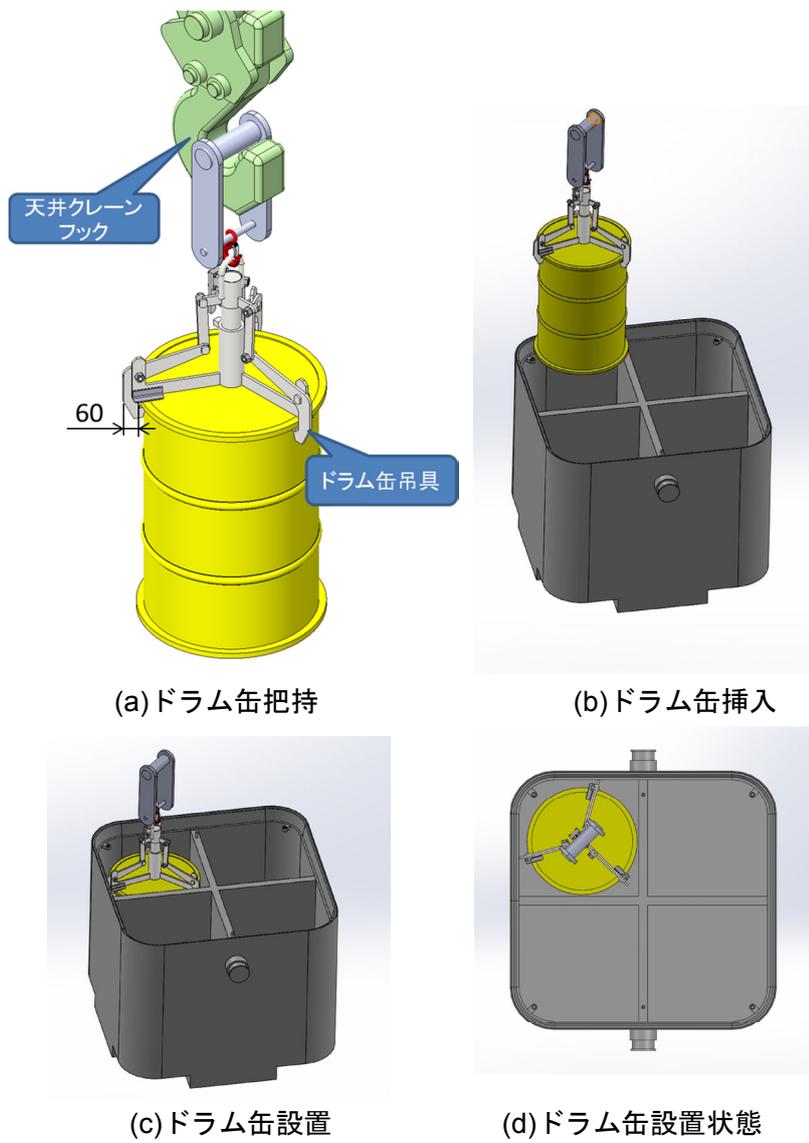


図 2.1-20 天井クレーンによるドラム缶の搬送イメージ

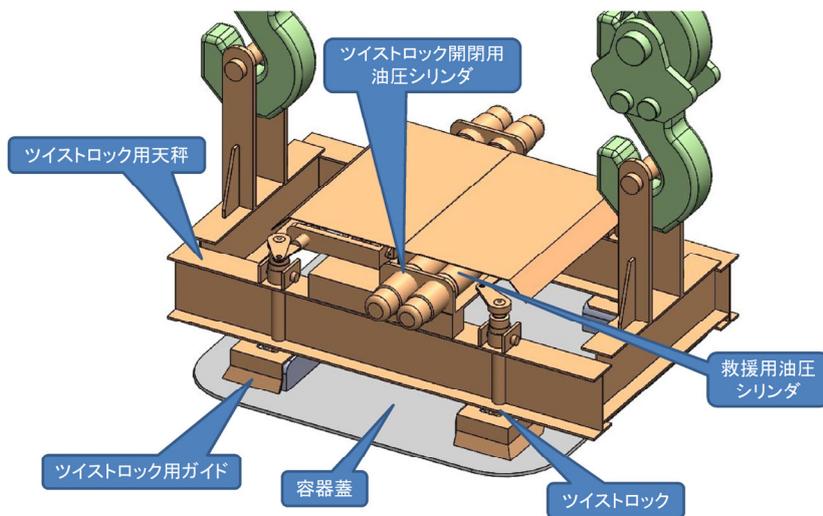


図 2.1-21 天井クレーンによる容器蓋の搬送イメージ

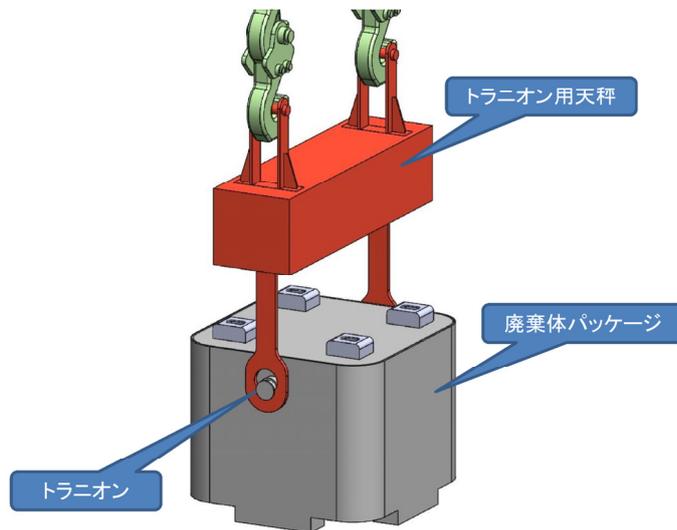


図 2.1-22 天井クレーンによる容器本体の搬送イメージ

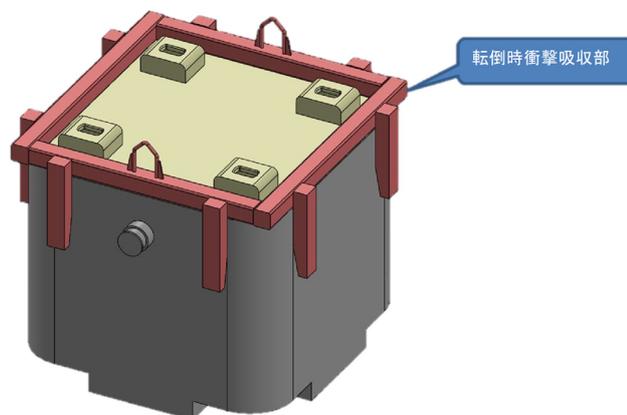


図 2.1-23 容器本体の落下時の衝撃吸収治具

② 蓋溶接設備

蓋溶接設備は、溶接を行う溶接装置および(必要に応じて)溶接部清掃装置にて構成される。

(a) 溶接装置

産業ロボットをベースに、先端部に溶接トーチを設置した構造とする。容器に対し対角に1対の溶接装置を配置し、各溶接装置により容器上面の蓋設置面を3辺(※)ずつ溶接する。溶接方法はTIG溶接とし、図 2.1-24に溶接装置の概念図を示す。なお、ロボット故障等の非常時には、ロボットの設置ベースを動作させるなどして、容器退避動線を確保する。

(※) 溶接の始末端は、他方の溶接端と角部以外の設置線上でラップさせる。そのため、各溶接装置により角部を除く3辺を溶接可能な仕様(アクセス範囲)とする。各溶接装置の溶接可能範囲を図 2.1-25に示す。

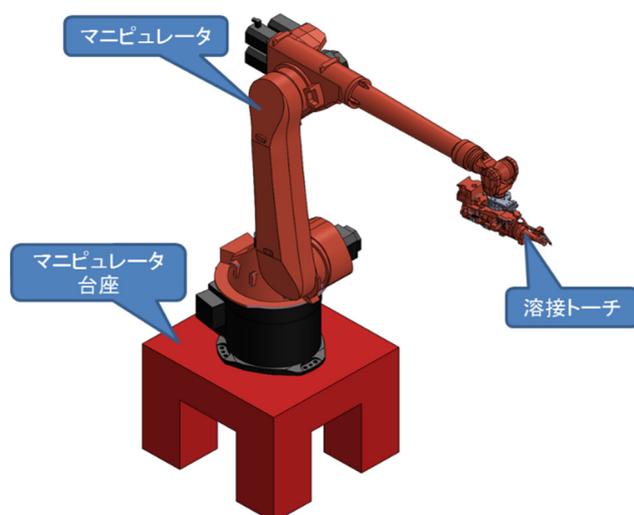


図 2.1-24 溶接装置の概念図

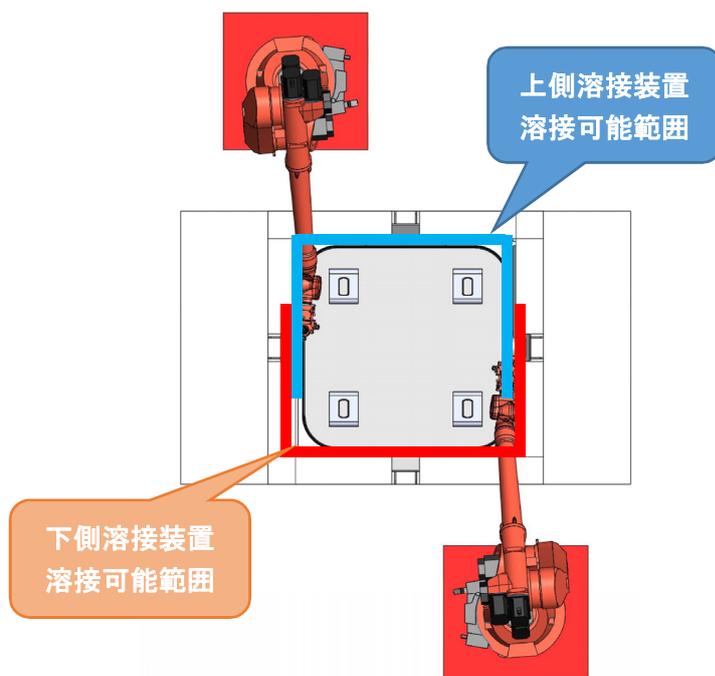


図 2.1-25 溶接装置の溶接可能範囲(清掃装置は省略)

(b) 溶接部清掃装置

スパッタやスラグの除去が必要な場合は、必要に応じて溶接部清掃装置を設置する。本装置は、溶接装置と同様に産業ロボットをベースとした構造とし、スパッタやスラグを除去することができるよう、先端ツールとしてワイヤブラシ等を設置可能な仕様とする。溶接装置と同様に容器に対し対角に1対（計2基）設置し、溶接装置とは対に配置する。これにより、廃棄体パッケージを移動させることなく、各層溶接後に清掃をすることが可能となる。図 2.1-26に溶接部清掃装置の概念図を、図 2.1-27に蓋溶接設備における溶接装置と清掃装置の配置を示す。

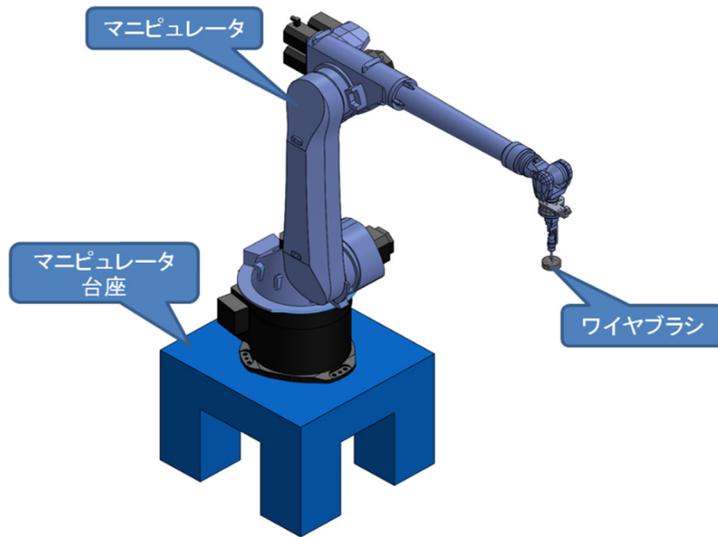


図 2.1-26 溶接部清掃装置の概念図

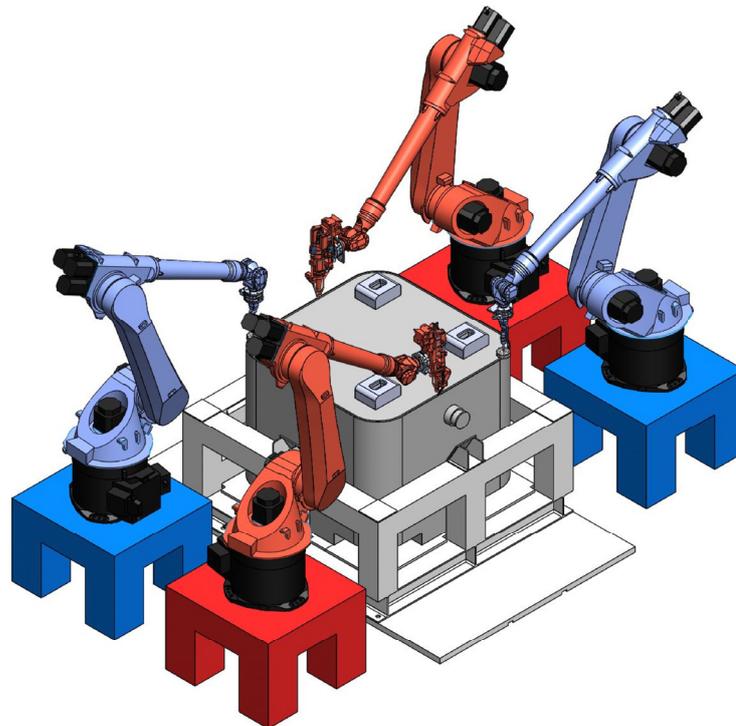


図 2.1-27 蓋溶接設備における溶接装置と清掃装置の配置

(c) ボルト締結装置

産業ロボットをベースとした構造とする（図 2.1-28、図 2.1-29参照）。

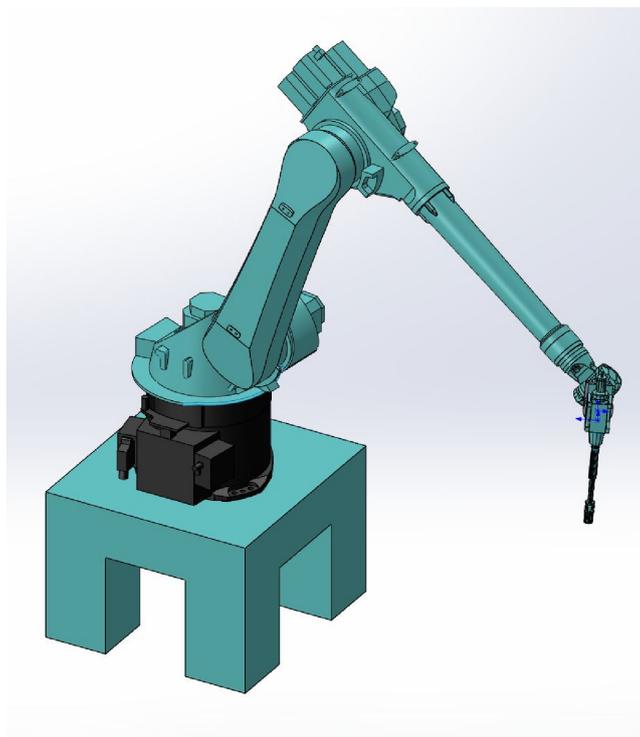


図 2.1-28 遠隔ボルト締結装置概念図

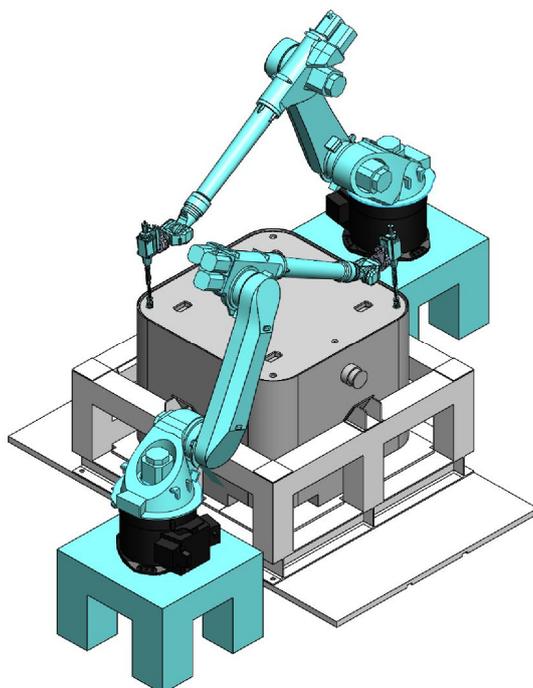


図 2.1-29 ボルト締結装置によるボルト締結イメージ

③ 溶接部検査設備

溶接部検査方法は、カメラを通じた VT による表面検査および EMAT(電磁超音波) ※による体積検査を検討している。検査は産業ロボットの先端に検査装置をもたせることで実施する。図 2.1-30 に溶接部検査装置の概念図を示す。

※電磁場を通じて金属中で、超音波を発生させ、溶接欠陥を見つける検査方法。

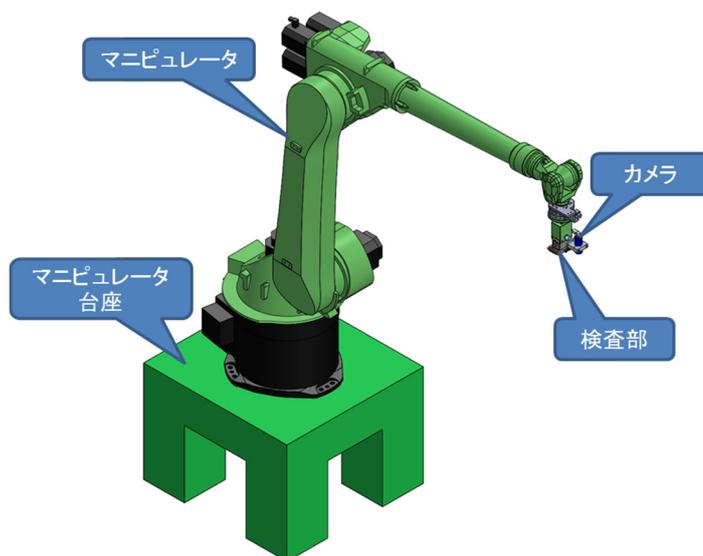


図 2.1-30 溶接部検査装置の概念図

④ 解体設備

不合格廃棄体パッケージの解体～容器内廃棄体取出しのため、解体設備を設ける。解体作業は、遠隔操作可能なロボット(マニピュレータ)にレーザ切断機等の切断ツールを設置した装置にて実施する。解体装置は内部の廃棄体を損傷させることなくパッケージ容器のみを解体できる装置とするが、万が一の廃棄体の損傷を想定した汚染管理が可能な設備とする。また、その他切断片の回収装置や容器内廃棄体の清掃装置等も必要となる。図 2.1-31 に溶接部解体装置の概念図を示す。

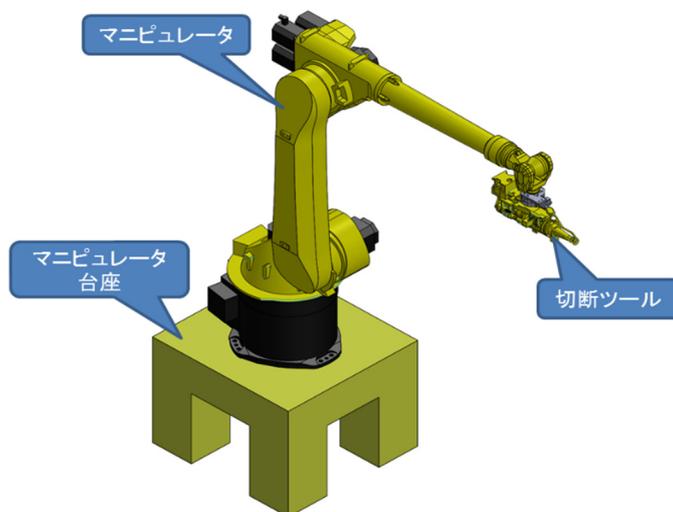


図 2.1-31 溶接部解体装置の概念図

⑤ 廃棄体パッケージ輸送車両

輸送車両は、蓋溶接済みの廃棄体パッケージを坑底施設まで輸送する際に用いられる。荷台には遮へい容器を搭載し、廃棄体パッケージ搭載時でも人が近づける程度まで放射線量を下げることができる。遮へい容器蓋および廃棄体パッケージのハンドリングは、地上施設および坑底施設の天井クレーンを用いる。図 2.1-32 に廃棄体パッケージ輸送車両の概念図を示す。

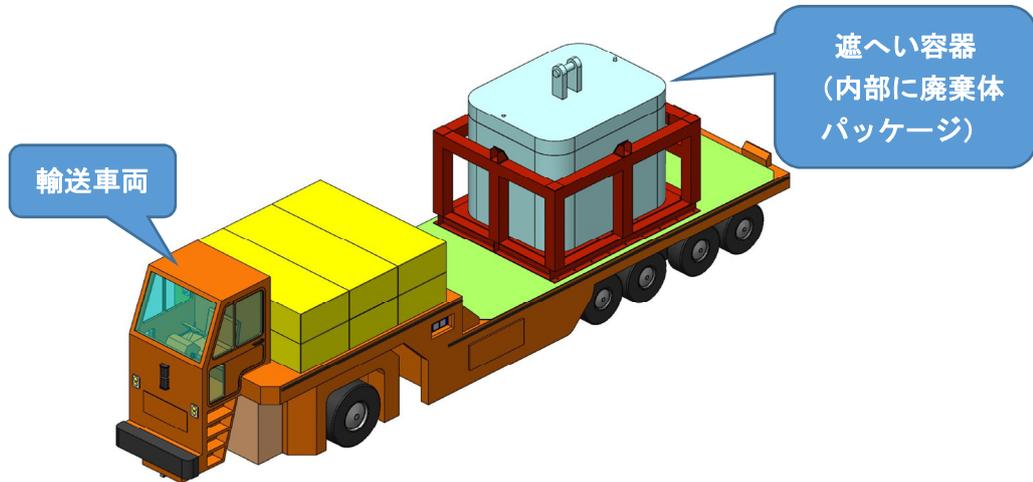
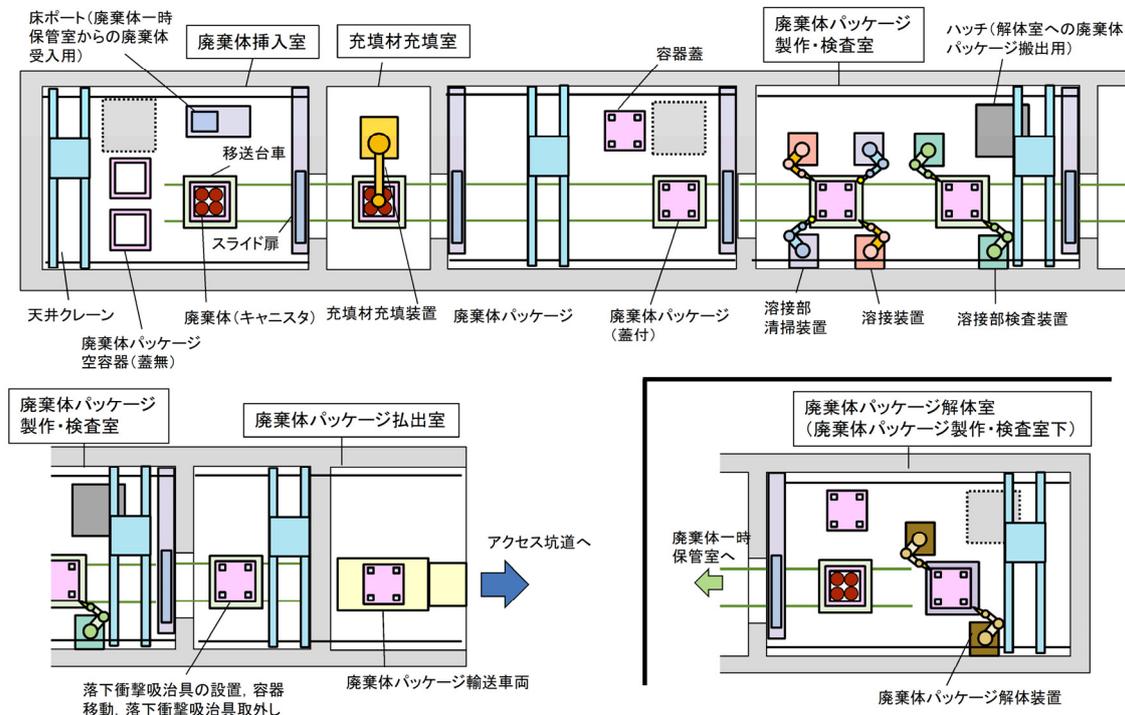


図 2.1-32 廃棄体パッケージ輸送車両の概念図

2) 施設内装置配置

前項までの検討を踏まえ、TRU 廃棄物 (TRU 廃棄体パッケージ B 容器) の地上施設 (受入・検査・封入) における施設内装置配置概略を図 2.1-33 に、3D 図を図 2.1-34 に示す。



※熱処理については、検討中のため本概略図には含んでいない。

※充填材は PCa とする。ドラム缶の固定については検討が必要である。

図 2.1-33 TRU 廃棄物 (廃棄体パッケージ B 容器) 地上施設内装置配置概略

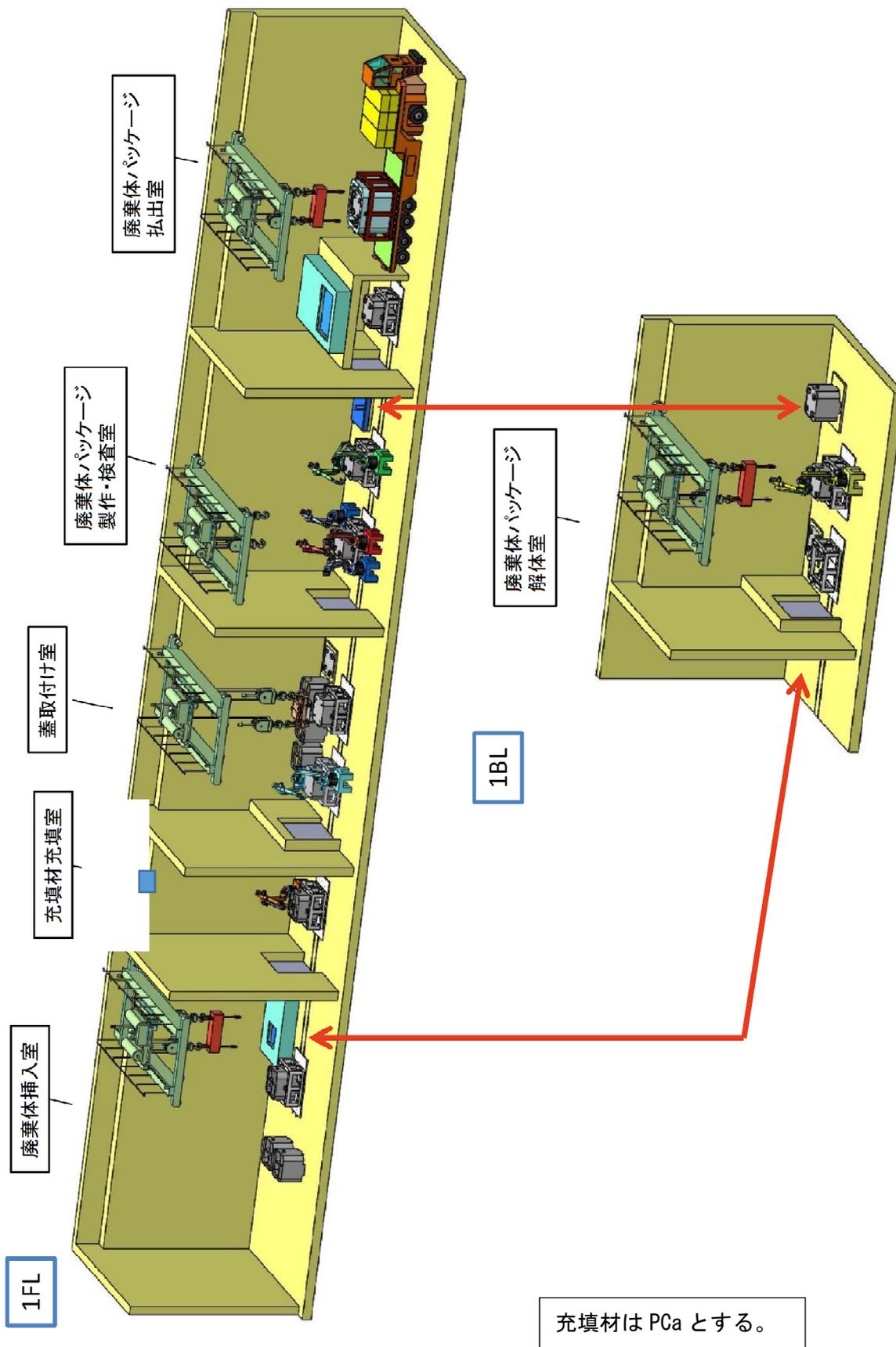


図 2.1-34 TRU 廃棄物（廃棄体パッケージB容器） 地上施設内装置配置概略(3D)

3) 製作手順（詳細）

前述の検討結果を踏まえ、廃棄体パッケージ B の空容器の受入れから定置までの製作手順について、詳細化した 2D 図を図 2.1-35(1/8)～(8/8)、3D 図を図 2.1-36(1/8)～(8/8)に示す。

なお、熱処理については、検討中のため本手順図には含んでいないものとする。

1. 容器受入～廃棄体充填

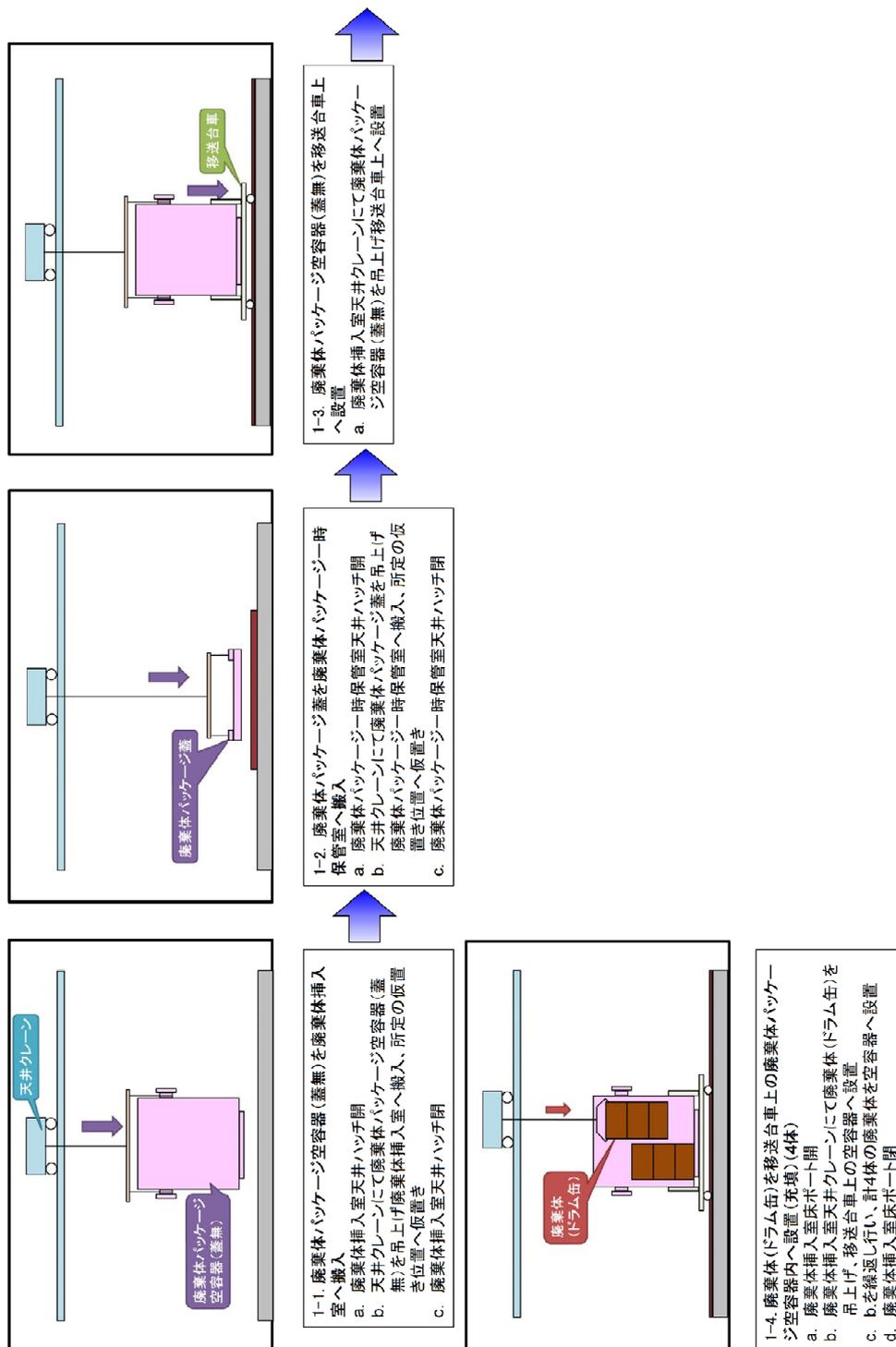
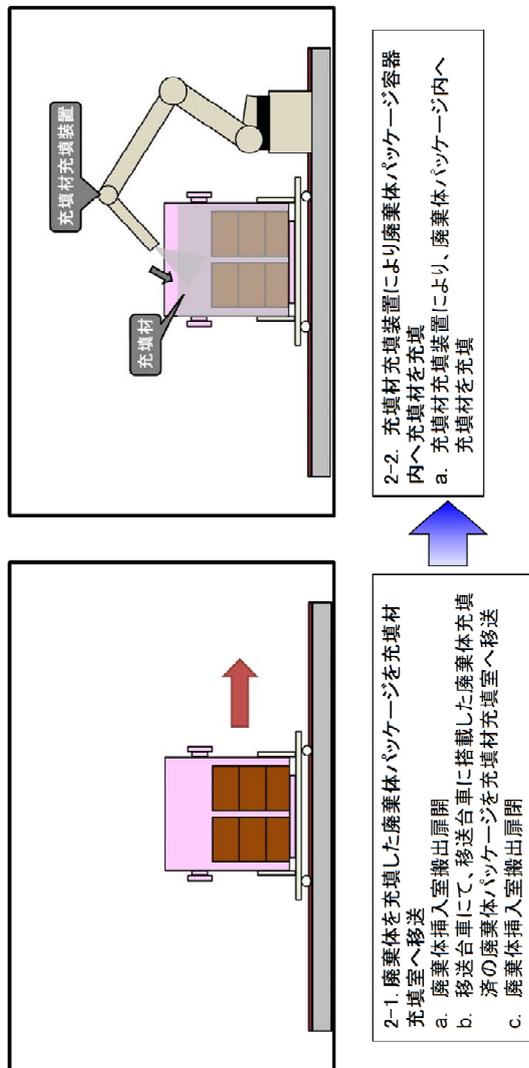


図 2.1-35 廃棄体パッケージ B 製作手順図 (2D) (1/8)

2. 内部充填材充填



※充填材については、PCaとする。なお、ドラム缶の 固定方法については検討が必要である。

図 2.1-35 廃棄体パッケージB 製作手順図 (2D) (2/8)

3. 容器蓋閉

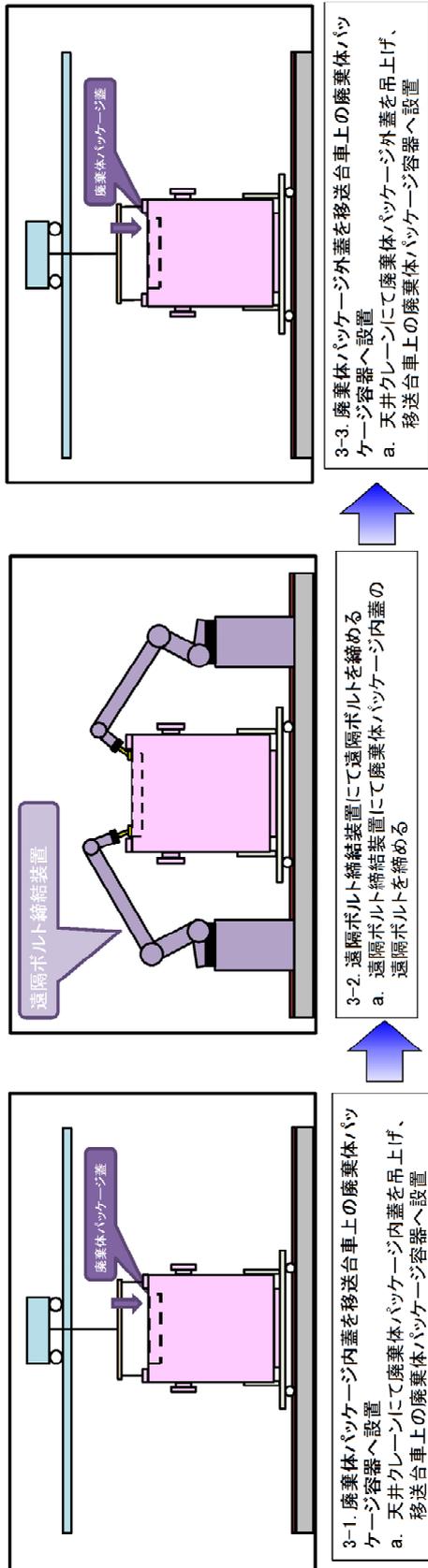


図 2.1-35 廃棄体パッケージB 製作手順図 (2D) (3/8)

4. 蓋溶接

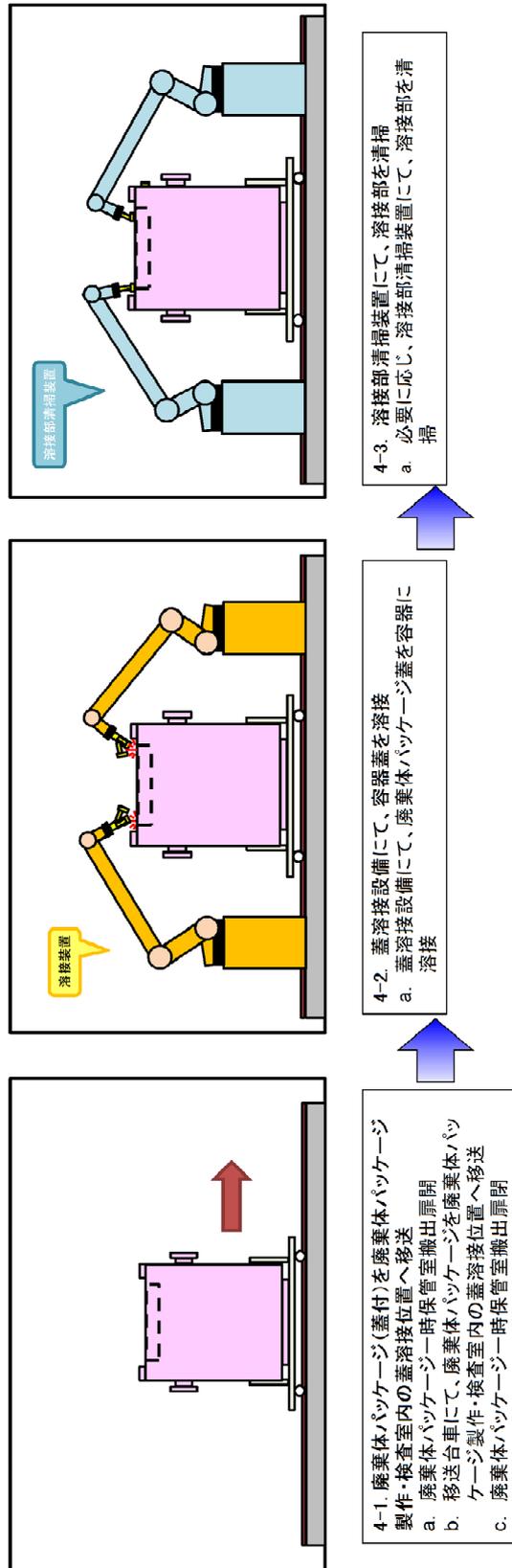


図 2.1-35 廃棄体パッケージB 製作手順図 (2D) (4/8)

5. 検査

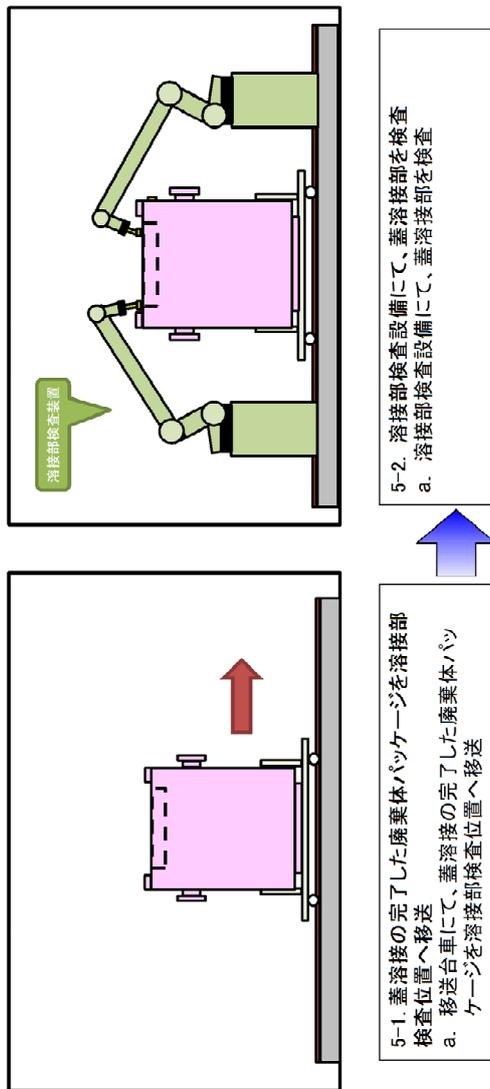


図 2.1-35 廃棄体パッケージB 製作手順図 (2D) (5/8)

6. 払出し～輸送

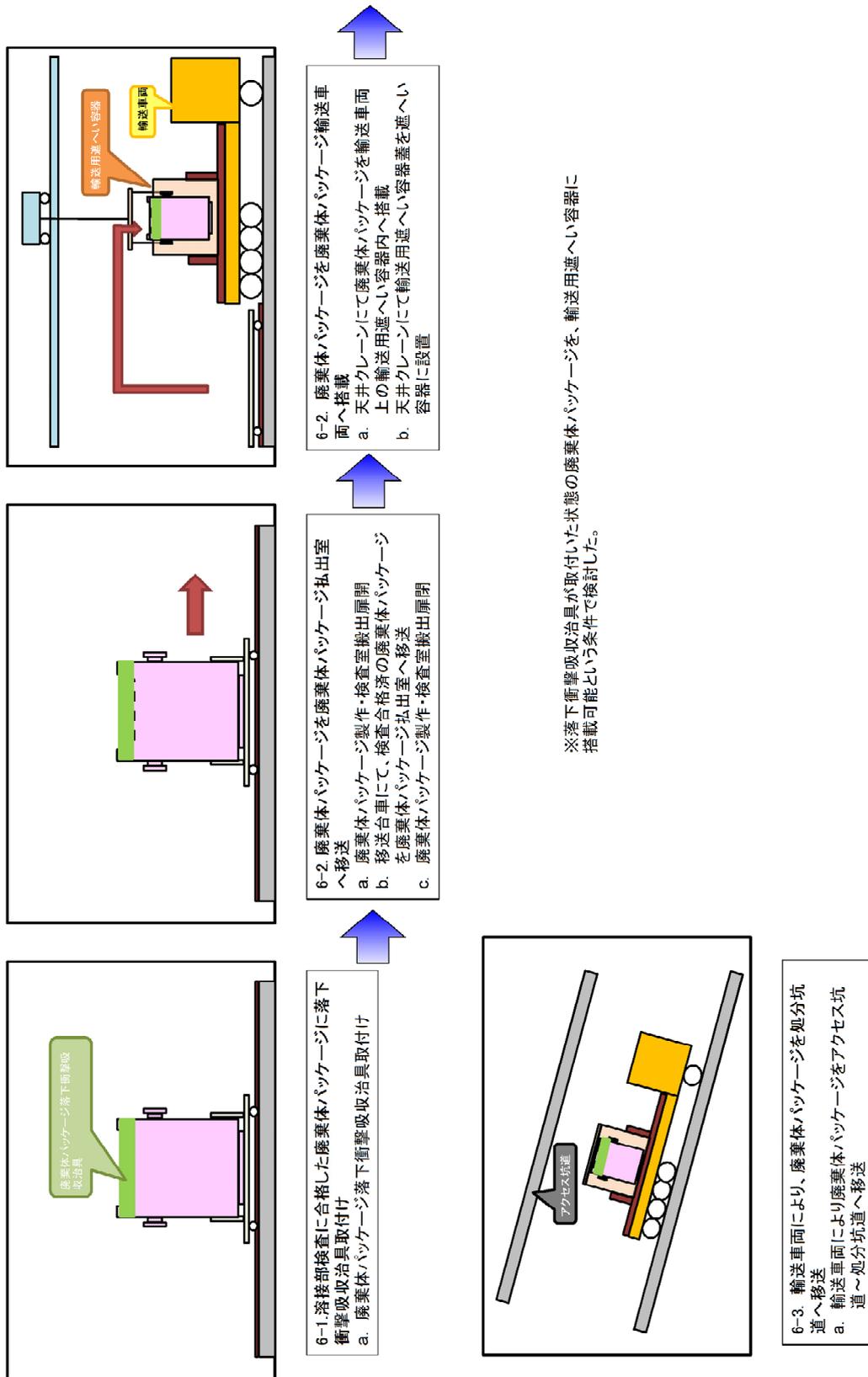


図 2.1-35 廃棄体パッケージB 製作手順図 (2D) (6/8)

7. 定置

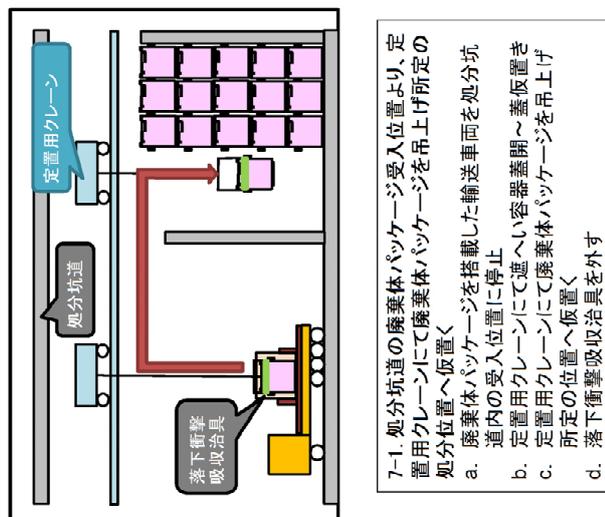


図 2.1-35 廃棄体パッケージB 製作手順図 (2D) (7/8)

8. 廃棄体パッケージ解体

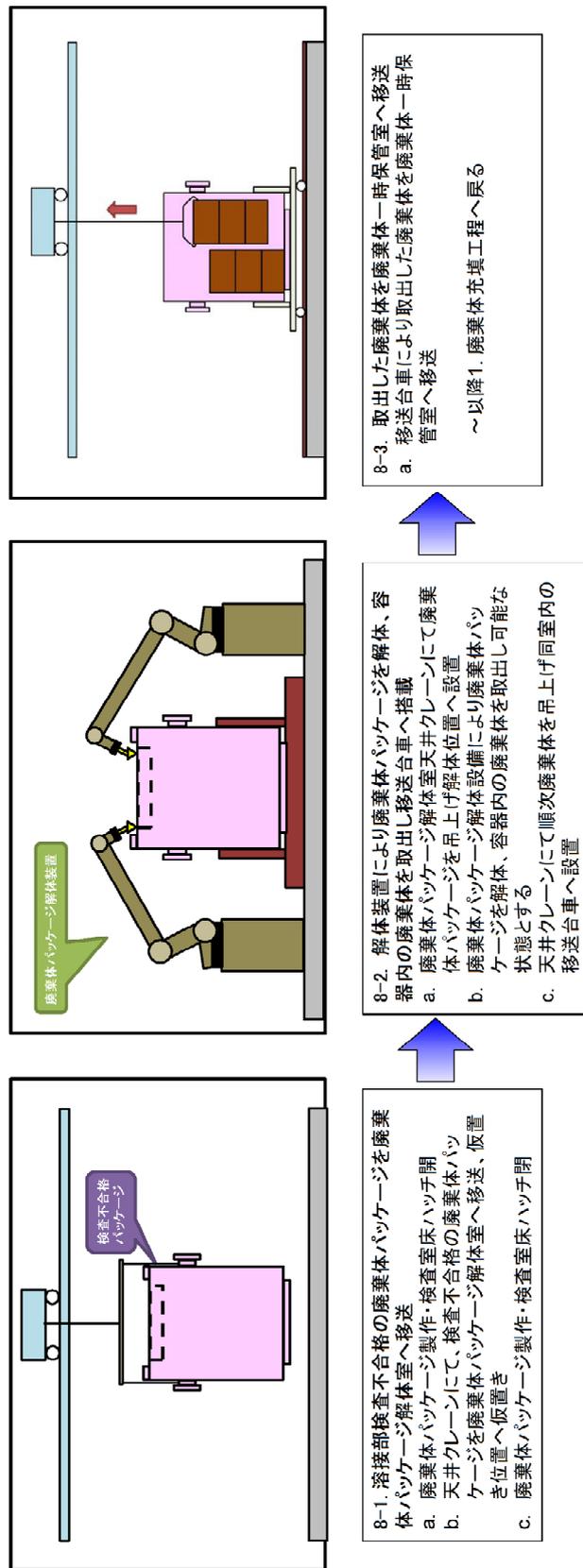


図 2.1-35 廃棄体パッケージB 製作手順図 (2D) (8/8)

1. 容器受入～廃棄体充填

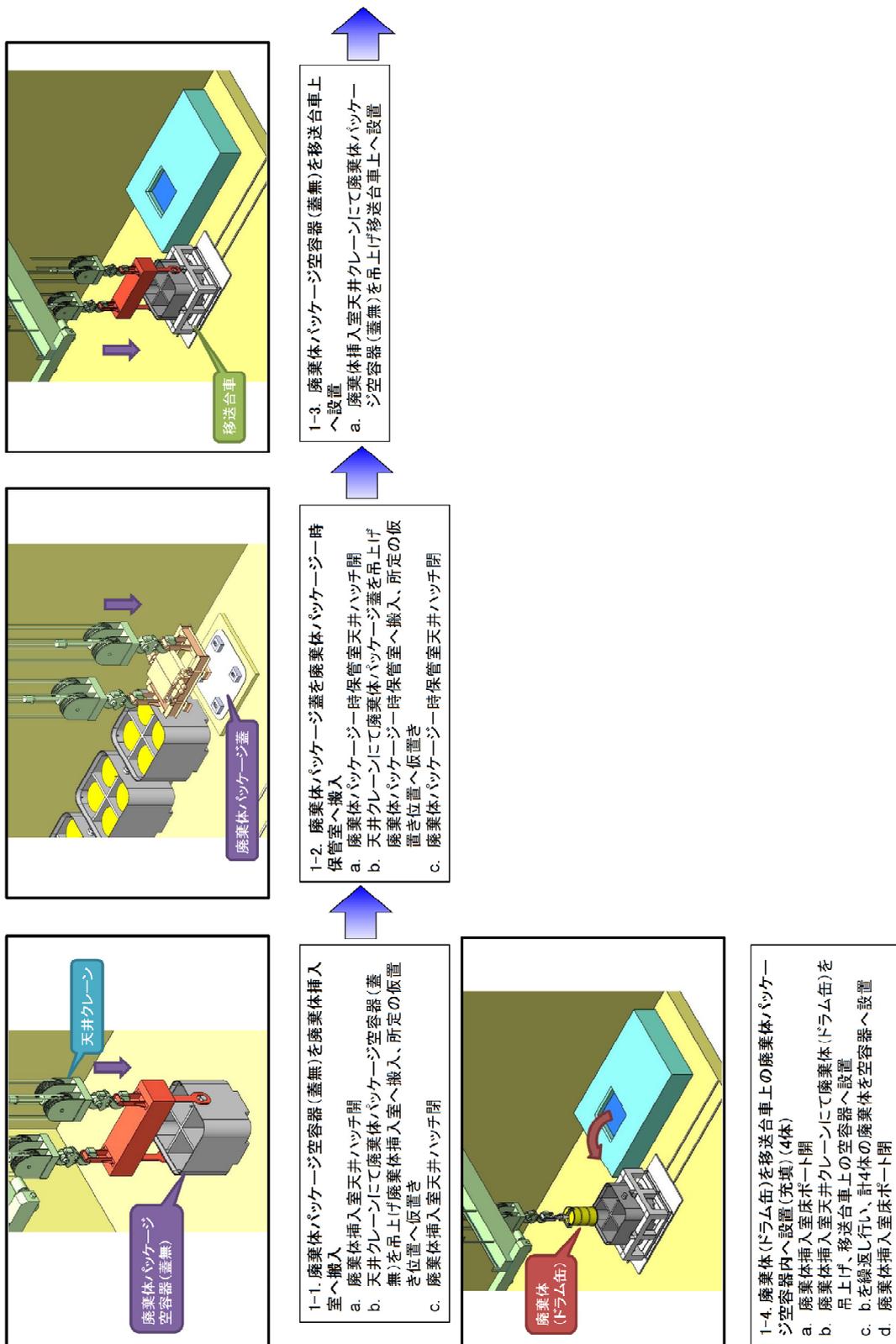
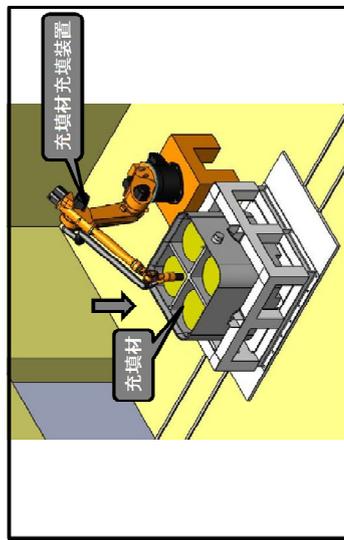


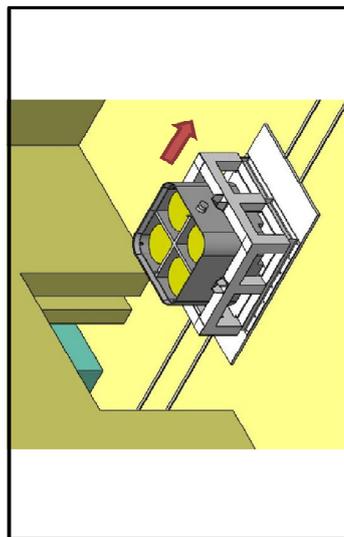
図 2.1-36 廃棄体パッケージB 製作手順図 (3D) (1/8)

2. 内部充填材充填



2-2. 充填材充填装置により廃棄体パッケージ容器内へ充填材を充填
 a. 充填材充填装置により、廃棄体パッケージ内へ充填材を充填

※充填材については、PCaとする。なお、ドラム缶の固定方法については検討が必要である。



2-1. 廃棄体を充填した廃棄体パッケージを充填材充填室へ移送
 a. 廃棄体挿入室搬出扉開
 b. 移送台車にて、移送台車に搭載した廃棄体充填済の廃棄体パッケージを充填材充填室へ移送
 c. 廃棄体挿入室搬出扉閉

図 2.1-36 廃棄体パッケージB 製作手順図 (3D) (2/8)

3. 容器蓋閉

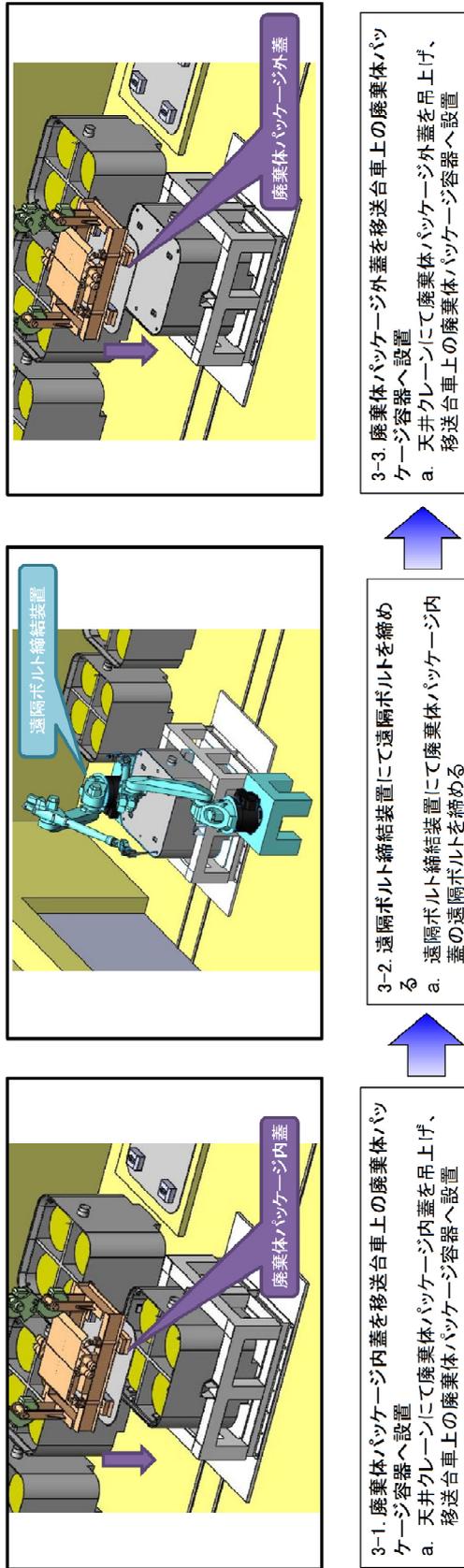


図 2.1-36 廃棄体パッケージB 製作手順図 (3D) (3/8)

4. 蓋溶接

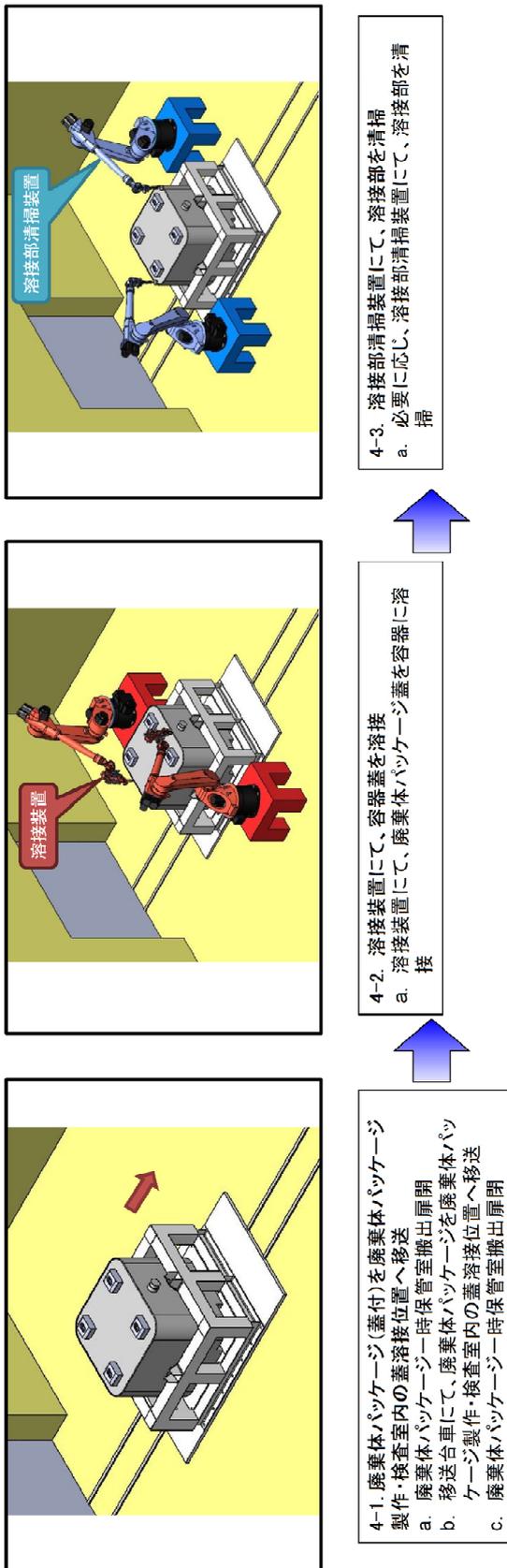


図 2.1-36 廃棄体パッケージB 製作手順図 (3D) (4/8)

5. 検査

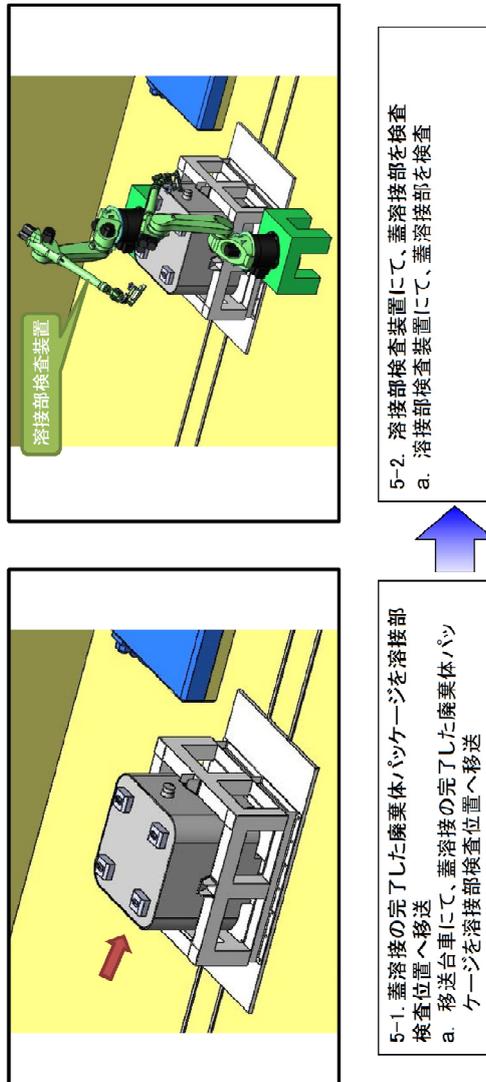


図 2.1-36 廃棄体パッケージB 製作手順図 (3D) (5/8)

6. 払出し～輸送

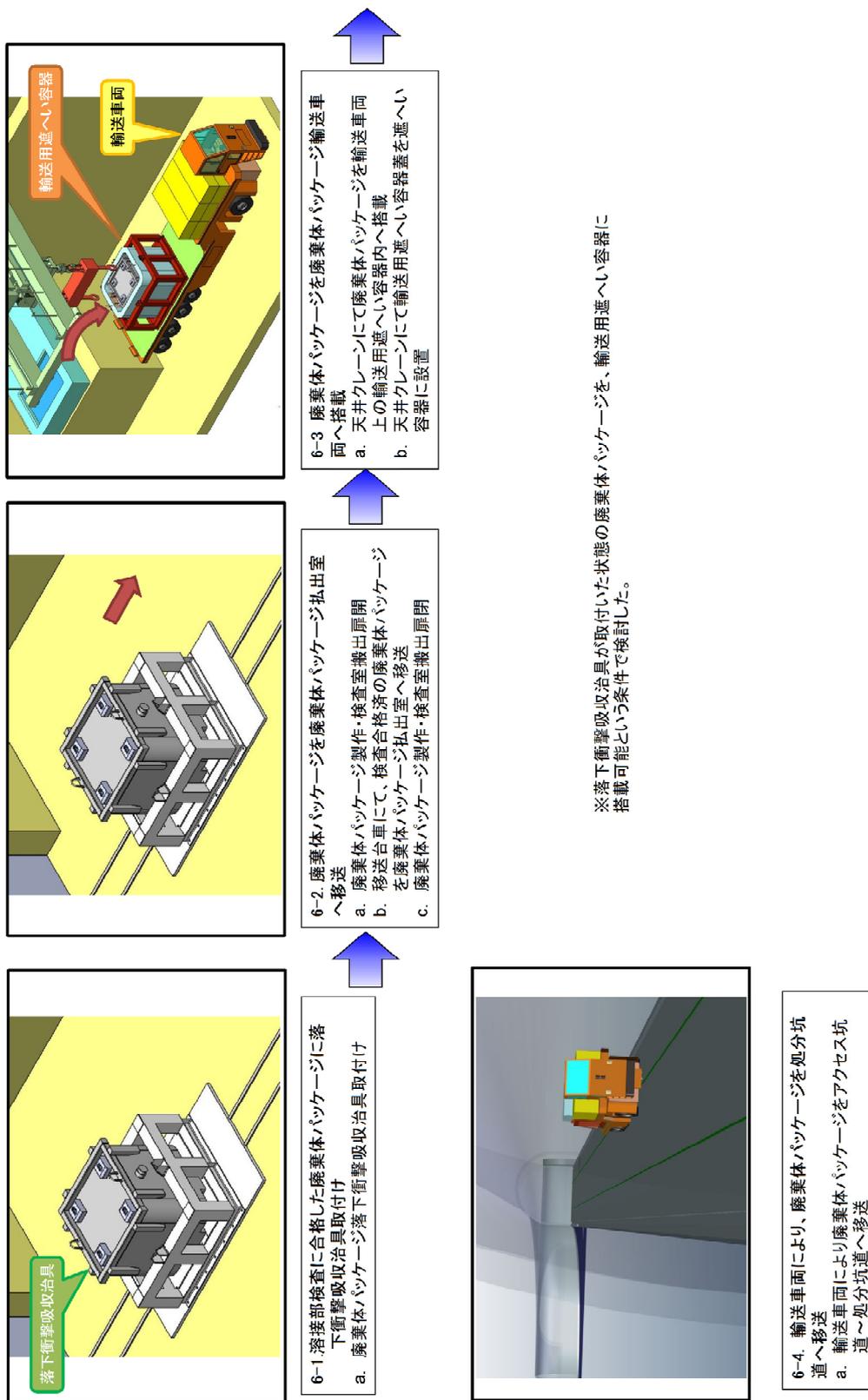


図 2.1-36 廃棄体パッケージB 製作手順図 (3D) (6/8)

7. 定置

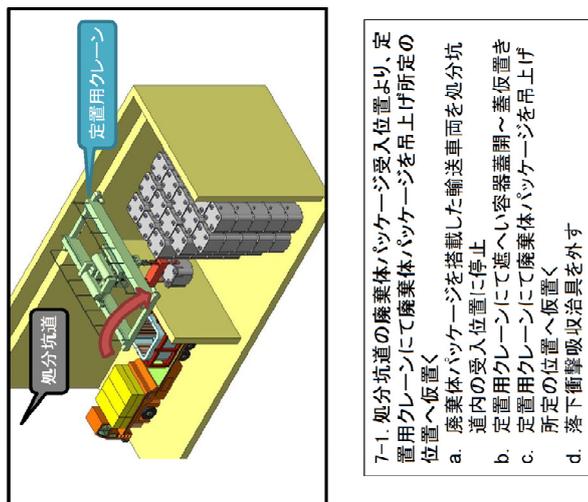


図 2.1-36 廃棄体パッケージB 製作手順図 (3D) (7/8)

8. 廃棄体パッケージ解体

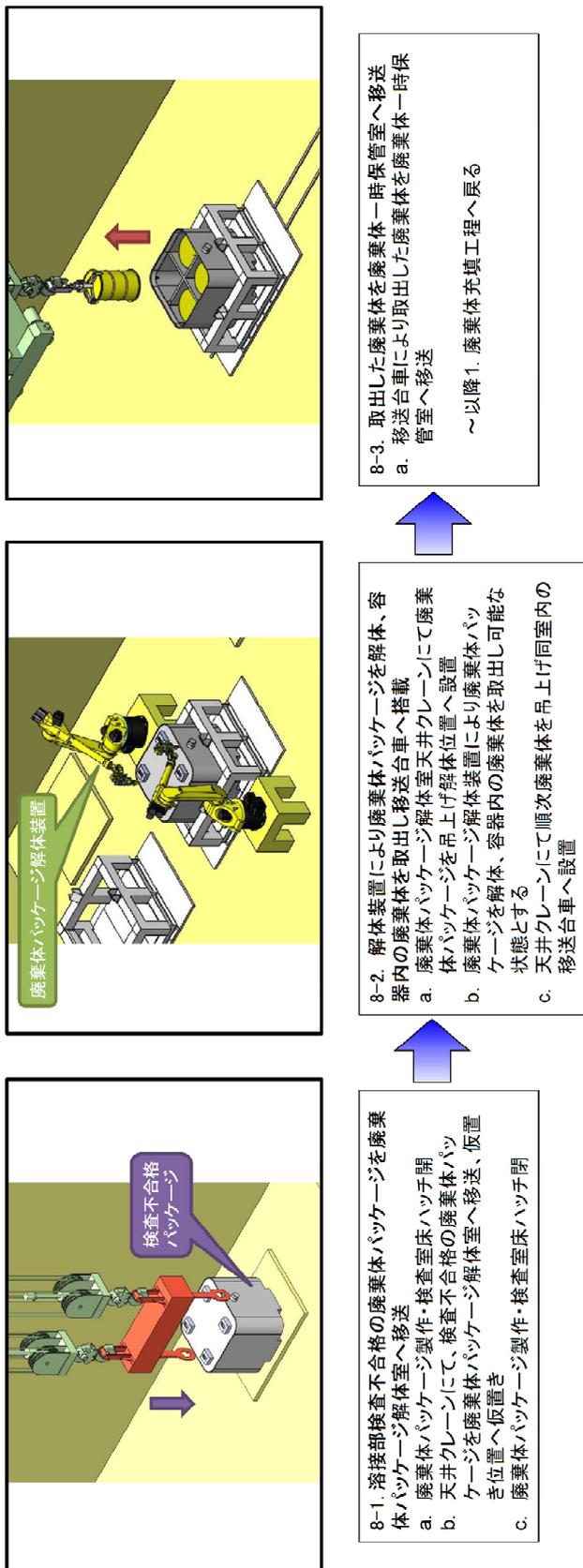


図 2.1-36 廃棄体パッケージB 製作手順図 (3D) (8/8)

(5) まとめと今後の課題

本年度は、廃棄体パッケージ B 容器に関する前提条件を設定したうえで、2重蓋構造に対する遠隔製作性を考慮した構造および製作手順を検討した。

検討の結果、遠隔製作性を考慮した構造について、容器本体、内蓋および外蓋の有力な構造案を示した。ただし、内圧に対する考慮が必要になった場合には、気密確保のための構造検討及びボルト締結の可否検討等を実施する必要があると考えられる。また、落下事象対策を含めた内蓋の固定が必要になった場合に備え、遠隔ボルト締結の適用可能性を検討し、締結が必要な場合は内蓋構造の見直し、または締結ボルトに関する開発の実施が必要であることを示した。

遠隔製作性を考慮した製作手順について、製作に必要な設備や取扱いに必要な器具等を検討し、成立性を示した。ただし、SR の実施有無や充填材の仕様（内部充填率および PCa の製作精度など）が具体化した段階で、本検討結果に対する影響を評価する必要がある。

2.1.3 溶接条件の検証詳細

本項では、本編 2.1.2(4)「溶接条件の検証」に補足的な図表等を追記し、詳細に記述する。

1) 目的

本年度に検討した容器構造（平蓋構造及び2重蓋構造）に対する溶接方法（LAH 溶接及び TIG 溶接）について溶接条件を選定し、その妥当性を検証することを目的とする。

なお、伝熱解析時に必要となる熱効率を算出するための、溶接時の温度計測も実施する。

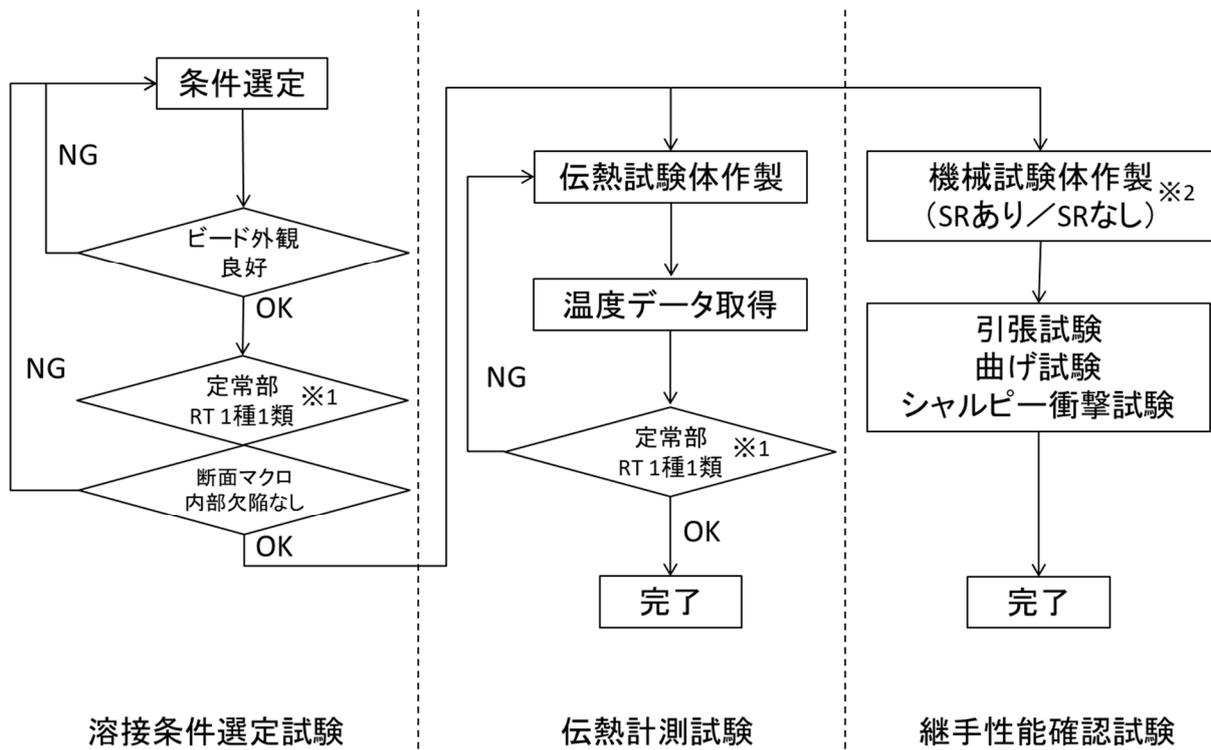
2) 試験フロー

試験フローを図 2.1-37 に示す。

溶接条件選定試験は、ビード外観は不連続箇所、オーバーラップの無い条件で、かつ断面マクロ試験での無欠陥を満足できる条件を選定する。なお、LAH 溶接については、定常部（スタート部、エンド部の 50mm を除去した範囲）での放射線透過試験（以下「RT」という）を実施し、判定基準を満足することを確認する。

伝熱計測試験では、伝熱解析時に必要となる熱効率を算出するため、選定した溶接条件における溶接時の温度計測を実施する。

継手性能試験では、選定した溶接条件での SR の有無における溶接継手の機械的性質（引張強度、曲げ強度、シャルピー衝撃値）を確認する。



※1: 定常部 RT は LAH 溶接に対して実施する。(TIG 溶接は溶接品質が良いため実施不要とする。)

※2: 継手性能試験体の試験片採取前に RT を実施し、健全部を供する。

図 2.1-37 溶接条件検証の試験フロー図

3) 試験内容及び試験結果（平蓋構造）

(a) 溶接条件選定試験

(i) 試験内容

開先形状は Y 型とし、初層ルート部はレーザーメインによる深溶込み溶接を行い、残層をアークメインでの積層溶接を行う。溶接条件選定試験体の形状を図 2.1-38 に示す。直接レーザー光が貫通しないように、裏面には母材と同材質の当て板を設置した。その他の試験仕様を以下に示す。

- ・材質：SM400B
- ・溶接材料： JIS 3312 YGW16 MG-50（ワイヤ径 ϕ 1.2mm）
- ・溶接姿勢：横向き水平

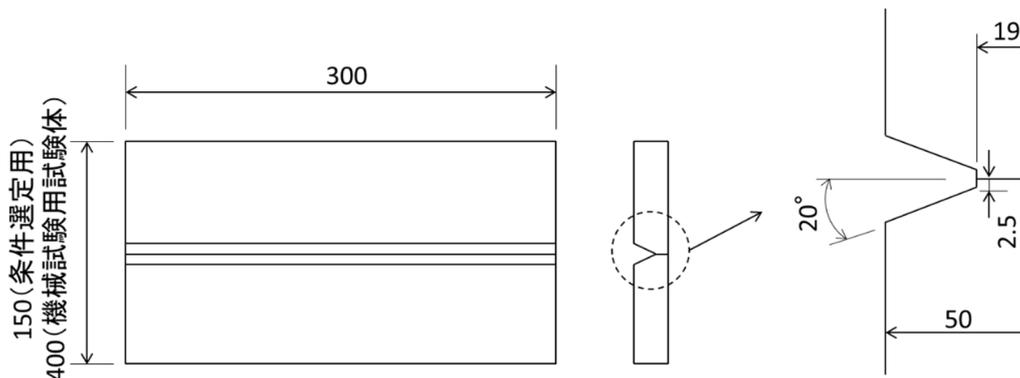


図 2.1-38 条件選定用試験体形状（平蓋構造）

(ii) 試験結果

選定した溶接条件を表 2.1-8 に示す。初層 LAH のアーク溶接電流については、施工可能な電流値範囲としては平成 30 年度の結果からも 100~250A であるが、横向き姿勢であること、容器内部の昇温を防ぐとの理由から 100A での施工とした。

試験の結果、平成 30 年度の下向き施工と比較し、スパッタが多くレンズの保護ガラスへの付着が散見された。スパッタがレーザー光の経路に付着した場合、保護ガラスが溶け落ち、レンズへの損傷が懸念されるだけではなく、母材への入熱も低減し、溶込み深さが浅くなるため、スパッタ対策が必要な場合がある。一方で、溶接長が 300mm 未満である場合には、スパッタの影響は少なく、条件選定のための継手を製作することができた。

試験体のビードは良好であることを確認した。ビード外観を図 2.1-39 に示す。

放射線透過試験の結果、評価部である溶接定常部において無欠陥の継手が得られ（フィルムは図 2.1-40 参照）、断面マクロ観察においても、有害なきず等は見受けられなかった（図 2.1-41 を参照）。よって、伝熱試験及び継手性能試験に進むこととした。

表 2.1-8 条件選定用試験体 溶接条件（平蓋構造）

初層	残層(8層29パス)
施工法: LAH	施工法: GMAW
レーザー出力: 16kW	アーク電流: 180-250A
溶接速度: 30cm/min	アーク電圧: 22-28V
アーク電流: 100A	溶接速度: 39-49cm/min
アーク電圧: 18.3V	

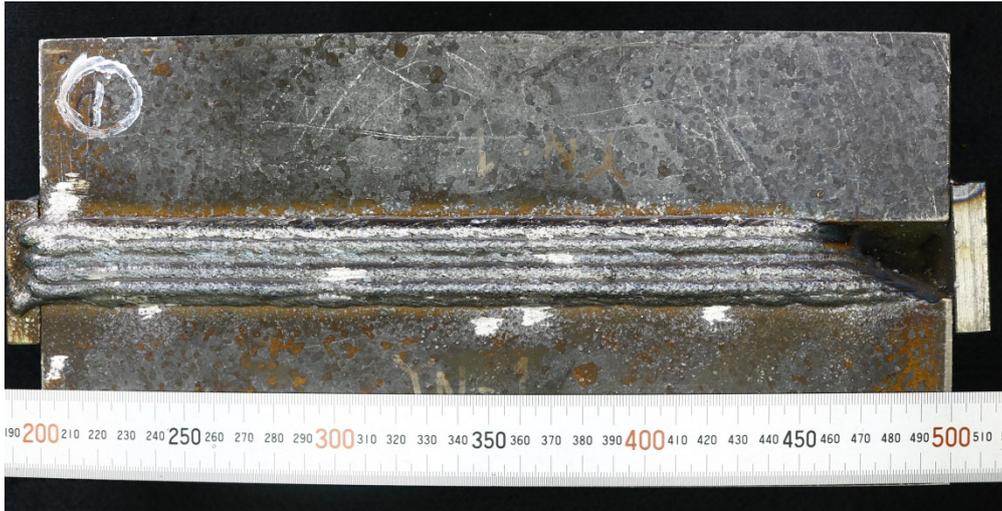


図 2.1-39 条件選定用試験体のビード外観（平蓋構造）

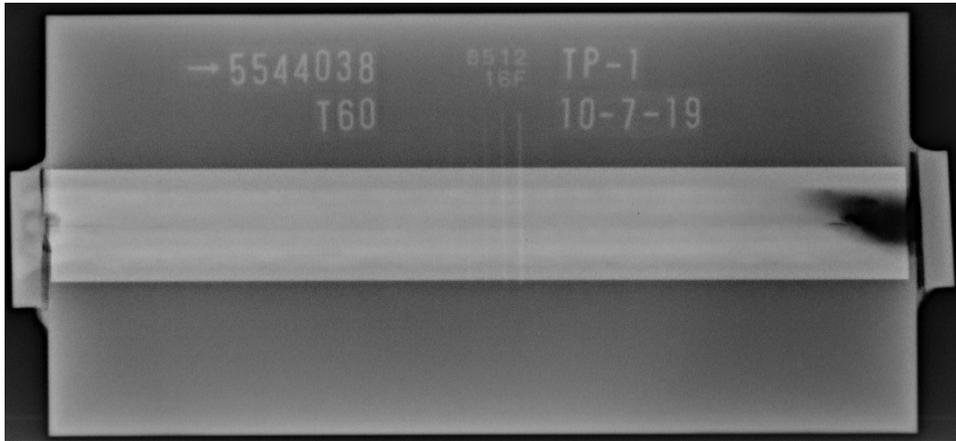


図 2.1-40 条件選定要試験体 RT フィルム（平蓋構造）

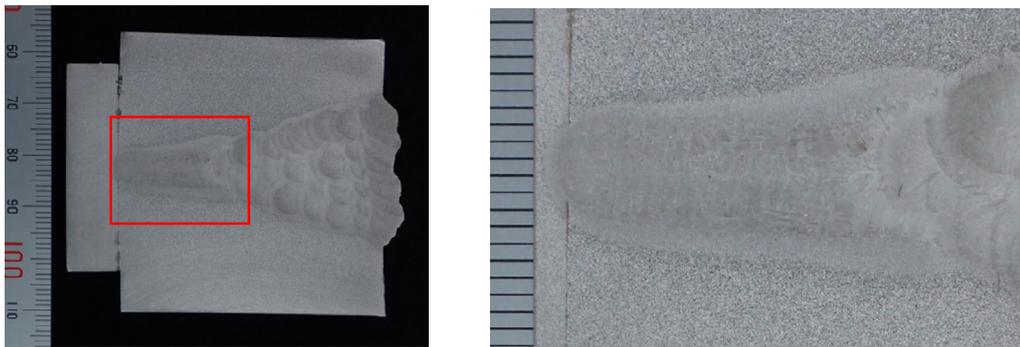


図 2.1-41 条件選定用試験体断面マクロ（平蓋構造）

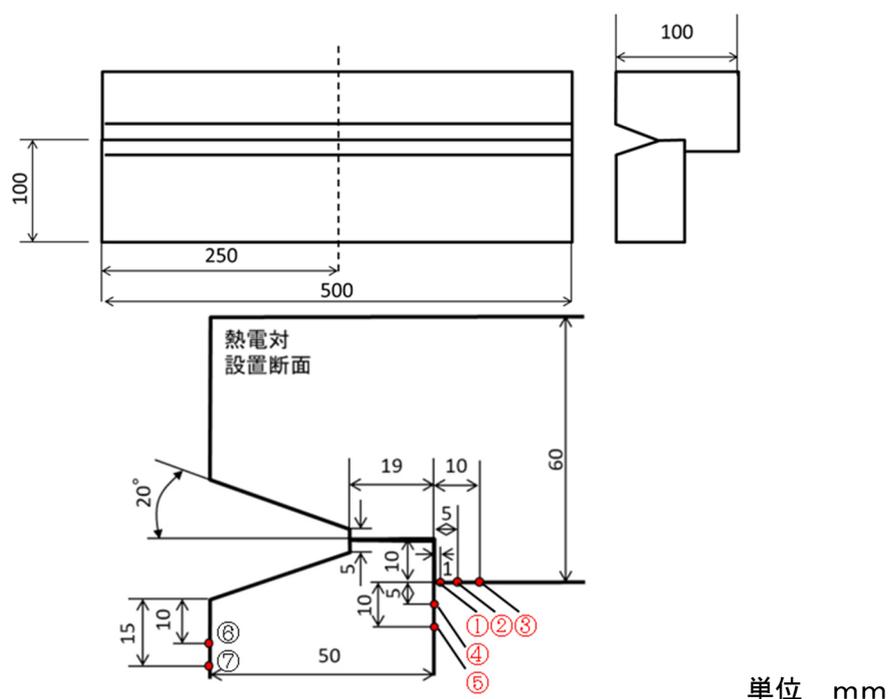
(b) 伝熱計測試験

(i) 試験内容

試験体形状及び熱電対設置位置を図 2.1-42 に示す。形状は蓋接合部を模擬した角継手とし、熱電対は K 熱電対を用いる。適用する溶接条件は前項で選定した溶接条件を基に選定する(表 2.1-9 を参照)。温度計測の健全性確認のため、残層を溶接した試験体 1 体(TM-1)と初層のみ溶接を実施した試験体(TM-3)を 1 体製作する。残層の MAG 溶接は多層盛りであり、前パスの形状等が必ずしも同じになると限らないため、適宜適正な条件に変更し実施する。

ただし、遠隔自動溶接の場合には、外乱等によりビード形状が変化した場合の積層について、今後検討する必要がある。

初層及び積層溶接時の温度を計測する。図 2.1-43 に熱電対の貼り付け状況を示す。パス間温度は平成 30 年度に実施した温度計測と条件を揃えて 100℃未満とし、製作した継手は外観検査及び放射線透過試験を実施する。



(●は熱電対貼付位置示す)

図 2.1-42 伝熱試験体形状及び熱電対貼付位置 (平蓋構造)

表 2.1-9 伝熱試験体 溶接条件 (平蓋構造)

初層	残層(8層30/パス)
施工法: LAH	施工法: GMAW
レーザ出力: 16kW	アーク電流: 200-260A
溶接速度: 30cm/min	アーク電圧: 23-31V
アーク電流: 100A	溶接速度: 29.9-49cm/min
アーク電圧: 18.3V	

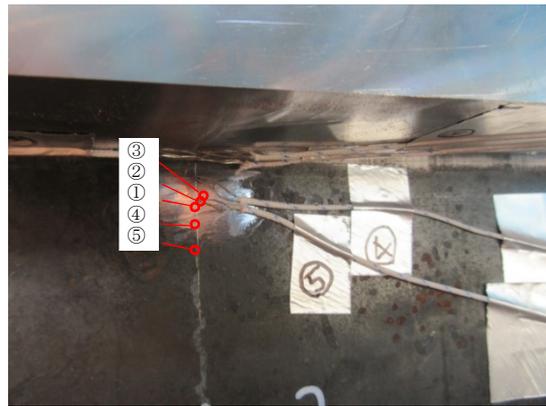


図 2.1-43 伝熱試験体熱電対貼付状況(TM-3) (平蓋構造)

(ii) 試験結果

伝熱試験体 TM-1 の外観写真を図 2.1-44 に、TM-1 及び TM-3 の初層の温度履歴を図 2.1-45 及び図 2.1-46 に示す。

試験体 TM-1、TM-3 のいずれも熱電対取付位置①(模擬胴のルート直下 1mm)で最高到達温度は 370°C程度となった。なお、放射線透過試験の結果は無欠陥であった。



図 2.1-44 伝熱試験体外観(TM-1) (平蓋構造)

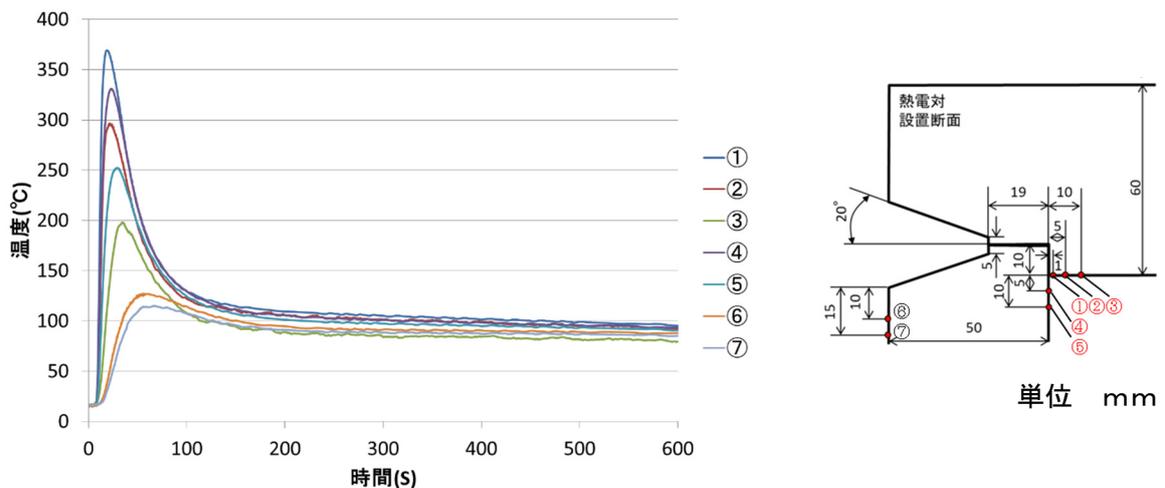


図 2.1-45 初層溶接時 温度履歴(TM-1) (平蓋構造)

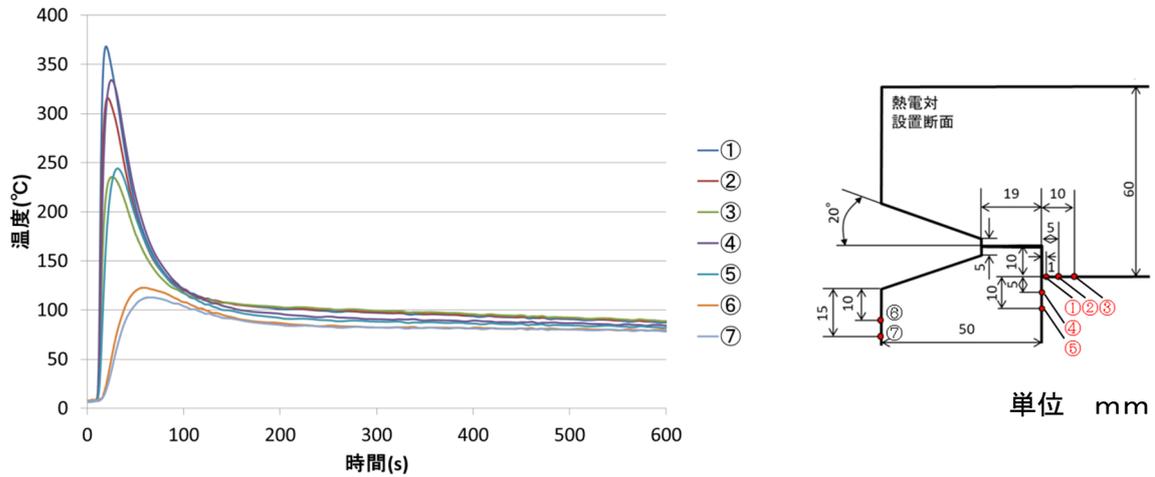


図 2.1-46 初層溶接時 温度履歴(TM-3) (平蓋構造)

(C) 継手性能確認試験

(i) 試験内容

継手性能確認試験に供する試験体の概要を表 2.1-10 に示す。SR の有無による継手性能への影響を確認するため、試験体 2 体を製作する。図 2.1-47 に示す試験体に表 2.1-11 に示す溶接条件にて溶接施工したのち、機械試験片採取及び機械試験に有害な溶接欠陥がないことを放射線透過試験 (RT) により確認する。その後、試験体 1 体 (MT-4) のみ SR を表 2.1-12 に示す条件にて実施する。

製作した試験体 MT-3 及び MT-4 に対して表 2.1-13 に示す継手性能確認試験を実施する。

表 2.1-10 継手性能確認試験体の概要 (平蓋構造)

符号	用途	材質	溶接部 厚さ	継手形状	溶接材料	SR
MT-3	継手性能 計測用 (SR なし)	SM400B	50t	Y 開先 図 2.1-38 参 照	JIS Z3312 YGW16 MG- 50	なし
MT-4	残留応力 計測用 (SR あり)				KOBELCO MG-50 φ1.2mm	595°C 120min ※1

※1JIS Z3700 に基づき、母材区分 P-1 材の最低保持温度は 595°C、溶接部厚さ 50mm に対する最小保持時間は $50 \div 25 = 2.0[\text{hr}] = 120[\text{min}]$ であるため 120min とする。

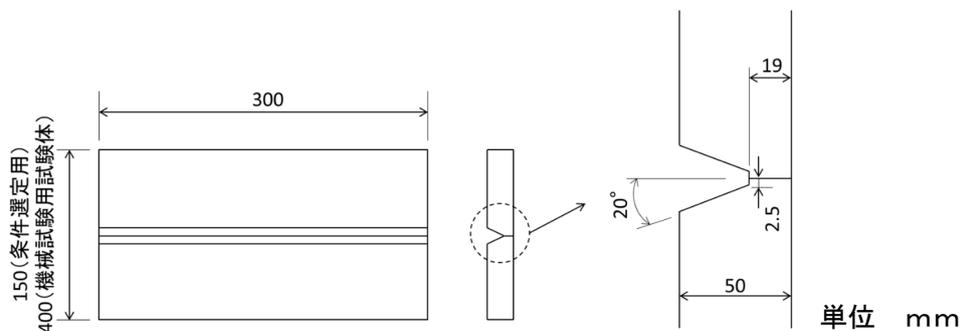


図 2.1-47 機械試験用試験体形状 (平蓋構造)

表 2.1-11 継手性能確認試験体 溶接条件（平蓋構造）

共通	MT-3	MT-4
初層	残層(8層30パス)	残層(8層30パス)
施工法:LAH	施工法:GMAW	施工法:GMAW
レーザ出力:16kW	アーク電流:200-260A	アーク電流:200-260A
溶接速度:30cm/min	アーク電圧:23-31V	アーク電圧:23-32V
アーク電流:100A	溶接速度:37.4-49cm/min	溶接速度:37.4-49cm/min
アーク電圧:18.3V	総入熱:261.1kJ/cm	総入熱:260.7kJ/cm

表 2.1-12 SR 条件（平蓋構造）

	SR 条件
加熱速度	110 [°C/hr] 以下
保持温度	595~620 [°C]
保持時間	120 [min] 以上
冷却速度	140 [°C/hr] 以下

表 2.1-13 継手性能確認試験（平蓋構造）

試験項目	試験片 本数	
引張試験	2 本	
引張試験 (SR 後)	2 本	
側曲げ試験	4 本※1	
マクロ試験	2 本	
シャルピー試験	溶接金属	6 本
	ボンド部※2	6 本
シャルピー試験 (SR 後)	溶接金属	6 本
	ボンド部※2	6 本

※1 溶接継手の欠陥により所定の本数が採取できなかったため SR 後からも採取

※2 LAH 溶接部はボンド部より 1mm 外側の位置、MAG 溶接部は溶接金属と HAZ が 1:1 となる位置から採取

(ii) 試験結果

試験体製作状況を図 2.1-38 に示し、ビード外観を図 2.1-49 に示す。

放射線透過試験の結果、MT-3、MT-4 のいずれにおいても線状欠陥指示が見受けられた（図 2.1-50 を参照）。欠陥部の MT-4 の断面マクロを図 2.1-51 に示す。欠陥の位置から、線状指示は凝固割れと推察される。溶接条件選定試験体及び伝熱試験体においても RT での指示がなかったことから、溶接条件の施工裕度が狭い、もしくは、継手性能評価用試験体特有の原因があると考えられる（拘束度、熱容量等）。継手性能評価には試験体の健全部を供した。

試験体 1 体 (MT-4) には SR を実施し、試験体 2 体について機械試験を実施した。断面マクロを図 2.1-52 に、側曲げ試験片外観を図 2.1-53 に、機械試験結果の一覧を表 2.1-14 に示す。

SR ありの側曲げ試験においてルート面近傍の凝固割れを起因とした 4mm の不合格きずが見受けられた。試験片採取位置に RT できずと判定される箇所が無いように採取したが、切断面にきずが重なってしまったものと推察される。それ以外の試験片ではいずれも合格であった。シャルピー衝撃試験においては SR なしでは積層施工部の溶接部は平均で 168J と良好な値を得た。

一方、初層施工部の溶接部は平均 74J と合格値ではあるが低下が見られた。



(a)試験体 MT-3

(b)試験体 MT-4(SR 前)

図 2.1-48 継手性能試験体の製作状況（平蓋構造）

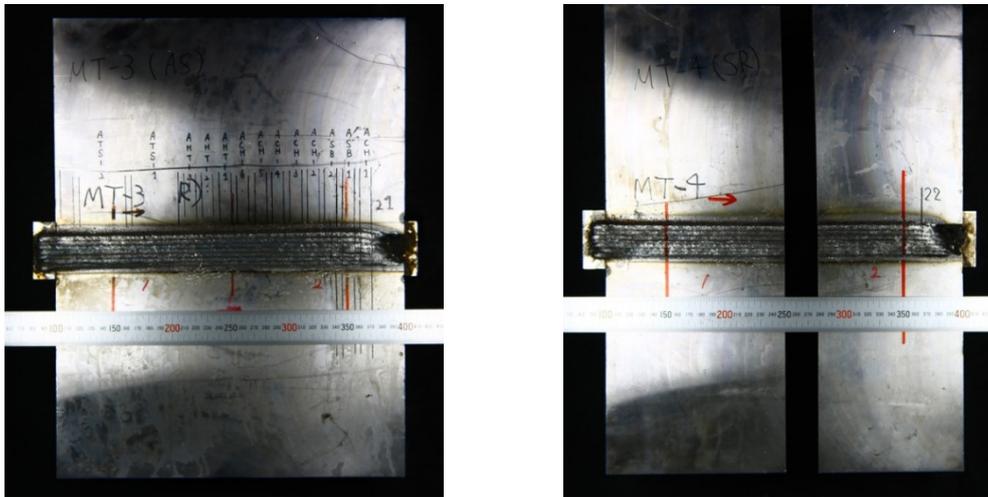
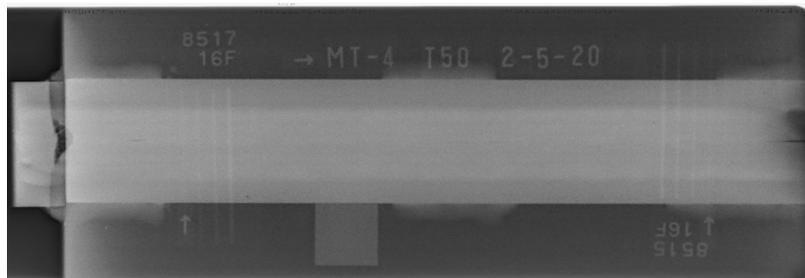


図 2.1-49 継手性能試験体のビード外観（平蓋構造）



(a) MT-3(焼鈍なし)初層完了時 RT フィルム



(b) MT-4(焼鈍あり)残層完了時 RT フィルム

図 2.1-50 継手性能試験体 RT フィルム（平蓋構造）

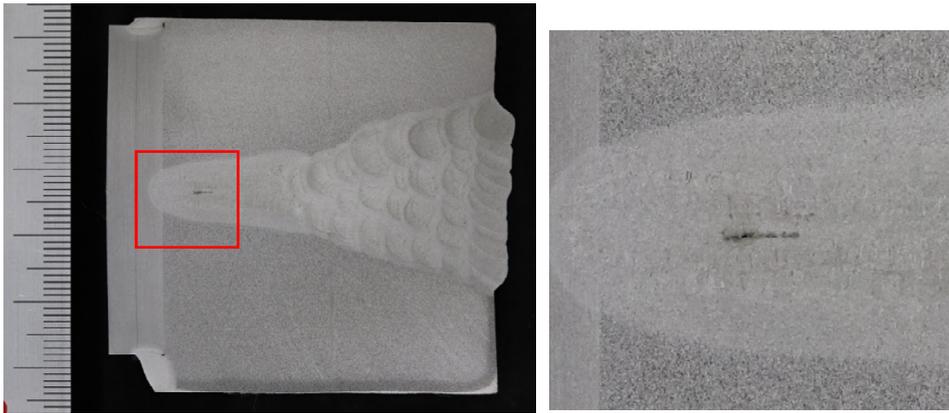
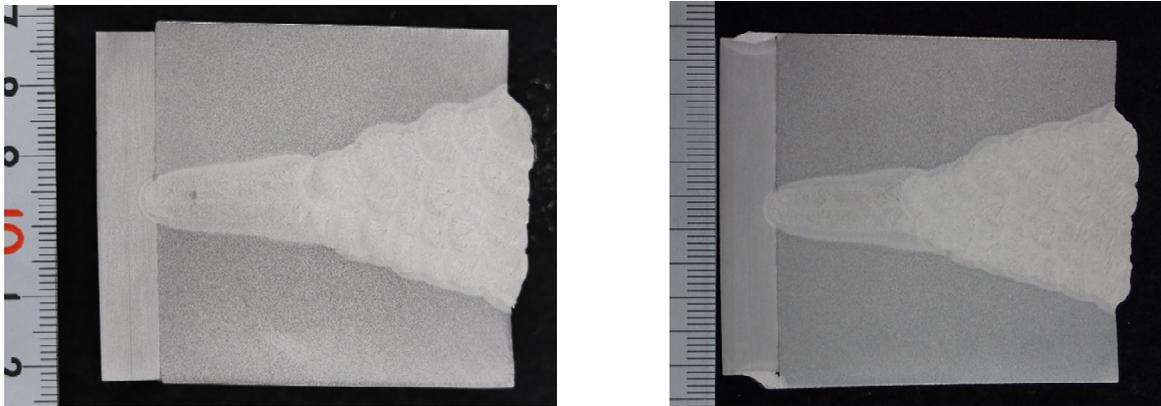


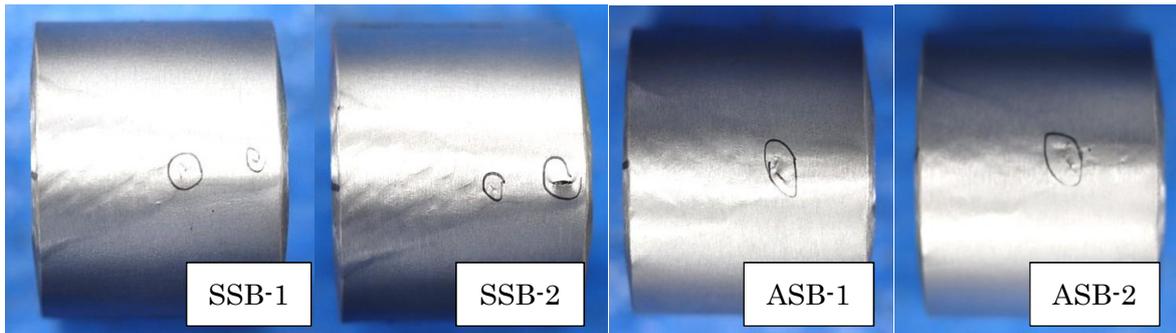
図 2.1-51 断面マクロ写真 (MT-4) (平蓋構造)



(a) MT-3 (SRなし)

(b) MT-4 (SRあり)

図 2.1-52 断面マクロ写真 (平蓋構造)



(左からSRあり、SRあり、SRなし、SRなし)

図 2.1-53 曲げ試験後試験片 (平蓋構造)

表 2.1-14 機械試験結果一覧（平蓋構造）

識別	試験片番号 Specimen No.	継引張試験 Joint Tension Test (Test Machine T21279) Test Temp : Room Temp.						
		試験片寸法 Size of Specimen			最大荷重 Max strength kN	引張強さ Tensile strength N/mm2	破断位置 Breaking Point	判定 Decision
	板厚 mm	板幅 mm	断面積 Area mm2					
	規格値 Spec.				≧400			
SRあり	STS-1	25.1	49.4	1239.9	568.8	459	母材部	合格
	STS-2	25.0	49.2	1230.0	566.4	460	溶接金属部	合格
SR無し	ATS-1	25.0	49.2	1230.0	584.3	475	母材部	合格
	ATS-2	25.0	49.3	1232.5	586.1	476	母材部	合格

識別	試験片番号 Specimen No.	側曲げ試験 Side Bend Test (Test Machine T21279) Test Temp : Room Temp.				判定 Decision	備考 Remarks
		板厚 Thickness(mm)	巾 Width (mm)	結果 Result 20R×180°			
	規格値 Spec.						
SRあり	SSB-1	10.2	49.5	0.5×1, 0.8×1, 1.0×1, 1.5×1		合格	判定基準: 3mm以上の割れが ないこと。割れ長さの合計 が7mm以上でないこと
	SSB-2	10.2	49.5	1.0×1, 4.0×1		不合格	
SR無し	ASB-1	10.2	49.4	2.0×2		合格	
	ASB-2	10.2	49.4	2.0×2		合格	

衝撃試験 Charpy Impact Test (Test Machine T-76TK5) Test Temp : 0°C							
識別	試験片番号 Specimen No.	施工法	採取位置	吸収エネルギー		判定 Decision	
				Each Energy J	Ave. Energy J		
	規格値 Spec.				≧33	≧40	
SRあり	SCH1M	GMAW	溶金	177.0	168.4	合格	
	SCH2M			166.5		合格	
	SCH3M			161.7		合格	
	SCH4M		HAZ※1	90.6		128.5	合格
	SCH5M			143.1			合格
	SCH6M			151.9			合格
	SCH1L	LAH	溶金	75.2	74.3		合格
	SCH2L			41.2			合格
	SCH3L			106.6			合格
	SCH4L		HAZ※2	100.0		122.9	合格
	SCH5L			127.5			合格
	SCH6L			141.2			合格

衝撃試験 Charpy Impact Test (Test Machine T-76TK5) Test Temp : 0°C							
識別	試験片番号	施工法	採取位置	吸収エネルギー		判定 Decision	
				Each Energy J	Ave. Energy J		
	規格値 Spec.				≧33	≧40	
SRなし	ACH1M	GMAW	溶金	160.8	162.5	合格	
	ACH2M			163.6		合格	
	ACH3M			163.1		合格	
	ACH4M		HAZ※1	125.2		94.2	合格
	ACH5M			70.3			合格
	ACH6M			87.2			合格
	ACH1L	LAH	溶金	55.4	61.8		合格
	ACH2L			47.9			合格
	ACH3L			82.2			合格
	ACH4L		HAZ※2	199.9		170.2	合格
	ACH5L			158.0			合格
	ACH6L			152.8			合格

※1 LAH 溶接部はボンド部より 1mm 外側の位置

※2 MAG 溶接部は溶接金属と HAZ が 1:1 となる位置

4) 試験内容及び試験結果（2重蓋構造）

(a) 溶接条件選定試験

(i) 試験内容

10mm の溶接厚さに対して健全な溶接が得られる溶接条件を選定することを目的に溶接条件選定試験を実施する。溶接条件の選定及び施工性確認には図 2.1-54 に示す試験体を使用する。

溶接部裏面の温度上昇を最小限にするため、可能な限り低入熱側の溶接条件（※1）（以下、「低入熱条件」とする）を選定する。さらに、それより少し入熱量を増加させ、施工ロバスト性を重視した溶接条件（以下、「施工性優先条件」）を追加で選定する。また、溶接条件選定に際し、すべてのパスにおいてウィーピングを行うこととする（※2）。

※1: これより入熱を下げた場合、主に初層ビードの形状不良及び溶込み不良が生じる可能性が高い条件。

※2: 積層ごとに変化する開先幅に対し、ウィーピング幅を調整することで比較的簡単かつ柔軟に対応できるため。ストリンガービード（ウィーピングなし）を積層することも可能だが、上下方向に加え幅方向の積層パターンを考慮する必要が生じ、パス数も増えるため、非効率かつ煩雑となる。ウィーピングを入れた場合の溶接時の温度上昇が、熱的制限値を大幅に超える場合は、ストリンガービードによる積層を検討する余地がある。

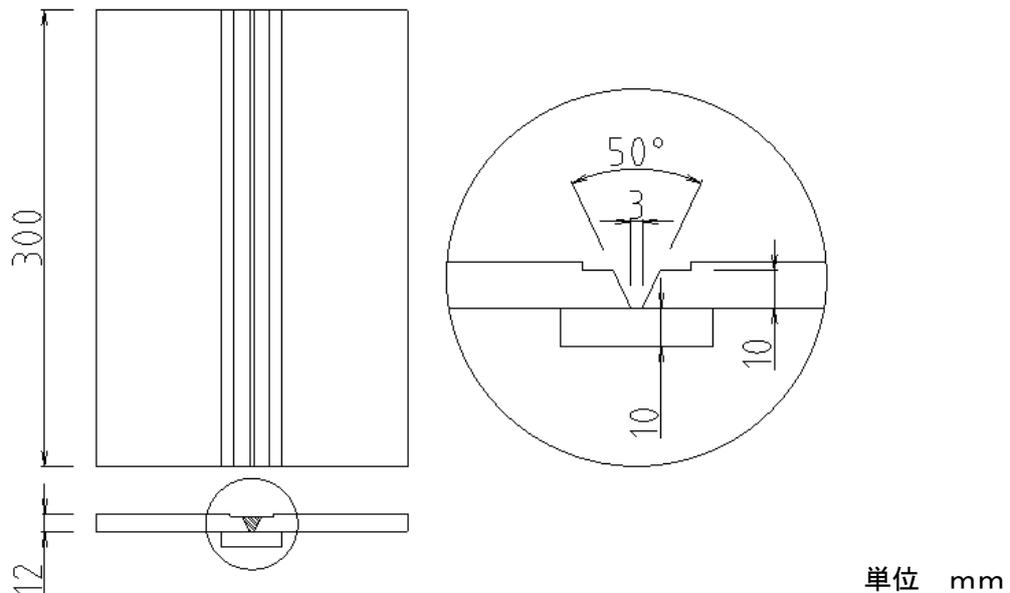


図 2.1-54 溶接条件確認用試験体（2重蓋構造）

(ii) 試験結果

試験体溶接状況を図 2.1-55 に示す。

低入熱条件のビード外観と断面マクロを図 2.1-56 に、溶接条件を表 2.1-15 に示す。施工性優先条件のビード外観と断面マクロを図 2.1-57 に、溶接条件を表 2.1-16 に示す。



図 2.1-55 試験体溶接状況（2重蓋構造）



ビード外観（低入熱条件）



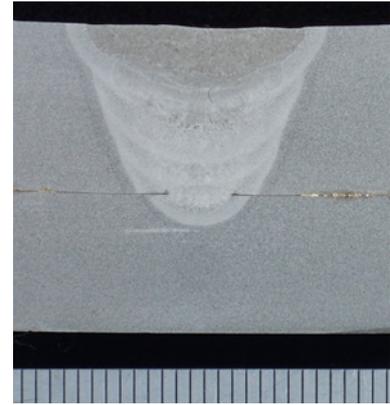
断面マクロ（低入熱条件）

図 2.1-56 ビード外観及び断面マクロ（低入熱条件）（2重蓋構造）

表 2.1-15 溶接条件（低入熱条件）（2重蓋構造）

初層	残層
ピーク電流: 220 [A]	ピーク電流: 250 [A]
ベース電流: 170 [A]	ベース電流: 150 [A]
速度: 11.0 [cm/min]	速度: 7.0 [cm/min]
ファイラ供給量	ファイラ供給量
ピーク期間: 0.5 [m/min]	ピーク期間: 0.8~0.9 [m/min]
ベース期間: 0.5 [m/min]	ベース期間: 0.5~0.8 [m/min]
ピーク比率: 50%	ピーク比率: 50%

※アーク長及びアーク電圧は AVC 制御による



ビード外観（施工性優先条件） 断面マクロ（施工性条件）
 図 2.1-57 ビード外観及び断面マクロ（施工性優先条件）（2重蓋構造）

表 2.1-16 溶接条件（施工性優先条件）（2重蓋構造）

初層	残層
ピーク電流: 300 [A]	ピーク電流: 300 [A]
ベース電流: 180 [A]	ベース電流: 180 [A]
速度 ^{*1} : 9~10.0 [cm/min]	速度: 7.0 [cm/min]
ワイヤー供給量	ワイヤー供給量
ピーク期間: 0.5 [m/min]	ピーク期間: 0.5~1.0 [m/min]
ベース期間: 0.5 [m/min]	ベース期間: 0.5~1.0 [m/min]
ピーク比率: 50%	ピーク比率: 50%

*1 ギャップに応じて調整

*2 アーク長及びアーク電圧は AVC 制御による

(b) 伝熱計測試験

(i) 試験内容

伝熱計測試験には図 2.1-58 に示す試験体を使用する。

前項にて選定した溶接条件（低入熱条件）を用いて、図 2.1-58 に示す伝熱計測用試験体を溶接する。その際、試験体に熱電対を貼付け（図 2.1-59 及び図 2.1-60）、溶接中の温度履歴を取得する。得られた温度履歴から、本溶接法の熱効率（熱伝導解析等に必要な入力パラメータ）を算出するとともに、試験体内面側の最高到達温度が所定の熱的制限値を超えていないことを確認する。

また、追加で選定した施工性優先条件を用いた伝熱計測試験体の溶接試験も実施し、試験体内面側の最高到達温度が所定の熱的制限値を超えていないことを確認する。その際の熱電対貼付け位置は図 2.1-61 及び図 2.1-62 のとおりとする。

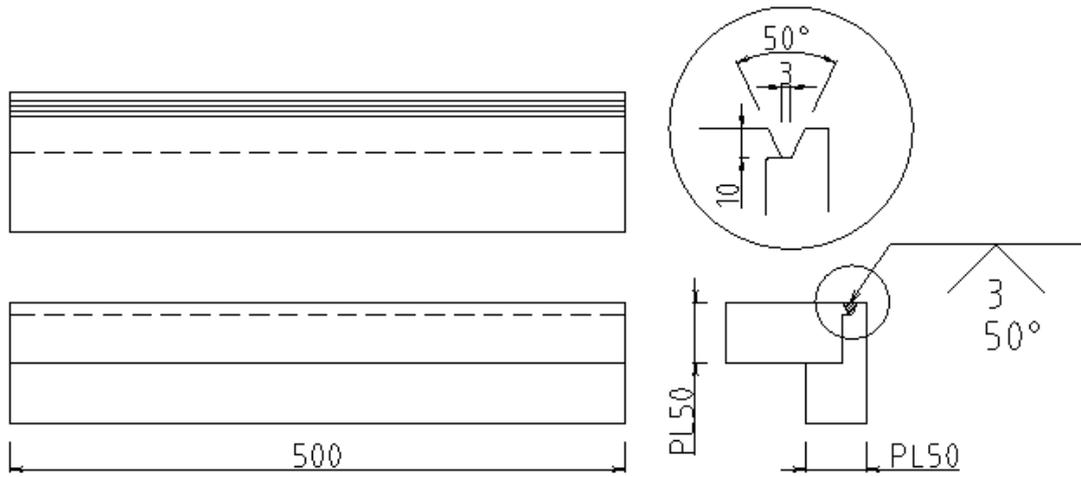
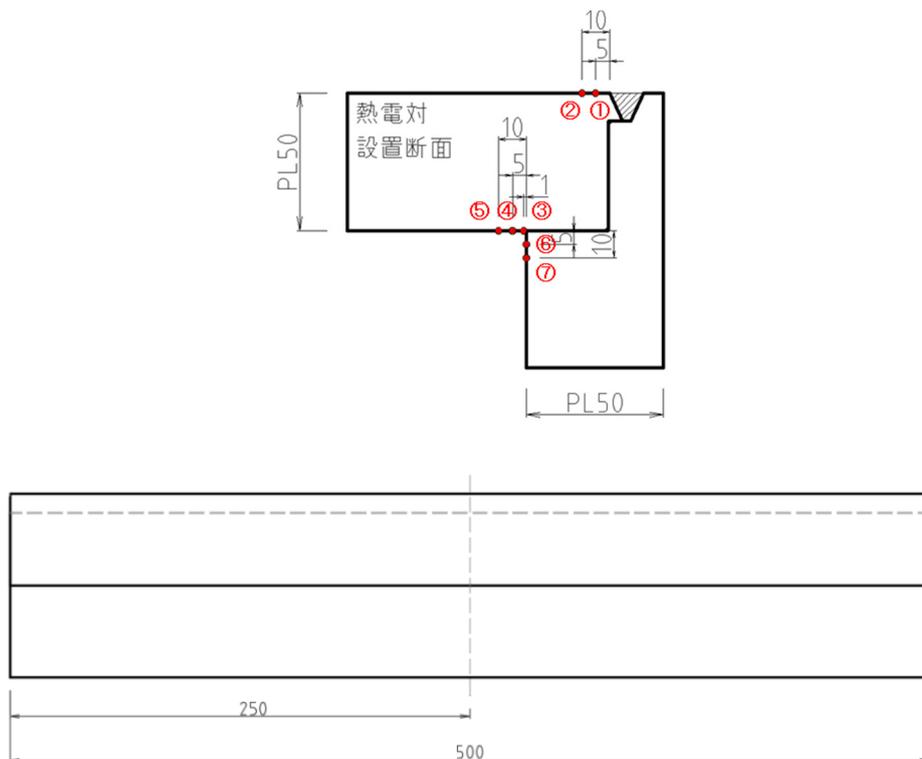


图 2.1-58 伝熱計測用試験体（2重蓋構造）

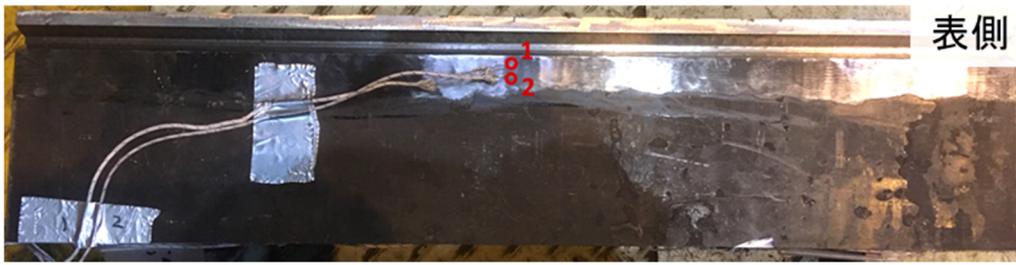
単位 mm



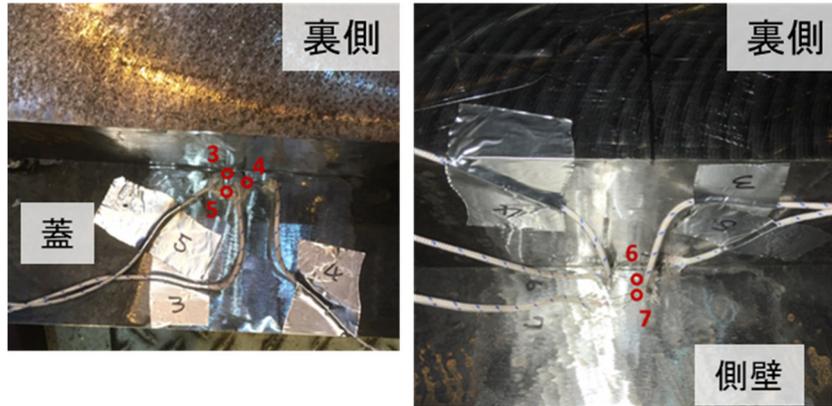
単位 mm

（中央部断面：●は熱電対貼付位置を示す）

图 2.1-59 熱電対貼付位置（低入熱条件）（2重蓋構造）

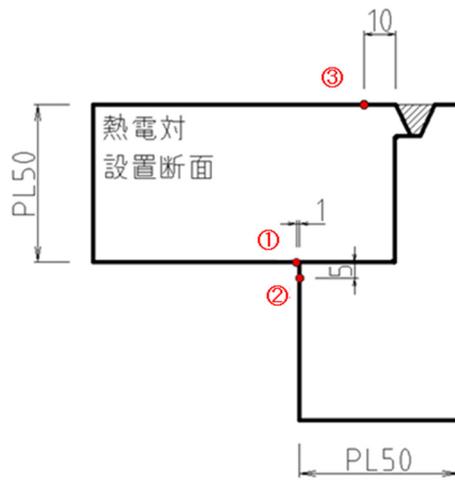


(a) 熱電対 1~2



(b) 熱電対 3~7

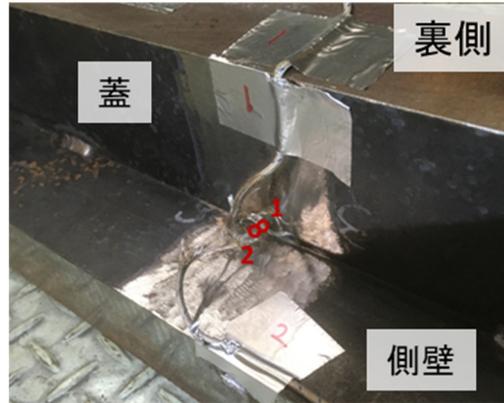
図 2.1-60 熱電対貼付状況（低入熱条件）（2重蓋構造）



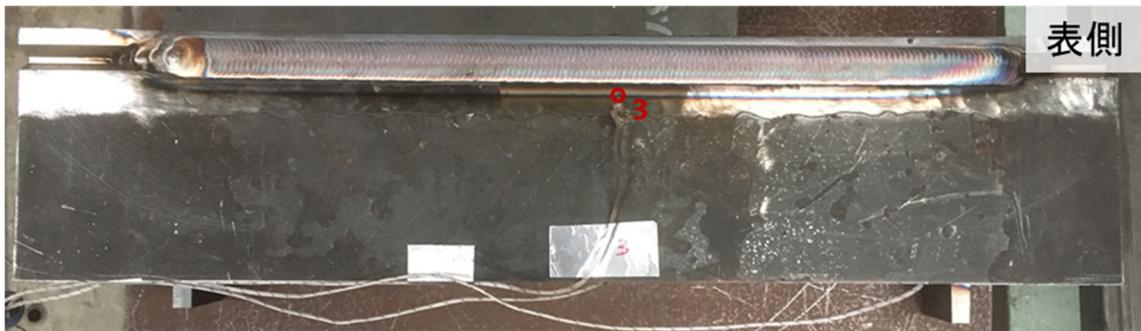
単位 mm

（中央部断面：●は熱電対貼付位置を示す）

図 2.1-61 熱電対貼付位置（施工性優先条件）（2重蓋構造）



(a) 熱電対 1~2



(b) 熱電対 3

図 2.1-62 熱電対貼付状況（施工性優先条件）（2重蓋構造）

(ii) 試験結果

低入熱条件の試験体のビード外観を図 2.1-63 に、断面マクロを図 2.1-64 に示す。溶接条件及び内面側熱電対（CH3、CH4、CH5、CH6、CH7）の最高到達温度を表 2.1-17 に示す。アスファルト固化体の熱的制限値 195℃に対して、内面側熱電対の最高到達温度は 95℃程度（初層溶接での最高到達温度は 47℃程度）であったため、施工ロバスト性を優先する目的で入熱を増加させる余裕があると推定された。

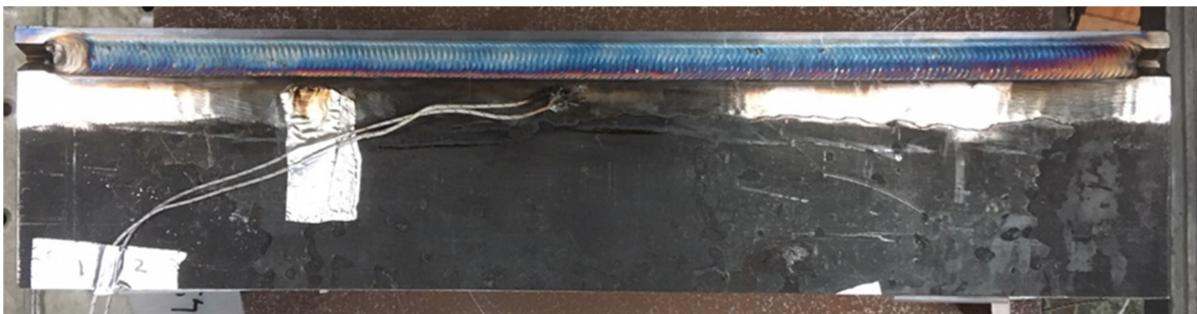


図 2.1-63 伝熱計測試験体のビード外観（低入熱条件）（2重蓋構造）

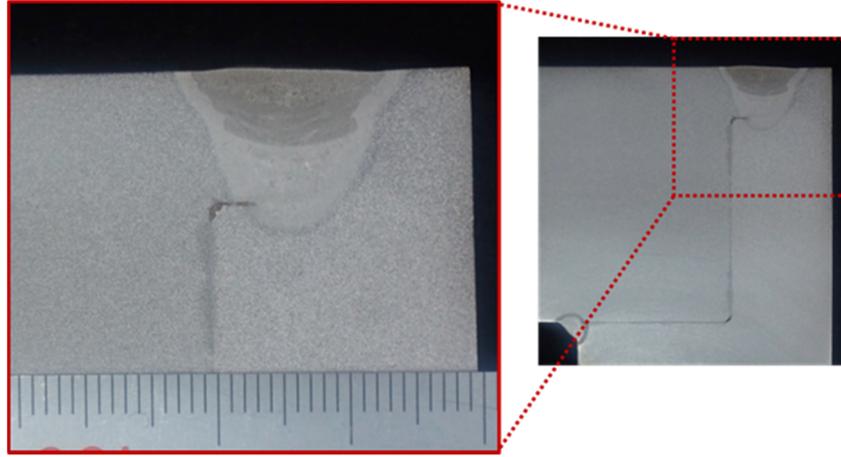


図 2.1-64 伝熱計測試験体の断面マクロ（低入熱条件）（2重蓋構造）

表 2.1-17 溶接条件及び内面側熱電対の最高到達温度（低入熱条件）（2重蓋構造）

No.	積層		溶接条件 (AS)										ワイピング条件 (WFP)			ワイヤー供給量		最高到達温度					パス間温度	
	層	パス	ピーク電圧 実行[V]	ベース電圧 実行[V]	平均電圧 計算値[V]	溶接速度 [cm/min]	ピーク電流 設定[A]	ベース電流 実行[A]	設定[A]	実行[A]	ピーク /ベース比	平均実行電流 計算値[A]	幅 [mm]	周波数 [Hz]	止機停止 [sec]	ピーク [cm/min]	ベース [cm/min]	OH3 [°C]	OH4 [°C]	OH5 [°C]	OH6 [°C]	OH7 [°C]	(溶接前) [°C]	管理 [°C]
1	1	1	13.0	15.0	14.0	11	220	210	170	165	0.5	188	1.0	0.8	0.1	0.5	0.5	44.3	43.7	42.4	46.3	46.7	17	≤ 50
2	2	1	13.3	15.5	14.4	7	250	234	150	139	0.5	187	3.0	0.8	0.5	0.5	0.8	88.4	86.8	84.0	81.0	78.9	43	
3	3	1	13.5	16.0	14.8	7	250	232	150	137	0.5	185	4.0	0.8	0.6	0.7	0.9	91.3	89.1	86.6	84.1	81.5	47	
4	4	1	13.0	16.0	14.5	7	250	234	150	138	0.5	186	5.0	0.8	0.6	0.7	0.9	88.3	86.7	84.1	81.4	78.0	41	
5	5	1	13.0	16.5	14.8	7	250	218	150	129	0.5	174	7.0	0.8	0.6	0.9	0.9	95.0	93.8	91.6	88.8	85.6	50	
6	6	1	13.8	16.6	15.2	7	250	219	150	129	0.5	174	7.0	0.8	0.6	0.9	0.9	94.1	92.1	90.6	86.7	84.5	50	

施工性優先条件の試験体のビード外観を図 2.1-65 に、断面マクロを図 2.1-66 に示す。溶接条件及び内面側熱電対（CH1、CH2）の最高到達温度を表 2.1-18 に示す。施工ロボラスト性向上のため入熱を増加（電流増加、速度減少）させた条件においても、最高到達温度は 106°C 程度であることが確認されたため、継手性能確認試験体及び残留応力計測用溶接試験体には本条件を基本とした溶接条件を用いることとする。

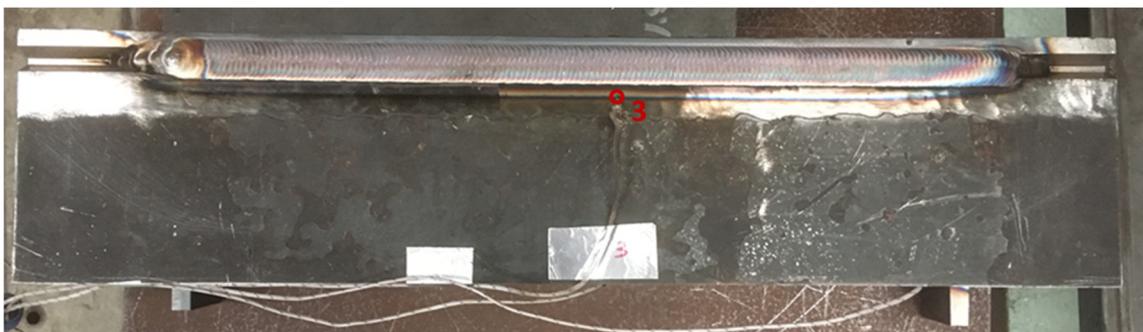


図 2.1-65 伝熱計測試験体のビード外観（施工性優先条件）（2重蓋構造）

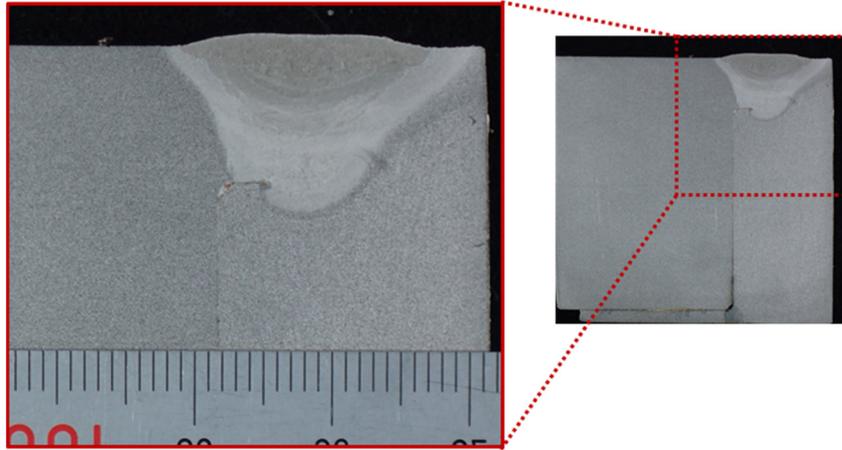


図 2.1-66 伝熱計測試験体の断面マクロ（施工性優先条件）（2重蓋構造）

表 2.1-18 溶接条件及び内面側熱電対の最高到達温度（施工性優先条件）（2重蓋構造）

No.	積層層	パス	溶接条件 (AS)										ワイピング条件 (WFP)			ワイピング供給量		最高到達温度		バス温度管理
			ビーク電圧 実行[V]	ベース電圧 実行[V]	平均電圧 計算[V]	溶接速度 [cm/min]	ビーク電流 設定[A]	ベース電流 実行[A]	ベース電流 設定[A]	ビーク電流 実行[A]	ビーク /ベース比	平均実行電流 計算[A]	幅 [mm]	周波数 [Hz]	止端停止 [sec]	ビーク [m/min]	ベース [m/min]	OH1 [°C]	OH2 [°C]	
1	1	1	18.0	13.8	15.9	9	300	288	180	171	0.5	230	1.2	0.7	0.2	0.3	0.3	58.6	57.1	17
2	2	1	18.8	14.0	16.4	7	300	286	180	170	0.5	228	3.0	0.7	0.5	0.5	1.0	102.4	101.1	49
3	3	1	19.0	14.0	16.5	7	300	286	180	170	0.5	228	4.0	0.8	0.6	0.7	1.0	93.3	92.9	39
4	4	1	19.5	14.5	17.0	7	300	289	180	172	0.5	231	5.0	0.8	0.6	0.9	1.0	77.9	76.4	13
5	5	1	19.5	14.5	17.0	7	300	296	180	179	0.5	238	7.0	0.8	0.6	1.0	1.0	105.7	103.4	47
6	6	1	19.0	14.5	16.8	6	300	296	180	179	0.5	238	7.0	0.8	0.6	1.0	1.0	90.9	88.7	24

(C) 継手性能確認試験

(i) 試験内容

継手性能確認試験に供する試験体として表 2.1-19 に示す平板突合せ継手を製作する。SR の有無による継手性能への影響を確認するため、図 2.1-67 に示す試験体を 2 体製作し、機械試験片採取及び機械試験に有害な溶接欠陥がないことを RT により確認する。その後、試験体 1 体 (MSR-T1) のみ表 2.1-20 に示す SR を施す。製作した試験体 MAS-T1 及び試験体 MSR-T1 に対して表 2.1-21 に示す継手性能確認試験を実施する。なお、平蓋構造向けの継手性能確認試験とは、溶接法が異なるため以下のような違いがある。

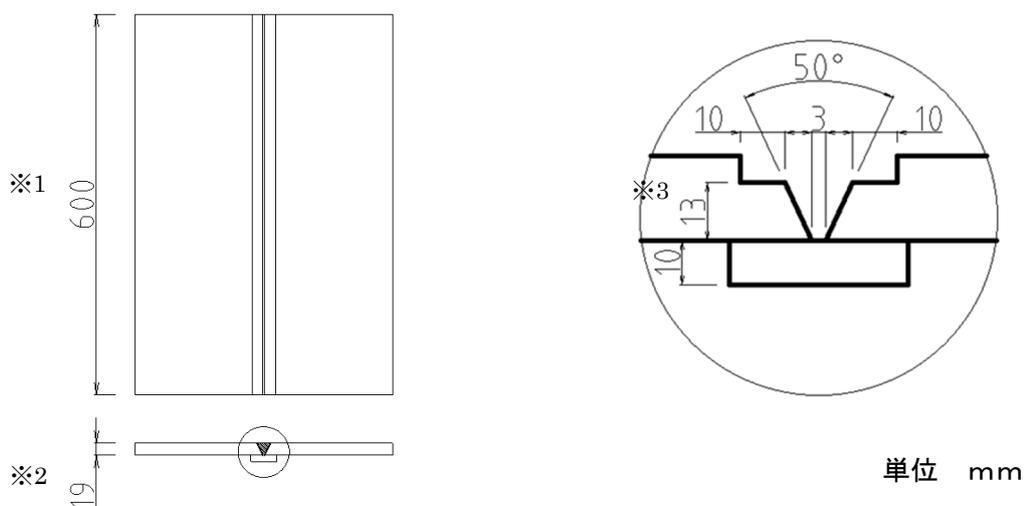
- ・溶込み形状が異なるため、シャルピー試験片の採取方法が異なる
- ・材料と溶接法の組合せから硬化リスクが低いいため、硬さ試験は実施しない。

表 2.1-19 継手性能確認試験体の概要（2重蓋構造）

符号	用途	材質	溶接部 厚さ	継手形状	溶接材料	SR
MAS-T1	継手性能 計測用 (SR なし)	SM400B	13t ^{*2}	V 開先 裏当て金あり 突合せ	JIS Z 3316 W49 A 3U 16 (YGT50)	なし
MSR-T1	残留応力 計測用 (SR あり)					595°C 40min ※1

*1 JIS Z3700 に基づき、母材区分 P-1 材の最低保持温度は 595°C、溶接部厚さ 13mm に対する 最小保持時間は $13 \div 25 = 0.52[\text{hr}] = 32[\text{min}]$ であるため 40min とする。

*2 シャルピー衝撃試験片の加工代確保のため 13mm 厚さを用いた。



- ※1 スタート・エンド部のタブ板として実際の試験体長さは 100mm 程度延長する。
 ※2 数 mm 程度の角変形に対して加工代を確保するため、試験体の板厚は 19mm とする。
 ※3 黒皮除去及び溶接厚さを必要最小限とするため溶接部近傍のみ厚さ 13mm まで機械加工にて減厚する。

図 2.1-67 継手性能確認用試験体（2重蓋構造）

表 2.1-20 SR 条件（2重蓋構造）

	SR 条件
加熱速度	220 [°C/hr] 以下
保持温度	595~620 [°C]
保持時間	40 [min] 以上
冷却速度	280 [°C/hr] 以下

表 2.1-21 継手性能確認試験（2重蓋構造）

試験項目		試験片本数
引張試験		2 本
引張試験（SR 後）		2 本
側曲げ試験		4 本
マクロ試験		2 本
シャルピー試験	溶接金属 ^{※1}	3 本
	ボンド部 ^{※2}	3 本
シャルピー試験（SR 後）	溶接金属 ^{※1}	3 本
	ボンド部 ^{※2}	3 本

- ※1 溶接金属中央をノッチ位置とする。
 ※2 ノッチ位置に溶接金属と熱影響部がほぼ等しく含まれる位置をボンド部とする。
 ※3 母材である SM400B（JIS G3106）の規定最小引張強さ以上とした。
 ※4 JIS Z3801 の規定による。
 ※5 WES 7902 : 2014 の規定による。

(ii) 試験結果

試験体製作状況及びビード外観を図 2.1-68 及び図 2.1-69 に示す。溶接実施後に実施した放射線透過試験の検査記録を図 2.1-70 に示す。放射線透過試験の結果、無欠陥及び 1 種 1 類判定（1 種：丸いブローホール及びこれに類するきず、1 類：最も厳しい判定基準）であり、溶接部に有害な欠陥は認められなかった。

試験体 1 体（MSR-T1）には SR を実施し、試験体 2 体について機械試験を実施した。マクロ試験片の観察結果を図 2.1-71 に、側曲げ試験片外観を図 2.1-72 に、継手性能試験結果の一覧を表 2.1-22 に示す。

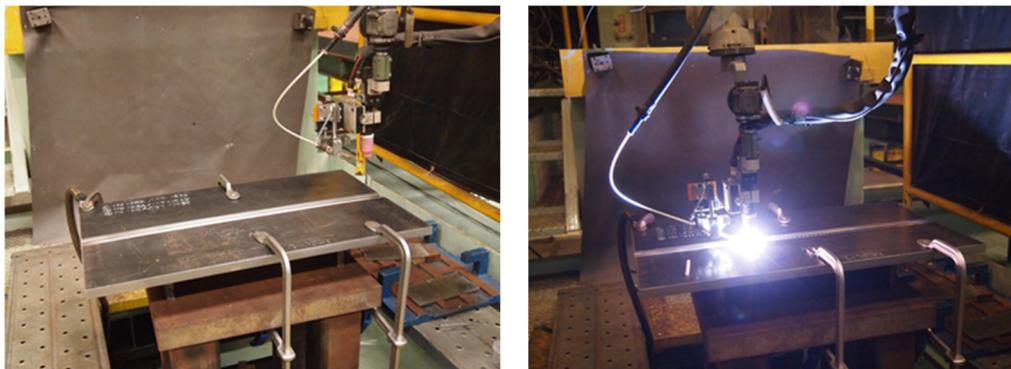


図 2.1-68 継手性能試験体の溶接状況（2重蓋構造）



(a) 試験体 MAS-T1

(b) 試験体 MSR-T1（SR 前）

図 2.1-69 継手性能試験体のビード外観（2重蓋構造）

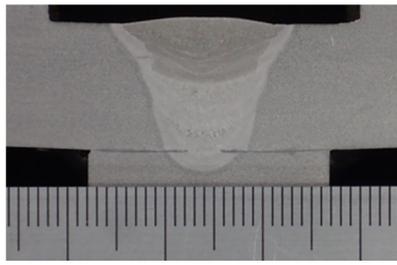
<div style="border: 1px solid black; padding: 2px; display: inline-block;">RT</div>		検査記録番号 RECORD NO. RT-038		頁 PAGE 1/1						
		検査項目 SUBJECT 溶接完了後		撮影日 DATE FILM EXPOSED 12-17-19						
放射線検査記録 RADIOGRAPHIC EXAMINATION RECORD										
注文主 CUSTOMER		ブロック/部材名称 BLOCK/PART NAME 蓋溶接試験体								
契約番号 CUSTOMERS REF. NO.		部材/継手番号 PARTS/JOINT NO. MSR-1, MAS-1		図面番号 DWG NO. REV <input type="checkbox"/>						
工事番号 MANUFACTURER'S ORDER NO. 5544038-1093		方案/要領図 SPEC/PROCEDURE REV <input type="checkbox"/> JIS Z 3104		材質 MATERIAL 母材 BASE METAL						
工事名称 PROJECT/WORK NAME TRU廃棄体パッケージ製作2019		検査場所 LOCATION 横浜工場		溶接部 WELD METAL						
撮 影 条 件										
装置名称/種類	電圧×電流 / GBq KVP, A / 線源活度	距離 mm	時間 分	焦点/線源	フィルム及び フィルムサイズ	増感紙 %	管外径 mm	材厚mm 板厚mm	ベネツク 及び配管区分	シム厚さ mm
1	ライナック LINATRON M6	MeV								S F
2	エックス線 SMART 300	295 KVP	700	0.6	1.5×1.5 KODAK AA400 4 1/2" × 17"	F:0.03 B:0.10	-	13	04F	S F
3	Co60 Ir192	GBq								S F
現像処理 FILM PROCESSING			現像剤 DEVELOPER			時間 TIME		温度 TEMP		
<input checked="" type="checkbox"/> 自動現像機 AUTOMATIC <input type="checkbox"/> タンク現像 MANUAL			SUPERDOL-I			11 min		25 °C		
撮影方法 FILM TECHNIQUE						<input checked="" type="checkbox"/> 単撮 Single Wall Exposure		<input type="checkbox"/> 複撮 Double Wall Exposure		
								二重壁片面 Single Wall		
								二重壁両面 Double Wall		
パノラマ照射 PANORAMA										
FILM										
SOURCE										
TYPE A						TYPE B				
TYPE C						TYPE D				
TYPE E						TYPE F				
TYPE G										
方法 スタート位置	継手番号	フィルム番号	欠陥位置 (mm)			欠陥分類	等級 (mm)	社内検査	立会者	備考
			フィルム有効範囲 195 mm			無欠陥	1 2 種			
E	MSR-1-	1 R				レ	1	12/17	/	
		2 R				レ	1	/	/	
		3 R				レ	1	/	/	
	MAS-1-	1 R				レ	1	/	/	
		2 R	P 2.7φ 60 ←			レ	1	/	/	
		3 R				レ	1	12/17	/	
	以下余白							/	/	
(欠陥記号) S:スラグ P:ポロシティ C:クラック I:溶込み不良 U:アンダーカット T:タンクスチエンスポット L:融合不良										
濃度 FILM DENSITY 1.0 min ~ 3.5 max	月/日 DATE			課長			月/日 DATE			
判定基準 ACCEPT.STD	客先/CUSTOMER'S REPRESENTATIVE			APPROVED BY			主務 月/日 DATE			
結果 RESULTS	月/日 DATE			CHECKED BY			担当 月/日 DATE			
	公認検査機関/AUTHORIZED INSPECTOR			YOKOHAMA INSPECTION DEPT.			12/17/2019			

株式会社 IHI 検査計測

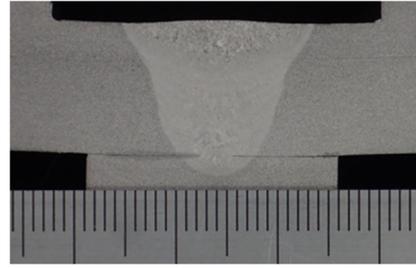
IHI Inspection & Instrumentation Co., LTD

記録中の MAS-1 及び MSR-1 はそれぞれ MAS-T1 と MSR-T1 を意味する。

図 2.1-70 放射線透過試験 (RT) の結果 (2重蓋構造)



(a) MAS-T1 (SRなし)



(b) MSR-T1 (SRあり)

図 2.1-71 断面マクロ観察結果 (2重蓋構造)

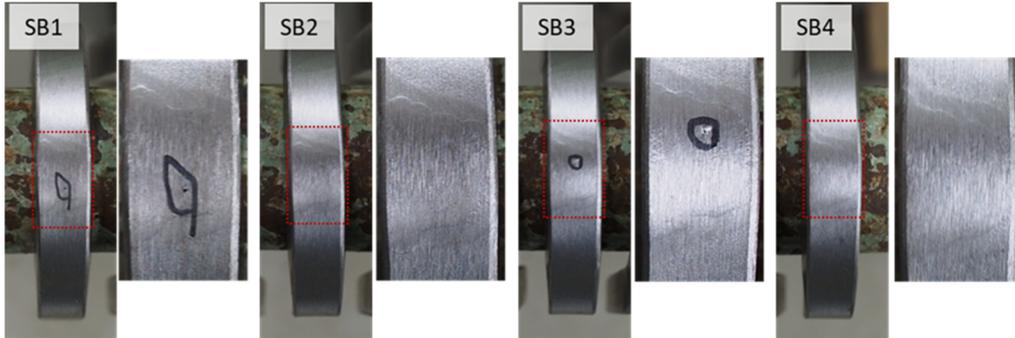


図 2.1-72 側曲げ試験片の試験後外観 (SRなし) (2重蓋構造)

表 2.1-22 継手性能試験結果の一覧 (2重蓋構造)

継手引張試験 (Test Machine T21279) Test Temp : Room Temp.									
試験片番号	試験体	試験片寸法			最大荷重	引張強さ	破断位置	判定基準	判定
		板厚	板幅	断面積					
		[mm]	[mm]	[mm ²]	[kN]	[N/mm ²]			
T1	MAS-T1	24.9	10.1	251.5	116.1	462	母材部	引張強さ 400N/mm ² 以上	合格
T2		25.0	10.1	252.5	116.6	462	母材部		合格
T3		MSR-T1	25.0	10.1	252.5	114.2	452		母材部
T4	24.9		10.1	251.5	112.3	447	母材部		合格

側曲げ試験 (Test Machine T21279) Test Temp : Room Temp.							
試験片番号	試験体	試験片番号	板厚	巾	結果 Result	判定基準	判定
SB1	MAS-T1	SB1	10.2	10.2	0.5mm×1	3mm以上の割れがないこと 割れ長さの合計が7mm以上でないこと	合格
SB2		SB2	10.2	10.2	欠陥なし		合格
SB3		SB3	10.2	10.2	0.3mm×1		合格
SB4		SB4	10.2	10.2	欠陥なし		合格

衝撃試験 (Test Machine T-76TK5) Test Temp : 0℃						
試験片番号	試験体	位置	吸収エネルギー		判定基準	判定
			個別 [J]	平均 [J]		
CW1	MAS-T1	溶接金属	228.5	222.3	3個の 平均値:40J以上 最小値:33J以上	合格
CW2			226.0			
CW3			212.5			
CW4	MSR-T1	溶接金属	276.0	286.1		合格
CW5			294.9			
CW6			287.3			
CB1	MAS-T1	ボンド部	170.3	182.4	合格	
CB2			177.0			
CB3			199.9			
CB4	MSR-T1	ボンド部	220.2	201.7	合格	
CB5			192.7			
CB6			192.2			

5) 溶接方法の検証結果

平蓋構造及び2重蓋構造のそれぞれの容器構造に対して、選定した LAH 溶接及び TIG 溶接により施工できることを確認した。

ただし、平蓋構造に対する LAH 溶接は、以下に示すとおり施工条件の裕度が狭いことが判明しており、実施に当たっては注意が必要である。

- ・LAH 溶接では溶接中のスパッタ発生に留意が必要である。レーザ溶接において、非貫通溶接ないしはそれに準じるような施工をした場合にスパッタ量は総じて多くなる傾向がある。今回試験を実施した LAH 溶接では、MAG 溶接が追従するため溶接速度は通常のレーザ溶接よりも低くなり、初層で深い溶け込みを得るために母材に近い距離でレーザヘッドを動かした。このような条件下ではスパッタの飛散元である母材とレーザヘッド内の保護ガラスの距離を適切に取るのが困難となり、保護ガラスに付着するスパッタ量が増加することが確認された。付着したスパッタにレーザが照射されると保護ガラスごと熔融するリスクがあり、最悪のケースでは光学レンズに損傷を及ぼす可能性がある。
- ・初層溶接時の凝固割れと思われる欠陥も確認された。平成 30 年度にも欠陥は発生していたが RT で検出されない微小なものであった。一般的に、凝固割れ感受性に与える溶込み形状の影響は大きい。高エネルギー密度溶接特有の、溶込み幅に対して溶込み深さの大きいキーホール型の溶込み形状、そして凝固速度の速さは凝固割れリスクを高める要因である (JIS Z 1600)。溶け込み形状改善のためには、溶け込み幅を広く、溶け込み深さを浅くできるような開先形状を最適化することが望ましい (日本溶接協会, Q-07-06-02)。

2.1.4 解析に用いた物性値

以下に伝熱解析に用いた物性値について、記載する。

保温幅に相当する容器外面は断熱条件、加熱域と保温域以外の容器外面での熱伝達条件は自然対流とし、保温保冷工事施工標準（日本産業規格, JIS A 9501）に従って、熱伝達面の向きや温度依存性および放射を考慮した熱伝達係数を以下に示す式から算出して設定した。また、容器内部の空気層においては空気層における熱伝導のほか、放射による伝熱も考慮した。解析に用いた SM400 の材料物性値（金 他, 2005.）を図 2.1-73 に、アスファルト固化体とセメント系材料（PCa とモルタル）の熱物性値（国立研究開発法人 日本原子力研究開発機構, 2017.）を表 2.1-23 に示す。鋼材（廃棄体パッケージ容器とドラム缶）およびセメント系材料の放射率は文献（齋藤秀人他, 2004.）（甲藤好郎, 1989）を参考に、それぞれ 0.9 および 0.8 とした。また、空気の熱物性値は伝熱工学資料（日本機械学会, 2009）を参照し、温度依存性を考慮した値を用いた（表 2.1-24 から表 2.1-26 参照）。

本検討では空気の比熱を表 2.1-26 に示した定圧比熱の表のうち、1 気圧（0.1MPa）における値を用いているが、空気は容器内に閉じ込められているため本来は定積比熱を用いるべきである。定積比熱は定積モル比熱 C_v と定圧モル比熱 C_p の関係式 $C_p - C_v = R$ （ R は気体定数）から求めることができ、例えば 0.1 [MPa]、20 [°C] の条件で定積比熱は 0.718 [kJ/kg·K] となり、比熱比（ C_p/C_v ）の値は約 1.4 となる。空気層の熱伝導の効果を正しく反映させるためには、空気温度の上昇に伴って生じる圧力上昇による空気の比熱の変化も考慮すべきであるが、空気層全体の平均温度から圧力を算出する必要があるため、解析では圧力上昇の効果は考慮せず、定圧比熱値を用いることとし、これに対する影響を評価することとする。

図 2.1-74 と図 2.1-75 に、解析ケース 2（充填材：PCa、隙間 0mm）を対象に行った、空気の熱伝導を考慮せず放射を考慮したケースと、放射を考慮せず空気の熱伝導を考慮したケースの 2 つの伝熱解析結果を、両方とも考慮したケースと比較した図を示す。図より、アスファルトの温度は放射による伝熱によってほぼ決まってしまう、空気の熱伝導による影響は相対的に非常に小さいことが分かる。上述したように、定積比熱は定圧比熱よりも小さい値となるため、空気の温度が温まりやすくなると考えられるが、空気の熱伝導による効果は放射による効果に比べて非常に小さいため、仮に定積比熱を用いて伝熱解析を行ったとしてもアスファルトの温度に及ぼす影響は軽微であると考えられる。

以上の検討より、本年度の解析では計算条件の簡易化のため、空気の比熱として定圧比熱を用いることとした。

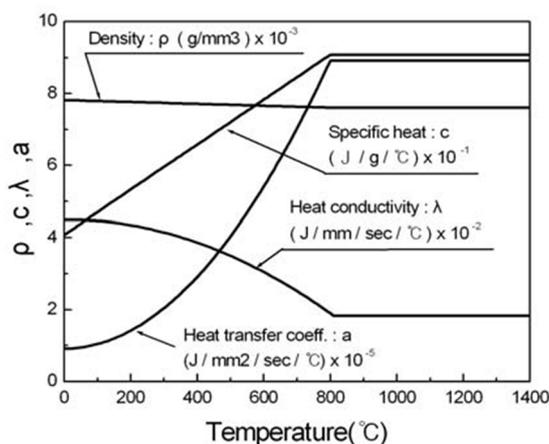


図 2.1-73 SM400 の熱物性値

表 2.1-23 アスファルト固化体とセメント系材料の熱物性値

構成要素	熱物性			出典
	密度 (kg/m ³)	比熱容量 (J/kg/K)	熱伝導率 (W/m/K)	
アスファルト固化体 (200Lドラム缶)	1,300	732+2.37T T(K)	0.35	三浦ほか (1999)
セメント系材料 (廃棄体パッケージ、廃棄体パ ッケージの充填材、処分坑道 埋戻し材)	2,350	1,050	2.56	電気事業連合会・ 核燃料サイクル 開発機構(2005)
母岩(結晶質岩)	2,670	1,000	2.80	

表 2.1-24 空気の熱伝導率

表 4 空気の熱伝導率 λ (mW/(m・K))

圧力 p MPa	温度 T °C													
	-100	-50	-20	0	20	40	60	80	100	120	140	160	180	200
0.01	16.02	20.21	22.61	24.17	25.69	27.17	28.62	30.04	31.43	32.79	34.13	35.44	36.74	38.01
0.1	16.08	20.26	22.66	24.21	25.72	27.20	28.65	30.07	31.45	32.82	34.15	35.47	36.76	38.03
0.2	16.15	20.31	22.70	24.25	25.76	27.24	28.68	30.10	31.49	32.85	34.18	35.49	36.78	38.06
0.5	16.37	20.48	22.84	24.38	25.88	27.35	28.79	30.20	31.58	32.93	34.27	35.57	36.86	38.13
1	16.75	20.76	23.09	24.61	26.09	27.55	28.97	30.37	31.74	33.09	34.41	35.71	36.99	38.26
2	17.64	21.37	23.61	25.08	26.53	27.95	29.35	30.72	32.07	33.40	34.71	35.99	37.26	38.51
5	21.50	23.59	25.42	26.70	28.00	29.30	30.59	31.88	33.15	34.41	35.66	36.90	38.12	39.33
10	33.78	28.52	29.16	29.94	30.87	31.88	32.95	34.04	35.15	36.28	37.41	38.54	39.67	40.80
20	-	41.19	38.39	37.75	37.65	37.89	38.34	38.95	39.66	40.45	41.29	42.17	43.09	44.02
50	-	-	65.55	61.86	59.20	57.26	55.89	54.96	54.37	54.04	53.93	53.98	54.17	54.46
80	-	-	-	81.61	77.79	74.69	72.19	70.21	68.66	67.46	66.56	65.89	65.42	65.13
100	-	-	-	92.91	88.63	85.04	82.06	79.62	77.63	76.02	74.72	73.68	72.87	72.25

圧力 p MPa	温度 T °C													
	250	300	350	400	450	500	550	600	650	700	750	800	900	1000
0.01	41.12	44.13	47.06	49.93	52.74	55.51	58.23	60.92	63.58	66.22	68.83	71.42	76.54	81.61
0.1	41.14	44.15	47.08	49.95	52.76	55.52	58.25	60.94	63.59	66.23	68.84	71.42	76.55	81.62
0.2	41.16	44.17	47.10	49.97	52.78	55.54	58.26	60.95	63.61	66.24	68.85	71.44	76.56	81.63
0.5	41.23	44.23	47.16	50.02	52.82	55.58	58.30	60.99	63.64	66.27	68.88	71.47	76.59	81.66
1	41.34	44.33	47.25	50.10	52.90	55.66	58.37	61.06	63.71	66.33	68.94	71.52	76.64	81.70
2	41.57	44.54	47.44	50.28	53.07	55.81	58.52	61.19	63.84	66.46	69.05	71.63	76.74	81.79
5	42.30	45.20	48.04	50.83	53.58	56.29	58.96	61.61	64.23	66.83	69.41	71.97	77.05	82.07
10	43.60	46.37	49.10	51.80	54.48	57.12	59.74	62.34	64.91	67.47	70.02	72.55	77.58	82.56
20	46.43	48.89	51.38	53.88	56.38	58.89	61.38	63.87	66.36	68.83	71.31	73.77	78.68	83.56
50	55.56	57.01	58.70	60.55	62.51	64.55	66.65	68.79	70.98	73.19	75.42	77.67	82.21	86.76
80	64.97	65.42	66.29	67.46	68.86	70.42	72.11	73.90	75.77	77.70	79.69	81.72	85.88	90.09
100	71.36	71.19	71.53	72.25	73.26	74.48	75.88	77.42	79.07	80.81	82.62	84.49	88.39	92.37

表 2.1-25 空気の密度

表 1 空気の密度 ρ (kg/m³)

圧力 p MPa	温度 T °C													
	-100	-50	-20	0	20	40	60	80	100	120	140	160	180	200
0.01	0.2012	0.1560	0.1375	0.1275	0.1188	0.1112	0.1045	0.09859	0.09330	0.08856	0.08427	0.08038	0.07683	0.07358
0.1	2.019	1.563	1.377	1.275	1.188	1.112	1.045	0.9859	0.9330	0.8854	0.8425	0.8036	0.7681	0.7356
0.2	4.053	3.130	2.756	2.552	2.377	2.225	2.090	1.972	1.866	1.771	1.685	1.607	1.536	1.471
0.5	10.25	7.860	6.907	6.391	5.949	5.564	5.227	4.929	4.663	4.424	4.209	4.014	3.836	3.674
1	20.93	15.84	13.87	12.82	11.92	11.14	10.46	9.855	9.320	8.841	8.409	8.018	7.662	7.336
2	43.66	32.16	27.97	25.77	23.91	22.31	20.92	19.70	18.61	17.65	16.78	15.99	15.28	14.63
5	125.7	83.84	71.36	65.20	60.12	55.86	52.21	49.04	46.25	43.79	41.59	39.60	37.81	36.18
10	305.4	175.5	145.4	131.4	120.2	111.1	103.4	96.82	91.13	86.13	81.69	77.73	74.16	70.92
20	514.6	340.6	281.7	253.7	231.5	213.3	198.2	185.4	174.3	164.7	156.1	148.5	141.7	135.6
50	690.9	572.9	514.3	480.5	450.5	423.9	400.2	379.1	360.2	343.2	327.8	313.9	301.3	289.7
80	—	673.9	624.4	594.5	567.0	541.7	518.3	496.8	476.9	458.5	441.5	425.7	411.0	397.4
100	—	719.6	674.1	646.2	620.4	596.3	573.9	553.0	533.5	515.2	498.1	482.1	467.1	452.9

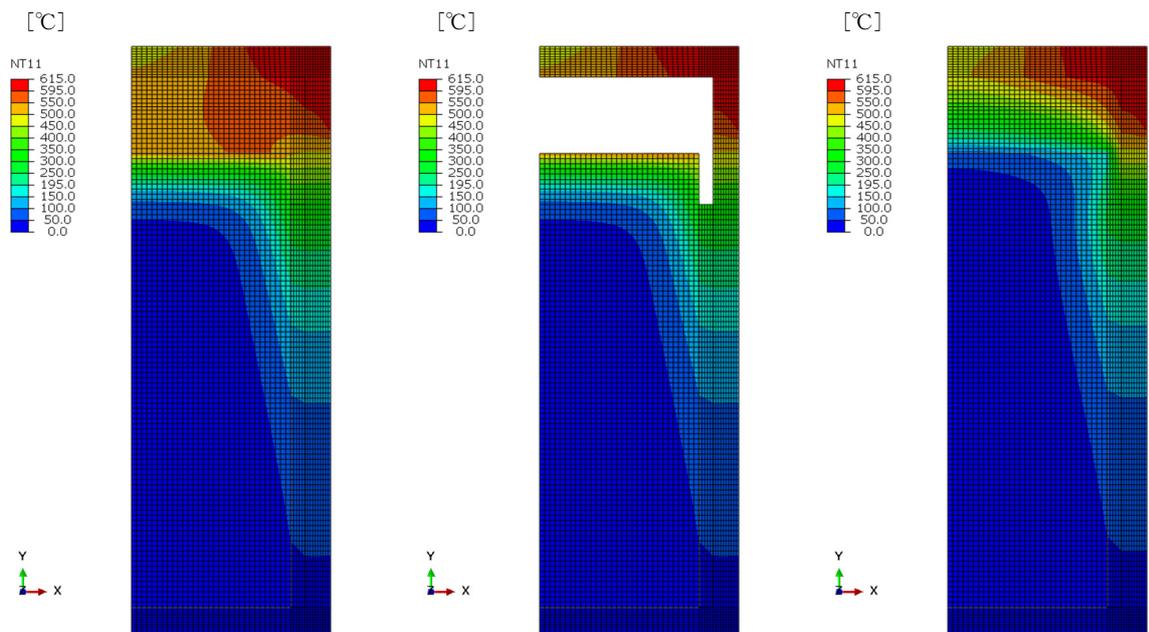
圧力 p MPa	温度 T °C													
	250	300	350	400	450	500	550	600	650	700	750	800	900	1000
0.01	0.06655	0.06074	0.05587	0.05172	0.04814	0.04503	0.04230	0.03987	0.03771	0.03578	0.03403	0.03244	0.02968	0.02735
0.1	0.6653	0.6072	0.5585	0.5170	0.4813	0.4502	0.4228	0.3986	0.3770	0.3577	0.3402	0.3243	0.2967	0.2734
0.2	1.330	1.214	1.117	1.034	0.9622	0.9000	0.8453	0.7969	0.7538	0.7151	0.6801	0.6485	0.5932	0.5466
0.5	3.322	3.032	2.789	2.581	2.403	2.248	2.111	1.990	1.883	1.786	1.699	1.620	1.482	1.365
1	6.633	6.053	5.567	5.153	4.797	4.487	4.215	3.974	3.759	3.566	3.392	3.234	2.959	2.727
2	13.22	12.06	11.09	10.27	9.558	8.941	8.399	7.919	7.491	7.108	6.762	6.448	5.900	5.438
5	32.67	29.80	27.40	25.37	23.62	22.10	20.76	19.58	18.53	17.59	16.74	15.96	14.61	13.48
10	64.00	58.37	53.68	49.71	46.30	43.35	40.75	38.45	36.41	34.57	32.91	31.41	28.78	26.56
20	122.4	111.8	102.9	95.41	88.98	83.40	78.50	74.16	70.29	66.81	63.67	60.82	55.83	51.61
50	264.6	243.8	226.2	211.2	198.1	186.7	176.5	167.5	159.3	151.9	145.3	139.1	128.4	119.2
80	367.2	341.6	319.6	300.5	283.7	268.8	255.4	243.4	232.5	222.6	213.6	205.2	190.4	177.6
100	421.2	393.9	370.1	349.3	330.9	314.5	299.7	286.4	274.2	263.1	252.9	243.5	226.8	212.2

表 2.1-26 空気の比熱

表 2 空気の定圧比熱 c_p (kJ/(kg·K))

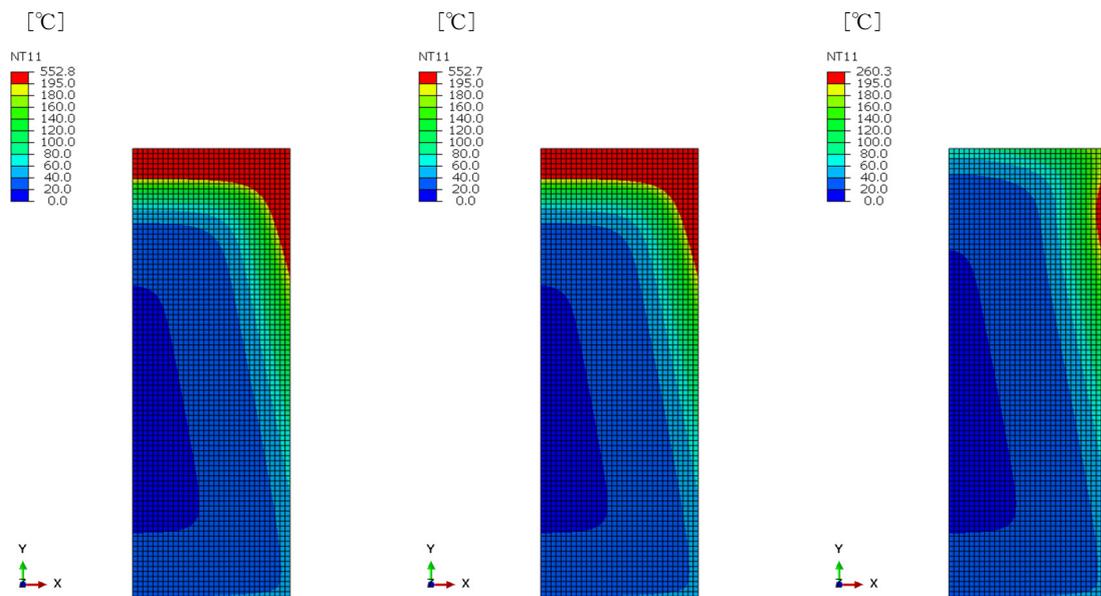
圧力 p MPa	温度 T °C													
	-100	-50	-20	0	20	40	60	80	100	120	140	160	180	200
0.01	1.004	1.004	1.004	1.005	1.005	1.006	1.007	1.009	1.011	1.013	1.016	1.019	1.022	1.025
0.1	1.011	1.007	1.007	1.006	1.007	1.007	1.009	1.010	1.012	1.014	1.016	1.019	1.022	1.026
0.2	1.019	1.010	1.009	1.009	1.009	1.009	1.010	1.011	1.013	1.015	1.017	1.020	1.023	1.026
0.5	1.043	1.021	1.017	1.015	1.014	1.013	1.013	1.014	1.015	1.017	1.019	1.022	1.024	1.028
1	1.085	1.039	1.031	1.026	1.022	1.020	1.019	1.019	1.020	1.021	1.022	1.025	1.027	1.030
2	1.174	1.077	1.058	1.047	1.040	1.035	1.031	1.030	1.029	1.029	1.029	1.031	1.033	1.035
5	1.562	1.196	1.140	1.112	1.092	1.078	1.067	1.060	1.055	1.052	1.049	1.048	1.048	1.049
10	2.374	1.408	1.275	1.216	1.174	1.145	1.124	1.108	1.096	1.087	1.081	1.076	1.073	1.072
20	1.986	1.622	1.446	1.361	1.297	1.249	1.212	1.183	1.161	1.145	1.131	1.121	1.114	1.108
50	1.604	1.505	1.446	1.400	1.360	1.325	1.295	1.268	1.244	1.224	1.206	1.191	1.179	1.169
80	—	1.439	1.402	1.370	1.339	1.311	1.288	1.268	1.251	1.237	1.223	1.212	1.202	1.193
100	—	1.417	1.388	1.359	1.329	1.303	1.281	1.262	1.247	1.234	1.223	1.214	1.206	1.198

圧力 p MPa	温度 T °C													
	250	300	350	400	450	500	550	600	650	700	750	800	900	1000
0.01	1.035	1.045	1.057	1.069	1.081	1.093	1.104	1.116	1.126	1.136	1.146	1.155	1.171	1.185
0.1	1.035	1.046	1.057	1.069	1.081	1.093	1.105	1.116	1.126	1.137	1.146	1.155	1.171	1.185
0.2	1.035	1.046	1.057	1.069	1.081	1.093	1.105	1.116	1.127	1.137	1.146	1.155	1.171	1.186
0.5	1.037	1.047	1.058	1.070	1.082	1.094	1.105	1.116	1.127	1.137	1.146	1.155	1.172	1.186
1	1.039	1.049	1.060	1.071	1.083	1.094	1.106	1.117	1.127	1.137	1.147	1.156	1.172	1.186
2	1.042	1.052	1.062	1.073	1.085	1.096	1.107	1.118	1.129	1.138	1.148	1.157	1.173	1.187
5	1.054	1.061	1.070	1.080	1.090	1.101	1.111	1.122	1.132	1.141	1.150	1.159	1.175	1.188
10	1.071	1.075	1.081	1.090	1.099	1.108	1.118	1.128	1.137	1.146	1.155	1.163	1.178	1.191
20	1.100	1.099	1.102	1.107	1.114	1.121	1.130	1.138	1.146	1.154	1.162	1.170	1.184	1.196
50	1.151	1.141	1.138	1.138	1.141	1.146	1.152	1.158	1.165	1.172	1.179	1.185	1.197	1.208
80	1.175	1.164	1.158	1.156	1.157	1.160	1.164	1.169	1.175	1.181	1.187	1.193	1.204	1.215
100	1.184	1.175	1.169	1.166	1.166	1.168	1.171	1.175	1.180	1.186	1.191	1.197	1.207	1.218



(a) 空気の熱伝導考慮&放射考慮 (b) 空気の熱伝導無し (c) 放射無し

図 2.1-74 SR 温度保持終了時の温度分布の比較 (モデル全体)



(a) 空気の熱伝導考慮&放射考慮 (b) 空気の熱伝導無し (c) 放射無し

図 2.1-75 SR 温度保持終了時の温度分布の比較 (アスファルト)

参考文献

- 原子力発電環境整備機構, 包括的技術報告: 我が国における安全な地層処分の実現—適切なサイト選定に向けたセーフティーケースの構築— レビュー版, NUMO-TR-18-03, 2018.
- 金 他, すみ肉溶接で生じる面外変形の高精度予測, 溶接学会論文集, 第 23 巻, 第 3 号, 2005.
- 国立研究開発法人 日本原子力研究開発機構, 平成 28 年度 地層処分技術調査等事業 処分システム評価確証技術開発 報告書, 2017.
- 甲藤好郎, 伝熱概論, 養賢堂, 1989.
- 日本機械学会, 伝熱工学資料 改訂第 5 版, 2009.
- 日本産業規格, 保温保冷工事施工標準 附属書 D, JIS A 9501.
- 日本溶接協会, 接合溶接技術 Q&A1000 Q-07-06-02.
- 齋藤秀人 他, 火災時におけるコンクリート内部温度の予測手法, 清水建設研究報告, 第 80 号, 平成 16 年 10 月, 2004.

2.2 廃棄体パッケージ内充填材の仕様の検討

2.2.1 はじめに

本項では、2.1.3「廃棄体パッケージ内充填材の仕様の検討」において実施した各検討や試験に関して、報告書本編の補足資料として試験条件や試験結果、検討内容の詳細などを記したものである。

2.2.2 廃棄体パッケージ内充填材のセメント系材料からの水素ガス発生の抑制に関する検討

本項では、セメント系材料からの放射線分解による水素ガス発生量の抑制方法やその効果、及び水素ガス発生量の見積もり方法に関する知見拡充を目的に、以下の検討を実施した。

- ・ 廃棄体パッケージ内充填材のセメント系材料からの水素ガス発生量に関する検討
- ・ 水素ガス発生が廃棄体パッケージ内の圧力上昇に及ぼす影響の検討

(1) 廃棄体パッケージ内充填材のセメント系材料からの水素ガス発生量に関する検討

平成 30 年度、廃棄体パッケージ内充填材のセメント系材料からの放射線分解による水素ガス発生に関して検討するため、セメントの種類及び水セメント比の異なるセメントペースト試料を作製し、 γ 線照射による水素ガス発生量を測定した。また、試料中の水分量が水素ガス発生量に大きく影響することが推測されることから、乾燥処理し、水分量を低減した試料についても検討した。その結果、試料中に含まれる水分量を少なくする手法としてセメント系材料を乾燥することが有効な手段の一つであることを明らかにした。また、セメント系材料からの水素ガス発生は、自由水量に大きく依存することが分かった。一方で、高炉スラグを混合した配合では、普通ポルトランドセメント(以下、OPC)を使用した試料の水素ガス発生量と水分量の関係のそれとは異なる傾向が見られた。既往の文献から共存元素が水素ガス発生に影響を及ぼすことも示唆されており、共存元素の影響についても検討していく必要があることが明らかとなった。

平成 31 年度は、廃棄体パッケージ内充填材のセメント系材料からの水素ガス発生量を評価するデータを蓄積するため、平成 30 年度と同様にセメント系材料の水分量と水素ガス発生量の関係を検討した。特に、自由水が少ない試料についての水素ガス発生量を評価した。高炉スラグ添加の影響については、高炉スラグ混合量が異なる配合の試料を作製し、水素ガス発生量の違いを検討した。加えて、実際に使用される廃棄体パッケージ内充填材は骨材及び化学混和剤を使用することから、これらについて水素ガス発生に及ぼす影響についても検討した。

また、平成 30 年度に実施した水素ガス発生量については、照射線量当たりの水素ガス発生量でデータを整理した。水素ガス発生量の見積りには G 値 (吸収エネルギー100eV あたりに生成する水素分子数) が必要となる。セメント系材料の G 値を評価するためには、試料に対する吸収線量より G 値を算出し、評価することが必要となる。そこで、平成 31 年度は、試料に対する吸収線量を算出し、セメント系材料からの水素ガス発生量 (G 値) の見積り方法について考察した。

1) 照射試験試料の基本特性

① 試料の水準

照射試験に用いるセメントペースト試料の水準を表 2.2-1 に示す。OPC を使用した水準及びフライアッシュ混合セメント (以下、FAC30) を使用した水準については、セメント系材料に含まれる水分量と水素ガス発生量の関係の評価することを目的とし、特に、自由水量 10%以下の試料を作製した。高炉スラグを混合した水準については、高炉スラグの混合率を内割で 30mass%、60mass%、90mass%とした試料を作製した。なお、高炉スラグを 30mass%及び 60mass%混合

した水準については、自由水量を減少させた試料も作製した。

表 2.2-1 セメントペースト試料の水準

試料名	セメント配合[C](mass%)			W/C (mass%)	養生	乾燥条件		材齢 (ヵ月)	備考
	OPC	BFS	FA			温度	時間		
OPC	100	—	—	45	1ヵ月, 20℃ 封緘養生	飽水		1	
OPC-b	100	—	—	45		飽水		3	加工後水中養生
OPC-①	100	—	—	45		50℃	6hr	1	
OPC-②	100	—	—	45		80℃	6hr	1	
OPC-③	100	—	—	45		80℃	8hr	3	加工後水中養生
OPC-④	100	—	—	45		80℃	24hr	1	
OPC-⑤	100	—	—	45		105℃	72hr	1	
OPC-⑥	100	—	—	45		150℃	3hr	1	
FAC30	70	—	30	45	1ヵ月, 20℃ 封緘養生	飽水		3	加工後水中養生
FAC30-①	70	—	30	45		50℃	6h	1	
FAC30-②	70	—	30	45		50℃	12hr	3	加工後水中養生
FAC30-③	70	—	30	45		80℃	6hr	1	
FAC30-④	70	—	30	45		80℃	24hr	1	
FAC30-⑤	70	—	30	45		105℃	72hr	1	
BFSC30	70	30	—	45	1ヵ月, 20℃ 封緘養生	飽水		1	
BFSC30-①	70	30	—	45		80℃	6hr	3	加工後水中養生
BFSC30-②	70	30	—	45		80℃	24hr	3	加工後水中養生
BFSC60	40	60	—	45		飽水		1	
BFSC60-①	40	60	—	45		80℃	6hr	3	加工後水中養生
BFSC60-②	40	60	—	45		80℃	24hr	3	加工後水中養生
BFSC90	10	90	—	45		飽水		1	

OPC: 研究用セメント, FA: フライアッシュ, BFS: 高炉スラグ, W/C: 水セメント比

照射試験に用いるモルタル試料の水準を表 2.2-2 に示す。骨材及び化学混和剤が水素ガス発生に及ぼす影響についても検討するため、モルタル試料を作製した。化学混和剤は、一般的に用いられる減水剤及び高性能 AE 減水剤であるリグニンスルホン酸系、ナフタレンスルホン酸系、ポリカルボン酸系の3種類とした。

表 2.2-2 モルタル試料の水準

試料名	セメント(C)	骨材(S)	化学混和剤	S/C	W/C (mass%)	養生・材齢	含水条件
OPC-M	OPC	珪砂	—	2	45	20℃, 封緘養生 材齢1ヵ月	表乾
OPC-M-LS	OPC	珪砂	リグニン系(C×0.6mass%)	2	45		表乾
OPC-M-NS	OPC	珪砂	ナフタレン系(C×0.6mass%)	2	45		表乾
OPC-M-PC	OPC	珪砂	ポリカルボン酸系(C×0.85mass%)	2	45		表乾

OPC: 研究用セメント, S/C: 砂セメント比, W/C: 水セメント比

② 照射試験試料の作製

(a) 使用材料及び試料形状

照射試験に用いる試料の作製に用いる使用材料を表 2.2-3 に示す。

ペースト試料は、すべての水準において水セメント比（以下、W/C）を W/C=0.45 とした。20℃で1ヵ月間封緘養生した後、所定の形状に加工し、表 2.2-1 に示した条件にて飽水及び乾燥した。

なお、材齢3ヵ月の試料については、追加の試験であったため、加工後さらに2ヵ月間水中養生した後に乾燥処理した。試料形状は、昨年度と同様に約φ6.7mm×長さ13.4mmの円柱状とした。

モルタル試料についても試料形状は、ペースト試料と同様とした。これは、本試験では試料を封入するアンプル管の形状からφ7mm以下の試料とする必要があったためである。この試料形状を考慮し、骨材には5号珪砂を用いてモルタル試料を作製した。モルタル試料における砂セメント比(S/C)はS/C=2とした。化学混和剤の添加量は、カタログにおける各製品の標準添加量を参考とした。

表 2.2-3 使用材料

材 料	仕 様
普通ポルトランドセメント(OPC)	一般社団法人セメント協会, 研究用セメント
フライアッシュ(FA)	(株)テクノ中部, JIS II 種
高炉スラグ(BFS)	エスメント関東(株), エスメント P(比表面積 4,240cm ² /g)
砂	5号珪砂(山川産業社掛津産)
化学混和剤	リグニンスルホン酸系: マスターポゾリス No.70 ナフタレンスルホン酸系: マイティ 150 ポリカルボン酸系: マスターグレニウム SP8SV
練混ぜ水	イオン交換水

(b) ペースト試料の乾燥処理

ペースト試料については、試料中における自由水量を変えるため、試料の乾燥処理を実施した。試料の乾燥条件及び乾燥処理による質量減少率を

表 2.2-4 に示す。表の質量減少率では、乾燥前の飽水状態の試料から乾燥処理により減少した試料質量の割合を示した。乾燥温度と時間を調整し、水分の蒸発量を変えて自由水量の異なる試料を作製した。作製した試料の自由水量の測定結果は2) ② (a) 項に後述した。

表 2.2-4 試料の乾燥条件と質量減少率

試料名	乾燥条件		乾燥処理による 質量減少率※1 (mass%)
	温度	時間	
OPC-①	50°C	6hr	5.9
OPC-②	80°C	6hr	13.4
OPC-③	80°C	8hr	18.9
OPC-④	80°C	22hr	20.5
OPC-⑤	105°C	79hr	22.1
OPC-⑥	150°C	6hr	23.3
FAC30-①	50°C	6h	6.4
FAC30-②	50°C	11hr	15.3
FAC30-③	80°C	6hr	21.9
FAC30-④	80°C	24hr	23.0
FAC30-⑤	105°C	72hr	24.2
BFSC30-①	80°C	6hr	15.6
BFSC30-②	80°C	24hr	19.3
BFSC60-①	80°C	6hr	15.5
BFSC60-②	80°C	24hr	19.7

※1 乾燥前の飽水試料から乾燥処理により減少した質量割合

③ 照射試験試料の分析項目及び方法

(a) 化学組成

蛍光 X 線分析により、照射試験試料の化学組成を測定した（測定装置：(株)リガク社製 蛍光 X 線分析装置 ZRX PrimusIV）。また、強熱減量 (ig.loss) の測定には、JIS R 5202 を準用した。化学組成分析試料の一覧を表 2.2-5 に示す。分析試料は、3 日間真空デシケータ中で乾燥後、微粉砕したものをを用いた。化学組成の測定値は、後述する 3) において試料に対する吸収線量を求めるために用いた。

表 2.2-5 化学組成分析試料の一覧

試料名	試料条件			
	セメント(C)	骨材(S)	W/C	養生・材齢
OPC	OPC	—	0.45	20°C、封緘養生 28 日
FAC30	OPC:FA=7:3	—	0.45	
BFSC30	OPC:BFS=7:3	—	0.45	
BFSC60	OPC:BFS=4:6	—	0.45	
BFSC90	OPC:BFS=1:9	—	0.45	
OPC-M	OPC	珪砂 S/C=2	0.45	

(b) 粉末 X 線回折 (XRD) による鉱物の同定

セメント硬化体試料の水和状態を把握するため、XRD による結晶鉱物の同定を実施した。測定には、照射試験に供する試料と同様に作製した試料をメノウ乳鉢で微粉碎して用いた。測定条件を以下に示す。

- ・装置：X'Pert PRO MPDP (パナリティカル社製)
- ・条件：ターゲット Cu, 電流-電圧 45kV-40mA, 走査範囲 $2\theta = 5 \sim 65^\circ$,
スリットソーラーズリット 0.04rad, 発散スリット: 1° ,
散乱防止スリット: 2° , マスク 15mm, ステップサイズ: $0.033^\circ / \text{step}$

(c) 示差熱-熱重量分析(TG-DTA)

試料に含有する Ca(OH)_2 量及び CaCO_3 量を測定するため、TG-DTA 測定を実施した。測定には XRD 測定と同様にメノウ乳鉢で微粉碎した試料を用いた。450°C 付近の TG 曲線より Ca(OH)_2 を、650°C 付近の TG 曲線より CaCO_3 量を算出した。

- ・装置：Thermo plus EVO2 (リガク社製)
- ・条件：昇温速度: $10^\circ\text{C}/\text{min}$
測定温度範囲: 室温 \sim 1000°C
測定雰囲気: N_2 ガス
リファレンス: $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$
試料量: 約 30mg

④ 照射試験試料の分析結果

(a) 化学組成分析結果

化学組成の分析結果を表 2.2-6 に示す。

表 2.2-6 セメント硬化体試料の化学組成分析結果

試料名	化学組成(mass%)												合計
	ig.loss	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	SO ₃	Na ₂ O	K ₂ O	TiO ₂	P ₂ O ₅	MnO	
OPC	26.95	15.94	3.54	2.36	47.86	0.79	1.49	0.26	0.32	0.17	0.13	0.08	99.89
FAC30	25.11	25.59	8.19	2.69	34.81	0.77	1.18	0.29	0.46	0.38	0.15	0.06	99.68
BFSC30	26.98	18.87	5.38	1.71	42.72	1.96	1.17	0.16	0.18	0.26	0.09	0.09	99.78
BFSC60	27.82	21.36	7.09	1.04	37.09	3.06	0.86	0.12	0.15	0.33	0.05	0.11	99.49
BFSC90	22.28	25.97	9.49	0.45	35.34	4.44	0.42	0.15	0.22	0.43	0.01	0.13	100.03
OPC-M	10.74	59.35	6.19	1.67	18.31	0.47	0.53	0.71	1.93	0.14	0.05	0.04	100.13

(b) 鉱物の同定結果

XRD の測定結果を図 2.2-1~図 2.2-6 に示す。

OPC を用いた試料では、すべての試料で未水和セメント鉱物であるビーライトのピークが認められた。水和物では、ポルトランダイト (Ca(OH)_2)、C-S-H が同定された。また、エトリンサイトは OPC、OPC-b 及び OPC-①の試料に、モノサルフェートは OPC、OPC-b、OPC-①、OPC-②、OPC-③及び OPC-④の試料で同定された。OPC-⑤ではヘミカーボネートが同定され、OPC-⑥ではカルシウムアルミネート水和物は検出されなかった。OPC が元の試料であり、①~⑥は、同一試料を乾燥条件のみを変えた試料であるが、エトリンサイトやモノサルフェートのようなカ

ルシウムアルミネート水和物には違いが見られ、乾燥処理によりに影響を受けているものと考えられる。

FAC30 を用いた試料では、フライアッシュ起源のムライト及びクォーツがすべての試料で同定された。その他、未水和セメント鉱物であるビーライト、水和物のポルトランダイト ($\text{Ca}(\text{OH})_2$) 及び C-S-H もすべての試料で確認された。FAC30 及び FAC30-①ではエトリンガイトとモノサルフェートが同定された。FAC30-②、FAC30-③、FAC-④及び FAC30-⑤では、モノサルフェートのピークのみが同定された。OPC を用いた試料と同様に、カルシウムアルミネート水和物については、乾燥条件による違いが見られ、その他の鉱物については同一であった。

高炉スラグを混合した BFSC30 では、ポルトランダイト、C-S-H、エトリンガイト及びビーライトが同定された。BFSC60 では、ポルトランダイト、C-S-H 及びビーライトが同定された。その他、BFSC60 及び BFSC60-①ではエトリンガイト及びモノカーボネート、BFSC60-②ではモノサルフェート及びモノカーボネートが同定された。BFSC90 ではポルトランダイトは検出されず、C-S-H 及びビーライトが同定された。ピーク強度は小さいがモノカーボネートのピークも確認された。高炉スラグの混合割合が多くなるとポルトランダイトの生成量が少なくなっていた。

モルタル試料で同定された鉱物は、骨材起源であるクォーツ、長石類(Albite, Microcline)と、セメント起源であるポルトランダイト、C-S-H、ビーライトであった。混和剤の有無、混和剤の種類による違いは、鉱物の同定結果には見られなかった。

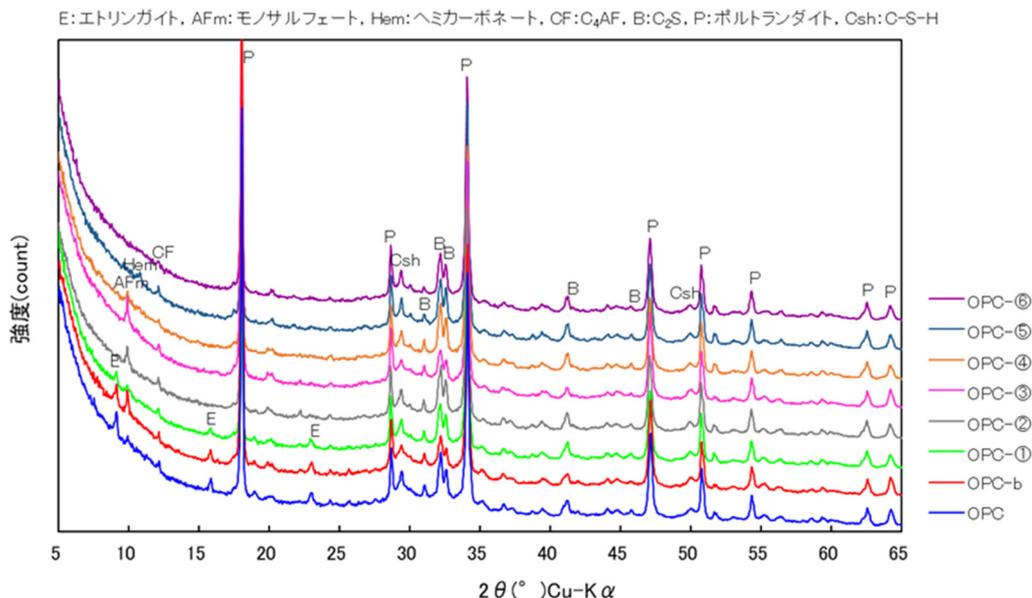


図 2.2-1 OPC 試料の XRD 測定結果

E: エトリンガイト, AFm: モノサルフェート, CF: C₄AF, B: C₂S, P: ポルトランドライト, Csh: C-S-H, Q: クォーツ, M: ムライト

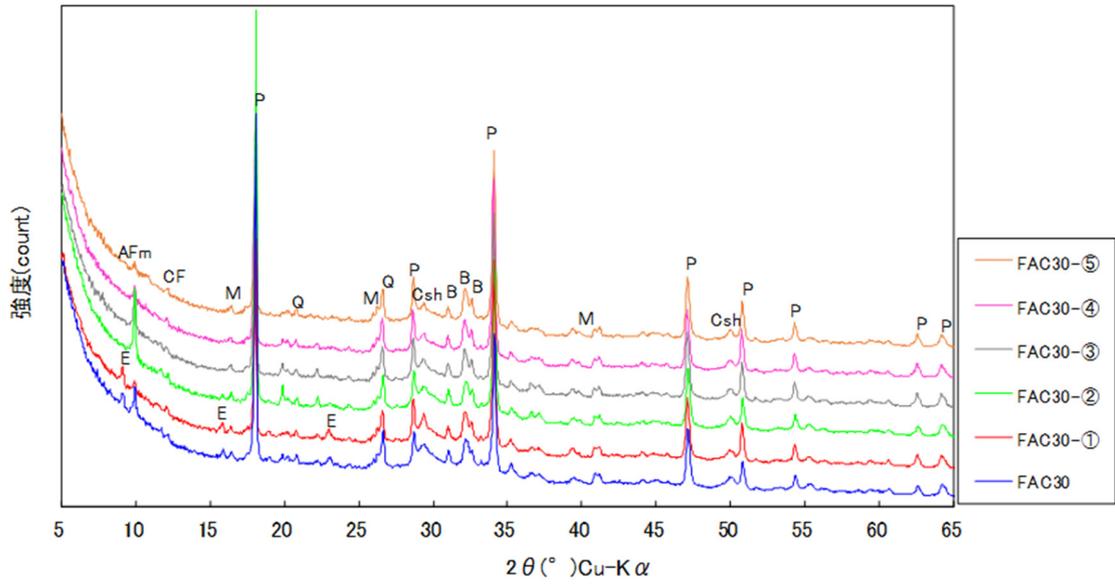


図 2.2-2 FAC30 試料の XRD 測定結果

E: エトリンガイト, B: C₂S, P: ポルトランドライト, Csh: C-S-H

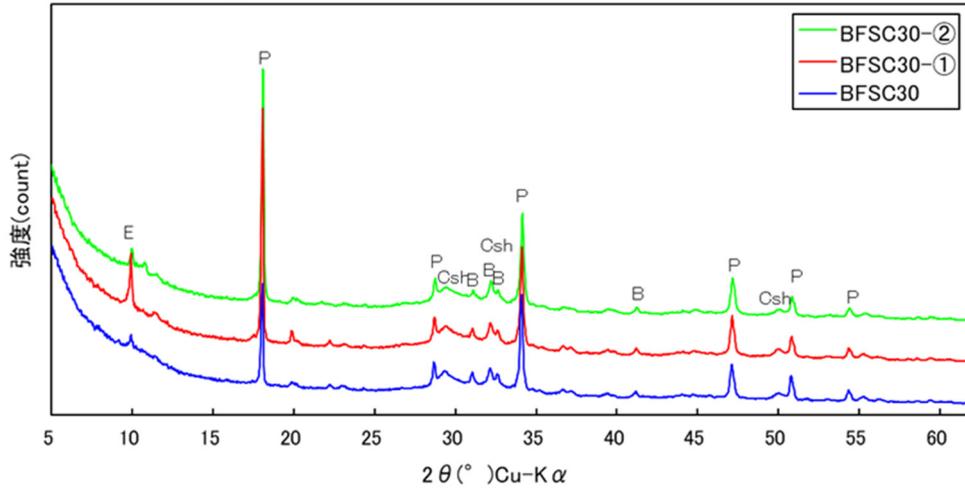


図 2.2-3 BFSC30 試料の XRD 測定結果

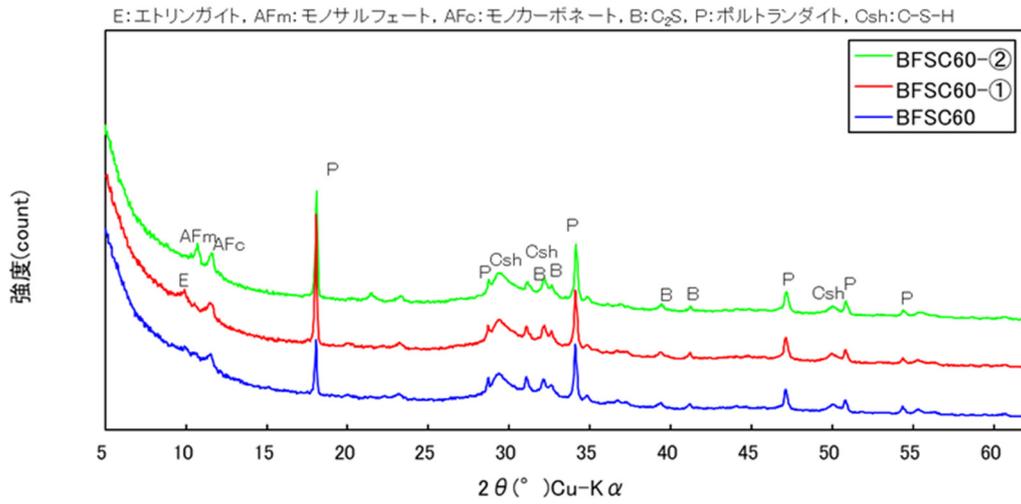


図 2.2-4 BFSC60 試料の XRD 測定結果

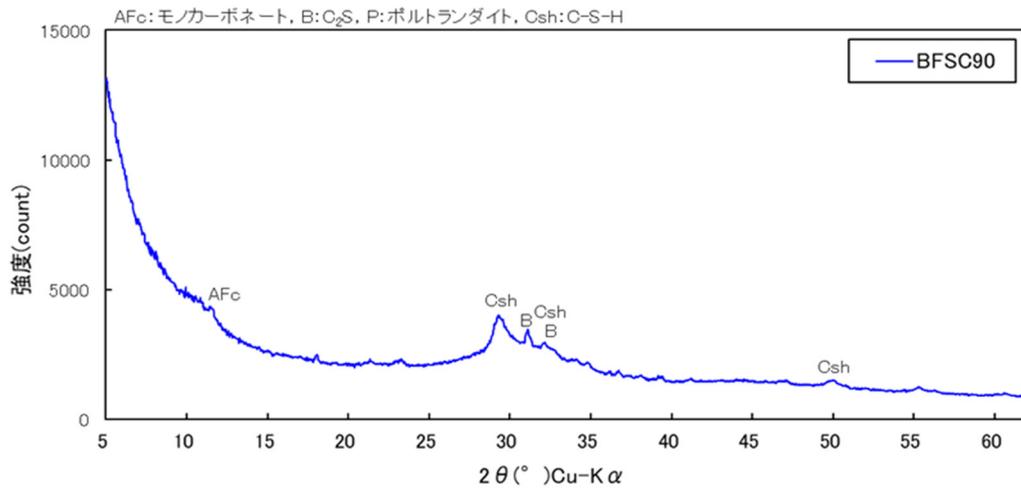


図 2.2-5 BFSC90 試料の XRD 測定結果

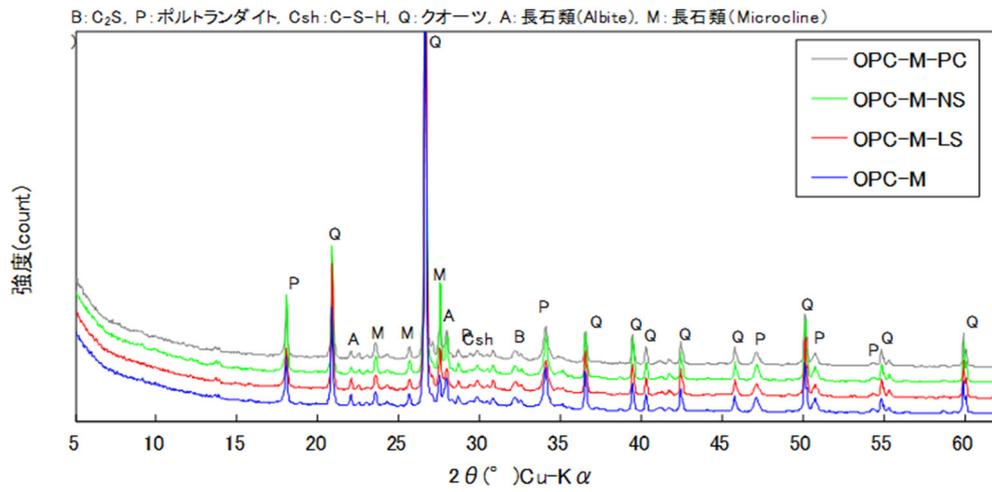


図 2.2-6 モルタル試料の XRD 測定結果

(c) TG-DTA 測定結果

TG-DTA より算出した Ca(OH)_2 含有量及び CaCO_3 含有量を表 2.2-7 に、 Ca(OH)_2 含有量を図 2.2-7 に示す。なお、TG-DTA 曲線を図 2.2-8～図 2.2-13 に示す。

いずれの試料も炭酸カルシウムは定量下限以下となった。水酸化カルシウム含有量は、使用しているセメントの種類ごとにほぼ同様な含有量となり、OPC が最も多く、次に FAC30 と BFSC30、BFSC60 の順に少なくなった。BFSC90 では、水酸化カルシウムは検出されなかった。今回作製した試料では、材齢の違いによる水酸化カルシウム含有量の違いはあまり見られなかった。モルタル試料は同程度の Ca(OH)_2 含有量となった。

表 2.2-7 Ca(OH)_2 含有量及び CaCO_3 含有量

試料名	材齢	Ca(OH)_2 含有量(mass%)	CaCO_3 含有量(mass%)
OPC	1カ月	14.9	N.D.
OPC-b	3カ月	14.8	N.D.
OPC-①	1カ月	15.2	N.D.
OPC-②	1カ月	16.7	N.D.
OPC-③	3カ月	18.5	N.D.
OPC-④	1カ月	17.1	N.D.
OPC-⑤	1カ月	18.1	N.D.
OPC-⑥	1カ月	18.5	N.D.
FAC30	1カ月	9.1	N.D.
FAC30-①	1カ月	9.3	N.D.
FAC30-②	3カ月	10.8	N.D.
FAC30-③	1カ月	11.3	N.D.
FAC30-④	1カ月	12.1	N.D.
FAC30-⑤	1カ月	11.5	N.D.
BFSC30	1カ月	8.7	N.D.
BFSC30-①	3カ月	10.9	N.D.
BFSC30-②	3カ月	11.7	N.D.
BFSC60	1カ月	3.8	N.D.
BFSC60-①	3カ月	5.7	N.D.
BFSC60-②	3カ月	5.6	N.D.
BFSC90	1カ月	N.D.	N.D.
OPC-M	1カ月	5.6	N.D.
OPC-M-LS	1カ月	5.6	N.D.
OPC-M-NS	1カ月	5.3	N.D.
OPC-M-PC	1カ月	5.5	N.D.

N.D.: 定量下限以下

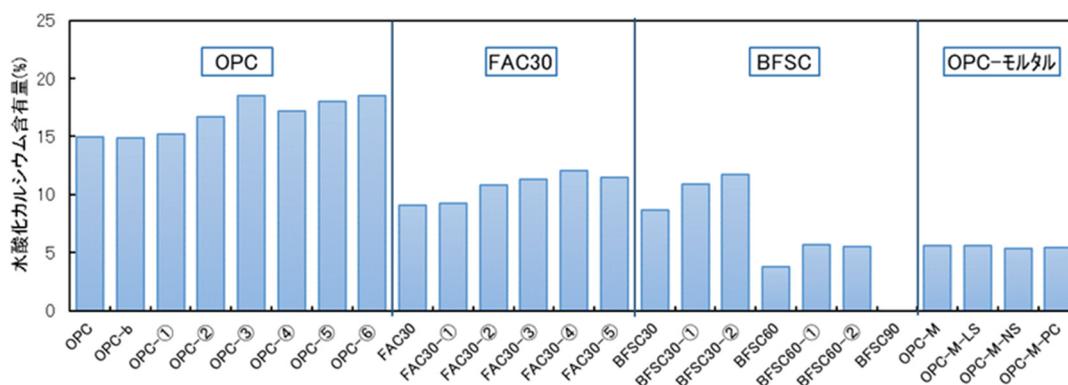


図 2.2-7 Ca(OH)_2 含有量

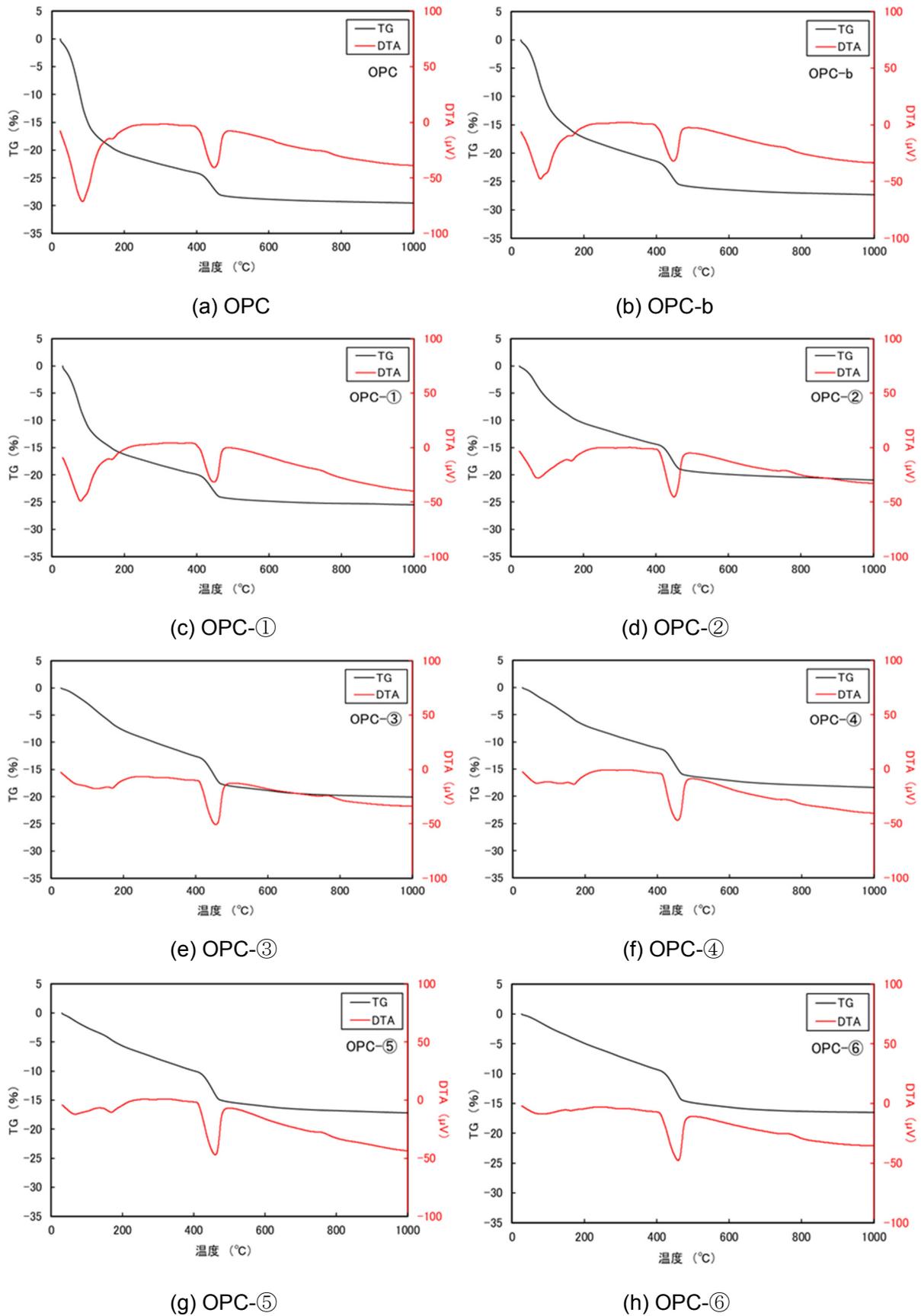
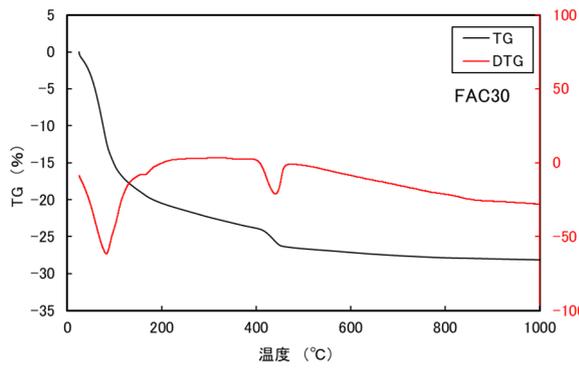
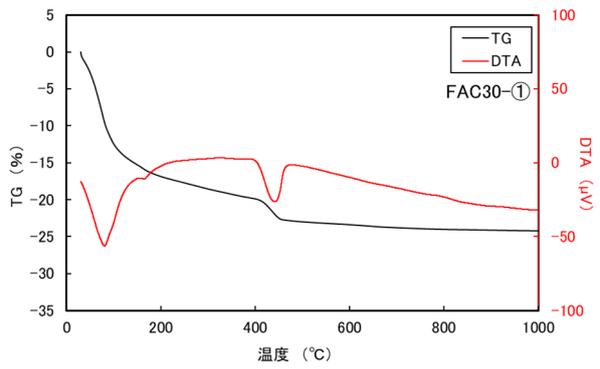


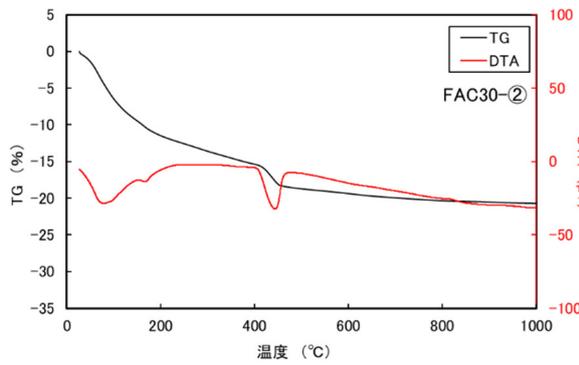
図 2.2-8 OPC 試料の TG-DTA 曲線



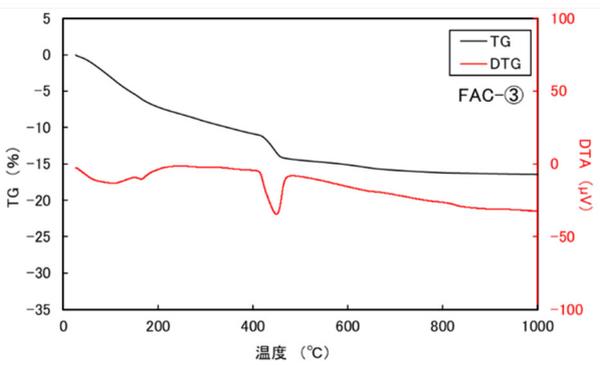
(a) FAC



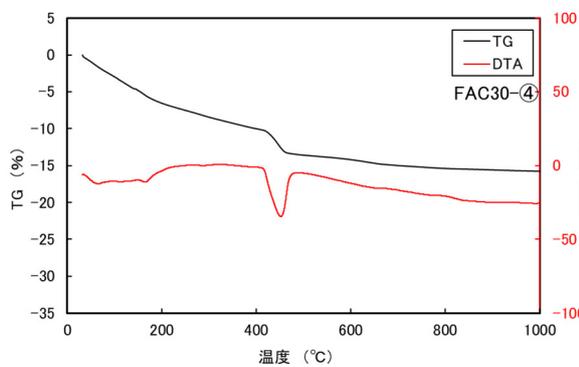
(b) FAC30-①



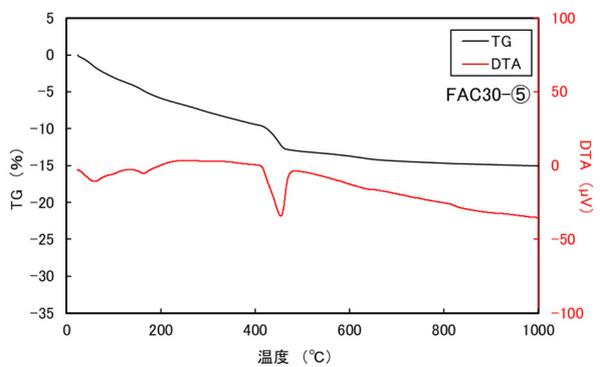
(c) FAC30-②



(d) FAC30-③

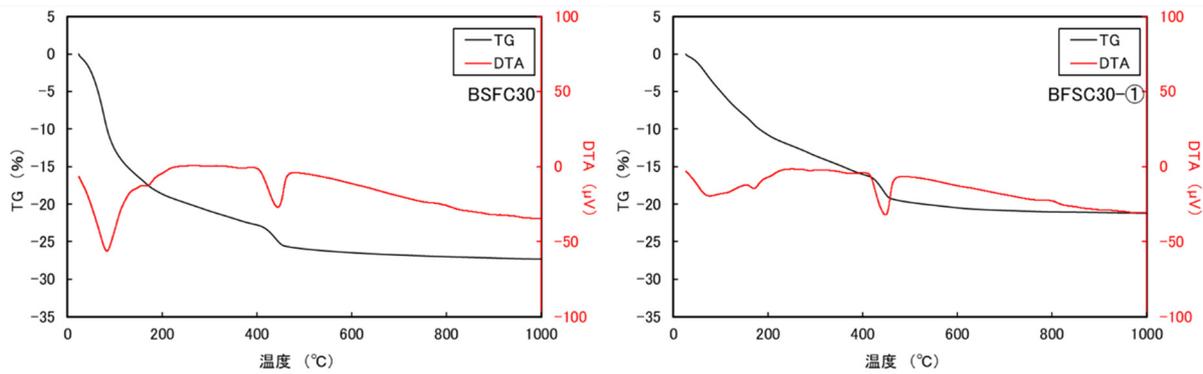


(e) FAC30-④



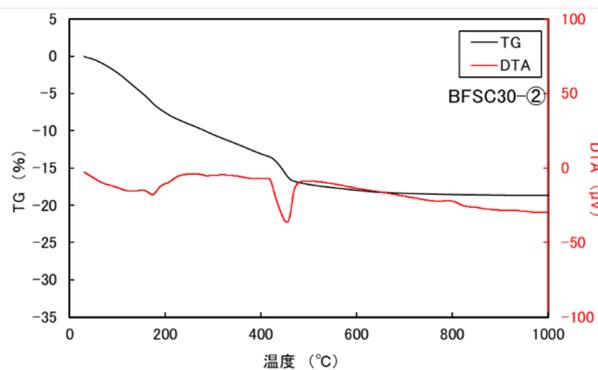
(f) FAC30-⑤

図 2.2-9 FAC30 試料の TG-DTA 曲線



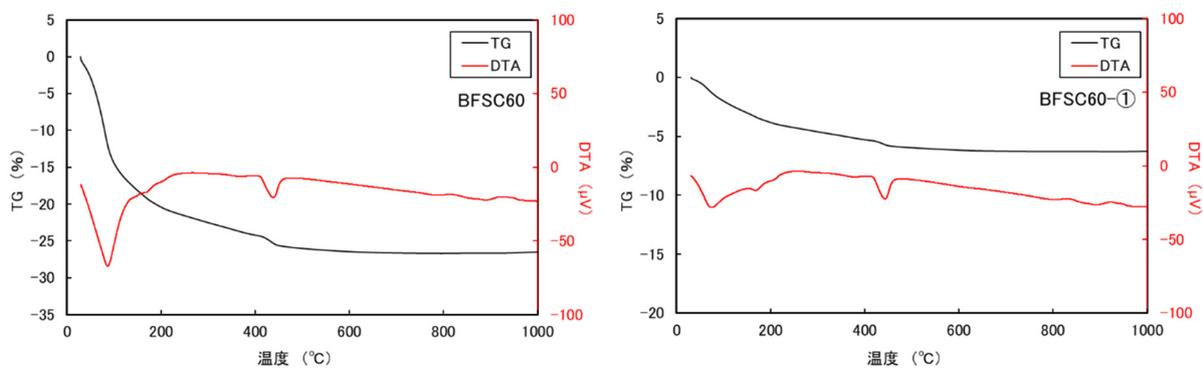
(a) BFSC30

(b) BFSC30-①



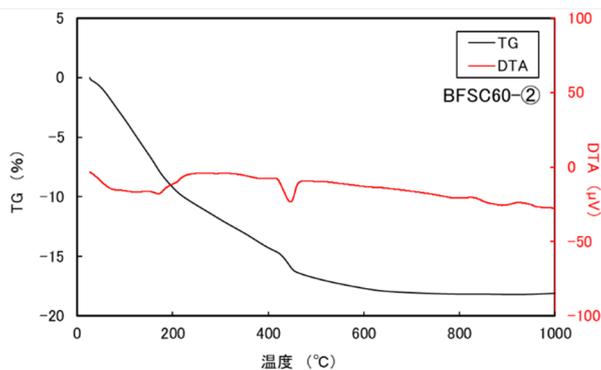
(c) BFSC30-②

図 2.2-10 BFSC30 試料の TG-DTA 曲線



(a) BFSC60

(b) BFSC60-①



(c) BFSC60-②

図 2.2-11 BFSC60 試料の TG-DTA 曲線

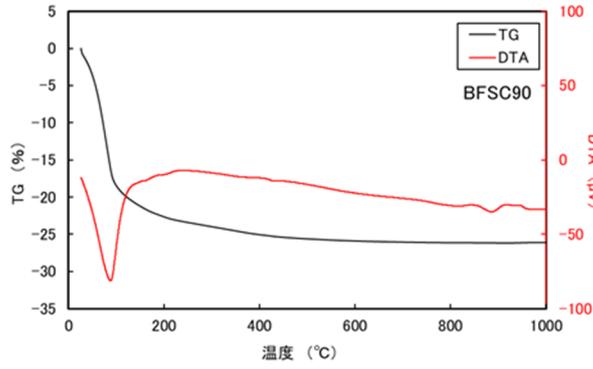
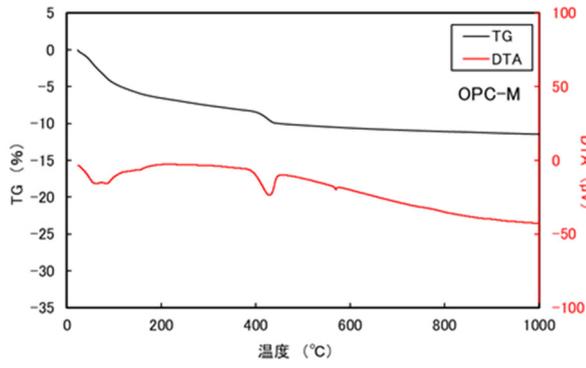
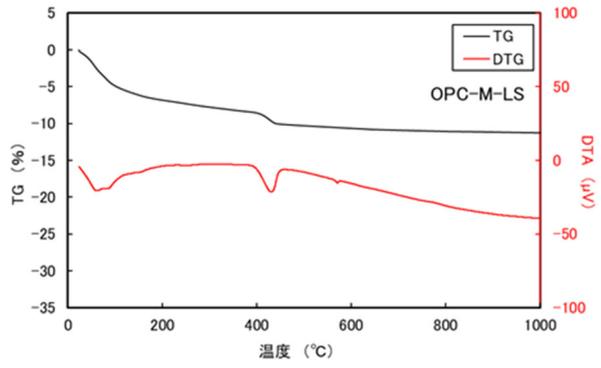


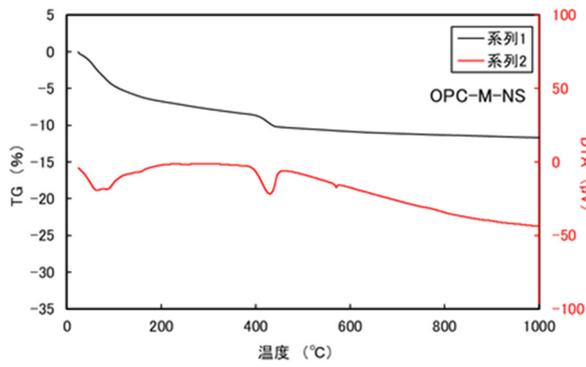
図 2.2-12 BFSC90 試料の TG-DTA 曲線



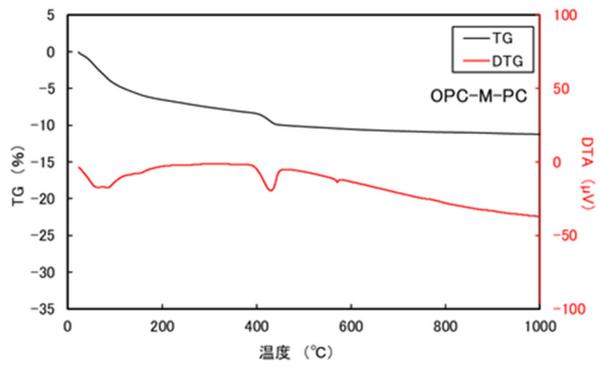
(a) OPC-M



(b) OPC-M-LS



(c) OPC-M-NS



(d) OPC-M-PC

図 2.2-13 モルタル試料の TG-DTA 曲線

2) γ 線による照射試験

① 試験方法

(a) 試料容器への試料の充填

照射試験に供する硬化体試料を平成 30 年度に実績のある溶封システムを用いて照射容器に封入した。溶封システムの系統図を図 2.2-14 に、試料を設置した状況を図 2.2-15 に示す。

照射容器は、パイレックスガラス製で内容積は約 75ml、ガラス厚さ約 2.8mm である。この容器は、発生した水素ガスをリークさせないために基礎的研究で使用されるブレーカブルシール付ガラス試料管である。

本試験では、試料と共に照射容器に高純度空気（純空気）を充填した。試料を照射容器に入れ、約 30kPa までの減圧操作と純空気の導入を 4 回繰り返した後、純空気を約 90kPa まで導入し、溶封した。試料を封入する際に照射容器を真空脱気すると、試料から著しく水分が逸散することが想定される。そのため、大気と純空気を置換する際の減圧操作では圧力を調整することで、できる限り水分の逸散を抑制した。また、試料管の内圧を 90kPa と大気圧より少し減圧することとし、これにより発生した水素ガスのリークを抑制できる。この減圧操作や純空気も水分を含まないガスであるため、試料の乾燥が懸念されるが、平成 30 年度の検討結果より、溶封システムにおける試料の乾燥の影響は大きくないことを確認している。なお、この溶封システムに照射試験試料と並列に水分量測定用試料を繋げることにより、照射試験試料と水分量測定試料の乾燥条件を同一とした。

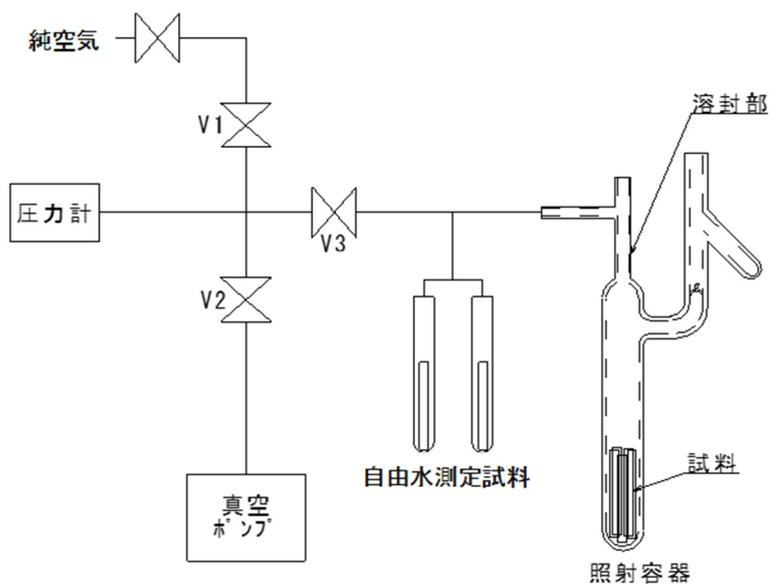


図 2.2-14 溶封システムの系統図



図 2.2-15 試料を溶封システムに設置した状況写真

(b) 自由水量及び結合水量の測定

水和したセメント系材料に含まれる水分量においては、105℃から 1000℃までの間に逸散する水分量を結合水量、105℃以下で逸散する水分量を自由水量（含水率）として評価されることが多い。しかし、セメント水和物では、C-S-H、エトリンガイト、モノサルフェートなど 105℃以下の温度条件で含有する一部の結晶水（結合水）が脱水することが知られている（Scrivener et al., 2016）。100℃以下でも水和物の結合水から脱水が生じるため、セメント系材料においては正確に自由水と結合水の含有量を分離することは難しい。本試験においては、105℃の環境下で試料から蒸発する水分量を自由水量と定義し、105℃から 600℃の間の環境下で蒸発する水分量を結合水量として定義した。600℃以上では CaCO_3 の分解温度条件となり、試料に含有する CaCO_3 からの脱炭酸が生じることから、この影響を受けない温度領域、600℃以下を結合水量とした。また、自由水量と結合水量の合計量を試料に含まれる全水分量とした。

水分量測定用試料には、前述したように溶封システムで封入される照射試料と並列で処理された試料を用いた。105℃の恒温槽に 15 時間以上保管した試料の質量を測定し、質量減少率を自由水量とした。自由水量を測定した後、600℃の電気炉で 3 時間加熱した際の質量減少率を結合水量とした。自由水量、結合水量及び全水分量の計算式を下記(2-1)、(2-2)、(2-3)に示す。なお、水分量の測定試料には、照射試験試料と同形状とするため粉碎しない円柱状の硬化体試料を用いた。

$$w_f = (W_0 - W_{d1}) / W_0 \times 100 \quad (2-1)$$

$$w_c = (W_{d1} - W_{d2}) / W_0 \times 100 \quad (2-2)$$

$$w_{\text{all}} = w_f + w_c \quad (2-3)$$

ここで、 w_f ：自由水量（mass%）

W_0 ：溶封システムで処理後の試料質量（g）

W_{d1} ：105℃乾燥後の質量（g）

w_c ：結合水量（mass%）

W_{d2} ：600℃乾燥後の質量（g）

w_{all} ：全水分量（mass%）

(c) 照射試験

照射試験は国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構（QST）高崎量子応用研究所のコバルト棟で実施した。照射試験の条件を表 2.2-8 に示す

照射試験では、あらかじめ線源強度分布図を入手し、目的の線量率となる照射位置を確認し、試料容器をアルミ製試料固定台に横 1 列に並べて固定した。照射位置は、線量率が約 1kGy/h となる線源カバーからの距離が約 105cm、中央の試料が線源中心から横に約 20cm の位置とした。照射時間は 5 時間とし、照射線量は 1kGy/h×5 時間=5kGy とした。照射実施状況を図 2.2-16 に示す。

表 2.2-8 照射試験の条件

項目	条件
試験	ガンマ線照射試験
照射施設	コバルト 1 棟 第 2 照射室
線源	コバルト 60 (Co-60)
照射線量	5kGy (1kGy/h × 5h)
雰囲気ガス	高純度空気
照射時温度	室温
測定項目	水素



(a) 照射前試料



(b) 照射位置



(c) 照射後試料

図 2.2-16 照射試験の状況

(d) 線量率の測定

照射試料への線量測定は、線量計(アミノグレイ)を用いて、試料の照射と同時に試料設置位置の γ 線照射累積線量を測定した。測定の際は、実照射環境を模擬するため γ 線照射容器に見立てた試験管内の底部へ線量計を入れた。線量計は、日本原子力研究開発機構と日立電線株式会社(現日立金属株式会社)の共同研究により開発されたアラニン線量率測定用素子(φ3mm、長さ30mm)で、ポリスチレン製の容器(外径12mm、長さ50mm、厚さ4mm)に収納されている。 γ 線を照射したアミノグレイは、校正された電子スピン共鳴装置を用いてラジカル濃度を測定することによって線量(水換算:照射された時間と同じ時間数で水が吸収した場合の線量)を求めた。線量計の外観及び線量計設置状況を図 2.2-17 に示す。

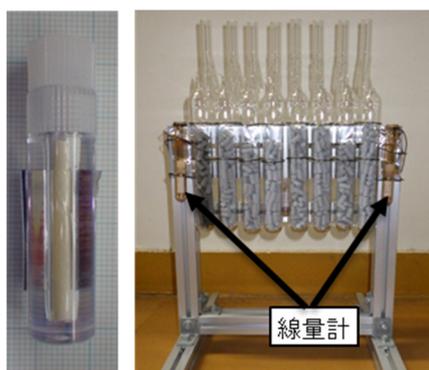


図 2.2-17 線量計 (アミノグレイ) 外観および線量計設置状況

(e) 水素ガスの測定

回収したガスの取り出しは、真空システムを利用して実施した。真空システムの系統図を図 2.2-18 に、外観写真を図 2.2-19 に示す。真空システム系統内は照射容器を設置する前に予め真空排気し、真空状態とした。照射後の照射容器を真空システムに設置し、ブレイク部を破ってガスを移行させた。照射容器を含む系統内へ希ガスを導入し、圧力を約 120kPa の陽圧にし、一定時間放置することにより系統内のガス濃度を均一にした。均一となった系統内のガスを一部サンプリングし、後述のガス濃度測定装置により水素ガス濃度を測定した。

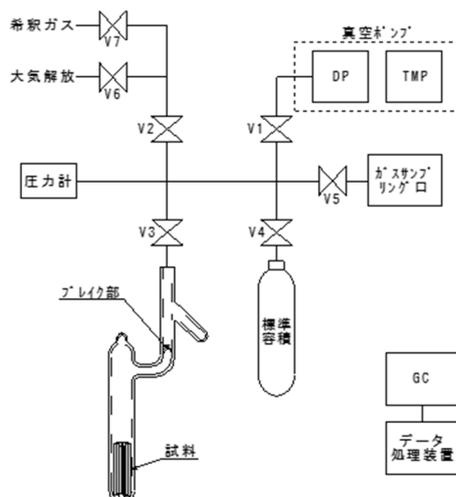


図 2.2-18 真空システム系統図



図 2.2-19 真空システム外観写真

系内に取り出したガスの水素ガス濃度は、ガスクロマトグラフにて測定した。ガスクロマトグラフは、50～2000ppm の範囲を測定する高濃度用と 5～50ppm の範囲を測定する低濃度用の 2 台の装置を用いた。水素ガスの測定にあつては、値付けされた水素標準ガスを用いて検量線を作成した。定量範囲は 5ppm 以上である。ガスクロマトグラフの仕様を表 2.2-9 に示す。

真空システムの水素ガスサンプルポートからガスタイトシリンジを用いて一定量サンプリングし、ガスクロマトグラフに直接導入して水素ガス濃度を測定した。

表 2.2-9 ガスクロマトグラフの仕様

測定機	低濃度水素 (H ₂)測定用 GC	中高濃度水素 (H ₂)測定用 GC
検出器	半導体ガスセンサー方式	TCD
測定範囲	5～50ppm(表示分解能/0.1ppm)	50～2,000ppm
キャリアガス	超高純度合成空気	アルゴン
校正	検量線法 5、10、25、50ppm	検量線法 50、100、500、2000ppm
測定時間	約 5 分/検体	約 10 分/検体
試料量	～1ml	～1ml

② 試験結果

(a) 自由水量及び結合水量の測定結果

自由水量及び結合水量の測定結果を表 2.2-10 に示す。OPC、FAC30 の自由水及び結合水量を図 2.2-20 に、BFSC 及び OPC モルタルの自由水量及び結合水量を図 2.2-21 に示す。OPC と OPC-b では、材齢 1 ヶ月と 3 ヶ月の乾燥していない飽水試料であるが、自由水量及び結合水量ともに大きな違いは見られなかった。OPC よりも FAC30 の方が若干、結合水量が少ないが、いずれの試料も結合水量に大きな差異はなく、自由水量が異なる試料であることが確認された。また、OPC-⑥は自由水を限りなく 0mass%とする目的で 150℃乾燥を実施した。測定上、自由水量は 0mass%となり、この試料については結合水も散逸しているものと考えられる。BFSC の場合、BFSC90 ではセメント量が少ないことから結合水量が少ない試料となった。自由水量に関しては、BFSC30、BFSC60、BFSC90 でそれほど大きな差はなかった。

モルタル試料の場合、いずれの試料も自由水量及び結合水量は同程度であった。

表 2.2-10 自由水量及び結合水量測定結果

試料 No.	乾燥条件		自由水 (mass%)	結合水 (mass%)
	温度	時間		
OPC	飽水		21.40	14.57
OPC-b	飽水		21.60	14.93
OPC-①	50℃	6hr	15.30	14.66
OPC-②	80℃	6hr	10.00	14.95
OPC-③	80℃	8hr	3.02	15.01
OPC-④	80℃	22hr	1.70	15.01
OPC-⑤	105℃	79hr	0.10	14.63
OPC-⑥	150℃	6hr	0.00	13.56
FAC30	飽水		23.66	11.64
FAC30-①	50℃	6h	17.50	11.73
FAC30-②	50℃	11hr	9.88	11.43
FAC30-③	80℃	6hr	3.19	11.26
FAC30-④	80℃	24hr	1.50	11.97
FAC30-⑤	105℃	72hr	0.20	11.39
BFSC30	飽水		22.48	13.55
BFSC30-①	80℃	6hr	6.65	14.98
BFSC30-②	80℃	24hr	2.16	15.03
BFSC60	飽水		23.34	12.27
BFSC60-①	80℃	6hr	8.56	13.52
BFSC60-②	80℃	24hr	3.17	13.66
BFSC90	飽水		25.84	7.69
OPC-M	飽水		9.15	5.55
OPC-M-LS	飽水		10.35	5.64
OPC-M-NS	飽水		9.30	5.56
OPC-M-PC	飽水		9.62	5.67

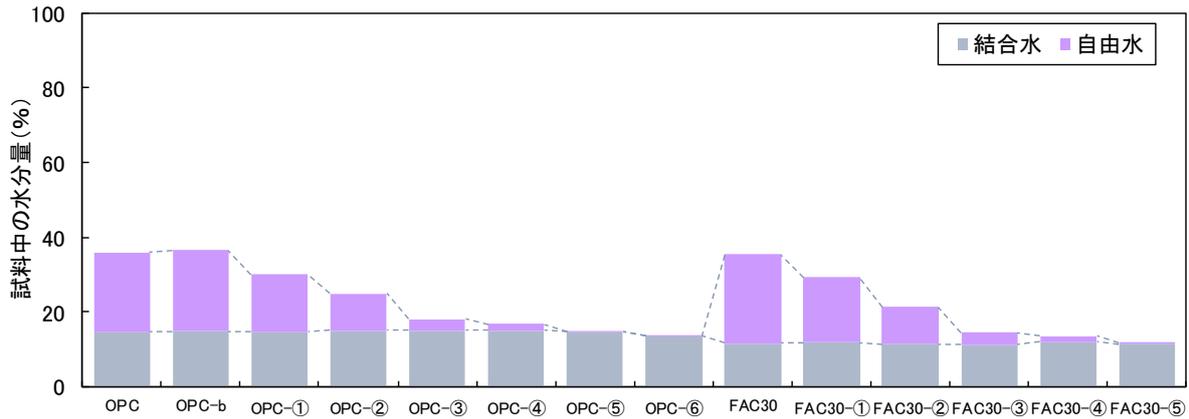


図 2.2-20 OPC、FAC30 の自由水量及び結合水量

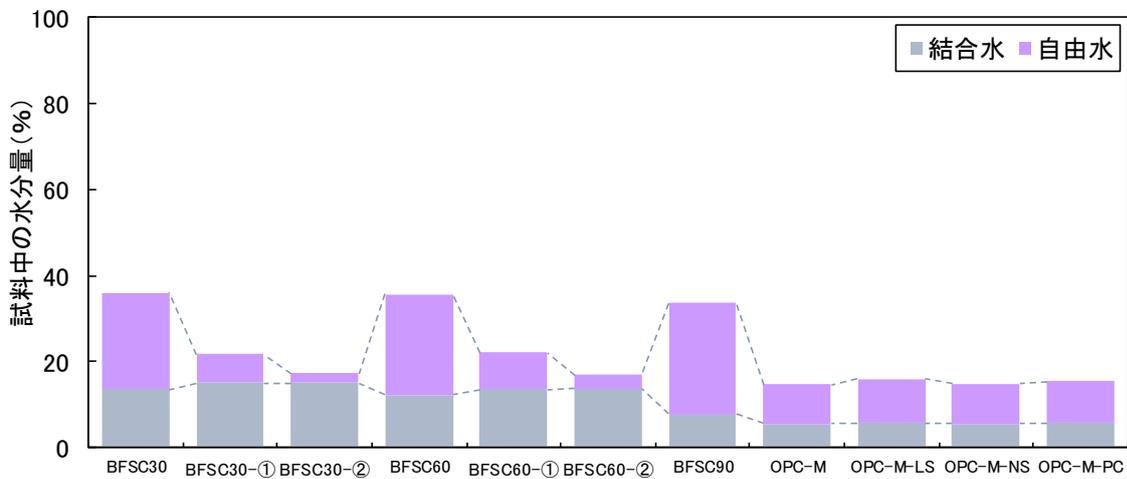


図 2.2-21 BFSC、OPC モルタルの自由水量及び結合水量

(b) 照射試験結果

平成 31 年度は、平成 30 年度の結果を踏まえ、また、自由水量が少ない試料を多く測定するため水素ガス発生量が少なくなることが予想されたことから、測定誤差をなくす目的で、試料量を 40~50g と昨年度の 4~5 倍程度として測定を実施した。ガスクロマトグラフィーにて測定した水素ガス濃度の分析値から以下の式を用いて水素ガス発生量を算出した。

$$H_2(\text{ml}) = H_2 \text{ 分析値}(\text{ppm}) \times \text{測定系容積}(\text{ml}) \times \text{測定系圧力}(\text{kPa}) / \text{大気圧}(\text{kPa}) / 1,000,000$$

$$H_2(\mu\text{mol}) = H_2(\text{ml}) / 22,400(\text{ml/mol}) \times \{273 / (273 + \text{測定系温度}(\text{°C}))\} \times 1,000,000(\mu\text{mol})$$

照射試験の測定結果の一覧を表 2.2-11 に示す。また、表には、試料 1g あたり、単位照射線量(水換算)あたりの水素ガス発生量も併せて示した。

表 2.2-11 照射試験測定結果の一覧

試料名	実照射線量	試料質量	温度	大気圧	測定系容器内圧力	系統容積	水素濃度	水素発生量換算	水素発生量 ^{※1}
	kGy	g	°C	kPa	kPa	ml	ppm	μmol	μmol/g/kGy
OPC	5.27	50.560	22.4	100.525	128.587	122.0	495	3.2	0.01196
OPC-b	5.65	40.376	21.7	102.332	126.095	129.5	424	2.8	0.01227
OPC-①	5.27	40.808	22.0	100.502	121.565	128.6	371	2.4	0.01108
OPC-②	5.27	40.835	22.2	100.545	126.800	137.8	245	1.8	0.00817
OPC-③	5.65	40.622	23.2	101.871	121.885	130.8	97	0.6	0.00272
OPC-④	5.27	41.531	22.5	100.499	120.855	142.7	41	0.3	0.00133
OPC-⑤	5.27	40.242	22.2	100.505	119.047	138.8	10	0.1	0.00032
OPC-⑥	5.04	40.181	19.2	100.882	121.142	137.4	3 ^{※2}	0.0	0.00010
FAC30	5.65	40.220	22.2	101.468	122.850	136.3	306	2.1	0.00917
FAC30-①	5.27	40.780	21.1	100.520	128.249	132.9	398	2.8	0.01301
FAC30-②	5.65	40.591	21.8	101.166	126.724	131.1	241	1.6	0.00713
FAC30-③	5.04	40.251	19.1	100.939	116.803	139.1	85	0.6	0.00281
FAC30-④	5.27	40.794	20.6	100.601	120.933	129.4	44	0.3	0.00132
FAC30-⑤	5.27	40.640	21.7	100.572	120.927	137.7	9	0.1	0.00029
BFSC30	5.04	40.686	17.7	101.316	126.577	127.4	480	3.2	0.01561
BFSC30-①	5.65	40.607	24.5	101.635	126.070	130.5	234	1.6	0.00676
BFSC30-②	5.65	40.916	24.5	101.618	123.003	134.7	70	0.5	0.00202
BFSC60	5.04	40.615	17.8	101.249	126.672	133.7	349	2.4	0.01195
BFSC60-①	5.65	40.689	23.5	101.21	122.449	128.3	320	2.0	0.00888
BFSC60-②	5.65	40.463	23.8	101.209	123.274	134.3	109	0.7	0.00320
BFSC-90	5.04	40.268	18.1	101.222	121.812	135.2	330	2.2	0.01108
OPC-M	5.04	50.245	19.3	100.907	119.757	125.2	232	1.4	0.00568
OPC-M-LS	5.04	50.604	18.5	101.032	119.250	131.5	238	1.5	0.00606
OPC-M-MS	5.04	50.517	18.9	101.001	116.803	133.9	228	1.5	0.00579
OPC-M-PC	5.04	50.336	19.1	100.957	119.883	123.7	223	1.4	0.00539

※1 照射線量(水換算)から算出した単位試料質量あたり、単位照射線量あたりの H₂ 発生量

※2 水素濃度の定量下限値は 5ppm 以上であるため参考値

試料 1g あたり、単位照射線量当たりの水素ガス発生量と自由水量及び全水分量の関係を報告書の図 2.1-61 に示す。なお、全水分量は自由水量と結合水量の合計である。また、平成 30 年度の結果を併せてプロットした。

自由水量と水素ガス発生量の関係は概ね直線的であり、自由水量が少ないほど水素ガス発生量は少ない結果となった。自由水量 0mass%であった OPC-⑥も 3ppm と値が観測された。自由水が含まれない試料においても水素ガスが検出されたことから、結合水からの水素ガス発生も考えられるが、自由水からの水素ガス発生に比較しその量が少ないため、自由水量と水素ガス発生量の間には直線関係が見られたものと推測される。なお、定量下限値は 5ppm 以上であるため参考値となる。また、FAC や BFSC においては、自由水量と水素ガス発生量の直線関係から乖離する点も見られた。モルタル試料の水素ガス発生量は、混和剤の有無及び混和剤の種類によらず、いずれの試料も同程度の水素ガス発生量となった。今回の結果からは、骨材が含まれたことによる影響及び混和剤の添加による水素ガス発生への影響は認められなかった。本試験では、測定システム上試料形状に制限があり、珪砂を用いた。しかし、コンクリートで使用する骨材において吸水された水分がどのような形態で存在し、水素ガス発生へ影響を及ぼすかは不明である。コンクリートのように骨材割合が多くなった場合、骨材に吸水される水がどの程度水素ガス発生へ影響を及ぼすか今後検討していくことが必要である。全水分量と水素ガス発生量の関係でも直線関係が得られた。全水分量が 10mass%程度以下では、水素ガス発生が少ない領域があり、セメント系

材料においては結合水からの水素ガス発生よりも自由水からの水素ガス発生が大きく寄与していると考えられる。

ここで、これらの結果は、照射線量（水換算）に対して整理した結果であるため、試料に対する吸収線量を算出した上で、水素ガス発生量について整理した結果を次項 3) で後述する。

3) G 値の検討

① 試料に対する吸収線量の算出

平成 30 年度は、前項のように水換算した照射線量を用いて水素ガス発生量を評価していたが、セメント系材料からの水素ガス発生量 G 値を評価するためには、セメント試料あるいはセメント試料中の「水」に対する吸収線量を算出し、水素ガス発生を評価する必要がある。本項では、試料に対する吸収線量を今回実施した水換算の照射線量から算出した。Co60 の γ 線照射では、放射線エネルギーの吸収のほとんどがコンプトン効果による吸収であるとみなされる。その場合、その吸収線量は被照射物質の構成元素の [電子数の総和/質量数の総和] に比例する。つまり、水の吸収線量 (D_{H_2O}) がわかっているならば以下の式により他の物質に対する吸収線量 (D_s) へと換算することが可能である。

$$D_s = \frac{(\Sigma Z / \Sigma A)_s}{(\Sigma Z / \Sigma A)_{H_2O}} \times D_{H_2O}$$

D_s : 物質の吸収線量

D_{H_2O} : 水の吸収線量

ΣA : 原子量の総和

ΣZ : 電子数 (原子番号) の総和

水の場合、 $(\Sigma Z / \Sigma A)_{H_2O} = 10/18$ であり、それに対する試料の構成元素の $\Sigma Z / \Sigma A$ の比より、試料の吸収線量を求めることができる。

例えば、試料 OPC-b の場合、照射線量（水換算）は 5650Gy、 $(\Sigma Z / \Sigma A)_s = 52.42 / 101.11$ であった。従って、OPC-b への吸収線量 D_s は

$$D_s = 5650 \text{ Gy} \times \{(10 / 18) / (52.42 / 101.11)\} = 5273 \text{ Gy}$$

と求められた。なお、このセメントペースト試料における全水分量（自由水量と結合水量の和）は 36.54% であるので、試料中の「水」への吸収線量を単純に質量比で求めると 1926Gy となる。このように求めた試料に対する吸収線量及び試料中の「水」に対する吸収線量を求めた結果を表 2.2-12 に示す。求めた吸収線量にて水素ガス発生量 G 値を次項で求めた。

表 2.2-12 試料及び試料中の水に対する吸収線量

試料名	実線量 (Gy)	試料に対する 吸収線量(Gy)	試料中の水に対する 吸収線量(Gy)
OPC	5270	4915	1768
OPC-b	5650	5273	1926
OPC-①	5270	4855	1211
OPC-②	5270	4855	1159
OPC-③	5650	5166	931
OPC-④	5270	4811	804
OPC-⑤	5270	4800	707
OPC-⑥	5040	4585	622
FAC30	5650	5257	1856
FAC30-①	5270	4870	1424
FAC30-②	5650	5176	1103
FAC30-③	5040	4581	662
FAC30-④	5270	4785	645
FAC30-⑤	5270	4775	553
BFSC30	5040	4699	1693
BFSC30-①	5650	5184	1121
BFSC30-②	5650	5159	887
BFSC60	5040	4694	1672
BFSC60-①	5650	5184	1145
BFSC60-②	5650	5154	868
BFSC90	5040	4683	1571
OPC-M	5040	4589	675
OPC-M-LS	5040	4596	735
OPC-M-NS	5040	4590	682
OPC-M-PC	5040	4592	702

② G 値の算出

水素の G 値を求めた計算式を以下に示す。ここで、G 値の定義として、試料全体から発生する水素ガスの G 値を $G_{H_2(All)}$ として記し、試料中の「水」から発生した水素ガスの G 値を $G_{H_2(W)}$ として記す。ここでの試料中の「水」は、自由水量と結合水量の和として求めた全水分量である。G 値は吸収エネルギー100eV あたりに生成する分子数であるため $1eV = 1.6 \times 10^{-19}J$ で換算し、求めることができる。

$$G_{H_2(All)} = \frac{M \times N_A}{R_{All} \times 6.241506 \times 10^{16} \left(\frac{100eV}{J}\right)} \times \frac{1}{Wt_{All}}$$

$$G_{H_2(W)} = \frac{M \times N_A}{R_w \times 6.241506 \times 10^{16} \left(\frac{100eV}{J}\right)} \times \frac{1}{Wt_w}$$

ここで、 $G_{H_2(All)}$ ：試料から発生した水素ガスの G 値

$G_{H_2(W)}$ ：試料中の水から発生した水素ガスの G 値

M：水素ガス発生量 (mol)

N_A ：アボガドロ数 (6.0221415×10^{23} (1/mol))

Wt_{All} ：試料質量 (kg)， Wt_w ：試料中の全水分量 (自由水量+結合水量) (kg)

R_{All} ：試料に対する吸収線量(Gy=J/kg)， R_w ：試料中の水に対する吸収線量(Gy=J/kg)

算出した $G_{H_2(All)}$ 及び $G_{H_2(W)}$ の結果を表 2.2-13 に示す。

表 2.2-13 $G_{H_2}(All)$ 及び $G_{H_2}(W)$

試料名	G 値	
	$G_{H_2}(All)$	$G_{H_2}(W)$
OPC	0.12	0.96
OPC-b	0.13	0.95
OPC-①	0.12	1.29
OPC-②	0.09	1.44
OPC-③	0.03	0.88
OPC-④	0.01	0.50
OPC-⑤	0.00	0.16
OPC-⑥	0.00	0.06
FAC	0.10	0.76
FAC-①	0.14	1.59
FAC-②	0.08	1.65
FAC-③	0.03	1.43
FAC-④	0.01	0.77
FAC-⑤	0.00	0.23
BFC30	0.16	1.24
BFC30-①	0.07	1.52
BFC30-②	0.02	0.72
BFC60	0.12	0.98
BFC60-①	0.09	1.91
BFC60-②	0.03	1.20
BFC90	0.12	1.02
OPC-M	0.06	2.78
OPC-M-LS	0.06	2.51
OPC-M-NS	0.06	2.78
OPC-M-PC	0.06	2.44

自由水量と $G_{H_2}(W)$ の関係を図 2.2-22～図 2.2-23 に示す（自由水量と $G_{H_2}(All)$ の関係は報告書に記す。図は 2.1-62～64 に該当。）。OPC の場合、自由水量が 10%程度以下の場合、自由水量が少ない程 $G_{H_2}(W)$ は小さい値となり、10%程度以上では自由水量が多くなると $G_{H_2}(W)$ が小さくなる傾向が見られた。この傾向は、FAC 及び BFSC でも同様にみられた。モルタル試料は、OPC ペーストよりも $G_{H_2}(W)$ の値が大きくなった。

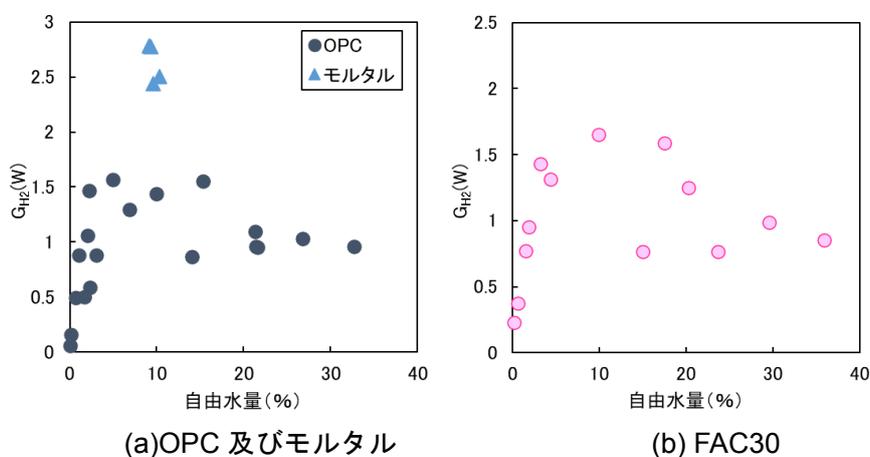


図 2.2-22 OPC、モルタル及び FAC30 の自由水量と $G_{H_2}(W)$ の関係

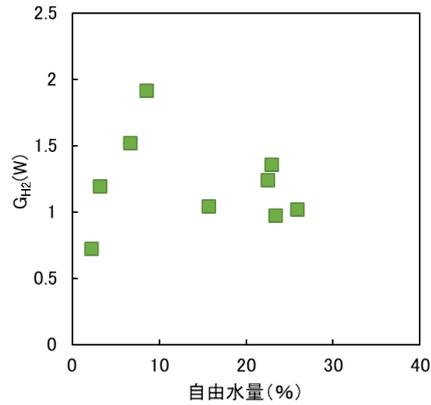


図 2.2-23 BFSC の自由水量と $G_{H_2(W)}$ の関係

ここで、全試料の結合水を含めた全水分量と $G_{H_2(All)}$ の関係を整理した (図 2.2-24)。なお、自由水量と $G_{H_2(All)}$ の関係は報告書で整理して示している。この図では、全水分の直線回帰として $G_{H_2(All)}$ を表わすことができ、表 2.2-14 に示すように、相関係数 $R^2=0.930$ 、標準誤差 Se は、OPC と比較して FAC 及び BFSC では大きくなったが、全セメントを対象としても、 Se は 0.0169 であり、 $G_{H_2(All)}$ が 0.2 程度 (飽水状態) であることからすれば、小さい値と考えられる。

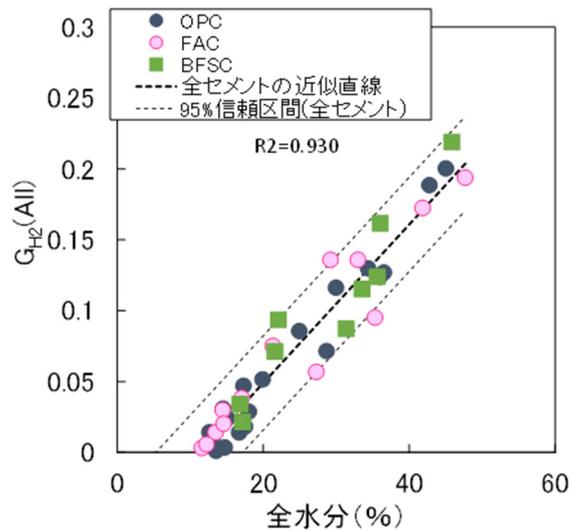


図 2.2-24 全水分量と $G_{H_2(All)}$ の関係

表 2.2-14 水素ガス発生と全水分との相関における統計的な計算値

対象試料	R2	標準偏差	標準誤差 Se
全セメント	0.930	1.67%	0.0169
OPC	0.960	1.27%	0.0130
FAC	0.915	1.98%	0.0201
BFSC	0.892	2.03%	0.0215

表 2.2-15 各セメントの適用範囲 (図 2.2-24)

セメント	置換率	W/C
OPC	—	0.3~0.8
FAC30	30%	0.45
BFSC	30~90%	0.45

以上、平成 30 年度に取得したデータを含め、廃棄体パッケージ内充填材を乾燥させて使用する場合に生成する水素ガス発生量の算定に有用な方法を検討した。蓄積したデータは十分とは言えないが、水素ガス発生量は、 $G_{H_2(All)}$ として、比較簡易に求めることができる自由水量の相関として算定できる可能性があり、また、充填材の持つ水を全水分量とすることで、FAC や BFSC を含めて推定値である近似直線の標準誤差を小さくできることが分かった。

4) まとめ

廃棄体パッケージ内充填材のセメント系材料からの水素ガス発生量を評価するデータを蓄積するため、セメント系材料に含まれる水分量と水素ガス発生量の関係を検討した。また、そのデータから廃棄体パッケージ内充填材からの水素ガス発生量 G 値の見積り方法について検討した。

自由水量の増加にともない水素ガス発生量が多くなることが確認された。自由水を含まない試料についても水素ガス発生が確認されたことから、結合水からも水素ガス発生が生じていることが推測された。しかし、自由水に比較してその寄与は小さく、セメント系材料からの水素ガス発生量は自由水量に支配されるものと考えられる。

コンプトン効果による試料への吸収線量を考慮し、試料に対する水素ガス発生量 $G_{H_2(All)}$ 及び試料中の「水」に対する水素ガス発生量 $G_{H_2(W)}$ を算出し、試料の水分量との関係について検討した。その結果、 $G_{H_2(W)}$ と自由水量との関係では明確な傾向が認められないが、 $G_{H_2(All)}$ で整理すると自由水量との間に一定の傾向が見られた。自由水に対する試料質量あたりの $G_{H_2(All)}$ を近似曲線で表わすことによって水素ガス発生量を自由水量から算定することが可能と考えられる。自由水量で $G_{H_2(All)}$ を評価すると、FAC や BFSC の試料では近似曲線から剥離する点が存在し、水素ガス発生量の算定に誤差が生じる場合があった。充填材の持つ水を全水分量と $G_{H_2(All)}$ で評価することで、FAC や BFSC を含めて推定値である近似直線の標準誤差を小さくできることが分かった。

実際に使用される廃棄体パッケージ内充填材を考慮するため、骨材及び化学混和剤が水素ガス発生に及ぼす影響について検討した結果、骨材の影響及び化学混和剤の影響は確認されなかった。しかし、廃棄体パッケージ内充填材をコンクリートとした場合には、試料に含まれる骨材割合が多くなり、骨材が吸水する水の影響が大きくなることが考えられる。骨材の吸水の影響による水素ガス発生量については今後、検討する必要がある。

(2) 水素ガス発生が廃棄体パッケージ内の圧力上昇に及ぼす影響の検討

廃棄体パッケージは溶接により密閉されるため、廃棄体パッケージ内においては、水の放射線分解により水素ガスが発生し、圧力上昇に起因するパッケージの変形あるいは破損等が懸念される。一方、平成 30 年度の文献調査から、密閉容器中での空気と水の系において、水素の発生に伴い内圧が上昇するが、ある時点で圧力平衡に到達し、圧力上昇が一定に収束することが示されている。また、水素ガス以外のガス（酸素や窒素酸化物等）が水素ガス発生に影響することが示唆された。

平成 31 年度は、セメント系材料からのガス発生に伴う圧力上昇挙動の把握を目的に、 γ 線照射による圧力上昇を測定できる手法を検討した。その際、圧力の変化は水素ガス発生による影響であるか、または水素ガス以外のガスが圧力に影響を及ぼしているかを検討するため、水素ガス以外のガス発生についても測定した。なお、水素発生が抑制される圧力領域までガス発生させるためには照射線量を増やす必要がある。平成 31 年度はガス発生による圧力上昇及び発生ガスが測定可能な測定システムの検討、及び条件など測定手順を確定することに主眼を置いた。

1) 圧力測定装置

平成 30 年度、 γ 線を照射することでセメント系材料から発生するガスによる密閉容器中の圧力上昇について検討するため照射試験を実施したが、精度良くデータを取得するまでには至らなかった。その要因として、環境温度の影響を大きく受けたこと、また、平成 30 年度に実施した圧力測定システムでは、圧力測定容器から圧力計までの配管や試料管内の空間が多く、死容積が大きい測定系となっていたこと等があげられた。そのため、測定装置についても容器、配管等を検討する必要があることが明らかとなった。そこで、平成 31 年度は、ガス発生による密閉容器内の圧力変化を精度よく測定できるシステムを検討するため、密閉容器や配管等を含めた圧力測定システムを検討した。

① 圧力測定用ハンドリングシステム

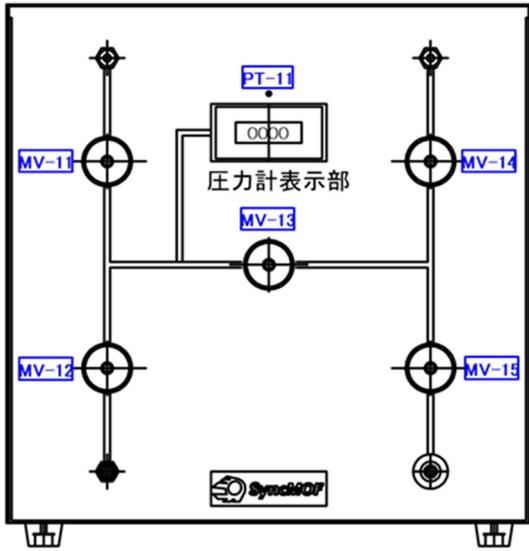
セメント系材料からのガス発生による圧力測定及び発生ガスの成分を測定するシステムとして SyncMOF 株式会社製ハンドリングシステム Visual Conc を適用した。

ハンドリングシステム Visual Conc の仕様を表 2.2-16 に、概要図を図 2.2-25 に示す。密閉容器と死容積が既知の Visual Conc を接続し、その圧力上昇の時間変化を追跡すれば、セメント系材料からの発生ガス量を定量法により明らかにすることができる。

Visual Conc では、死容積をできる限り小さくするために配管として SUS 製管 1/16 インチを使用した。(c)ガス配管図の MV-11、MV-12、MV-13 に囲まれた部分の死容積が既知である。また、MKS 製圧力ゲージにより 0.1kPa 程度の圧力変化が測定可能である。この圧力ハンドリングシステム装置を用いて圧力測定を実施した

表 2.2-16 ハンドリングシステム Visual Conc の仕様

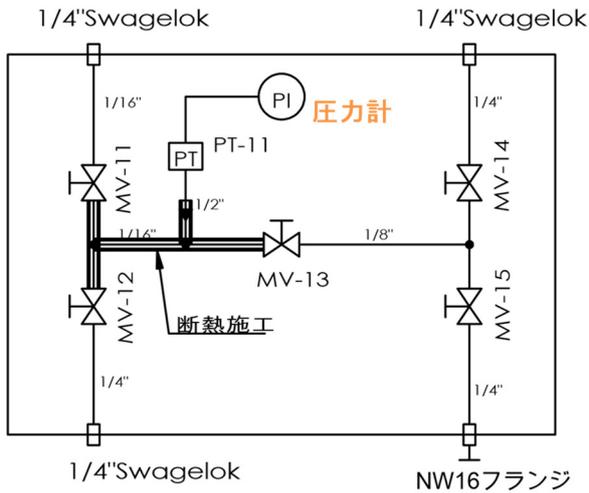
項目	仕様
型式:	HS-001(寸法:280×454×472mm)
圧力計型式	MKS Baratron タイプ 627D 寸法:全長(本体 98.3mm+継ぎ手部分 35.1mm)、径 79.5mm
圧力測定範囲	0.0~999.0 kPa
使用温度範囲	15 ~ 35°C以下
死容積	MV-11、MV-12、MV-13(図 2.2-1)に囲まれた部分の死容積:13.507 mL



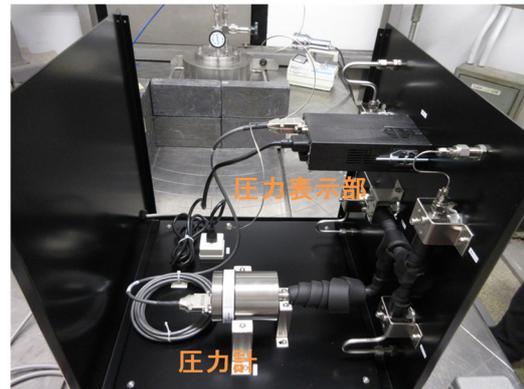
(a) 外観図



(b) 外観写真



(c) 配管図



(d) 配管部の写真

図 2.2-25 ハンドリングシステム・Visual Conc 概要図

② 圧力測定容器

Visual Conc に接続する圧力容器の概要図を図 2.2-26 に示す。圧力容器は、Visual Conc に接続する配管とガス採取時にガス採取袋を接続する配管を設けた。また、試料内温度を測定するため試料中心部に熱電対を設置した。圧力容器内の死容積を少なくするため、試料上部の空間にはスペーサーを入れた。また、容器本体と蓋との間からのガス漏れを防ぐためメタルガスケット (U-TIGHSEAL) を用いた。

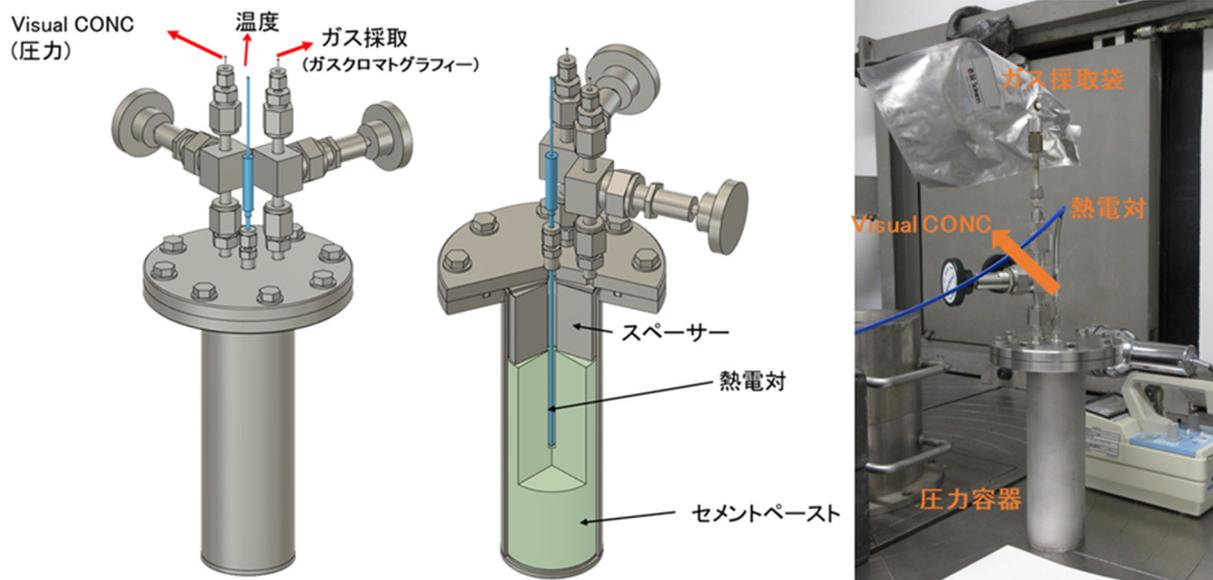


図 2.2-26 圧力容器の概要図

2) 試験方法

① 測定試料

W/C=0.6 の OPC ペーストを圧力容器内に直接打ち込んだ。材料は、表 2.2-3 に示した OPC を用いた。試料高さは 15cm とし、上部に熱電対の入る約 $\phi 7\text{mm}$ の穴を設けた。試料は乾燥しないように上部を密閉し、40 日間養生した。圧力測定に用いた試料の情報を表 2.2-17 に示す。

表 2.2-17 圧力測定試料の情報

OPC ペースト	W/C=0.6, 20°C封緘養生 40 日間
試料①	質量: 789.77g, 自由水量: 24.06%, 結合水量: 15.73%
試料②	質量: 729.66g, 自由水量: 24.47%, 結合水量: 14.69%

② 圧力測定用ハンドリングシステムによる測定

(a) 測定概要

内圧測定試験に用いた装置の概要を図 2.2-27 に、内圧測定試験状況写真を図 2.2-28 に示す。セメントペーストを充填した圧力容器を Visual Conc の MV-11 バルブと接続し、圧力容器のガス採取側にはガス採取袋を取り付け、バルブを閉止した。また、照射中の試料温度及び圧力変化のデータを記録できるよう圧力計と熱電対はデータロガーに接続した。

Visual Conc における定量法による発生ガス量の測定方法の手順を図 2.2-29 に示す。手順としては、まず、測定系内を Ar ガスでフローさせて空気と Ar ガスを置換した。その後、圧力容器を含めた測定系内の死容積 (Vd') を測定した後に γ 線照射を開始した。照射により容器内の圧力が上昇するとともに温度上昇も生じるため、照射後は、容器を冷却装置内で室温まで冷却した。冷却後、照射前後の容器内の圧力差から発生した総ガス量を算出した。発生ガスは、採取袋に回収し、ガスクロマトグラフィーでガス量を測定した。詳細を次項に示す。

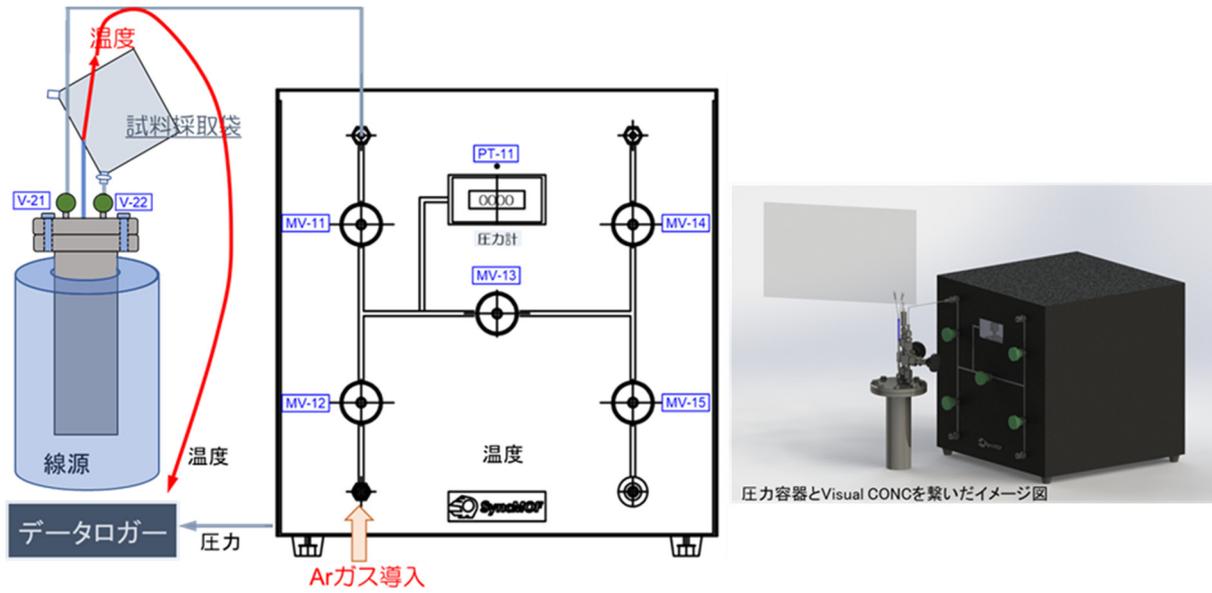


図 2.2-27 圧力測定試験に用いた装置の概要図



図 2.2-28 内圧測定試験状況（測定開始前）

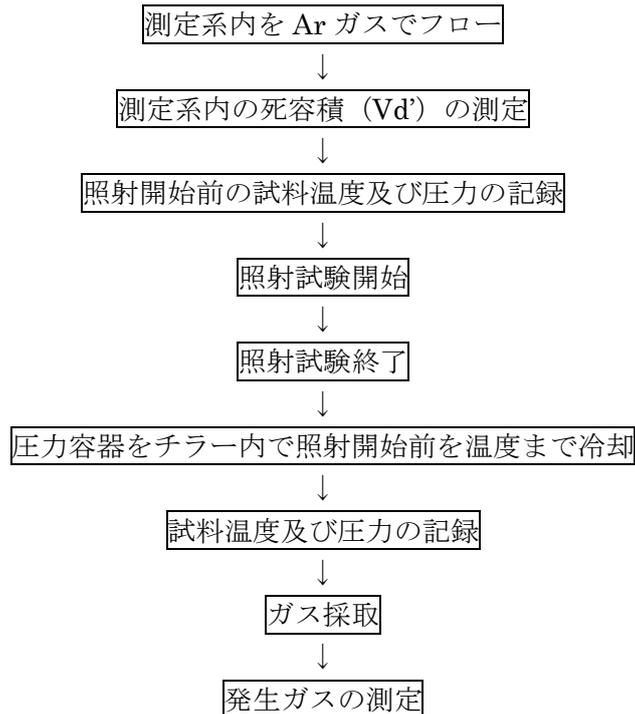


図 2.2-29 Visual Conc における定量法による発生ガス量の測定方法の手順

(b) 測定系内死容積の測定

測定系内死容積は、セメントペーストが充填された圧力容器を Visual Conc に繋いだときの死容積であり、圧力容器内、MV-12、MV-13 バルブで囲まれた部分となる。この部分を「測定系内死容積：Vd'」とし、この容積の測定を実施した。MV-11、MV-12、MV-13 バルブで囲まれた部分の容積は 13.507 mL（死容積：Vd と呼ぶ）と検量されている。

MV-12 から Ar ガスを導入し、MV-11、MV-12、MV-13 バルブで囲まれた部分の圧力（ P_1 ）を測定した。MV-11 を開き、圧力容器を含めた Vd' に Ar ガスを導入し、そのときの圧力値（ P_2 ）を記録した。ここで、以下の式が成り立つことより、Vd' を求めることができる。

$$P_1 V_d = P_2 V_d'$$

(c) 照射試験

セメントペーストの γ 線照射試験は、名古屋大学コバルト 60 γ 線照射室にて実施した。

γ 線照射環境は、円筒形照射筒の中心部に照射容器を置いた。ハンドリングシステムの圧力計の半導体部位を放射線損傷から守るため、円筒形照射筒の外側に線量を 1/100 に軽減する厚さ約 3 cm の円筒鉛容器を設置し、さらに、照射筒とハンドリングシステムとの間に厚さ 6 cm の鉛ブロックを置くことにより、圧力系並びにデータロガーの放射線損傷を防いだ。圧力データ及び試料温度はデータロガーを接続することにより記録した。

また、照射室内は空調機によって 22°C に設定されていたが、外気温度が 15°C より高い場合は空調機の仕様により、外気が温度調整されることなく導入されるため、常に 22°C を維持する環境ではなかった。照射試験終了後は、照射により試料温度が上昇していることから、開始時の温度に近づけるため圧力容器を冷却装置の中に入れて試料温度を室温近くまで下げた後、照射終了後の圧力を測定した。照射試験は 2 回実施した。

③ 発生ガスの測定

圧力測定が終了後、ガス採取袋のバルブを開けて発生ガスを採取した。採取したガスのH₂、O₂、CO₂、N₂濃度を測定した。ガスクロマトグラフィー装置の仕様及び測定条件を表 2.2-18 に示す。

表 2.2-18 ガスクロマトグラフィー装置の仕様

装置名	Varian CP-4900			
項目	H ₂	N ₂	O ₂	CO ₂
測定原理検出器	TCD	TCD	TCD	TCD
測定範囲	0.1~2,000 ppm	1~1,000,000 ppm	1~1,000,000 ppm	0.5~1,000,000 ppm
キャリアガス	アルゴン	アルゴン	アルゴン	アルゴン
校正方式	1点検量線法 198 ppm	1点検量線法 1040 ppm	1点検量線法 1010 ppm	1点検量線法 1980 ppm
試料量	~1ml	~1ml	~1ml	~1ml
カラム充填剤	M5A	M5A	M5A	PPQ

3) 試験結果

① 照射試験結果

(a) 1回目照射試験

1回目の照射試験は、表 2.2-17 に示す試料①を用いて、合計 46 時間照射を実施した。試料が照射された時間数と同時間で水が吸収した線量(水換算)は、51848Gy(約 1.1kGy/h)であった。照射試験前には、試料①の測定系内死容積(Vd')を測定し、その値は、17.065mlであった。

試料温度及び容器内圧の経時変化を図 2.2-30 に示す。1回目の照射試験では、開始から約 7 時間までデータロガーの圧力計との接続不良により連続データは取得できなかった。しかし、別途、本体の圧力値を記録しているため開始時の圧力については差圧を求めることには問題はなかった。試料温度は、照射開始時から 12 時間程度まで上昇し、その後 27℃付近で推移した。圧力は、開始初期の経時変化は見られないが、10 時間以降はほぼ直線的に上昇した。照射終了時は、試料温度 27.2℃、圧力 111.6kPa であった。照射終了後、圧力容器を冷却装置で室温まで冷却した。冷却終了時は、試料温度 22.7℃、圧力 110.6kPa となった。

(b) 2回目照射試験

2回目の照射試験は、表 2.2-17 に示す試料②を用いて、合計 63.7 時間照射を実施した。2回目照射の場合は、水吸収線量換算で 73924Gy であった。照射前に実施した試料②の測定系内死容積(Vd')は 15.464ml であった。

試料温度、容器内圧及び室温の経時変化を図 2.2-31 に示す。常に温度調整された環境下ではなかったことから2回目の照射試験では室温の変化についても記録した。20 時間と 45 時間の付近で室温に変化見られている。このように室温に数℃の変化がある場合、試料温度に影響し、圧力値が変化していることがわかった。2 回目の測定では、ほとんどの時間で温度調整された状態であったことから、1回目測定よりも温度の影響が少ない結果であった。測定条件の一つとして、測定環境は、温度が一定に保たれていることが望ましいことが分かった。試料温度の変化では、1回目と同様に照射開始から約 10 時間までは上昇し、その後 27℃前後で推移した。圧力は照射開始から継続的に上昇した。照射終了時は、試料温度 27.6℃、圧力 112.1kPa であった。圧力容器を室温まで冷却し、冷却終了時は試料温度 22.2℃、圧力 111.3kPa であった。

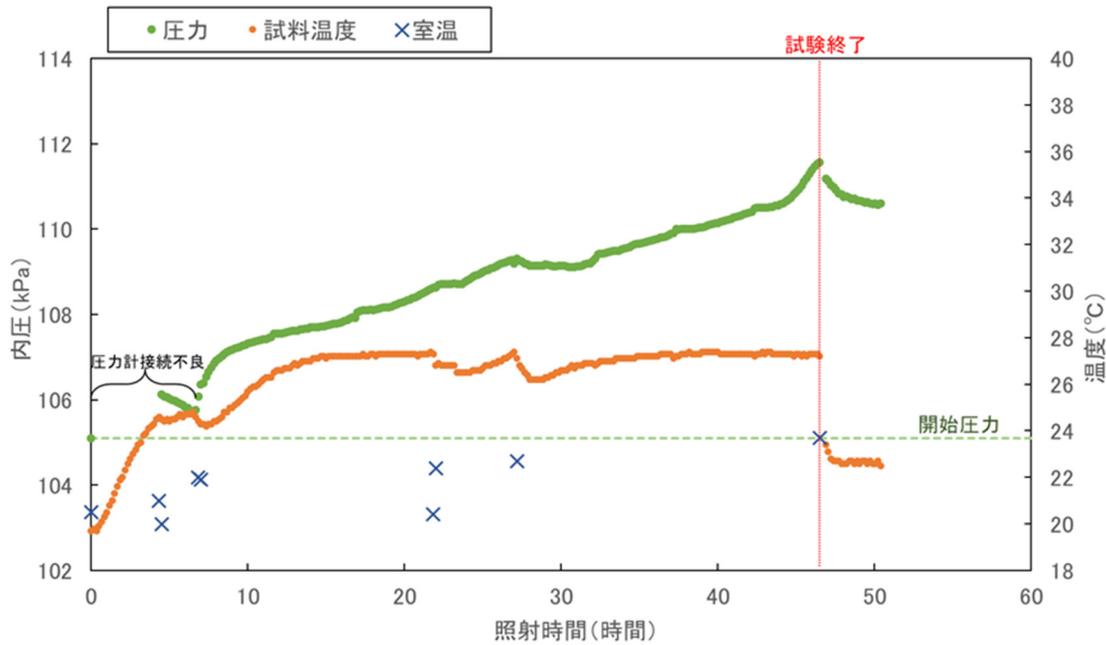


図 2.2-30 1 回目照射試験の結果

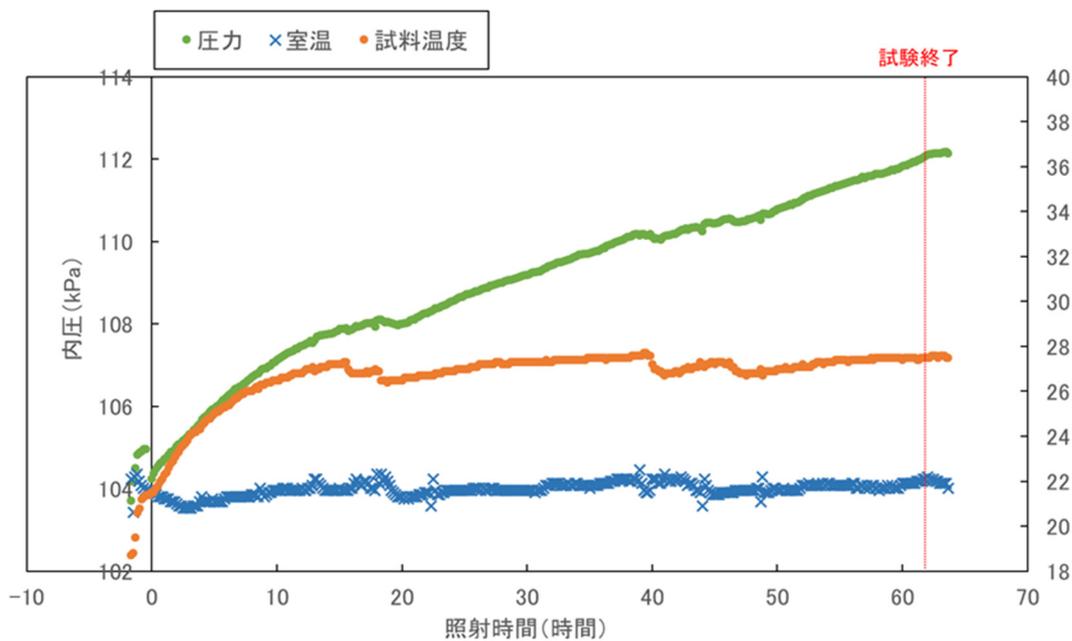


図 2.2-31 2 回目照射試験の結果

(c) 照射試験による圧力上昇

照射試験による試験前後の差圧から、照射による圧力上昇値を求めた。1 回目及び 2 回目の圧力上昇結果を表 2.2-19 に示す。また、上昇した圧力から発生したガスが理想気体とした場合の発生ガス量を、理想気体の状態方程式 $PV = nRT$ にて求めた値についても記載した。

死容積の測定結果より、1 回目照射の試料①の死容積は、17.065ml、2 回目照射の試料②の死容積は、15.464ml であった。また、照射前の開始温度と終了時の温度に温度差が生じ、その差は、1 回目測定では 3.1°C、2 回目測定では 0.7°C であった。終了時と同様の冷却装置を用いて開始前温度についても終了時温度と同一の温度に調整し、圧力値の測定を行うことが望ましいことがわ

かった。今回の結果では、 $PV/T = \text{一定}$ として終了時の温度に開始時圧力を補正した。内圧上昇は、1回目照射で4.4kPa、2回目照射で7.0kPaであった。ここで、1回目と2回目の圧力上昇を比較するために2回目終了時温度22.2°Cで温度補正を行った。照射線量に対する圧力変化を報告書の図2.1-66に示す。2回目照射試験の結果では、照射線量に対して直線的に圧力上昇が見られた。1回目照射試験の結果では、2回目照射試験結果ほど一定ではないが、同様な割合で圧力上昇が見られた。1回目、2回目とも同様な割合でガスが発生しているものと考えられる。

今回用いた圧力測定システムにより、 γ 線照射による容器内の圧力上昇が測定可能であることが分かった。また、測定条件として、試験開始前と試験終了後の温度を一致させ、照射試験中の環境は一定に保つことが必要であることがわかった。

表 2.2-19 照射による圧力上昇結果

		死容積 Vd' ml	測定値		温度補正值		発生ガス μmol
			試料温度 (°C)	内圧 (kPa)	試料温度 (°C)	内圧 (kPa)	
1 回目 照射	照射開始時	17.065	19.6	105.1	22.7	106.2	
	試験終了時(冷却後)		22.7	110.6	22.7	110.6	
	照射前後の差圧(圧力上昇分)					4.4	31
2 回目 照射	照射開始時	15.464	21.5	104.2	22.2	104.3	
	試験終了時(冷却後)		22.2	111.3	22.2	111.3	
	照射前後の差圧(圧力上昇分)					7.0	44

② 発生ガスの分析

(a) ガス分析結果

試験終了後は、MV-22のバルブ(図2.2-27)を開け、発生ガスを試料採取袋で回収した。回収したガスはガスクロマトグラフィーで H_2 、 N_2 、 O_2 、 CO_2 濃度を測定した。分析結果を表2.2-20に示す。1回目の照射試験結果において、 O_2 、 N_2 が非常に高い値となった。非常に高い値のため、試料から発生したガスとは考えにくく、試料採取袋の中に空気が混入していたものと考えられた。別途、室内の空気の N_2 濃度を測定した結果78.9%となり、試料採取袋に購入時より混入していた空気であると推定された。そこで、2回目の測定においては、採取袋の真空引きとアルゴン導入を数回繰り返して、混入している空気を除去した。その結果、2回目の測定においては N_2 、 O_2 、及び CO_2 濃度も低下したことから、試料採取袋に混入していた空気については除去されたものと思われた。しかしながら、2回目の分析結果についても N_2 及び O_2 の濃度は高く、Arガスによる容器内の置換も実施していることから、外部からの混入がなければ試料から発生したガスは H_2 に比べ N_2 と O_2 が高く含まれていたこととなる。平成30年度に実施した照射試験による発生ガスの分析結果では、 N_2 の発生は検出されなかったことから、大気混入の可能性が高いと考えられる。本試験で用いた装置は、試料採取袋のコネクター以外は金属パッキンであり、試料採取袋のみがPTFE製のコネクターで接続されたアルミニウム製のサンプリングバッグであった。圧力容器と試料採取袋との接続部からの空気混入の可能性が最も高く、この部分については検討が不十分であったため、今後改良することが必要である。また、2.2.2(1)の照射試験においては、試料を封入し、高純度空気を導入する際には30kPaまで排気し、高純度空気を導入する操作を4回繰り返して実施した。ガス採取の際は、試料容器に接続される配管内を排気した上で試料容器からガスを移行させ、さらにアルゴンガスを導入し、陽圧となった状態で測定系内の濃度を均一となるようにそのまま6時間以上静置した。圧力上昇確認試験では、照射試験前の系内はアルゴンガスをフローさせて大気と置換させた。ガス採取の際も、測定系内は陽圧であったが圧力はそれほど

高くなく、静置した時間も1時間程度であった。照射前の大気の置換方法及びガス採取からガス分析までの手順についてもさらに検討した上で、発生ガスを評価する必要がある。

表 2.2-20 発生ガス分析結果

	H ₂ (ppm)	O ₂ (ppm)	N ₂ (ppm)	CO ₂ (ppm)
1 回目照射	692	205,800	727,700	965
2 回目照射	249	9,647	32,755	46

※空気の組成比: N₂ 78.084%, O₂ 20.948%, Ar 938ppm, CO₂ 330ppm, H₂ 0.5ppm(理化学辞典より)

(b) 水素ガス発生量

本項では、圧力上昇試験で測定した水素ガス濃度から水素ガスの G 値を求めた。

水換算した線量から試料の吸収線量を求めた。圧力容器が 0.2cm 厚のステンレス製であることから圧力容器による線量の減衰についても考慮した。まず、圧力容器の壁厚による線量の減衰の算出方法を示す。SUS304 ステンレスの構成成分である Fe, Cr, Ni の 1 MeV の光子に対する質量減弱係数（物質中を通過する光子が単位質量当たり相互に作用する確率）ではおおよそ 6.0×10^{-2} (cm²/g) である。SUS304 ステンレスの密度は 7.93 g/cm³ であるから、線減弱係数 μ （物質中を通過する光子が単位長さ当たり相互に作用を起こす確率）は $6.0 \times 10^{-2} / 7.93 = 7.56 \times 10^{-3}$ cm⁻¹ となる。ステンレス容器の壁厚 $x = 0.2$ cm であるため、壁を透過前の線量を D_0 、透過後の線量を D とすると、

$$\ln \frac{D_0}{D} = \mu x$$

より、 $D = D_0 \exp(-\mu x)$

となる（ただし、ビルドアップ係数（放射線が物質を透過するとき任意の点での γ 線などの全放射線量と散乱することなくその点に到達する放射線の量の比で定義される）は 1 と仮定）。上記の値を代入して $D_0 = 100$ として計算すると、 $D = 99.8$ であり、ステンレス壁による線量の減衰は 0.2% と見積もられた。さらに γ 線のエネルギーがコンプトン効果で吸収されるとみなし、試料に対する吸収線量及び試料中の水分に対する吸収線量を求めた。算出した吸収線量の結果を表 2.2-21 に示す。

表 2.2-21 γ 線吸収線量

	1 回目照射	2 回目照射
照射線量(水の吸収線量換算): Gy	51848	73924
圧力容器の減衰補正した吸収線量(水の吸収線量換算): Gy	51744	73776
セメント試料の吸収線量: Gy	48460	69047
試料中の水の吸収線量: Gy	20354	28557

次に、ガスクロマトグラフィの結果（表 2.2-20）及び吸収線量の結果（表 2.2-21）より水素ガス発生量及び G 値を求めた。水素ガス発生量及び G 値を表 2.2-22 に示す。

表 2.2-22 より算出した G 値は非常に小さい値となった。2.2.2 (1) 項の試験に比較し、試料量も多く、吸収線量も多いにもかかわらず水素ガス発生量は少なかった。今回、2 回目の照射試験において、ガスを採取した後に、測定系内に Ar ガスを導入し、Ar ガス流通下でガスを採取し、

分析を実施した。この2度目に採取したガスの水素ガス濃度は503ppm、3度目に採取した水素ガス濃度は255ppmと、初回に採取した水素ガス濃度249ppmを上回る値となった。Arガス流通によって試料中に存在した水素ガスが追い出された可能性もあるが、初回に採取したガスが均一となっていなかったことも考えられる。精度よくガス発生量を測定するためには、照射前の大気の置換方法及びガス採取からガス分析までの手順について検討していく必要があることがわかった。

表 2.2-22 水素ガス発生量及びG値

	大気圧	測定系			H ₂ 量		G値	
	kPa	圧力(kPa)	容積(ml)	温度(°C)	ppm	μmol	G _{H₂} (All)	G _{H₂} (W)
1回目照射	101.24	110.6	17.065	22.7	692	0.53	1.34E-04	8.02E-04
2回目照射	101.31	111.3	15.464	22.2	249	0.17	3.34E-05	2.06E-04

4) まとめ

セメント系材料からのガス発生による圧力上昇を評価するため、圧力容器及び圧力測定用ハンドリングシステムを用いたγ線照射によるセメント系材料の圧力上昇試験を実施した。今回実施した測定手法によりガス発生による圧力上昇が測定可能であり、また、発生したガス発生を回収・分析することによりどのようなガスが圧力上昇に寄与するか影響を確認できる見通しを得た。圧力上昇確認試験においては、環境温度により圧力が大きく影響を受けることから、温度の変動をできるだけなくす環境下で実施することが重要であった。また、試験開始時の温度及び終了時の温度を一致させることも精度良く圧力を測定するためには必要である。発生したガスについての採取方法の手順については、空気の混入などがないように検証し、改善する必要があることがわかった。

今回実施した試験では、上昇した圧力はわずかであり、目的である圧力上昇により水素ガス発生が抑制されるような領域ではない。照射線量を高くし、圧力が高い領域における試験を実施し、圧力上昇による水素ガス発生の抑制効果を見極める必要がある。その場合、照射線量の高い施設での実施が不可欠となる。本試験においては、測定系の死容積をできる限り小さくするために、線源の近くに圧力計等の測定機器を設置した。照射線量の高い施設での実施においては測定機器に対して遮蔽機構を設ける等の対応も必要となる。基本となる測定システムが確定したことから、今後、圧力上昇による水素ガス抑制の効果を見極めるため、照射線量の高い試験を行うための検討を行っていく必要がある。

5) 今後の検討課題

① 廃棄体パッケージ内充填材のセメント系材料からの水素ガス発生量に関する検討

セメントペースト試料で検討した試料からの水素ガス発生においては、試料質量あたりの水素ガス発生量 G_{H₂}(All)を評価することにより水分量から算定できる可能性を見出した。自由水量で整理したデータでは、ペースト試料のみで整理した近似曲線でモルタルを評価可能であることがわかった。一方、全水分量で整理した場合、モルタル試料で算出した G_{H₂}(All)は、信頼区間95%以内ではあるが近似直線から外れる結果となった。これは、試料中に占める結合水量の割合がモルタルとペースト試料では異なるためであると考えられる。コンクリートからの水素ガス発生量を見積もるためには、コンクリートのデータを蓄積し、水分量と水素ガス発生量の関係を整理していくことが必要であると考えられる。本検討で得られた結果から、自由水量と G_{H₂}(All)の関係において、自由水量が20%以上と多くなる範囲ではセメントの種類による違いの影響が見られる

が、自由水量が10%以下の少ない範囲ではセメントによる種類の影響が見られない。パッケージ内充填材において、水素ガス発生を抑制を目的として乾燥処理させたコンクリートの場合、試料質量に対する自由水量が少ない範囲であることを考慮すると、自由水量から水素ガス発生量を推定できる可能性があると考えられる。例えば、後述する2.2.3項で作製したコンクリートの自由水量は、コンクリート質量に対して約5%以下の範囲にあった。さらに、コンクリートの自由水量は、実際に105℃乾燥におけるデータを取得する、あるいは、乾燥時の水分逸散量を測定したデータを用いて自由水量を推定するなど、比較的、簡易な方法で測定が可能である。水素ガス発生量を見積る方法として自由水量と $G_{H_2}(All)$ で評価することが有効であると考えられる。

今後、廃棄体パッケージ内充填材の候補材料となるコンクリートから発生する水素ガスについて、試料質量あたりの水素ガス発生量 $G_{H_2}(All)$ で評価し、自由水量あるいは全水分量から算定可能であるか検討していく必要がある。

また、モルタル試料に用いた珪砂では、水素ガス発生に及ぼす影響は小さかった。しかし、コンクリートで使用する骨材は、骨材の種類によっても吸水率が異なり、吸水された水がどのような形態で存在し、水素ガスがどの程度発生するかは不明である。自由水として測定される量が同程度であったとしてもセメントペースト中とコンクリート中では水の状態が異なる可能性は考えられる。コンクリート配合のように骨材割合が多くなった場合、骨材に吸水される水が水素ガス発生に及ぼす影響が大きくなることが想定されることから、骨材が含有する水からの水素ガス発生量については検討する必要があると考えられる。

また、実際の廃棄体パッケージ内充填材では、廃棄物からの熱により温度が上昇することが推定される。どの程度の温度上昇が見込まれるかにより水素ガス発生に及ぼす影響が異なり、反応も複雑になることが考えられる。廃棄体パッケージ内の温度条件やその熱影響によって発生する水素ガス量に及ぼす影響などを整理する必要がある。その温度影響を考慮した上で、充填材から発生する水素ガス量を評価する手法を検討していくことが望ましい。

② 水素ガス発生が廃棄体パッケージ内の圧力上昇に及ぼす影響の検討

圧力容器及び圧力測定用ハンドリングシステムを用いたγ線照射によるセメント系材料の圧力上昇試験により、圧力容器内の圧力変化を精度よく測定可能なシステムを見出した。発生したガスを回収、分析することにより圧力上昇に影響するガスについて評価できる見通しを得た。一方、ガス回収時の方法については、さらに検討し現状の測定方法を改善する必要があることがわかった。

今後、密閉容器中で発生したガスにより容器内の圧力が上昇するが、平衡に到達し圧力上昇が収束する挙動を検討するためには照射線量を高くし、さらに圧力が高い領域の変化を確認する必要がある。照射線量の高い施設での測定を実施するには測定機器に対して遮蔽機構を設ける等の対応を検討することも必要となる。また、本検討においては、ガスを採取するための採取袋と試料容器を繋ぐ配管部分において空気の漏れ込みが疑われる結果となった。ガス回収のシステム及び手順については更なる改善が必要である。以上の課題を解決した後、ガス発生による圧力上昇の変化を測定し、発生したガスを分析することにより水素ガスやその他のガスが圧力上昇に及ぼす影響を評価していく必要がある。

2.2.3 廃棄体パッケージ内充填材の仕様の具体化のための検討

本検討は、廃棄体パッケージ内充填材の候補材料の更なる絞り込みと仕様の具体化を目的として実施した。平成 30 年度の検討においては、廃棄体グループごとに、性能、物性に対する材料設計の要因の関与の大きさ、及び、セメント系材料配合の選定による対応の容易さを相対的に比較して、乾燥処理を経たセメント系材料が廃棄体パッケージ内充填材の候補となる事が分かった。また、コンクリートの乾燥試験からは乾燥により含水率を低減し、水の放射線分解による水素ガス発生を抑制出来る見込みが得られた。

以上の成果を踏まえ、廃棄体パッケージ内充填材の乾燥を考慮した廃棄体パッケージの組立手順として図 2.2-32 に示す以下の 3 ケースが提示された（原環センター，原子力機構，2019）。

- I. 容器に充填材を打設後に廃棄体を設置する充填材先打設方式（先打設方式）
- II. 容器に廃棄体を入れすき間を充填する充填材後打設方式（後打設方式）
- III. 別工程で製作した内部充填材を容器に設置後に廃棄体を収納するプレキャスト方式（プレキャスト方式）

方式	方法	解説	技術的な観点	長期的な観点
モルタル（セメント系充填材）	先打設	①容器本体内にケーシング（内型枠）を設置 ②容器→ケーシング（内型枠）間に打設（内型枠は撤去） ③廃棄体を挿入	利点 ・打設後に乾燥工程可能 ・打設作業は非放射線環境 懸念 ・隙間の取合（廃棄体-充填材） ・澆注作業時のセメント系材料への熱影響	利点 ・容器と充填材は一体化 ・核種の収束が期待できる（安全評価） 懸念 ・短期/長期的な変質（熱的・化学的） ・隙間残存（充填材-廃棄体）
	後打設	①容器本体内にラックを設置 ②廃棄体をラックで仮固定 ③容器-廃棄体間に打設	利点 ・廃棄体周囲に隙間なし 懸念 ・打設作業は放射線環境 ・廃棄体の浮上に留意 ・乾燥工程は廃棄体とともに伊乾 ・澆注作業時のセメント系材料への熱影響	利点 ・容器内は一体化 ・核種の収束が期待できる（安全評価） 懸念 ・短期/長期的な変質（熱的・化学的） ・充填部に残存する水分の影響
	プレキャスト	①別途内部充填材製作 ②容器に内部充填材を挿入 ③廃棄体を挿入	利点 ・充填材挿入前に乾燥作業可能 ・充填材挿入作業は非放射線環境 懸念 ・隙間の取合（容器-充填材、充填材-廃棄体） ・澆注作業時のセメント系材料への熱影響	利点 ・核種の収束が期待できる（安全評価） 懸念 ・短期/長期的な変質（熱的・化学的） ・隙間残存（容器-充填材、充填材-廃棄体）

図 2.2-32 廃棄体パッケージの組立手順の比較

更に、廃棄体パッケージの構成要素である容器と廃棄体パッケージ内充填材について、NUMO 包括的技術報告書レビュー版（原子力発電環境整備機構，2018，以下 NUMO-SC と表記）に示されている設計因子及び設計要件と、設計要件を満足させる方策及び設計の目安との関係が整理された（原環センター，原子力機構，2019）。廃棄体パッケージ内充填材には、第 2 次 TRU レポート（電気事業連合会，核燃料サイクル開発機構，2005）にてすき間を埋め一体化させるとの概念が示されており、NUMO-SC でもそれを踏襲している。廃棄体パッケージの設計の目安（原環センター，原子力機構，2019）の一つには、“廃棄体パッケージ内充填材は、搬送時に容器内で廃棄体が移動しない仕様とする。または、容器自体に廃棄体を固定する機能を設ける。”と定義されている。

また、NUMO-SC では、処分場閉鎖後の廃棄体パッケージ容器や廃棄体パッケージ内充填材による地下水進入の抑制、及び、廃棄体パッケージ内充填材による放射性物質の取着を、安全機能と

して期待している。

(以下、引用)

・廃棄体パッケージは、複数の廃棄体を廃棄体パッケージ内充填材とともに、金属製の廃棄体パッケージ容器に地下への搬送・埋設のための形態として一体化したものである。したがって廃棄体パッケージには、操業期間中の放射性物質の漏えいの防止を安全機能として期待するとともに、処分場閉鎖後についても、廃棄体パッケージ容器や廃棄体パッケージ内充填材により地下水の浸入を抑制するとともに、廃棄体パッケージ内で地下水に溶出した放射性物質が廃棄体パッケージ内充填材に収着することによって、放射性物質の溶出を抑制する機能を期待する。

(以上、引用終わり)

更に、NUMO-SC では、水の放射線分解による水素ガス発生の可能性について、次のように述べている。

(以下、引用)

グループ 2 及びグループ 4H の廃棄体は表面線量が高いため、廃棄体パッケージ内のモルタル充填材中に含まれる水の放射線分解によって水素ガスが発生する可能性がある。上蓋を溶接封入する構造の廃棄体パッケージ B の容器の場合には、内圧に対しても対応できるように設計する必要がある。ただし、水素ガスの発生量については、充填材をモルタルから乾燥砂に変更することや、廃棄体の挿入が可能な型枠を入れてモルタルを先に充填して固結させ、廃棄体を入れる前に水素ガスの発生原因となる間隙水を除去するなど、水素ガスの発生量自体を低減するための対策をとることが可能と考えられる。したがって、今後これらの低減対策について技術開発を進めて実用化する必要がある。

(以上、引用終わり)

上記を踏まえると、廃棄体パッケージ内充填材に求められる機能は、以下に示す 3 項目と考えられる。

- (a) 搬送時に容器内で廃棄体が移動しない。
- (b) 放射性物質の溶出の抑制を期待する。
- (c) 水素ガスの発生量が少ない。

廃棄体パッケージ内充填材に求められる機能のうち、(a) については、廃棄体の固定が可能な廃棄体パッケージ内充填材の製作性、実現性を検討する事とした。(c) については、乾燥処理を行う事が考えられる。しかしながら、廃棄体パッケージ製作段階において廃棄体パッケージ内充填材の含水率を低減させるために乾燥処理を施すと収縮が生じ、幅の広いひび割れが発生することが懸念される。幅の広いひび割れが生じた場合には、廃棄体パッケージ内充填材に期待される地下水の浸入抑制と地下水に溶出した放射性物質の収着効果が著しく低減し、(b) を満たすことが困難となる可能性がある。そこで、本検討では、(b) を考慮してひび割れの抑制、制御を含めた製作方法を検討することとした。

平成 30 年度に示された設計の目安のうち、廃棄体パッケージ内充填材の製作過程に関連する項目はとしては以下が示されている。

- ① 廃棄体パッケージ内充填材を別工程で製作する場合は、
 - ・製作可能な形状であること。
 - ・直接作業で、容器内に移送・設置できるものとする。
- ② 廃棄体パッケージ内充填材を別工程で製作、または、廃棄体設置前に金属容器内に直接施工する場合は、廃棄体を遠隔操作で挿入できる形状であること。
- ③ 廃棄体パッケージ内充填材を廃棄体挿入後に充填する場合は、遠隔操作で所定の状態となる

ように、容器内に施工できる材料とする。

これらを踏まえた上で、施工性や製作性を検討するための机上検討と試験を実施した。机上検討においては、施工性や製作性の観点から内部充填材の候補となるセメント系材料を絞り込んだ(1)。また、試験においては、廃棄体パッケージ B の実規模サイズから 60cm 角にスケールダウンした試験体（以下、60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体）の製作を通じて、廃棄体パッケージ内充填材の製作性、実現性を検討した。その際には、図 2.2-32 の 3 ケースの組立手順を考慮した実験要因を設定した。その後、製作した 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体を用いて、設計の目安②に関連し水素ガス発生量低減のための乾燥工程における変状の有無を確認した(2) 1)、(2) 2)。

(3)では、廃棄体パッケージの組立において構成要素間にすき間が発生する組立工程(図 2.2-32 の I 及び III) の対策技術として、セメント系材料を用いたすき間充填についての検討も実施した。廃棄体パッケージ内充填材に求められる機能のうち、(a) 及び (b) の機能を満足するためには、廃棄体パッケージの組立に際し廃棄体パッケージ内充填材に設けたすき間（廃棄体パッケージ内充填材と廃棄体との間のすき間、及び、金属容器と内部充填材の間のすき間）を、充填することが必要と考えられる。そこで、すき間充填の施工方法、また、すき間充填材に要求されるであろう機能から、すき間充填材に求められる性能を検討した。そして、すき間充填材に求められる性能に基づき、すき間充填材としてセメント系材料を選定し、すき間の充填が可能かを確認するための試験を実施した。また、用いたすき間充填材の物性値を測定した。

(1) 組立手順を考慮した廃棄体パッケージ内充填材の候補材料の検討

平成 30 年度の検討では、既往の検討を参考に、廃棄体パッケージ内充填材の選定の際の評価項目として着目すべき物性値や特性等を抽出し、候補材料の特性を評価項目ごとに検討して廃棄体パッケージ内充填材としての適性を評価してとりまとめ、候補材料の一次絞り込みを行った。その結果、施工可能であり、多くの抽出した物性等に対して適用可能なこと、硬化後の乾燥による水素ガス発生量の低減が可能と考えられることなどから、乾燥処理を経たセメント系材料が水素ガス抑制可能な廃棄体パッケージ内充填材の有力な候補となることがわかった。また、廃棄体パッケージ内充填材の製作方法に関する検討が別途実施され、組立手順として図 2.2-32 で示した 3 ケースが提示された。

そこで平成 31 年度は、廃棄体パッケージ内充填材の候補材料の更なる絞り込みと仕様の具体化を目的に、平成 30 年度の成果をふまえ、前述の組立手順 3 ケースについて、施工性や製作性の観点から、廃棄体パッケージ内充填材として候補となるセメント系材料を、特殊コンクリートを含め幅広く、施工方法を検討して絞り込みを行った。

1) 組立手順別の利点・懸念事項の整理及び検討項目の抽出

① 容器に充填材を打設後に廃棄体を設置する充填材先打設方式

容器に充填材を打設後に廃棄体を設置する充填材先打設方式（先打設方式）の概略工程を表 2.2-23 に示す。

表 2.2-23 容器に充填材を打設後に廃棄体を設置する
充填材先打設方式（先打設方式）の概略工程

	手順概略
①	鋼製容器本体内にケーシングを設置する。ケーシングの寸法は、廃棄体が封入された200Lドラム缶、角型容器、ハル缶、インナーバレル等の容器の大きさに加え、設置作業時のクリアランス（50mm程度）を加えた値を設ける。
②	鋼製容器内にパッケージ内部充填材を打設し、廃棄体パッケージ内充填材が硬化した後、ケーシングを撤去する。
③	廃棄体パッケージ内充填材と一体化した鋼製容器を乾燥工程にかける。
④	ケーシング撤去部の空間に廃棄体が封入された容器を遠隔挿入する。
⑤	パッケージ内部充填材と廃棄体封入容器間のクリアランスを、別の充填材（以下、すき間充填材と称する）を用いて遠隔操作により充填し、廃棄体封入容器の固定度を高める。

先打設方式の利点としては以下が挙げられる。

- ・廃棄体パッケージ内充填材の打設時に遠隔操作を行う必要性がないため高い施工精度を確保できる。
- ・乾燥工程時に廃棄体の影響を考慮しなくてよい。
- ・鋼製容器と充填材をほぼ完全に一体化できる。

また、懸念すべき事項としては、以下が挙げられる。

- ・鋼製容器と廃棄体パッケージ内充填材が一体化された状態で乾燥工程を行うため、高温乾燥時の廃棄体パッケージ内充填材の体積変化（温度膨張及び自己収縮・乾燥収縮）により、互いの部材に拘束応力が発生する。これにより、鋼製容器の変形、廃棄体パッケージ内充填材の幅の広いひび割れの発生等が懸念される。
- ・乾燥工程において、外周部表面からの水分逸散を期待できないため、乾燥工程が長期に及ぶ可能性がある。
- ・すき間充填材に極めて高い流動性が求められる。
- ・すき間充填材は乾燥工程を経ないため、別途、水素ガス発生量の検討が必要となる。

以上を踏まえると、先打設方式を採用した場合に、廃棄体パッケージ内充填材の検討項目は、

- ・製作性（寸法精度、施工性）
 - ・構造健全性
 - ・乾燥工程時の水分逸散時間
 - ・乾燥工程時に生じうる変形及び幅の広いひび割れの制御
- である。

② 容器に廃棄体を入れすき間を充填する充填材後打設方式

容器に廃棄体を入れすき間を充填する充填材後打設方式（後打設方式）の概略工程を表 2.2-24 に示す。

表 2.2-24 容器に廃棄体を入れすき間を充填する
充填材後打設方式（後打設方式）の概略工程

	手順概略
①	鋼製容器本体内に廃棄体封入容器を設置する。
②	鋼製容器内に廃棄体パッケージ内充填材を遠隔操作により打設する。
③	容器全体を遠隔操作により乾燥工程にかける。

後打設方式の利点としては以下が挙げられる。

- ・ 工程が少ない。
- ・ 鋼製容器と充填材及び廃棄体封入容器をほぼ完全に一体化できる。
- ・ すき間充填材の検討が不要。

また、懸念すべき事項としては、以下が挙げられる。

- ・ 遠隔操作により、廃棄体パッケージ内充填材の打設、及び、乾燥工程を行う必要がある。
- ・ Gr2 や Gr4 など、廃棄体が熱を発する場合、廃棄体パッケージ内充填材の流動性に及ぼす高温の影響を考慮する必要がある。
- ・ 鋼製容器と廃棄体パッケージ内充填材及び廃棄体封入容器が一体化された状態で乾燥工程を行うため、高温乾燥時のセメント系充填材の体積変化（温度膨張及び自己収縮・乾燥収縮）により、互いの部材に拘束応力が発生する。これにより、鋼製容器、廃棄体封入容器の変形、廃棄体パッケージ内充填材の幅の広いひび割れの発生等が懸念される。
- ・ 乾燥工程において、上部表面以外からの水分逸散を期待できないため、乾燥工程が極めて長期に及ぶ可能性がある。

以上を踏まえると、後打設方式を採用した場合に、廃棄体パッケージ内充填材の検討項目は、

- ・ 製作性（寸法精度、遠隔封入性、高温材に隣接する場合の流動性）
 - ・ 構造健全性
 - ・ 乾燥工程時の水分逸散時間
 - ・ 乾燥工程時に生じうる変形及び幅の広いひび割れの制御
- である。

③ 別工程で製作した廃棄体パッケージ内充填材を容器に設置後に廃棄体を収納するプレキャスト方式

別工程で製作した廃棄体パッケージ内充填材を容器に設置後に廃棄体を収納するプレキャスト方式（プレキャスト方式）の概略工程を表 2.2-25 に示す。

表 2.2-25 別工程で製作した内部充填材を容器に設置後に廃棄体を収納するプレキャスト方式（プレキャスト方式）の概略工程

	手順概略
①	型枠及びケーシングを設置しプレキャスト（PCa）廃棄体パッケージ内充填材を製作する。ケーシング寸法は、廃棄体が封入された 200L ドラム缶、角型容器、ハル缶、インナーバレル等の容器の大きさに加え、設置作業時のクリアランス（50mm 程度）を設ける。
②	PCa 廃棄体パッケージ内充填材が硬化した後、脱型し、乾燥工程にかける。
③	乾燥後、鋼製容器に PCa 廃棄体パッケージ内充填材を設置する。
④	ケーシング撤去部の空間に廃棄体が封入された容器を遠隔挿入する。
⑤	鋼製型枠と廃棄体パッケージ内充填材、及び、廃棄体パッケージ内充填材と廃棄体封入容器間のクリアランスを、すき間充填材を用いて遠隔操作により充填し、廃棄体封入容器の固定度を高める。

プレキャスト方式の利点としては以下が挙げられる。

- ・廃棄体パッケージ内充填材の打設時に遠隔操作を行う必要性がないため高い施工精度を確保できる。
- ・乾燥工程時に廃棄体及び鋼製容器の影響を考慮しなくてよい。また、表面積が大きいため、迅速に乾燥工程を終えることができる。

また、懸念すべき事項としては、以下が挙げられる。

- ・高温乾燥時の廃棄体パッケージ内充填材の体積変化（温度膨張及び乾燥収縮）の内外分布により、内部拘束応力が発生する。これにより、鋼製容器の変形、廃棄体パッケージ内充填材の幅の広いひび割れの発生等が懸念される。ただし、外部拘束と比較し貫通ひび割れが生じる可能性は小さい。
- ・すき間充填材に極めて高い流動性が求められる。
- ・すき間充填材は乾燥工程を経ないため、別途、水素ガス発生量の検討が必要となる。

以上を踏まえると、プレキャスト方式を採用した場合に、廃棄体パッケージ内充填材の検討項目は、

- ・製作性（寸法精度、施工性）
 - ・構造健全性
 - ・乾燥工程時に生じうる変形及び幅の広いひび割れの制御
- である。

2) 組立手順を考慮した検討内容及び候補材料の絞り込み

1)の検討より、廃棄体パッケージ内充填材の製作性に関しては、3つケースの組立手順によって要求される性能が異なり、以下の検討が必要であることが確認された。

- ・製作性（寸法精度、施工性、遠隔封入性、高温材に隣接する場合の流動性）
- ・構造健全性
- ・乾燥工程時の水分逸散時間
- ・乾燥工程時に生じうる変形及び幅の広いひび割れの制御

上記の検討項目から、平成 31 年度に実施する検討内容及び廃棄体パッケージ内充填材の候補材

料の絞り込みを行う。

① 製作性に係る検討内容（想定する組立手順の選定）

前記 4 項目のうち、製作性と構造健全性については、NUMO-SC で示されている廃棄体パッケージの設計要件に基づき設計の目安が提示されている。

製作性に関する設計の目安は、

- ① 製作可能な形状であること
- ② 直接作業で、容器内に移送・設置できること

とされており、これは、複雑な形状となった場合においても要求される寸法精度を保ち、充填材が充分充填すること、と言い換えることができる。

また、遠隔封入性に関する設計の目安としては、

- ③ 廃棄体を遠隔操作で挿入できる形状であること
- ④ 遠隔操作で所定の状態となるように容器内に施工できること

が挙げられており、遠隔操作によっても上記設計の目安①、②を満足することが求められる。

ここで、1)における各組立手順の検討から、先打設方式及びプレキャスト方式では、廃棄体封入容器を設置する前に製作可能であることから人力による打設が実施できるのに対し、後打設方式では遠隔封入性が求められる。つまり製作性に関しては、後打設方式が最も厳しい条件である。

よって、平成 31 年度における廃棄体パッケージ内充填材の製作性に係る検討では、後打設方式による組立手順を想定し、バイブレータ等を用いた打設後の加振を行わない条件で、施工上の寸法精度が確保されているかの検討を実施することとした。

② 構造健全性に係る検討内容（基礎物性取得に係る測定項目の選定）

次に、構造健全性に関する設計の目安は以下の通りである。

- ⑤ 搬送時に容器内で廃棄体が移動しない、または容器自体に廃棄体を固定できること
- ⑥ 充填材から発生するガスは、できる限り小さいこと
- ⑦ 充填材は、人工バリアの機能を減ずることのないように、緩衝材等の容器内への流入を妨げるよう容積に変化がないこと

設計の目安⑤については、硬化後の充填材が所定の強度、ヤング係数を有していることを確認することにより満足することができると考えられるため、2019 年度の検討において、廃棄体パッケージ内充填材の強度試験を実施することとした。

また、設計の目安⑥については、充填材の含水率を把握することによって、設計の目安⑦は、変形及び幅の広いひび割れを抑制することによって満足できることから、平成 31 年度は、製作時における乾燥工程を対象に、廃棄体パッケージ内充填材の含水率試験ならびに体積変化試験を実施することとした。なお、設計の目安⑦に関連し、寸法安定性については、長期的にはクリープ性状の検討が必要である。

③ 乾燥工程時の水分逸散・変形を考慮した廃棄体パッケージ内充填材の検討

1)で挙げられた検討項目のうち、「乾燥工程時の水分逸散時間」を決定する因子は、周辺の温

湿度条件、部材形状の他に、初期含水率及び材料の水分移動抵抗性に依存する。工程管理の観点から、水分逸散時間は短いほうがよく、初期含水率と水分移動抵抗性は小さいほど有利である。

セメント系材料において水分移動抵抗性は、みかけの拡散係数で表現されることが多いが、みかけの拡散係数は、1) 水セメント比が大きいほど大きい、2) 粗骨材とセメント硬化体の界面に存在する遷移帯の存在によりコンクリートの方が大きくなるとされている。

水セメント比の設定については、水セメント比が大きいほど、初期含水率、みかけの拡散係数何れも大きくなるため、許容する水素ガス発生量の閾値によって最適な解が異なると予想される。一方、粗骨材の有無に関しては、粗骨材を入れることで初期含水率が低下し、みかけの拡散係数が増大するため、コンクリートの方が有利である。

また、「乾燥工程時に生じうる変形及び幅の広いひび割れの制御」に関しても、粗骨材の存在により乾燥収縮ひずみが著しく低減されることから、粗骨材を入れたコンクリートの方が望ましいと考えられる。

一方、粗骨材の混入により流動性が低下する可能性があるため、平成 31 年度の検討では、充填材の候補材料としてモルタルではなくコンクリートで実施することとし、コンクリートの流動性が十分に確保されていることを検証することとした。

④ 先打設方式及びプレキャスト方式に係る検討内容（すき間充填に係る検討）

前述した通り、平成 31 年度の廃棄体パッケージ内充填材の製作性に係る検討では、3 ケースの組立手順のうち最も厳しい条件と考えられる後打設方式による組立手順を想定することとした。しかしながら、3.2.1(1)項及び(3)項で述べた通り、残りの 2 ケース（先打設方式及びプレキャスト方式）の組立手順でも検討が必要な項目はある。具体的には、廃棄体パッケージ内充填材の金属容器への挿入や内部充填材設置後に廃棄体を挿入する作業の都合、金属容器－廃棄体パッケージ内充填材及び廃棄体パッケージ内充填材－廃棄体の間にすき間を設ける必要があり、設計の目安⑤“搬送時に容器内で廃棄体が移動しない、または容器自体に廃棄体を固定する機能を設ける”に対応するには、すき間を充填する方策を検討する必要がある。そこで平成 31 年度は、このすき間を埋めるためのセメント系材料に着目した要素試験を行うこととした。具体的な検討内容については、(3)で詳述する。

3) 抽出した検討項目における実施内容の整理

以上 2)までの机上検討で絞り込んだ検討項目と候補材料、それに対して実施した試験の目的と内容の一覧を報告書本編に示す。

(2) 廃棄体パッケージ内充填材の製作性に関する検討

廃棄体パッケージ内充填材の製作における主たる工程としては、セメント系材料の打設及び硬化過程と水素ガス発生低減のための高温乾燥の 2 工程に分けられる。そこで、報告書本編で絞り込んだ廃棄体パッケージ内充填材を製作する上で必要と考えられる検討項目に対して、パッケージ内充填材の組立手順の何れのケースにも共通する知見を得ることを念頭に置いて 2 工程に関連する確認試験を実施した。ここでは、実施した試験の条件や結果などの詳細を記す。

1) 廃棄体パッケージ内充填材の製作性及び強度特性の確認

現時点で想定されている廃棄体パッケージ内充填材は、廃棄体と金属容器との間隔が狭くなっている箇所があり、そのような狭隘部への打設が可能かの確認が必要である。そこで本項では、試験体の製作を通じて、廃棄体パッケージ内充填材打設時の流動性、充填性、材料分離性、強度

特性等の製作性を検討する上で必要なデータを取得するとともに、取得したデータに基づき、内部充填材の製作性の観点から課題を抽出した。

① 配合選定

(a) 配合設計の考え方

高流動コンクリートの配合選定に際しては、始めに海外における先行事例のコンクリート配合を国内材料に置き換えて検討したが、十分な流動性、充填性を得ることができなかつたため、国内の規格に準じて高流動コンクリートを検討することとした。

土木学会コンクリート標準示方書【施工編】(土木学会, 2017)では、高流動コンクリートの自己充填性に関して、次の3ランクの中から選ぶことを原則としている。

ランク 1: 鋼材の最小あきが 35~60mm 程度で、複雑な断面形状、断面寸法の小さい部材または箇所、無筋のコンクリート構造物に自重のみで均質に充填できるレベル。

ランク 2: 鋼材の最小あきが 60~200mm 程度の鉄筋コンクリート構造物または部材に自重のみで均質に充填できるレベル。

ランク 3: 鋼材のあきが 200mm 程度以上で、断面寸法が大きく配筋量の少ない部材または箇所、無筋のコンクリート構造物に自重のみで均質に充填できるレベル。

上記の自己充填ランクに対し、製作性に係る検討で整理した廃棄体パッケージ内充填材の要件(①複雑な形状となった場合においても要求される寸法精度を保ち、充填材が充分充填すること、②遠隔操作で所定の状態となるように容器内に施工できること)と照合すると、ランク 1 を選定するのが妥当と考えられた。そこで本試験では、高流動コンクリートの自己充填性ランク 1 相当に設定し、土木学会コンクリート標準示方書【施工編】を参考に、フレッシュコンクリート性状の目標値を以下の通りに設定した。

スランプフロー : 650~750mm

500mm フロー到達時間 : 5~20 秒

V₇₅ 漏斗流加時間の範囲 : 9~20 秒

また、コンクリートの設計強度は、NUMO-SC における「廃棄体パッケージ内充填材に積み上げ時の構造健全性を期待する場合には、30N/mm²の強度をめやすとして設計する」という記述に基づき、30MPa 以上を暫定的に設定した。

(b) 試験体製作における廃棄体パッケージ内充填材の種類及び暫定配合の設定

試験体製作における内部充填材の種類としては、絞り込んだ検討内容を踏まえ、以下の3条件を設定した。

【無筋コンクリート】 : 流動性を高めたコンクリート (高流動コンクリート)

【鉄筋コンクリート】 : 鉄筋を配置し、乾燥工程における内部充填材の変形を制御する。
配合は無筋コンクリートと同じ。

【繊維補強コンクリート】 : 繊維補強材を入れ、乾燥工程における内部充填材の変状を抑制する。
配合は無筋コンクリートに繊維補強材を混入したもの。

配合選定で使用した材料を表 2.2-26 に示す。使用材料は国内で入手できる銘柄とし、繊維補強材については海外の先行事例を参考にステンレス製の短繊維とした。なお、繊維補強材の形状

はコンクリートの物性に影響を及ぼし、アスペクト比（長さ/直径）が小さいと繊維が抜けやすくなり補強効果が小さくなるが、大きいと混練が困難になる他に流動性が低下するため、高流動コンクリートの配合設計、製造が難しくなると予想された。そこで、既往の繊維補強コンクリートに関する指針や製造実績（超高強度繊維補強コンクリート、ポリマー含侵コンクリート等）を参考に、 $\phi 0.3 \times 15\text{mm}$ のステンレス短繊維を用いた。

表 2.2-26 暫定配合選定における使用材料

種別	記号		銘柄	密度 (g/cm^3)
混練水	W		千葉県佐倉市上水道水	1
セメント	P	C	太平洋セメント社製 普通ポルトランドセメント	3.16
石粉		GC	奥多摩工業社製 石灰石微粉末 TR-200	2.71
細骨材	S		静岡県掛川産陸砂	2.59*
粗骨材	G		(G 大) 茨城県桜川産砕石 2013	2.64*
			(G 小) 茨城県桜川産砕石 1305	2.65*
	※G 大:G 小=50:50(質量比)で使用			-
混和剤	SP	8VS	BASF ジャパン株式会社製 マスターグレンニウム SP8VS (ポリカルボン酸系 高性能 AE 減水剤 標準型 I 種)	-
		8HV	BASF ジャパン株式会社製 マスターグレンニウム SP8HVM (ポリカルボン酸系 高性能 AE 減水剤 標準型 I 種)	-
	AE		BASF ジャパン株式会社製 マスターエア 202 (AE 剤 I 種)	-
繊維補強材	FM		伊藤忠丸紅特殊鋼社製 ステンレス短繊維 $\phi 0.3 \times 15\text{mm}$	7.93

注記) ※:細骨材及び粗骨材の密度は、表乾状態の密度

暫定的に設定した配合を表 2.2-27 に示す。本試験のコンクリートは、高流動コンクリートの自己充填性ランク 1 相当であること、また高い自己充填性が求められることから、材料分離抵抗性の高い、高水粉体比の配合を選定した。水粉体比は 27%とし、材料分離抵抗性を向上させる目的で石粉を全粉体量の 30%内割り置換とした。また、単位粗骨材容積を 280L とした。

表 2.2-27 設定した暫定配合

種類	目標 スランプ フロー (mm)	目標 空気量 (vol%)	W/P (mass%)	W/C (mass%)	GC 添加率 (mass%)	粗骨材 容積 (L/m^3)	単位量 (kg/m^3)					
							W	P		S	G	FM
								C	GC			
繊維無し	650~750	4.5 ± 1.5	27	38.5	30	280	175	454	195	694	739	-
繊維有り												適宜

(c) コンクリートの製作方法

コンクリートの練混ぜは、温度 $20 \pm 2^\circ\text{C}$ 、相対湿度 60%以上の恒温恒湿室内で実施した。コンクリートの練混ぜには、光洋機械産業株式会社製 水平二軸ミキサ KYC-DAM60 (公称容量 60L) を用いた。練混ぜ方法を繊維無し配合及び繊維有り配合の 2 パターンについて以下に示す。

【繊維無し配合】

G 大+G 小+1/2S+C+GC+1/2S→空練り 15sec→W+SP+AE→本練り 150sec→300sec 静置
→本練り 30sec→排出

【繊維有り配合】

G 大+G 小+1/2S+C+GC+1/2S→空練り 15sec→W+SP+AE→本練り 150sec→300sec 静置
→本練り 30sec→本練り 60sec (前半 30sec で繊維投入) →排出

(d) フレッシュ性状の試験方法

練混ぜ後、自己充填性を評価するため JIS A 1150「コンクリートのスランプフロー試験方法」に準拠し、スランプフロー試験及び JSCE-F 512「高流動コンクリートの漏斗を用いた流下試験方法(案)」に準拠し、漏斗流下時間の測定を実施した。スランプフロー試験時には 500mm フロー到達時間及び流動停止時間についても測定した。なお漏斗流下時間の測定において、漏斗は V 漏斗(吐出口寸法：75×75mm)を用い、測定は 2 回連続で実施した。

併せて、空気量 (JIS A 1128「フレッシュコンクリートの空気量の圧力による試験方法-空気室圧力方法」に準拠) 及び、コンクリート温度 (JIS A 1156「コンクリートの温度測定方法」に準拠) の計測も実施した。

② 配合選定結果

表 2.2-27 で示した配合について、フレッシュ性状が目標値の範囲内となるよう、混和剤添加率及び混和剤種類を適宜調整し、配合選定を実施した。配合選定時の各練混ぜバッチにおけるフレッシュコンクリート試験結果を表 2.2-28 に示す。表 2.2-28 に示すバッチの内、繊維無し配合についてはバッチ No.5 を、繊維有り配合についてはバッチ No.6 を決定配合とした。

表 2.2-28 配合選定結果

バッチ No.	W/P (mass%)	s/a (vol%)	GC/P (mass%)	Gvol (L/m ³)	FM 量 (1m ³ ×vol%)	単位量 (kg/m ³)							添加率 (P×mass%)			スランプフロー					空気量 (vol%)	温度 (°C)	V ₇₅ 漏斗 流下時間 (sec)		
						W	P		S	G 大	G 小	FM	8SV	8HV	AE	(sec)		(mm)							
							C	GC								50cm 到達	停止	1	2	Ave.					
捨て	27	50.5	30	280	-	175	454	194	737	370	369	-	1.00	-	0.003	-	-	-	-	-	2.4	-	-	-	-
1	27	50.5	30	280	-	175	454	194	737	370	369	-	1.50	-	0.006	6.1	72.9	725	713	719	2.0	23	16.1	15.3	15.7
2	27	50.5	30	280	-	175	454	194	737	370	369	-	1.50	-	0.015	5.8	80.2	724	710	717	3.3	22	12.2	12.8	12.5
3	27	50.5	30	280	-	175	454	194	737	370	369	-	-	1.30	0.030	7.1	38.1	564	536	550	2.2	22	18.4	16.9	17.7
													-	+0.20*1	-	-*2	-*2	-*2	-*2	-*2	-*2	-*2	-*2	-*2	-*2
4	27	50.5	30	280	-	175	454	194	737	370	369	-	-	1.40	0.050			653	650	652	2.8	23	13.0	14.1	13.6
5	27	50.5	30	280	-	175	454	194	737	370	369	-	-	1.45	0.060	5.3	40.3	701	689	695	3.1	22	11.5	12.1	11.8
					1.0											9.8	56.4	612	592	602	2.3	22	41.1	40.4	40.8
6	27	50.5	30	280	0.5	175	454	194	737	370	369	39.65	-	1.60	0.070	7.5	63.2	707	707	707	2.5	23	14.7	14.8	14.8

注記) *1: ミキサ内に後添加した量を示す。

*2: コンクリートが分離したため、測定していない。

③ 選定配合で作製したコンクリートの基本物性

本項では、選定配合でコンクリート作製したコンクリートの基本物性を把握するため、表 2.2-29 に示す項目の物性値を取得した。

表 2.2-29 選定配合で取得する基本物性

測定項目	試験概要	対象配合	
		繊維無し	繊維有り
強度、静弾性	選定配合の圧縮強度と静弾性係数を測定した。	○	○
熱物性値	熱伝導率	○	—
	熱拡散率	○	—
	比熱	○	—
乾燥開始前の含水率、空隙率	コンクリート中の自由水を「105℃で 24 時間以上乾燥したときに試験体外に逸散する水」と定義し、乾燥開始前のコンクリート中の自由水量の割合（含水率）を求めた。	○	○

(a) 試験方法

(i) 強度、静弾性

JIS A 1108「コンクリートの圧縮強度試験方法」及び JIS A 1149「コンクリートの静弾性係数試験方法」に準拠し、選定配合の圧縮強度、静弾性係数を測定した。φ100×200mm の円柱試験体を成型し、20℃封緘養生を施した後、材齢 28 日で試験に供した。

(ii) 熱物性値

廃棄体パッケージモデルを対象とした伝熱解析に資する目的で、選定したコンクリートの熱物性値（熱伝導率及び熱拡散率）を取得した。

熱伝導率測定用の試験体は、φ200×400mm の円柱試験体の中心に銅パイプを設置し、試験体の高さの中央に熱電対を設置したものである。型枠及び打設状況を図 2.2-33 に示す。試験体は試験に供する材齢 28 日まで脱枠せずに 20℃封緘養生を施した。

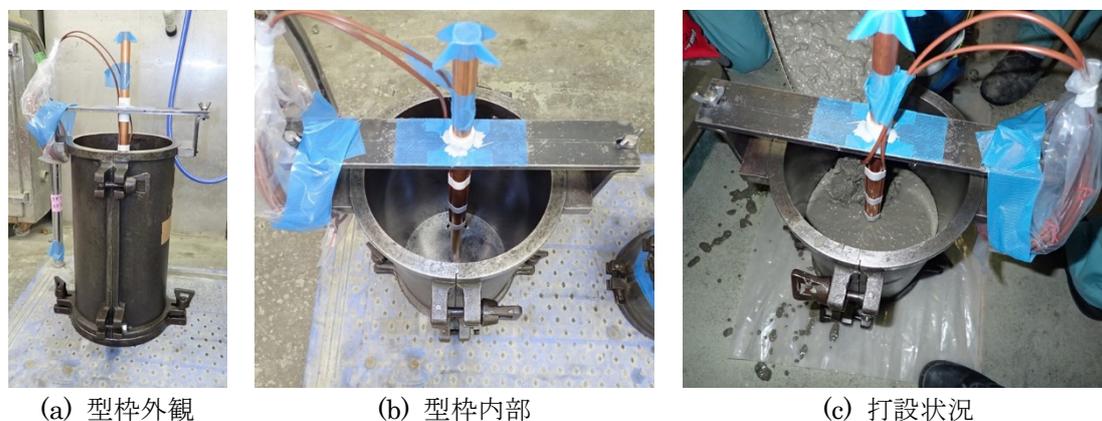


図 2.2-33 熱伝導率試験体の型枠及び打設状況

熱伝導率の測定状況を図 2.2-34 に示す。熱伝導率の測定には、株式会社チノー製の精密冷水槽及び制御測定装置を用いた。測定は、試験体中心の銅管内に直径 1mm の棒状ヒーターを設置し、ヒーターに一定電力を供給することで、試験体に熱を加えた。試験体の側面からのみ熱が移動するため、また、試験体の外表面は一定（温度約 10℃）に温度制御された水に接しているため、終局的には温度平衡状態（定常状態）となる。この時の試験体内面温度と外面温度及び供給電力を測定し、下記の式から熱伝導率を算出した。なお、本試験では、試験体に時間当たり 90W の熱量を供給した。

$$\lambda = Q \cdot \ln(b/a) / (2 \cdot \pi \cdot L \cdot (T_a - T_b))$$

ここで、

λ : 熱伝導率 (W/(m·K))

Q: 供給電力 (W)

a: 試験体の内径 (m)

b: 試験体の外径 (m)

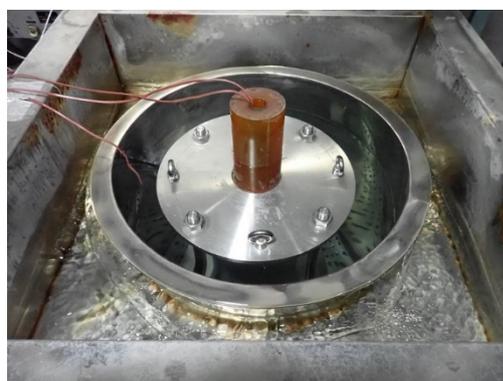
L: 試験体の高さ (m)

T_a: 試験体の内面温度 (°C)

T_b: 試験体の外面温度 (°C)



(a) 試験体外観



(b) 槽内設置後の状況

図 2.2-34 熱伝導率の測定状況

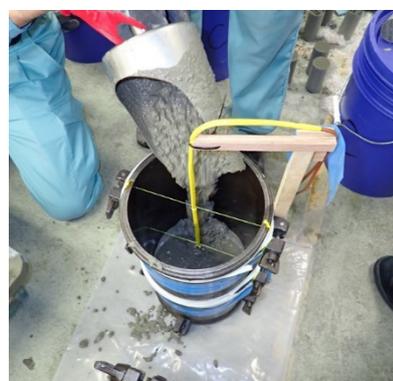
熱拡散率測定用の試験体は、φ200×400mm の円柱試験体の高さ中央に熱電対を設置したものである。型枠及び打設状況を図 2.2-35 に示す。熱伝導率と同様、試験体は試験に供する材齢 28 日まで脱枠せずに 20℃封緘養生を施した。



(a) 型枠外観



(b) 型枠内部



(c) 打設状況

図 2.2-35 熱拡散率試験体の型枠と打設状況

熱拡散率の測定状況を図 2.2-36 に示す。熱拡散率は、株式会社チノー製、精密冷水槽及び制御測定装置を用いて、Glover 法（水中冷却法）により測定した。熱電対を埋め込んだ試験体を別槽で約 60℃に加熱し、試験体全体の温度が均一に達したことを確認した後、約 10℃の恒温冷水槽に入れ、試験体の中心における温度変化を経時的に測定した。熱拡散率は下記式から求めた。

$$h^2=(D^2/t) \cdot F^{-1}(R)$$

ここで、

$$\begin{aligned} h^2: & \text{熱拡散率 (m}^2/\text{h)} & D^2: & \text{試験体の外径 (m)} \\ t: & \text{冷却開始からの時間 (h)} & R: & \theta_i/\theta_0 \\ \theta_i: & \text{冷却途中における試験体中心温度と冷却水温度の差 (}^\circ\text{C)} \\ \theta_0: & \text{冷却開始時の試験体中心温度と冷却水温度の差 (}^\circ\text{C)} \end{aligned}$$

なお、 $F^{-1}(R)$ については、米開拓局の関数表より求めた。

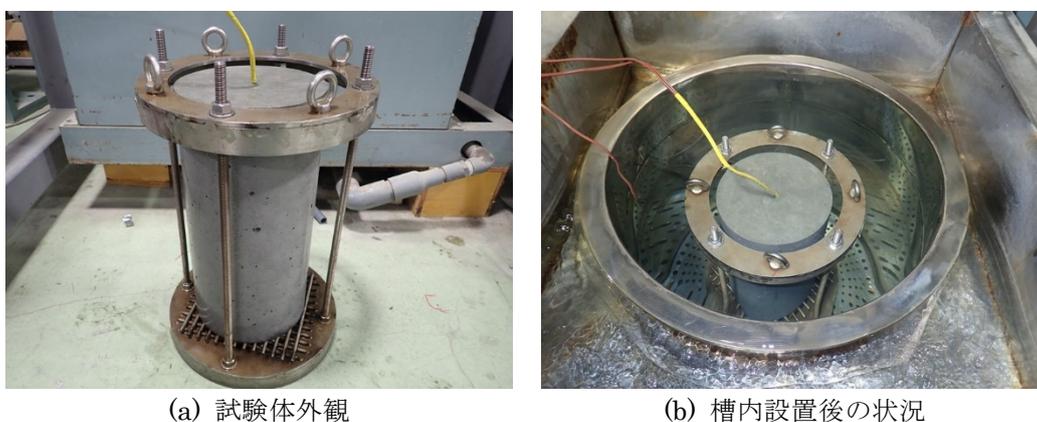


図 2.2-36 熱拡散率の測定状況

比熱は、上述で求めた熱伝導率、熱拡散率及び熱拡散率測定用の試験体の見掛け密度から、下記式により算出した。

$$C=(\lambda/(h^2 \cdot \rho)) \times 3600 \quad (3.3-3)$$

ここで、

$$\begin{aligned} C: & \text{比熱 (J/(kg} \cdot \text{K))} & \lambda: & \text{熱伝導率 (W/(m} \cdot \text{K))} \\ h^2: & \text{熱拡散率 (m}^2/\text{h)} & \rho: & \text{見掛け密度 (kg/m}^3) \end{aligned}$$

(iii) 乾燥開始前の含水率、空隙率

本検討ではコンクリート中の自由水を、「105℃で 24 時間以上乾燥したときに試験体外に逸散する水」と定義し、乾燥開始前のコンクリートを対象に、自由水量の割合（含水率）を以下の方法により求めた。

封緘養生 28 日の $\phi 100 \times 200\text{mm}$ の円筒試験体を割裂しその時点の質量を測定した。次に、水没させ、真空ポンプによる減圧で飽水させ、表面乾燥飽水状態質量、及び、アルキメデス法による見かけの密度を測定した。その後、定温乾燥機により 105℃で 24 時間以上乾燥させ絶対乾燥状

態質量を測定した。

秤量には 0.1g まで測定可能な電子天秤を用いて、質量含水率、空隙率を 2 体の平均値としてそれぞれ有効数字 3 桁にて算出した。以下に計算式(を示す。

$$w_0 = \frac{W_0 - W_d}{W_d}$$

$$p_s = \frac{\rho_s (W_s - W_d)}{\rho_w \cdot W_s}$$

ここで、 w_0 : 質量含水率(g/g)、
 W_0 : 乾燥開始前質量(g)、
 W_d : 絶対乾燥状態質量(g)、
 p_s : 空隙率(cm³/cm³)、
 ρ_s : 見かけの密度(g/cm³)、
 W_s : 表面乾燥飽水状態質量(g)、
 ρ_w : 純水の密度(=0.998) (g/cm³)、

(b) 試験結果

(i) 強度、静弾性

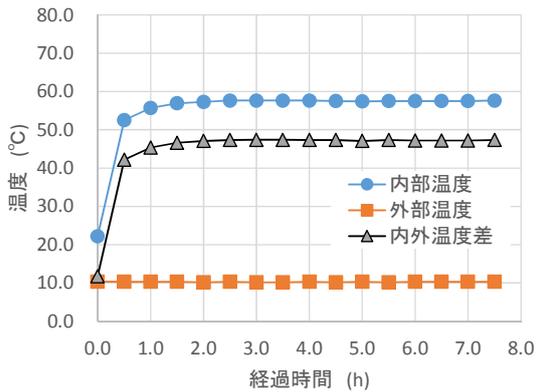
圧縮強度及び静弾性係数試験結果を表 2.2-30 に示す。表より、圧縮強度は繊維の有無によらず、暫定的に設定したコンクリートの設計強度 (30MPa 以上) を上回っており、圧縮強度、静弾性係数ともに、十分に構造健全性を満たす結果であった。

表 2.2-30 圧縮強度及び静弾性係数試験結果

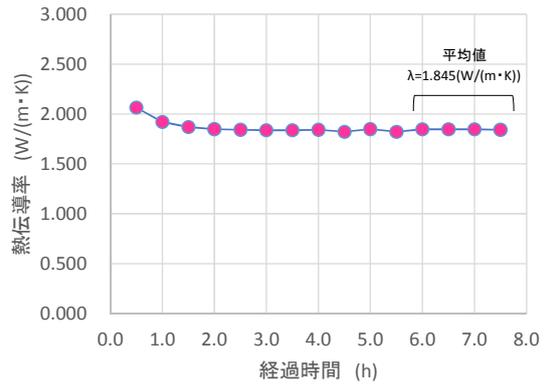
配合	供試体 No.	圧縮強度 (N/mm ²)		静弾性係数 (kN/mm ²)	
			平均		平均
繊維無し	1	74.2	74.6	35.3	34.8
	2	74.0		35.4	
	3	75.7		33.8	
繊維有り	1	76.5	75.2	34.8	34.2
	2	75.2		34.4	
	3	73.9		33.3	

(ii) 熱物性値

熱伝導率試験の測定結果を図 2.2-37 に、熱拡散率試験の測定結果を図 2.2-38 に示す。また、図 2.2-37 及び図 2.2-38 で示した測定結果に基づき算出した熱伝導率、熱拡散率及び比熱を表 2.2-31 に、比熱の算出に用いた熱拡散測定用試験体の寸法、質量及び見掛け密度の値を表 2.2-32 に示す。

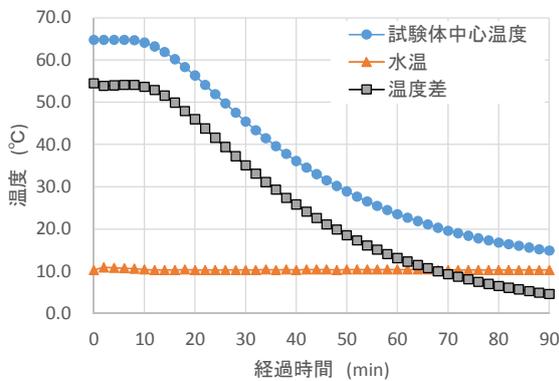


(a) 各種温度と経過時間の関係

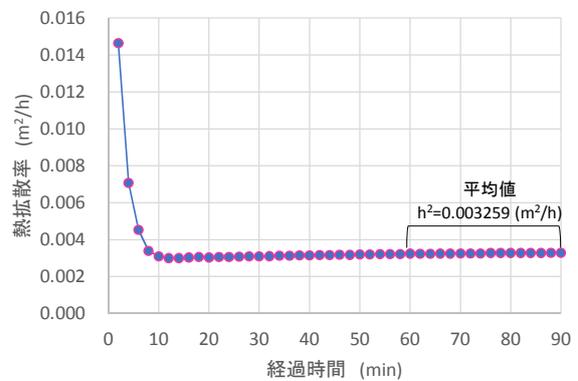


(b) 熱伝導率と経過時間の関係

図 2.2-37 熱伝導率試験の測定結果



(a) 各種温度と経過時間の関係



(b) 熱伝導率と経過時間の関係

図 2.2-38 熱拡散率試験の測定結果

表 2.2-31 熱伝導率、熱拡散率及び比熱の算出結果

熱伝導率 λ *1		熱拡散率 h^2 *3	比熱*4	
(W/(m·K))	kcal/(m·h·°C)*2		(J/(kg·K))	(kcal/(kg·K))
1.845	1.586	0.003259	857.8	0.205

注記) *1: 熱伝導率は値が定常となった 6.0~7.5 時間の平均値 (図 2.2-37 参照)

*2: 熱伝導率 (kcal/(m·h·°C)) = 0.8598 × 熱伝導率 (W/(m·K))

*3: 熱拡散率は値が定常となった 60~90 分の平均値 (図 2.2-38 参照)

*4: 比熱 (kcal/(kg·K)) = 0.000239 × 比熱 (J/(kg·K))

表 2.2-32 熱拡散測定用試験体の寸法、質量及び見掛け密度

試験体寸法*4 (mm)						試験体質量 (kg)	見掛け密度 (kg/m³)
直径 1	直径 2	平均直径	高さ 1	高さ 2	平均高さ		
200	200	200	399	399	399	29.8	2376

(iii) 乾燥開始前の含水率、空隙率

乾燥開始前の質量含水率及び空隙率を表 2.2-33 に示す。なお表 2.2-33 には参考として、平成 30 年度の要素試験で取得した、水粉体比が異なるコンクリートの質量含水率及び空隙率の測定結果 (W/P:35~55) も併記する。

表 2.2-33 乾燥開始前の質量含水率及び空隙率試験結果の比較

配合条件				試験結果		
水粉体比 (mass%)	単位水量 (kg/m ³)	単位粉体量(kg/m ³)		繊維有無	質量含水率 (mass%)	空隙率 (vol%)
		セメント	石灰石微粉末			
W/P:27	175	454	194	繊維有り	4.02	10.6
				繊維無し	4.10	10.1
W/P:35	163	466	—	繊維無し	4.36	11.4
W/P:45		362	—		4.73	12.1
W/P:55		296	—		5.24	13.0

注記) 灰色の網掛け欄は 2018 年度の測定結果

表より、平成 30 年度と平成 31 年度で単位水量は異なるものの、W/P:27%の含水率及び空隙率は、水粉体比が高い平成 31 年度のそれらよりも小さい値となり、水粉体比が低くなるにつれ、含水率及び空隙率は減少する傾向を示した。なお、繊維の有無による差は認められなかった。

含水率及び空隙率に差が生じた要因としては、水粉体比によって自由水量及び結合水量が異なることが挙げられる。すなわち、水粉体比が小さくなるにつれて単位粉体量は多くなることから、水和反応に消費される水量 (結合水量) の割合は大きくなるとともに組織は緻密になり、105℃乾燥で逸散する自由水量が減少しているものと考えられる。

④ 選定配合で作製したコンクリートの高温乾燥時の性質

パッケージ内充填材としてセメント系材料を使用する場合、水素ガス発生量低減のために乾燥工程を経ることが想定されている。セメント系材料は、他の材料と同様に昇温降温に伴い、体積が膨張・収縮する。また、セメント系材料特有の現象として、乾燥に伴い空隙水が外部に散逸された場合に、毛細管張力等の機構により乾燥収縮が生じる。

本項では、選定配合が想定される高温乾燥を受けた際に生じる諸特性の変化について検討を実施した。

(a) 含水率、空隙率の経時変化

乾燥工程における含水率と空隙率の経時変化を下記式により求めた。結果を図 2.2-39 及び図 2.2-40 に示す。

$$w_0 = \frac{W_0 - W_d}{W_d}$$

$$p_s = \frac{\rho_s (W_s - W_d)}{\rho_w \cdot W_s}$$

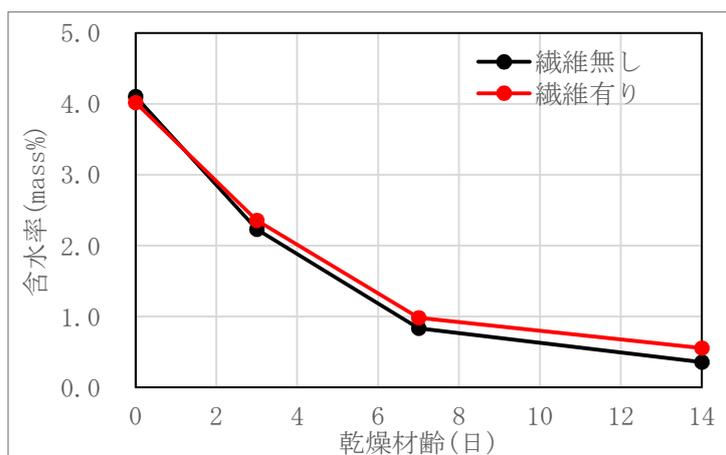


図 2.2-39 乾燥工程における含水率の経時変化

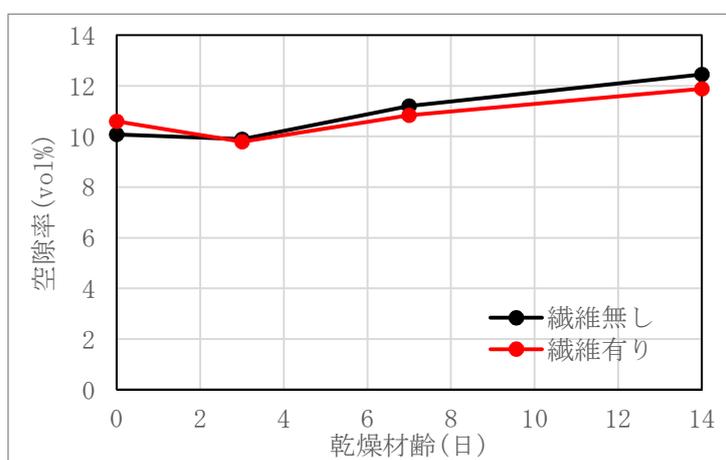


図 2.2-40 乾燥工程における空隙率の経時変化

図 2.2-39 より、80℃乾燥期間中、含水率は低下し続け、乾燥材齢 7 日時点で含水率 1.0mass% 程度、乾燥材齢 14 日時点では、繊維無し：0.36mass%、繊維有り：0.56mass%であった。また、乾燥期間中、含水率の低下速度は徐々に緩慢になり乾燥材齢 14 日時点で収束の兆しがみられる。含水率の経時変化に及ぼす繊維の影響はほとんど見られなかった。

また、図 2.2-40 より、乾燥材齢 3 日以降、繊維の有無によらず試験体中の空隙率は増加し、乾燥により細孔構造の粗大化が進行していることが確認された。高温乾燥によるコンクリートの空隙構造の粗大化は、C-S-H の収縮によるもの（青野ほか，2007）と、骨材界面の微細ひび割れの発生によるもの（Maruyama et al., 2013）に大別されるが、本検討の範囲では各要因の寄与度を把握するには至らなかった。

次に、放射線環境下における水素ガス発生量を推定するための資料として、乾燥工程中にどの程度の割合の水分が逸散したかを整理した。単位水量を基準としたものを図 2.2-41、自由水量を基準としたものを図 2.2-42 に示す。ここで、自由水は 105℃乾燥により逸散可能な水分量と定義している。

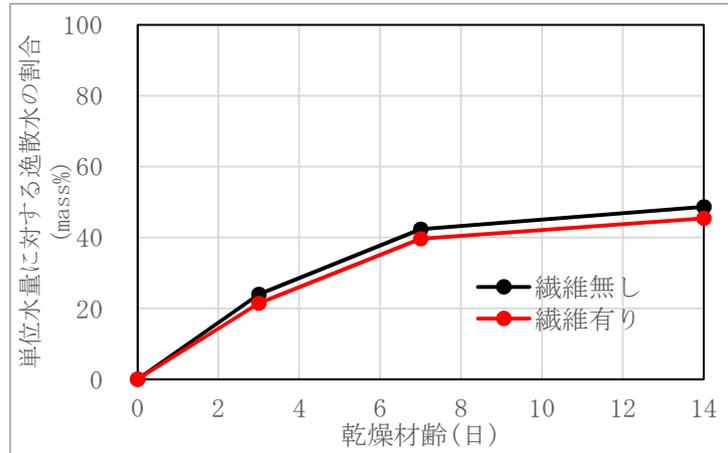


図 2.2-41 乾燥工程における単位水量に対する逸散水の割合

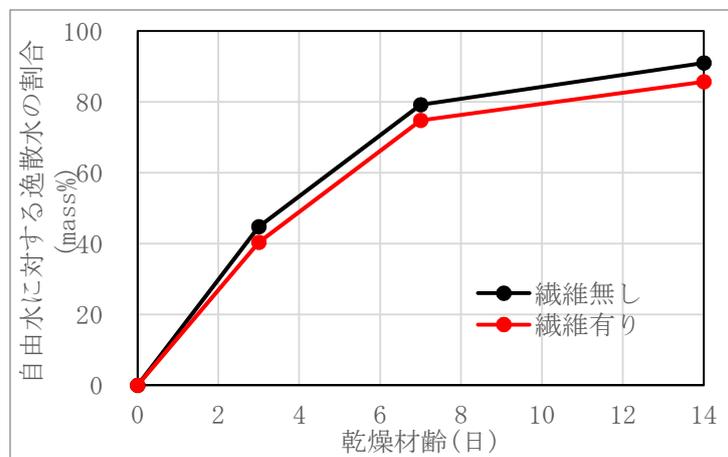


図 2.2-42 乾燥工程における自由水に対する逸散水の割合

図より、80℃14日間時点において、単位水量に対して繊維無しでは45.5mass%、繊維有りでは48.6mass%、自由水に対して繊維無しでは85.7mass%、繊維有りでは91.0mass%の水分が逸散している結果であった。

(b) 体積変化測定

乾燥工程時における材料の体積変化を計測した。配合は繊維有り配合及び繊維無し配合の二種類であり、計測には100×100×400mm角柱を各3本使用した。ひずみ計測には、試験体中央に設置した埋込型ひずみ計（東京測器研究所社製 KM-100BT）を用いた。試験体は、乾燥工程を実施するまでビニール袋で封緘養生とし、材齢28日に封緘養生を解き、80℃乾燥炉内に静置した。埋込型ひずみ計により得られた乾燥工程中的実ひずみの経時変化を図2.2-43に示す。

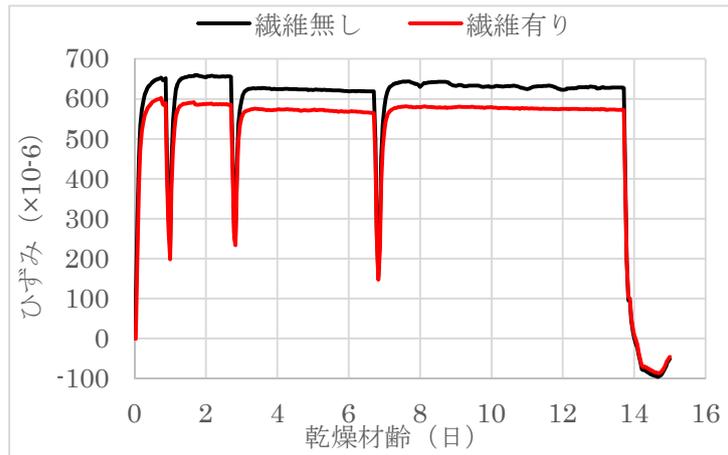


図 2.2-43 100×100×400mm 角柱の乾燥工程における実ひずみ

図より、乾燥炉への設置後すぐに著しい温度膨張し、試験体温度が概ね 80℃に達した時点で 600×10^{-6} 前後の膨張ひずみを示した。その後、緩やかに乾燥収縮ひずみが進行し、乾燥材齢 14 日後の空冷により急激に収縮側に推移した。空冷後の室温 (19.9℃) におけるひずみはそれぞれ繊維無しが -59×10^{-6} 、繊維有りが -55×10^{-6} であり、繊維の影響は見られなかった。

乾燥工程中の乾燥収縮ひずみを抽出するため、線膨張係数を仮定し温度ひずみを差し引いた。線膨張係数は含水率依存性を有することから厳密な評価はほとんど不可能である。そこで本検討では、繊維無しに $10.5 \times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$ 、繊維有りに $10.3 \times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$ を採用した。結果が図 2.2-44 である。

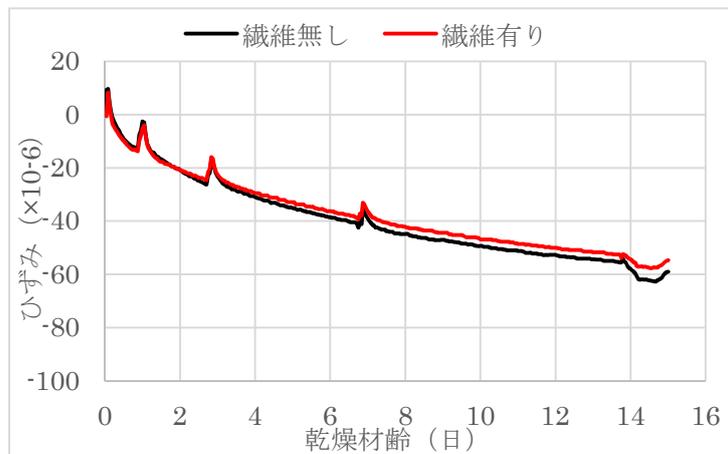


図 2.2-44 100×100×400mm 角柱の乾燥工程における乾燥収縮ひずみ

図より、乾燥材齢 1、3、7 日の試験体取り出し時期に一時的な変動がみられるものの、乾燥工程を通して乾燥収縮ひずみは緩やかに進行し、乾燥 14 日時点で概ね 60×10^{-6} 程度であった。これは一般的なコンクリートの乾燥収縮ひずみ量と比較して小さい値である。

本配合の高温時の乾燥収縮ひずみが小さかった要因として考えられる要因は以下の 3 点である。

- ・石粉が乾燥収縮ひずみを抑制した。
- ・低水粉体比の配合であるため、自己収縮ひずみと比較して乾燥収縮ひずみが小さい。
- ・水分拡散係数が小さく乾燥収縮ひずみが未だ十分に進展していない。

骨材として使用される石灰石が、コンクリートの自己収縮、乾燥収縮を抑制することはよく知られている。これは石灰石そのものの乾燥収縮率が小さいため、コンクリート内部でセメント硬化体の収縮を拘束するためである（後藤ほか，1979）。骨材によるセメント硬化体の収縮抑制効果は骨材粒径が大きいほど大きいとされているが、粒径の小さい石粉であっても、乾燥収縮を抑制することが報告されている（賀谷ほか，2010）。よって、本検討において自己充填性向上のために混和した石粉が、乾燥収縮を抑制した可能性は十分に考えられる。

また、水結合材比 25%のコンクリートでは、乾燥収縮ひずみ（乾燥開始 7 日）と自己収縮ひずみの割合は概ね 4：6 程度と報告されている（楊ほか，2001）。本検討では乾燥開始材齢が更に遅いことから、水和により自由水が多く消費され乾燥収縮ひずみがより抑制された可能性が考えられる。しかし本検討では自己収縮ひずみの計測を行っておらず十分な検証には至っていない。

普通コンクリートの乾燥収縮ひずみは、数十年にわたり緩やかに進行する。本検討のように低水結合材比のコンクリートでは、水分逸散速度がより緩慢になることから本検討のように 80℃という高温環境で乾燥を促進した場合においても十分に乾燥収縮が収束していない可能性は考えられる。内部充填材として低水粉体材料を使用する場合には、予めより長期間の乾燥収縮ひずみのデータを持ち合わせておくことが望ましい。

⑤ 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の作製

(a) 試験体形状

選定配合を使用して、60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体を製作した。製作した試験体の概要を図 2.2-45 に、型枠寸法図を図 2.2-46 に示す。

試験体の外寸は、外形が 420mm の 50L ドラム缶が収まるサイズとし、廃棄体パッケージ内充填材の最小厚さは、NUMO-SC にある廃棄体パッケージ B の寸法仕様の上面図から廃棄体間のすき間幅を読み取り設定した。具体的には、ドラム缶用パッケージの内寸法が最大 1400mm、ドラム缶の外形が 569mm（2×2 本で収納されるため、廃棄体分の幅は 1138mm）であり、すき間は等間隔になるとすると約 88mm となるが、廃棄体を収納する際の尤度として、両端で 10mm 程度は必要と仮定し、68mm とした。

また試験体には、後述の試験体の変形計測に使用するため、試験体の側面に、ホイットモアストレーンゲージで長さを測定するための埋め込み用ゲージプラグを設置した。ゲージプラグ設置位置を図 2.2-47 に示す。

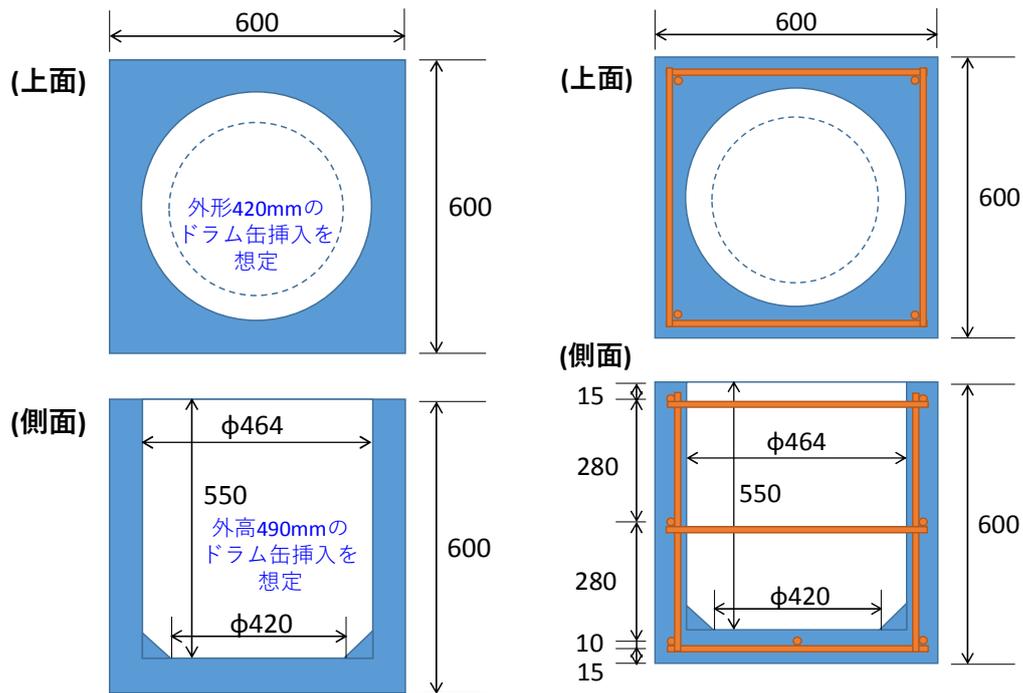


図 2.2-45 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体概要図（左：配筋無し、右：配筋有り）

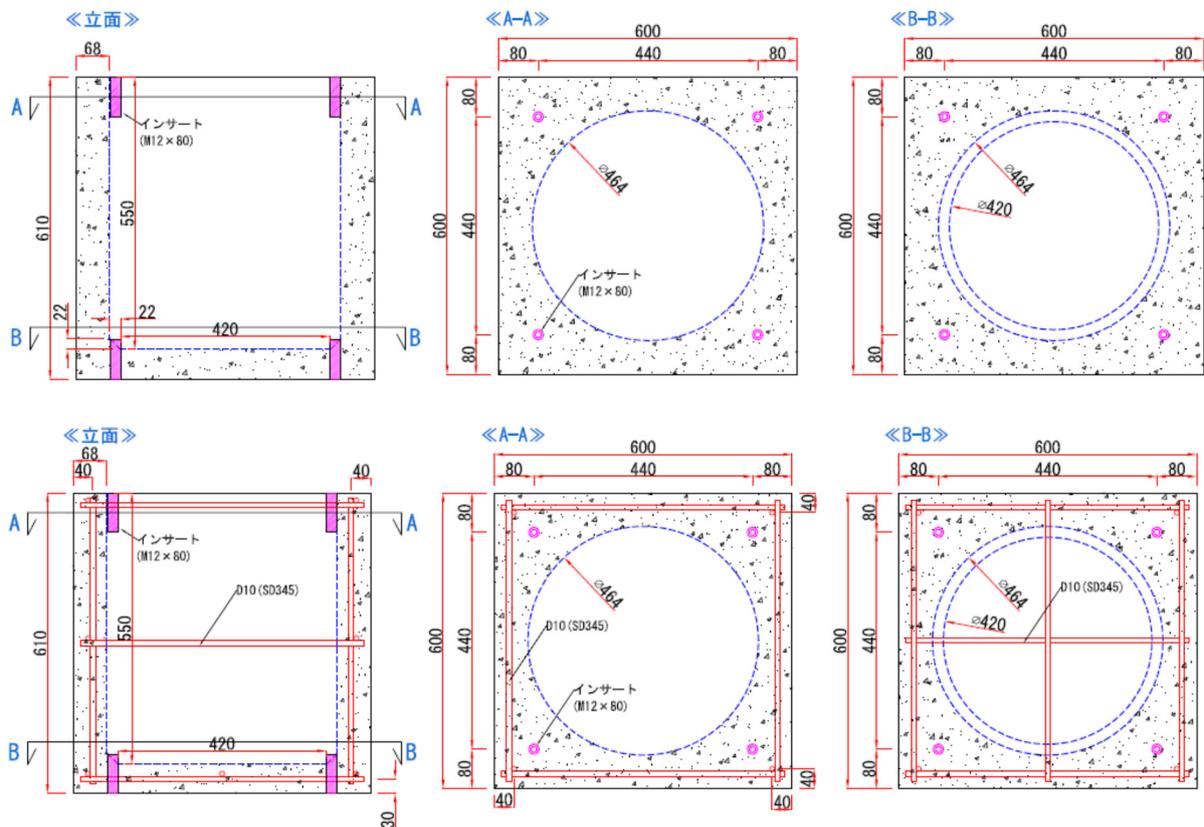


図 2.2-46 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の寸法図（図中の単位は mm）



図 2.2-47 ゲージプラグ設置位置 (図中の単位は mm)

図 2.2-45 に示すように、60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体は、試験体中央部に円柱型の空間が空いたものであり、コンクリート部分に配筋の有るものと、配筋の無いものの 2 種類である。実際に製作した 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の型枠は、図 2.2-46 に示すように高さが 600mm から 610mm に変更している。これは、底面に配筋した鉄筋に対して施工するのに十分なかぶり厚さを確保するためである。

60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の中央にはドラム缶を挿入することを想定した空間を設け、ケーシング材として発泡スチロールを用いた。また、脱型後の移動及び質量測定に使用するため、60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の上下面 8 か所にアンカーボルトを設置した。図 2.2-47 に示すように、ゲージプラグの設置位置は、1 小型試験体 4 側面全てに、1 面当たり 9 点、60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体 1 体当たり 36 点設置した。設置間隔は、ホイットモアストレーンゲージの基長と同じ 250mm 間隔である。

(b) 配合及びフレッシュ性状

60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体打設時のコンクリートの練混ぜは、温度 $20 \pm 2^\circ\text{C}$ 、相対湿度 60%以上の恒温恒湿室内で実施した。コンクリートの練混ぜには、光洋機械産業株式会社製水平二軸ミキサ KYC-DAM60 (公称容量 60L) を用いた。繊維無し配合及び繊維有り配合の練混ぜパターンを以下に示す。なお、前述の配合選定時の練混ぜ方法とは、練混ぜ時間が若干異なる。

【繊維無し配合】

G 大+G 小+1/2S+C+GC+1/2S→空練り 30sec→W+SP+AE→本練り 180sec→300sec 静置
→本練り 30sec→排出

【繊維有り配合】

G 大+G 小+1/2S+C+GC+1/2S→空練り 30sec→W+SP+AE→本練り 180sec→300sec 静置
→本練り 30sec→本練り 60sec(前半 30sec で繊維投入)→排出

60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体及び各供試体成形時におけるコンクリートのフレッシュ性状結果を表 2.2-34 に示す。なお、繊維無しの配合については、最初の 1 バッチ目のみ混和剤 AE を P (C+GC) に対し 0.045%添加とし、その後の練混ぜは、添加率を 0.050%とした。

試験の結果、何れの配合においても、フレッシュ性状は設定した自己充填性ランク 1 の範囲内であった。

表 2.2-34 廃棄体パッケージ内充填試験体成形時におけるコンクリートのフレッシュ性状

配合	添加率 (P×mass%)		スランプフロー					空気量 (vol%)	温度 (°C)	V ₇₅ 漏斗流下時間 (sec)		
			(sec)		(mm)					1	2	Ave.
	8HV	AE	50cm 到達	停止	1	2	Ave.					
繊維無し	1.45	0.045	6.1	59.6	705	705	705	3.1	22	11.8	10.9	11.4
	1.45	0.050	-	-	-	-	-	3.2	-	-	-	-
繊維有り	1.60	0.070	6.8	66.1	720	688	704	3.4	22	15.1	14.4	14.8

(c) 打設状況と製作した試験体の確認

型枠内部の状況を図 2.2-48 に、高流動コンクリートの打設状況及びコンクリート打設後の状況は報告書本編に示す。打設は、練り舟容器の短辺側 1 か所に穴を開け、そこから流し込むように、自重を利用した流し込みのみで実施し、バイブレータ等による加振は行っていない。

打設作業の結果、コンクリートの自重を利用した流し込みのみでは打設面に不陸が生じ、最終的に打設面はコテ仕上げが必要であった。コンクリートの不陸としては 8cm 程度であり、ケーシング部の上が最も高く、型枠四隅の角部が低くなった。

なお、1 体当たりのコンクリート打設量は何れの試験体も約 306kg、打設作業に要した時間は約 30 分であった。



図 2.2-48 型枠内部状況

打設後、材齢 29 日まで型枠内で養生を行い、材齢 29 日で脱型した。脱枠から反転、ケーシング材除去までの作業に要した時間は、1 体当たり約 40 分であった。

脱型後の外観を図 2.2-49～図 2.2-51 に示す。なお、試験体側面の記号は、Xa 面をコンクリート流し込み位置としている。外観観察の結果、何れの試験体も成形後の状態は概ね良好であったが、打ち継いだような跡が見られた他、流し込み面から最も遠い面の一部で充填不良箇所(豆板)が確認された。打設したコンクリートのスランプフローは何れも 700mm 程度であり、コンクリートは十分高い流動性を有していると考えられる。しかしながら、コンクリートの粘性が高いため、型枠内部のケーシング材等にペースト部分が取られ、骨材周辺に十分に行き渡らなかったことが要因と考えられる。

配合設計の観点から考えられる、充填不良を防ぐ対策としては、

- ・水粉体比を大きくする。
- ・単位水量を低減させ、単位粉体量を低減させる。
- ・フライアッシュなどの流動性の改善が期待される混和材を用いる。

などが挙げられる。なお本試験では、乾燥工程における変形挙動を繊維混入の有無で比較することも目的としていたため、繊維無しの配合をベースにして繊維有りの配合を設定した。

ここで、繊維を混入するコンクリートの配合は、通常、繊維混入後のフレッシュ性状を考慮し、ペーストやモルタル量が多い配合となる場合が多い。本試験においても繊維混入後のフレッシュ性状を鑑み、ペースト量の多い配合としたが、繊維混入の有無それぞれで適切な配合を設定する必要があると考えられる。

一方、施工方法の観点から考えられる対策を述べると、本検討では遠隔打設による製作性を確認するために、バイブレータ等の加振は行わずに自重による自己充填性に期待した。しかし先述のように、脱型後の試験体の側面の一部には充填不良箇所が確認された他、最終的に打設面はコテ仕上げが必要であったことから、後打設方式において高流動コンクリートを適用しても、若干の振動締めめやフィニッシャー等を用いた仕上げ工程が最終的に必要であると考えられる。なお、余裕深度処分施設への適用を想定した施工性の確認試験として、充填材の打設から平坦仕上げまでを遠隔操作で行う技術の検討事例が報告されている（木ノ村ら、2010）。この報告では、スランプフロー $700 \pm 50\text{mm}$ の上部遮蔽コンクリートを用いて $160 \times 160\text{cm}$ 平面に対し複数の打設状況を設定し、簡易フィニッシャー等を用いた補助工法による仕上げ性状を確認しているが、改善の余地はあるものの、最大高低差 10cm 程度の不陸であれば概ね平坦な仕上げが可能である、としている。

また本試験では、ミキサ容量の都合上、試験体1体の打設において複数バッチのコンクリートの練混ぜが必要であった。このため、バッチ間の打設に時間間隔が生じ、打ち継いだような面が残った。そのため、コンクリートの打設方法として、必要とされるコンクリート量を、バケット等を用いて1回で打設することが望ましいと考えられた。

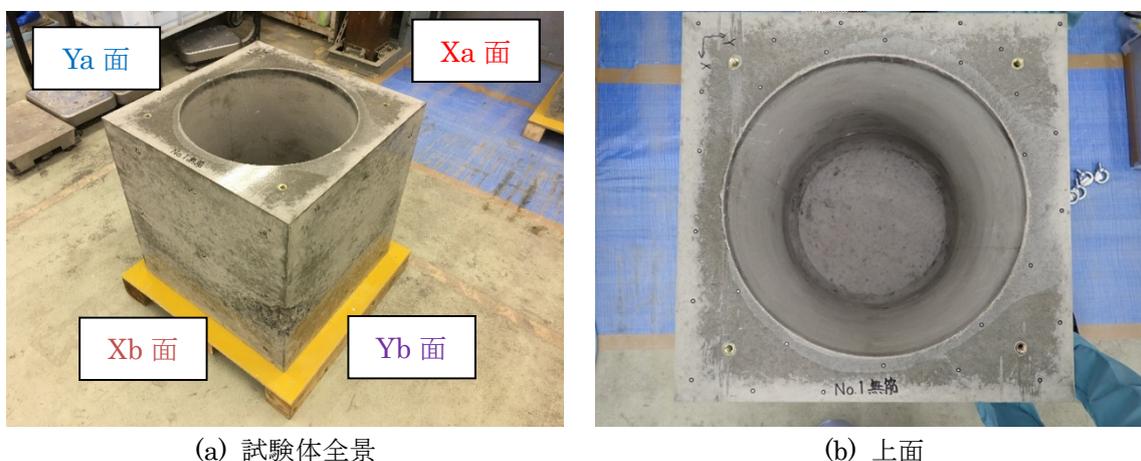
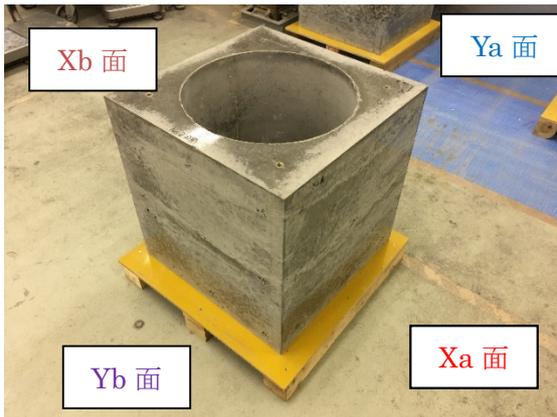
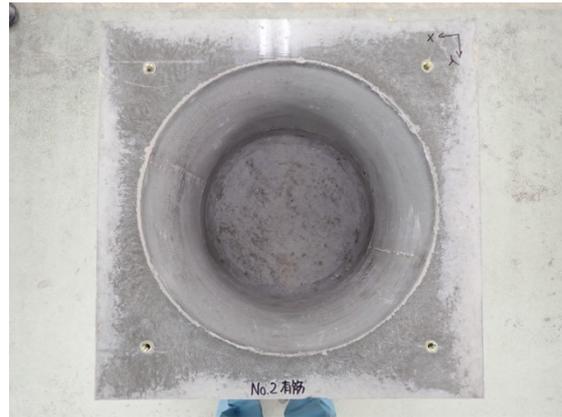


図 2.2-49 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の外観 (No.1 : 無筋)

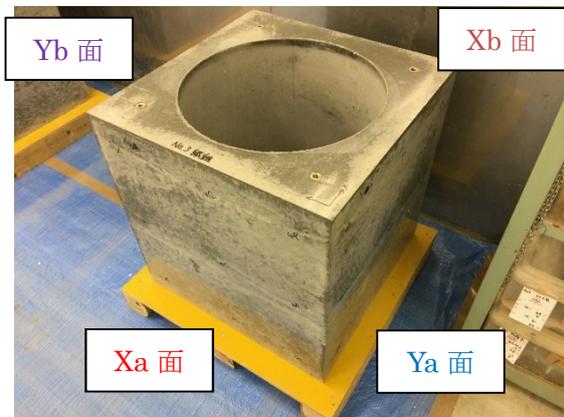


(a) 試験体全景

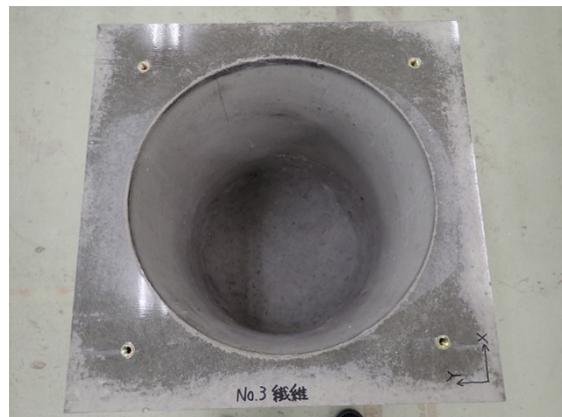


(b) 上面

図 2.2-50 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の外観 (No.2 : 有筋)



(a) 試験体全景



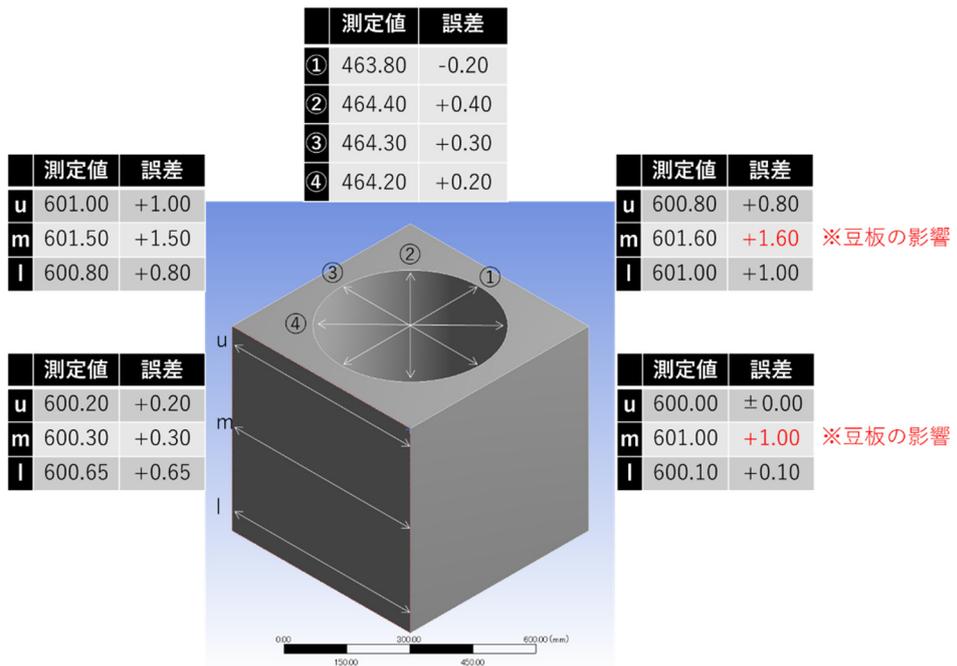
(b) 上面

図 2.2-51 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の外観 (No.3 : 繊維)

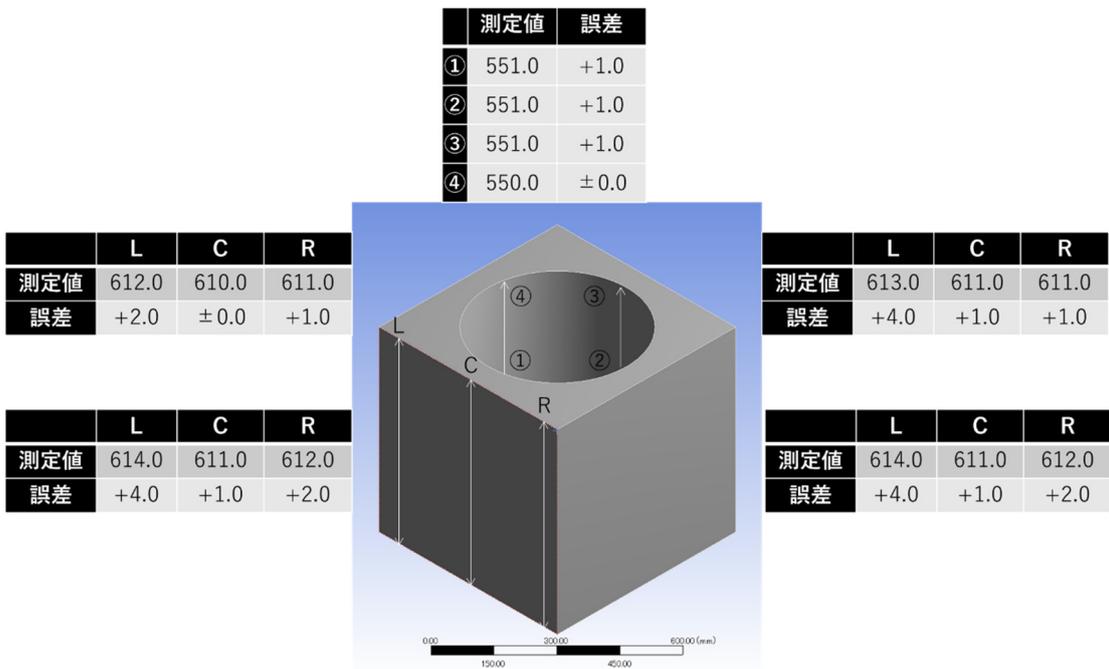
(d) 寸法精度の確認

作製した小型試験体の寸法精度を確認するため、材齢 28 日時点においてノギスを用いて寸法計測を実施した。No.1 無筋、No.2 有筋、No.3 繊維の試験体の寸法を図 2.2-52 から図 2.2-54 にそれぞれ示す。図には、ノギスによる測定値と、設計値からの誤差を記載した。

一部バリや充填不良箇所の影響により、適切な計測が行えていない箇所があるものの、設計値からの誤差は何れの試験体も水平方向で $\pm 1.60\text{mm}$ 以内、鉛直方向で $\pm 4.0\text{mm}$ 以内に収まっており、廃棄体封入容器の格納、及び鋼製容器に納めるために十分な寸法精度を有していると考えられる。

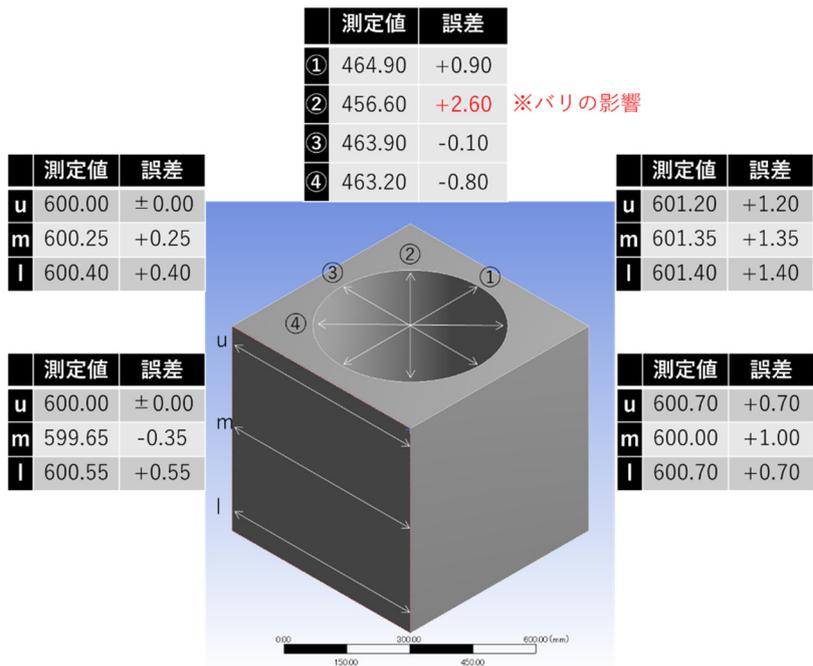


水平方向

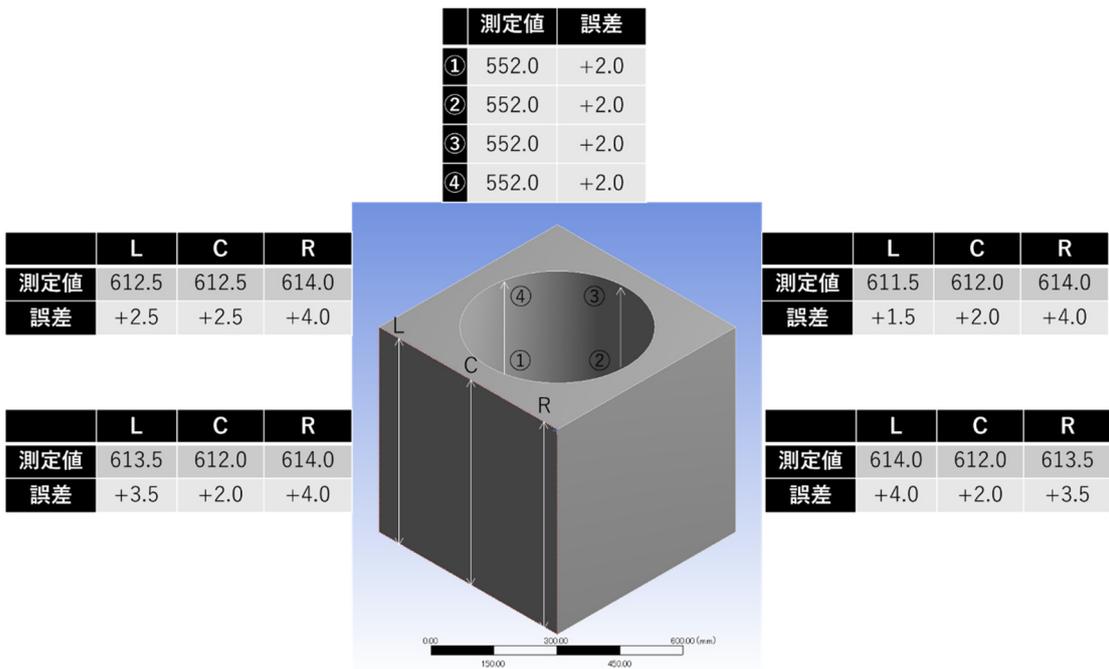


鉛直方向

図 2.2-52 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の寸法 (No.1 : 無筋)

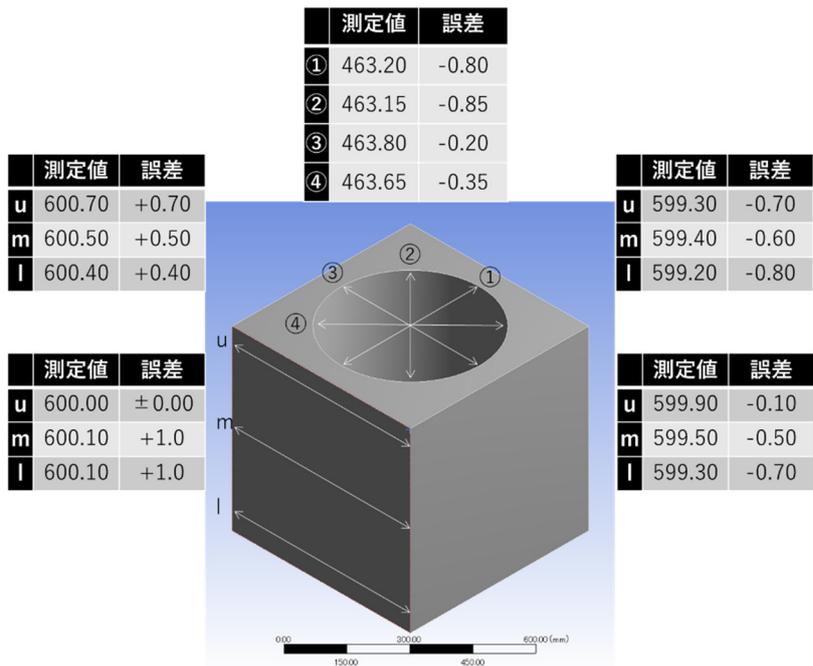


水平方向

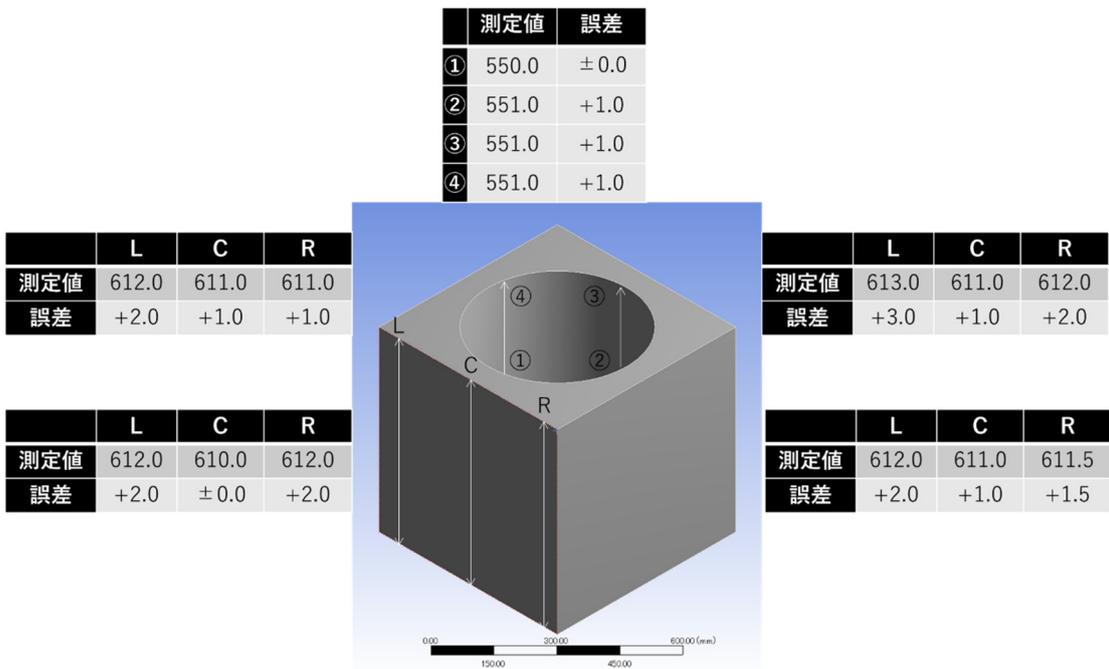


鉛直方向

図 2.2-53 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の寸法 (No.2 : 有筋)



水平方向



鉛直方向

図 2.2-54 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の寸法 (No.3 : 繊維)

2) 乾燥工程が廃棄体パッケージ内充填材に及ぼす影響の確認

水素ガス発生抑制の観点から、廃棄体パッケージ内充填材の製作には、乾燥（脱水）工程を行う想定である。乾燥工程の概要は検討課題の一つであるが、廃棄体パッケージ製作の工期圧縮のために、高温乾燥は現実的な選択肢である。

高温乾燥過程において、セメント系材料には熱膨張ならびに乾燥収縮などの体積変化が生じる。これらの体積変化は、鋼製容器や廃棄体封入容器などの外部部材に拘束され、いわゆる外部拘束応力が生じる。外部拘束応力がセメント系材料の引張応力を超えた場合、ひび割れが発生し、体積変化量によっては幅の広いひび割れに進展する可能性がある。また、パッケージ内充填材を単独で作製する「別工程で作製した廃棄体パッケージ内充填材を容器に設置後に廃棄体を収納するプレキャスト方式」においても、部材表面と内部とのひずみ差に起因する内部拘束応力によってひび割れが生じる可能性がある。上記のひび割れの他、乾燥収縮による体積変化は温度降下後も残留するため、廃棄体パッケージ内充填材には乾燥収縮による残留変形が見込まれる。

そのため、プレキャストで作製した廃棄体パッケージ内充填材を金属容器に確実に挿入する、もしくは、廃棄体パッケージ内充填材に廃棄体封入容器を確実に挿入するためには、変形の程度を把握しておかなければならない。

加えて、乾燥過程において幅の広いひび割れが生じた場合には、廃棄体パッケージ内充填材に期待される地下水の浸入抑制と地下水に溶出した放射性物質の収着効果が著しく低減する可能性があるため、乾燥過程におけるひび割れ制御も重要な検討課題である。そこで本検討では、各条件（無筋、有筋、繊維）で作製した 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体を活用し、乾燥に伴う試験体の変形及びひび割れ等の外形変化に関する検討を行った。

① 試験方法及び解析手法の概要

乾燥工程時の水分逸散時間は、配合や試験体の形状による変化すると考えられるが、本検討では大凡の時間を把握するため、平成 30 年度の要素試験と同様、乾燥時間を 80℃14 日間とした。乾燥期間中の変形については、一時的に乾燥炉から試験体を取り出し、ホイットモアストレーンゲージ（一部ノギスにより代用）により経時的に測定した。外観観察は目視及びデジタル画像相関法（DIC）を使用した。

本検討では上記の実験的検討に加え、乾燥工程に伴う試験体の変形及びひずみ分布を把握することを目的に数値解析的検討を実施した。数値解析には汎用解析ソフト ANSYS を使用した。

② 温度及び質量変化

(a) 乾燥時の 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の温度変化

乾燥炉内の温度状況を把握するため、各試験体の外側と内側及び炉内の空気中に T 型熱電対を設置し乾燥期間中の温度変化を計測した。計測結果を図 2.2-55 に示す。

図より、試験体の設置箇所の影響により多少のばらつきがみられるものの、何れの箇所も 75℃ 以上で保管されており、高温乾燥の条件としては概ね問題ない結果であった。

また、乾燥材齢 1 日、3 日、7 日、14 日に各種計測のため一時的に乾燥炉から試験体を取り出したが、計測後の試験体温度はそれぞれ 1 日：52.6～62.5℃、3 日：57.0℃～66.0℃、7 日：50.0℃～59.5℃の範囲内であり、再び乾燥炉に戻したあとは概ね 3 時間以内に 75℃以上に復帰した。

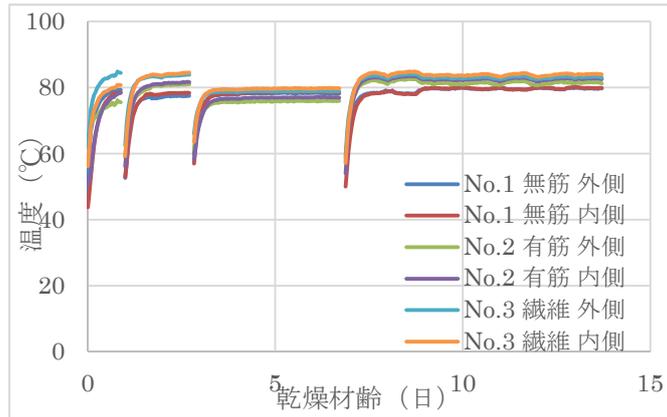


図 2.2-55 乾燥工程中の 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の温度

(b) 乾燥時の 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の質量変化

質量変化は、乾燥炉から一時的に取り出した試験体に対してクレーンスケールを用いて測定した。乾燥期間中の試験体質量の変化を図 2.2-56 に、質量変化割合を図 2.2-57 に示す。

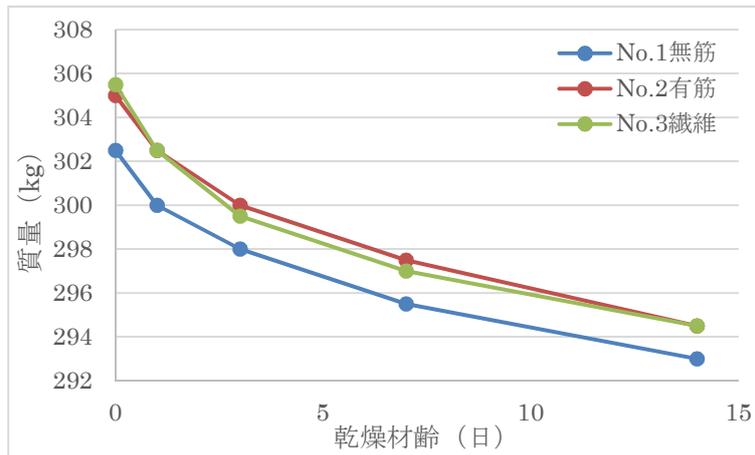


図 2.2-56 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の質量の経時変化

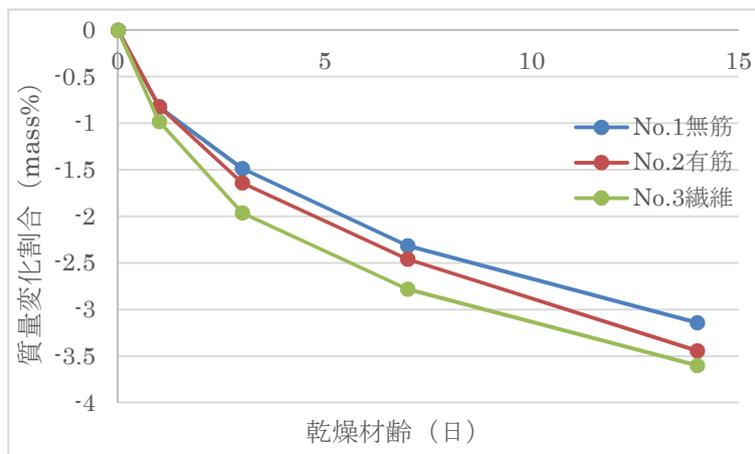


図 2.2-57 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の質量変化割合の経時変化

図より、No.1 無筋試験体は初期質量が No.2 有筋や No.3 繊維と比較して 2.5kg 程度小さい結

果であった。これは鉄筋やステンレス繊維が No.2 有筋や No.3 繊維の見かけの密度を大きくしているためであり想定通りである。

その後の経過をみると、何れの試験体も乾燥工程開始から質量減少が継続しているが、期間 14 日においても質量減少は下げ止まる様子を見せておらず、更なる水分逸散を見込める結果であった。この結果は、図 2.2-39 に示した $\phi 100\text{-}200\text{mm}$ の円筒試験体の結果とは異なっており、水分逸散が試験体の形状に依存することを示す結果であった。

一方、各試験体間で比較すると、水分逸散速度は、No.3 繊維 > No.2 有筋 > No.1 無筋の順であり、特に No.3 繊維の初期乾燥速度が大きい。この結果の一因として自己収縮ひずみが考えられる。

未水和のセメントと水が反応する場合、生成する水和物の体積は未水和セメントと水の体積の和より小さくなる（水和収縮）ため、セメントペースト中では、水和反応により次々と空隙が形成されている。このような状況の中で、セメントペースト中の水分の浸透速度が水和収縮による空隙生成速度を下回る、もしくは乾燥により水分が外部に逸散するなどの理由で、空隙を水が充填できなくなった場合、空隙にはメニスカスが形成される。このメニスカスの形成による毛細管凝縮水中の負圧によって生じるマクロな収縮を自己収縮ひずみと呼ぶ。

乾燥収縮ひずみは、コンクリート外部への水の散逸に起因するため、外気に接した部分から進行するのに対し、自己収縮ひずみはセメントの水和そのものに原因を有するため、内部と外部でほぼ同時に同程度進行する。そのため、躯体内部に外部拘束体（鉄筋や鋼繊維）を有する試験体において、自己収縮ひずみの拘束応力により微細ひび割れが生じ、結果として水分透過性が向上した可能性が考えられる。

(c) 水分移動に関する数値解析モデルの現状

廃棄体パッケージ内充填材の含水率をどの程度に設定するかは水素ガス発生量が基準となることから、水素ガス発生量の目安が設定されていない現時点では、任意の乾燥期間における水分逸散量を予測する手法を構築することが望ましい。

また、「先打設方式」や「後打設方式」では、本計測と比較して体積あたりの乾燥面積が小さいことから数値解析によって乾燥面積の影響を推定する手法の構築が望まれる。

現状、セメント系材料の水分逸散量を予測する方法としては、みかけの拡散係数を仮定して水分移動を表現することが多い。本来は物質の状態と温度のみで一義的に決まるはずの拡散係数を、水の存在状態の配分を表現できるよう含水率や相対湿度の関数として表し、拡散係数が見かけ上コンクリート中の含水率に依存するとして記述することが行われている。すなわち、みかけの拡散係数により予測精度が決定する。以下に水分移動の数値解析モデルに使用されるコンクリートのみかけの拡散係数の現状について言及する。

健全なコンクリート中の水分移動に関する代表的な数値解析モデルとして、Bazant による著名な研究では、相対湿度の関数として以下を提案している (Bazant, 2000)。

$$D(RH) = D_1 \left(\alpha_0 + \frac{1 - \alpha_0}{1 + \left(\frac{1 - RH}{1 - RH_c} \right)^n} \right) \quad (2.2-1)$$

ここで、 D_1 ：相対湿度 1 のときの拡散係数 (m^2/s)、 α_0 ：最大拡散係数と最小拡散係数の比で

ある。同様に、Mensi は、相対湿度の指数関数として、以下の式を提案している (Mensi, 1988)。

$$D(RH) = A \cdot \exp(B \cdot RH) \quad (2.2-2)$$

ここで、 A, B : フィッティングパラメーターである。

上式に記載の各係数はボルツマン-マタノ法などを利用して実験により求めることができる。このように、拡散係数を含水率や相対湿度の関数として表現することで、水分移動の非線形性を説明することが一般的である。国内でも、阪田ら、秋田ら、が同様の手法を用いて解析を行っている。参考までに阪田らと秋田らの拡散係数導出式を以下に記す (阪田ら, 1981、秋田ら, 1997)。

$$D_w(w) = D_{w0} + \frac{D_s - D_0}{1 + \left(\frac{100 - w}{100 - w_c}\right)^n} + \frac{D_s - D_0}{1 + \left(\frac{100}{100 - w_c}\right)^n} \frac{w - 100}{100} \quad (2.2-3)$$

$$D(R) = D_{R1} \left(0.01 + \frac{0.99}{1 + (k(h - R))^m} \right) \quad (2.2-4)$$

$$D(R) = D_{R1} \left(0.01 + \frac{0.99}{1 + (k(h - 2n + R))^m} \right) \quad (2.2-5)$$

拡散係数の関数形は、研究者により微妙な違いがあるものの何れも実験的に求められるもので物理的な意味合いはないようである。

また乾燥工程において乾燥炉の温・湿度の設定方法は、工程管理上の重要課題の一つであるため、みかけの拡散係数の温度依存性を知っておくことが望ましい。一般的なコンクリートの拡散係数は、温度の上昇に伴って増大するといわれている。酒井らは、空気中の水蒸気拡散係数が経験式として

$$D_v = 2.2 \times 10^{-5} \cdot \left(\frac{T}{273}\right)^{1.75} \quad (2.2-6)$$

が使用されていることを参考に、コンクリート中の水分拡散係数を

$$D_w = D_0 \cdot \exp\left(a \cdot \frac{T - T_0}{T_0}\right) \quad (2.2-7)$$

で表現している。(酒井ら, 2013)

また、Bazant も経験式として以下を提案している。(Bazant, 1972)

$$D_1(t_e, T) = D_0 \left[0.3 + \sqrt{\frac{13}{t_e}} \right] \cdot \frac{T}{T_0} \cdot \exp\left(\frac{Q}{RT_0} - \frac{Q}{RT}\right) \quad (2.2-8)$$

コンクリート中の物質移動の温度依存性については、そのほかにも塩化物イオンや酸素についての研究がなされているが、いずれもアレニウス則を考慮して指数形で表現することが多いようである。しかしながら、実際の数値解析に使用される諸係数は、要素実験を再現するような形でフィッティングされているのが実情であり、乾燥工程の温度から乾燥時間を定量的に予測することは現状では困難である。そのため、水分逸散量の予測を数値解析によって実施する場合には、同様の配合条件によって作製した要素試験体により実験的にみかけの拡散係数を取得することが望ましい。

本検討のように、自己収縮ひずみにより内部に微細ひび割れの発生が懸念される場合も同様に、実験的に事前にみかけの拡散係数を取得したほうがよいが、これら微細ひび割れは、配合条件による自己収縮ひずみ量の相違や、拘束体の量や分布の影響を受けるため、内部パッケージ材に使用する場合には、充填材内部の鉄筋配置や繊維量も検討課題の一つと考えられる。

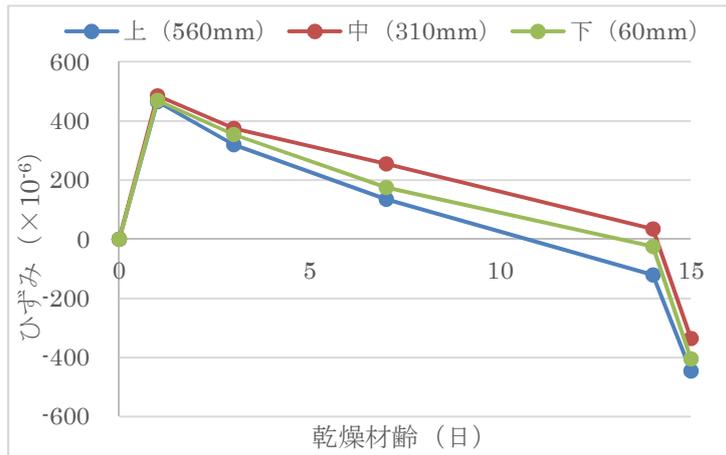
ひび割れが液状水の移動に及ぼす影響に関して、石田らの研究では、ひび割れ前後で液状水移動係数を10倍と仮定してフィッティングを行っている。(石田ら, 1999)

式(2.2-7)や式(2.2-8)において、80℃環境と常温時の水分拡散係数が1.2倍程度であることを考慮すると、温度と比較してひび割れの影響は極めて大きいと推察される。

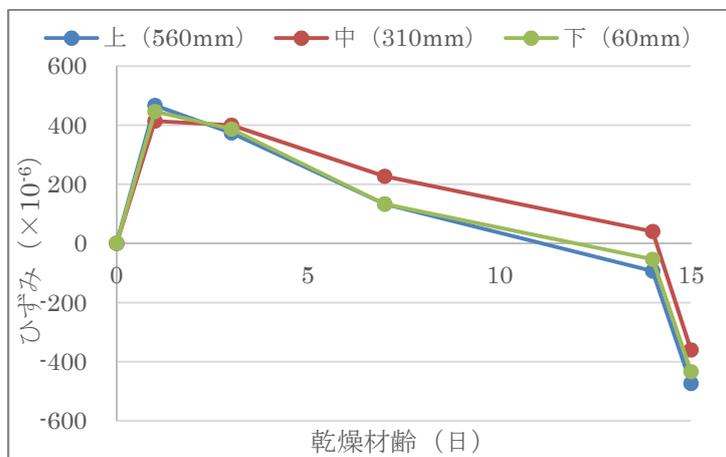
なお、無筋コンクリートを使用する場合、「プレキャスト方式」では自己収縮が進展する期間にほとんど外部拘束体と接触しないため、自己収縮による有害なひび割れの発生の可能性は小さいものの、「先打設方式」や「後打設方式」では、鋼製容器が外部拘束となり得るため、過度な貫通ひび割れが誘発される可能性があり、鋼製容器間との界面の取り扱いが検討課題となる。

③ 試験体寸法

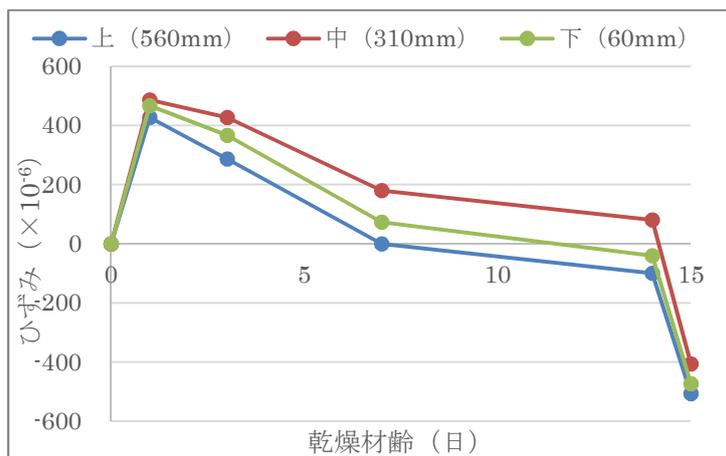
次に、製作した60cm角廃棄体パッケージ内充填材試験体の変形計測を実施した。図2.2-58はホイットモアストレインゲージにより計測した各試験体の底面から60mm、310mm、560mmの地点における横方向のひずみの経時変化である。



No.1 無筋



No.2 有筋



No.3 繊維

図 2.2-58 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体側面壁のひずみの経時変化

図に示されるように、初期値の計測後、乾燥工程のための高温養生により試験体は 400 から 500×10^{-6} 程度膨張し、その後、乾燥収縮に伴い経時的に収縮挙動を取った後、乾燥材齢 14 日終

了後の空冷期間に著しい温度収縮を示した。最終的に、何れの試験体も上部が最も収縮ひずみ量が大きい結果であり、その収縮ひずみ量は 400×10^{-6} 程度であった。この収縮ひずみ量は、 $100 \times 100 \times 400\text{mm}$ の試験体の乾燥収縮ひずみ量と比較して 7 倍程度大きい結果であった。また、以上の傾向に、試験体間の差異はほとんど見られなかった。

80℃乾燥炉内における試験体の温度上昇性状を把握するため、数値解析を実施した。解析モデルを図 2.2-59 に示す。

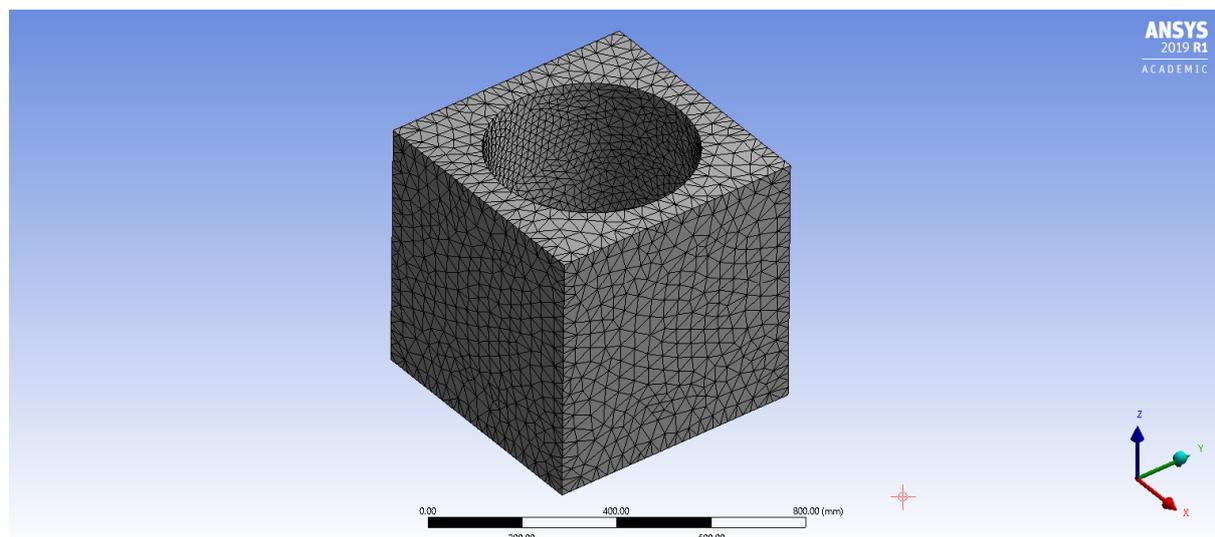


図 2.2-59 解析モデル

解析中の雰囲気温度を 80℃、試験体要素の熱伝導率を 0.72W/mK として側面壁(厚さ約 67mm)の温度分布を計算した。結果が図 2.2-60 である。

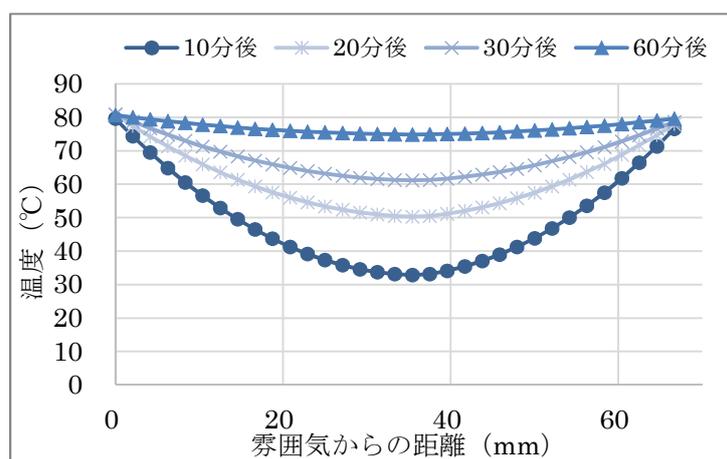


図 2.2-60 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体内の温度分布

図より、概ね 1 時間で試験体は 75℃以上に到達していることが確認できる。1 時間後の 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体の変形を計算したものが図 2.2-61 である。このとき境界条件は底面中央部の任意の三点を固定している。

実際の実験では、底面が最も温まりにくいと考えられるため、上記の境界条件を採用した。

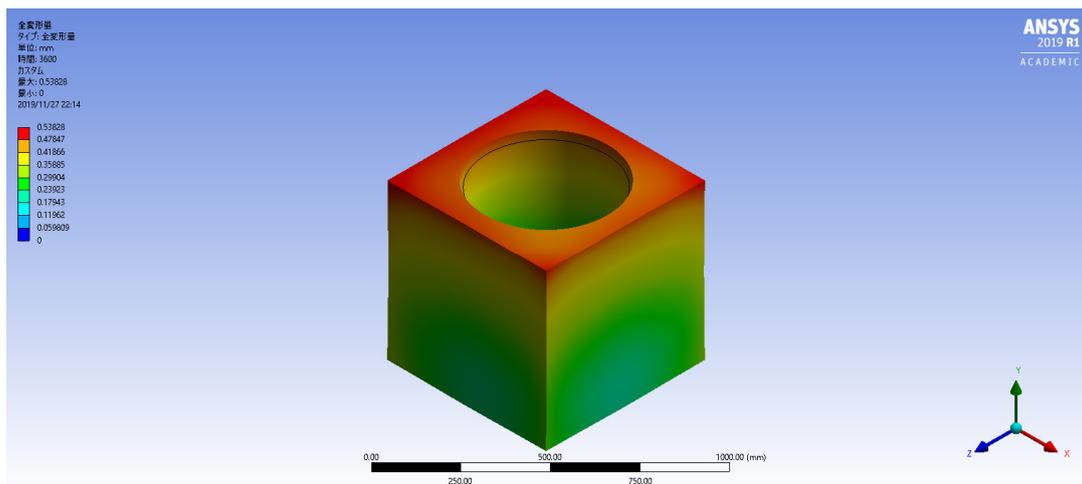
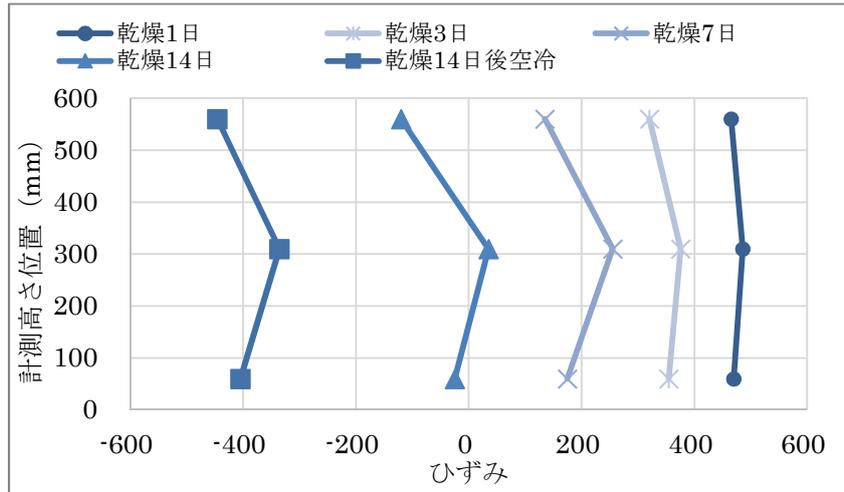


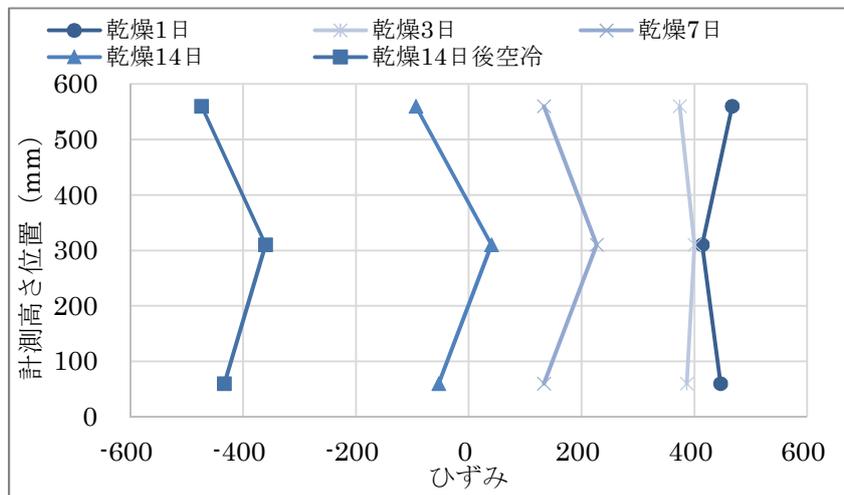
図 2.2-61 高温乾燥時の温度膨張

図より、内部が大凡 80℃に到達した段階での変形量は最大で 0.53mm 程度であった。

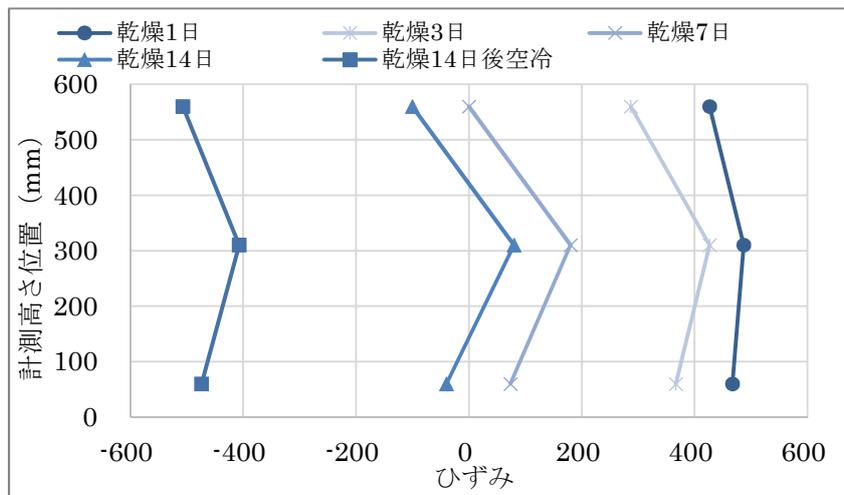
次に、乾燥工程における乾燥収縮ひずみに着目する。各試験体の乾燥による変形挙動を確認するため、各計測高さ位置におけるひずみ分布の経時変化を図 2.2-62 に示す。図 2.2-63 は、乾燥材齢 1 日時点の膨張時と 14 日乾燥後の空冷後におけるひずみ分布を試験体間で比較したものである。



No.1 無筋



No.2 有筋



No.3 繊維

図 2.2-62 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体側面壁のひずみの経時変化

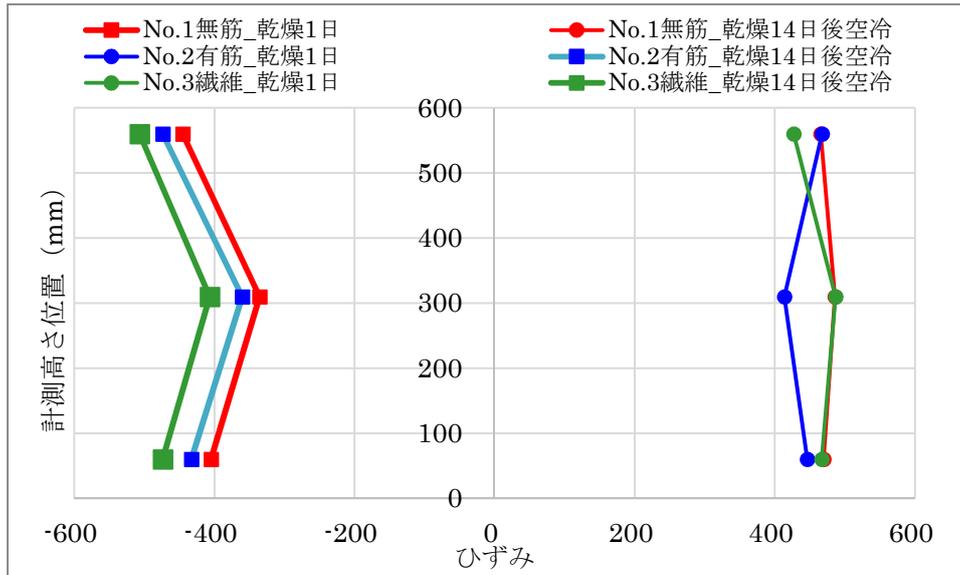


図 2.2-63 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材乾燥試験体側面壁のひずみの経時変化

図 2.2-63 より、乾燥材齢 1 日時点の温度膨張量はそれぞれに試験体でほとんど差異がみられないのに対し、収縮後の変形量は、No.3 繊維 > No.2 有筋 > No.1 無筋の順であった。拘束体を有していない No.1 無筋が最も変形量が小さくなった原因は後述するひび割れの発生と考えられる。一方、促進乾燥 14 日後に空冷した試験体側面壁のひずみ量は何れの試験体も約 $350 \sim 530 \times 10^{-6}$ 程度となっており、 $100 \times 100 \times 400 \text{mm}$ の角柱試験体で得られた乾燥収縮ひずみ量を大きく上回っている。

この結果は、試験体形状の相違により生じたものと考えられる。建築学会の「鉄筋コンクリート造建築物の収縮ひび割れ制御設計・施工指針(案)・同解説」(日本建築学会, 2006)では、乾燥収縮の速度は V/S と相関を有し、表面積が大きいほど速度が早いとされている。小型試験体上部の V/S は角柱試験体より小さいことから乾燥がより早く生じた可能性が考えられる。

以上の乾燥工程における変形挙動の再現性を検証するため、数値解析による再現を試みた。使用したモデルは図 2.2-59 と同じである。

乾燥工程における乾燥収縮は、外気に接した部分から内部へ徐々に進行し、乾燥領域では含水率が低下、そしてコンクリート材料に含水率の低下に伴う乾燥収縮ひずみが生じる。本来であればこれら一連の仮定を数値解析により再現することが望ましいが、現状では、以下の課題により実施することが困難である。

- ・高温時に温度分布を有するコンクリート内部の水分拡散現象の解析手法が確立されていない。
- ・含水率と乾燥収縮量の関係性は一定ではなく、何らかの仮定か実験によるモデル化が必要。
- ・コンクリートの乾燥収縮による拘束応力を算定可能な数値解析ソフトには、複雑な形状を有する試験体をモデル化できるプリプロセッサが整備されていない。

よって本検討では、コンクリートの表面から進行する乾燥収縮ひずみをの熱収縮ひずみとして与えることとした。

図 2.2-64 は、角柱試験体で得られた値を参考に、側面壁の自由収縮ひずみの平均値が約 60×10^{-6} となるよう試験体の温度分布を制御した場合の試験体の変形図である。

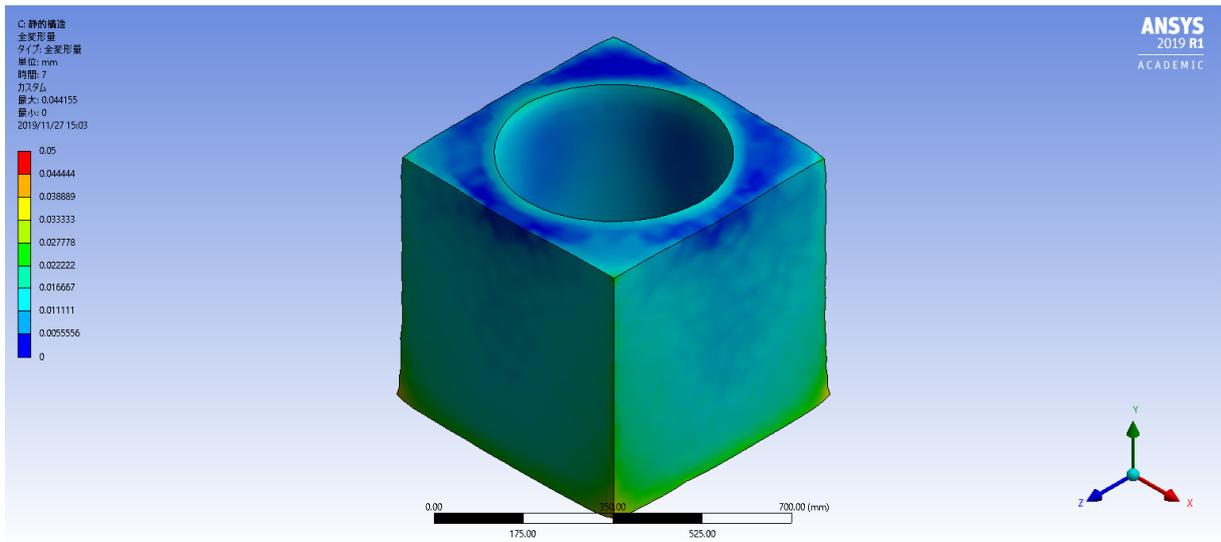


図 2.2-64 収縮ひずみ 60×10^{-6} を与えた場合の変形

図 2.2-64 より、収縮ひずみの入力値が 60×10^{-6} では本実験で得られた変形は計測値と比較して総じて小さい値を示していることが確認できる。このことから、角柱試験体と小型試験体では異なる乾燥収縮ひずみ履歴を有している可能性が指摘できる。

上記の結果を参考に、No.1 無筋の側面壁下部のひずみ量が概ね一致するように、収縮ひずみ量を調整したものを図 2.2-65 の水色線で、試験体に埋設した鉄筋の影響を調べるため、図 2.2-66 に示す軸要素を鉄筋位置に配置したものを図 2.2-65 の黄色線で示す。

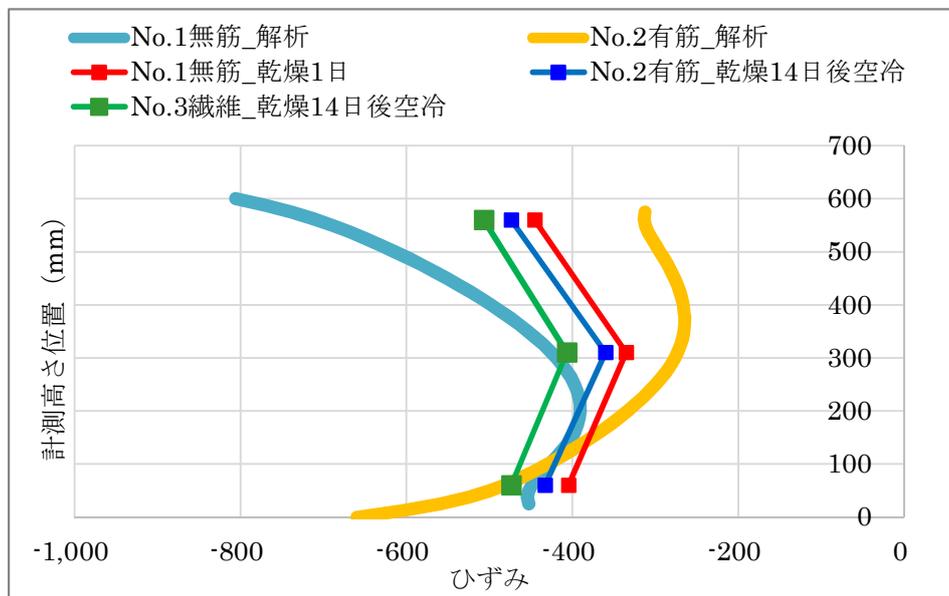


図 2.2-65 乾燥後の 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体側面壁のひずみ分布

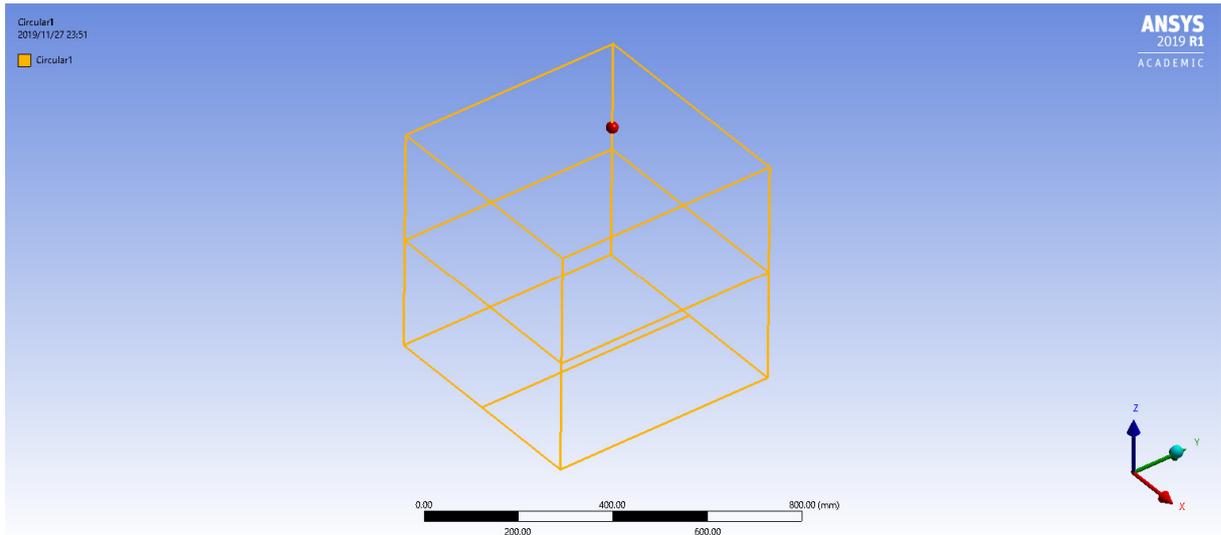


図 2.2-66 鉄筋要素のモデル

図より、鉄筋要素がない条件で下部をフィッティングした場合、上部では実験値と比較して 1.8 倍程度のひずみ値を示した。この結果は、試験体の上部ではひび割れ等の発生により弾性解析では表現できない変形の緩和が生じているためと推察される。一方、鉄筋を配置した解析では、上部の変形が抑制され、より実験値と近い値を示すことが確認された。

④ 外観変状

(a) デジタル画像相関法 (DIC)

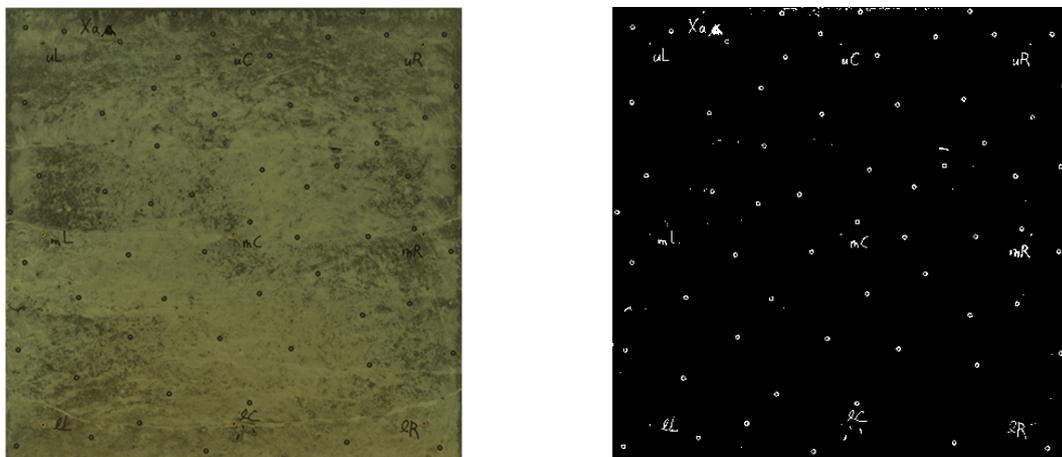
これまでに述べてきた通り、廃棄体パッケージ内充填材の硬化過程及び乾燥工程において、乾燥収縮、自己収縮あるいは温度膨張により試験体は変形し、場合によっては幅の広いひび割れが生じる可能性がある。充填材は、廃棄体封入容器と一体化した後は、外観変状の観察も遠隔から行わなければならない。そこで本検討では、製作した小型試験体の乾燥工程に伴う変状を目視以外の方法で検出することを目的に、デジタル画像相関法 (DIC) を採用した。

DIC は、測定対象物表面を撮影した複数の画像を用い、変形前後の画像を比較し、変形前の着目する輝度値パターンが移動した場所を、変形後の画像から探し出し輝度値パターンの変位を求める画像解析手法である。この輝度値パターンの領域はサブセットと呼ばれ、任意の大きさの領域を指定することができる。そのため、高精度の画像を撮影するだけでパッケージに近づくことなく変状の観察が可能となる。DIC では、サブセットの寸法を小さくするとひずみ分布の画素精度が向上するが、輝度値パターンの変形量が大きい場合 (幅の広いひび割れが生じたときなど) や、輝度値パターンの変化が乏しい場合に解析が不可能となることがある。そのため、後述するランダムパターンの設け方も適切なサブセット寸法の設定に大きく影響する。一方、サブセットの寸法を大きくすると大変形が生じた場合でも解析を行うことができるがひずみ分布の画素が粗くなる。本検討では、DIC によって試験体の変形を抽出すること、及び微細ひび割れの発生を検出することを試みた。

一般的な打ち放しコンクリート表面には、型枠の接触や水和、含水率のランダム性によって輝度値パターンが存在する。しかし画素の実寸法が大きい場合はランダムパターンの認識割合が著しく低下する。そこで、本検討では、観測用のカメラに十分な解像度がある場合とない場合の二つの条件で DIC を行った。

まず観測用カメラに十分な解像度を期待できない場合を想定して、全体変形を解析により取得

するため、シールにより試験体にランダムパターンを貼り付けた。シールによるランダムパターンを図 2.2-67 の(a)に示す。次に、シール位置をより鮮明に示すため、明度の閾値を設定し二値化処理を施した。二値化後の画像が図 2.2-67 の(b)である。



(a) シールによるランダムパターン

(b) 二値化した後の画像

図 2.2-67 シールによるランダムパターンの作成及び二値化処理

同様の処理を乾燥前後で実施し、乾燥工程により生じた試験体側面の変形を DIC により解析した。解析結果の一例を図 2.2-68 に示す。この図は乾燥前の試験体側面画像と、乾燥 14 日後に空冷した後の側面画像とを比較したものである。図より、下部では収縮ひずみを上部の一部では、膨張ひずみを示し、図 2.2-58 等の実測結果とは一致しない結果であった。この結果は、本検討で張り付けたシールによるランダムパターンの密度が十分でないことに起因すると考えられる。

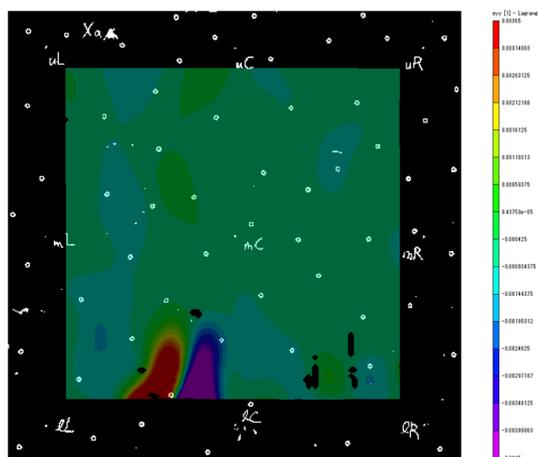
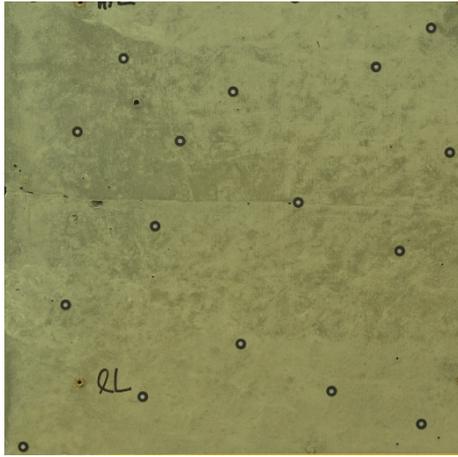


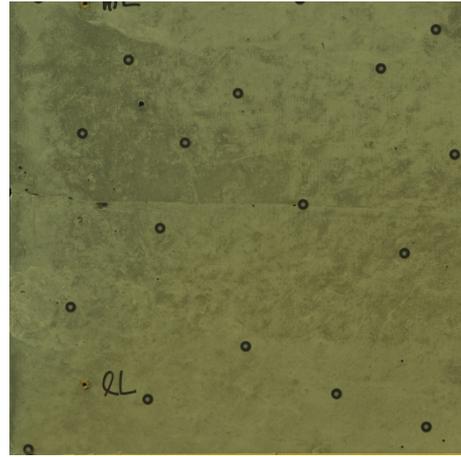
図 2.2-68 シールによるランダムパターンに基づく解析結果

次に、観測用カメラに十分な解像度を期待できる場合として、1 画素当たりの実寸法を 0.143mm の画像を取得し、現画像を用いて DIC 解析を実施した。

図 2.2-69 の(a)は乾燥開始前の側面画像であり、(b)は乾燥後の同一側面画像である。乾燥前後の写真で、共に写真中央部を横切るように打ち継ぎ部に生じた横線模様がみられるが、実際には肉眼でひび割れは確認できない箇所である。



(a) 乾燥前



(b) 乾燥後

図 2.2-69 乾燥前後の画像の比較

これらの乾燥前後の実画像を用いて、DIC に供した結果が図 2.2-70 である。

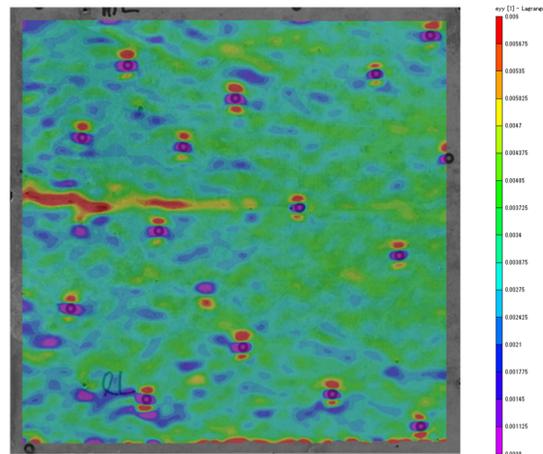
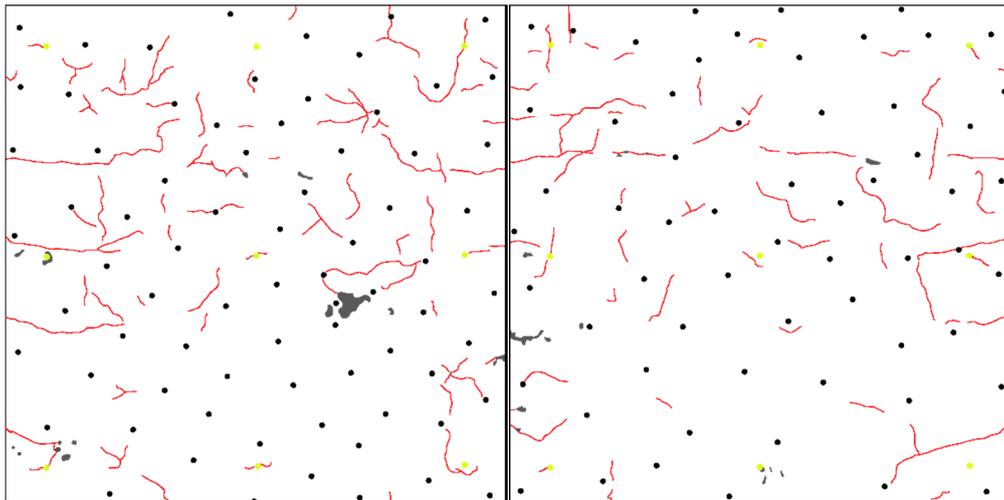


図 2.2-70 実画像に基づく解析結果

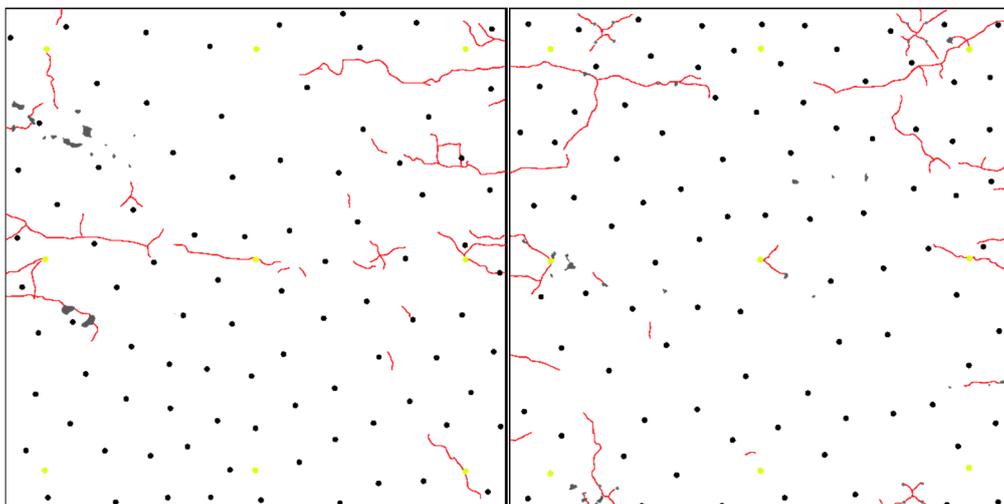
図のように、画像左端部にひび割れと思われる膨張ひずみが確認できる。以上の結果から、十分な解像度を有するカメラを用いることで、目視では確認しにくい微小なひび割れの進展を DIC により検出することが可能であった。

(b) 目視観察

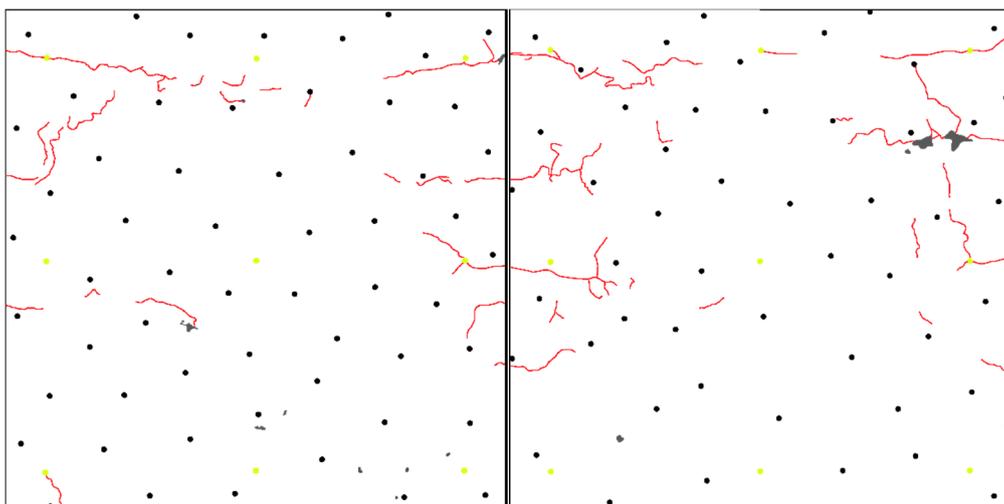
目視により得られた 14 日乾燥後空冷時のひび割れ図を図 2.2-71 に示す。図中の黒塗り部分は豆板を表している。



(a) No.1 無筋



(b) No.2 有筋



(c) No.3 繊維

図 2.2-71 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体のひび割れ図

図より、No.1 無筋のひび割れ密度が他の二体と比較して著しく大きくなっていることが確認できる。特に、床面がある下側と比較して、試験体の形状上、自由に変形しやすい上部に多くのひ

び割れがみられることから、温度膨張や乾燥収縮の分布によって試験体側面がそり変形を起し、そり変形によって生じた表層の引張応力がひび割れを引き起こしたと推察される。

ひび割れの発生により周辺の引張応力は緩和され、変形が抑制されることを考慮すると、No.1 無筋の試験体で最も多くのひび割れが発生した結果と、図 2.2-58 において無筋がもっとも小さい変形量を示した結果は符合している。一方、No.2 有筋と No.3 繊維のひび割れ発生数は、No.3 繊維の方がやや小さいものの概ね同程度であった。このことから、試験体に鉄筋や鋼繊維等の拘束材を混入することで、ひび割れの発生を抑制できることが確認された。

また、注意すべき点として何れの試験体についても、ひび割れは、打ち継ぎ部や豆板などの脆弱部に集中して発生しており、施工の不具合が生じた際に不慮のひび割れが発生しうることを示唆している。なお、全てのひび割れ幅を確認できている訳ではないが、目立ったひび割れについては、クラックスケールで測定しており、測定した範囲での最小ひび割れ幅は、0.05mm であった。

先述の通り、コンクリート中のひび割れは、物質移動抵抗性を低下させる。そのため、過度なひび割れの発生は、廃棄体パッケージ内充填材に期待される地下水の浸入抑制効果、及び地下水に溶出した放射性物質の収着効果を著しく損ねる可能性がある。

ただし、どのような補強を用いたとしても、セメント系材料にひび割れを全く生じさせないことはほとんど不可能であるため、ある程度のひび割れが存在するものとして物質移動抵抗性を想定しておいたほうが良いと思われる。

ひび割れのような劣化がすでに進行しているコンクリートの水分移動を表現するための考え方としては、1)dual-porosity、2)dual-permeability、3)discrete fracture models 等が提案されている。

dual-porosity モデルは、劣化したコンクリートが“健全なコンクリート”と“劣化部”から構成されると考えるもので、水分移動においては劣化部の性状が支配的と考えられ、健全部での移動及び劣化部から健全部への移動はほとんど考慮しない。このモデルの利点は、手法そのものの単純さにあり、主な不利点としては、健全部そのものの水分移動性状を表現することが難しいことである。

一方 dual-permeability モデルでは劣化部と健全部双方の水分移動を考慮する。そのため、一つの材料のなかに異なる水分移動性状を有した空隙構造を持つことを仮定する。劣化部と健全部は異なる水分保持特性（飽和含水率）を有し、水分移動としては、劣化部内の移動、健全部の移動、劣化部と健全部間の移動を考慮する必要がある。具体的には、劣化部と健全部でそれぞれ見かけの拡散係数を設定することが必要になる。(Barenblatt et.al, 1960)

discrete fracture models は、よりミクロな視点で劣化部を表現することを可能としている。すなわち、劣化部それぞれについて位置や形状、水分移動性状を表現する。これにより局所的な透水や、異方性をより高度に表現することが可能となるが、解析としてはより多くのインプットデータが必要となるため複雑化する。(Castillo et.al, 1972)

劣化部の水分移動特性を求める実験的研究としては、長瀧ら、佐藤・佐藤らの研究がある（長瀧ら、1987、佐藤ら、1997）が、一般化できるほどの知見は蓄積されておらず、例えば石田らのように、ひび割れ部の水分移動係数を感度解析によって確認し採用することが現実的な手段となっている。

本検討において試験体に生じたひび割れは最大でも 0.1mm 程度であったこと、ひび割れの主たる要因は何れも内部拘束ひび割れと推定されることから貫通ひび割れが生じている可能性は低く、一般構造物においてはほとんど問題にならない程度の劣化である。しかしながら、千年オーダーの解析を実施する場合には、劣化状態の見かけの水分拡散係数を実験的に取得しておく方が

望ましいと考えられる。

(3) すき間充填材の要素試験

廃棄体パッケージ内充填材の乾燥を考慮した廃棄体パッケージの組立手順として以下の3ケースが提示されている（原環センター，原子力機構，2019）。

- I. 容器に充填材を打設後に廃棄体を設置する充填材先打設方式（以下、先打設方式）
- II. 容器に廃棄体を入れ隙間を充填する充填材後打設方式（以下、後打設方式）
- III. 別工程で製作した内部充填材を容器に設置後に廃棄体を収納するプレキャスト方式（以下、プレキャスト方式）

このうち、後打設方式を除き、先打設方式では、廃棄体パッケージ内充填材を打設乾燥後に廃棄体を挿入するため、すき間を設ける必要があると考えられ、また、プレキャスト方式では、金属容器とプレキャスト充填材との間、及び、プレキャスト充填材と廃棄体との間にすき間を設ける必要があると考えられる。

一方で、2.2.3 項の冒頭に示したように、廃棄体パッケージ内充填材に求められる機能は、以下に示す3項目と考えられる。

- (a) 搬送時に容器内で廃棄体が移動しない。
- (b) 放射性物質の溶出の抑制を期待する。
- (c) 水素ガスの発生量が少ない。

(a) 及び (b) の機能を満足するため、廃棄体パッケージの組立に際し廃棄体パッケージ内充填材に設けたすき間（廃棄体パッケージ内充填材と廃棄体との間のすき間、及び、金属容器と廃棄体パッケージ内充填材の間のすき間）を、何らかの方法で充填することが必要であると考えられる。

平成 31 年度は、セメント系材料によるすき間充填が可能かを確認するための試験を実施した。また、用いたすき間充填材の物性値を測定した。加えて、(c) の機能については、すき間充填材からの水素発生量を推定する十分なデータが無いため、すき間充填材を使用した場合に廃棄体パッケージとして持ち込まれる水量を算定し、水素ガス発生量を検討した。

1) 充填材の概要

① 想定されるすき間とすき間充填材の施工方法

平成 31 年度は、上記に示した廃棄体パッケージ内充填材に求められる機能のうち、(a) 搬送時に容器内で廃棄体が移動しない、を達成するとともに、(b) 放射性物質の溶出を抑制する、ために水みちとなるすき間を無くし、すき間充填材により廃棄体の構成要素を一体化することを目指した。

廃棄体パッケージの組立手順のうち、先打設方式及びプレキャスト方式では、表 2.2-35 のすき間が想定される。

表 2.2-35 想定されるすき間

想定されるすき間	すき間幅の予想	留意点	廃棄体パッケージの組立方式
金属容器と廃棄体パッケージ内充填材のすき間	数 mm～数 cm	<ul style="list-style-type: none"> ・挿入時の偏り ・金属容器の底面～側面の角の丸み、あるいは、溶接部の盛り上がり 	<ul style="list-style-type: none"> ・プレキャスト方式
廃棄体（ドラム缶等）と内部充填材のすき間	側面：数 mm～数 cm （偏った場合は 0mm） 底面：設計による	<ul style="list-style-type: none"> ・ドラム缶のリムの存在 ・挿入時の偏り ・廃棄体底面部の凹凸により生じるすき間 	<ul style="list-style-type: none"> ・先打設方式 ・プレキャスト方式
廃棄体設置時に必要な溝等 （例えば、釣具などハンドリング上必要な切り欠き）	数 cm 程度		<ul style="list-style-type: none"> ・先打設方式 ・プレキャスト方式
金属容器を型枠とした場合の収縮によるすき間	数 mm 以下		<ul style="list-style-type: none"> ・先打設方式

なお、表 2.2-35 に記載したが、廃棄体の設置位置が挿入時に偏った場合には、すき間幅が数 mm 以下になり、これはコンクリートに対するひび割れ補修と同程度のすき間幅となる。平成 31 年度は、このような狭いすき間への充填は考慮しなかった。

一方、表 2.2-35 に示したすき間を埋めるにあたり、図 2.2-52 のようなすき間充填材の施工方法が考えられ、施工方法の違いにより表 2.2-36 に示すような課題がある。

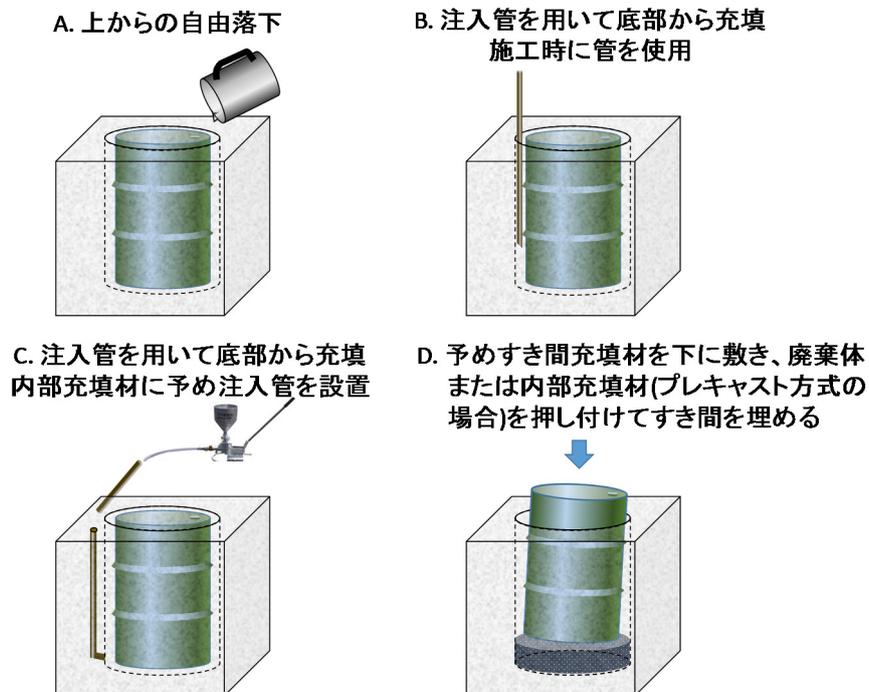


図 2.2-72 想定されるすき間充填材の施工方法

表 2.2-36 すき間充填材の施工方法の違いによる課題

すき間充填材の施工方法		課題
A	上からの自由落下	<ul style="list-style-type: none"> ・ 廃棄体底面部の凹凸により生じるすき間、及び、廃棄体側面へのすき間充填材の充填と空気抜き ・ 施工時の空気の巻き込みの可能性 ・ 粘性が高いすき間充填材が中に入っていない可能性
B	注入管を用いて底部から充填 —施工時に管を使用—	<ul style="list-style-type: none"> ・ 廃棄体底面部の凹凸により生じるすき間へのすき間充填材の充填と空気抜き ・ 注入中の廃棄体の浮き
C	注入管を用いて底部から充填 —内部充填材に予め注入管を設置—	<ul style="list-style-type: none"> ・ 内部充填材に設置した注入管の、すき間充填材注入後の処理 ・ 注入中の廃棄体の浮き
D	予めすき間充填材を下に敷き、廃棄体または内部充填材（プレキャスト材の場合）を押し付けてすき間を埋める	<ul style="list-style-type: none"> ・ 圧力不足

平成 31 年度は、廃棄体パッケージの構成要素を一体化するにあたり、表 2.2-36 に示した A～D の施工方法のうち、すき間の空気を抜いて、すき間充填材内部に残留する空気を最も少なくできると考えられる下記の施工方法を想定した試験を実施する事とした。

- ・ 注入管を用いて底部から充填（B及びC）

② すき間充填材に求められる性能

(a) 土木建築で用いられるすき間充填材（一般）

土木建築において、充填材はかなり広範囲に適用される。適用箇所としては、例えば、逆打ちコンクリートの充填、ポストテンションプレストレスコンクリートケーブルの充填（PC グラウト）、鉄筋継ぎ手グラウト、機械装置の基礎、プレキャスト床版下部充填、トンネル裏込め充填、鉄骨のベース、鉄骨ブレース、など、多岐に及ぶ。

これら充填材は、適用箇所や用途別に開発され、実用化されてきたため、要求される品質の評価を統一的に検討された例はほとんど無いが、日本コンクリート工学協会（現、日本コンクリート工学会）「充填材の品質評価研究委員会報告」で検討された充填材の性能分類では、セメント固化過程として、硬化前と硬化後に分類し、それぞれの過程で求められる性能として表されている。硬化前は、流動性と均質性を確保するため材料分離抵抗性を要求しており、充填性を達成している。硬化後は、無収縮性、材料強度特性、耐久性を要求している。これらにより構造体全体系としての一体性や耐久性を得ている。

(b) 廃棄体パッケージに使用するすき間充填材の性能

廃棄体パッケージに使用するすき間充填材に求められる機能は、廃棄体パッケージ内充填材の機能を達成する観点から、廃棄体パッケージ内充填材に求められる機能と同様、以下の通りと考えられる。

- (a) 搬送時に容器内で廃棄体が移動しない。

(b) 放射性物質の溶出の抑制を期待する。

(c) 水素ガスの発生量が少ない。

これらの機能を達成するために要求される性能を検討した。

はじめに、(a) 搬送時に容器内で廃棄体が移動しない、には、すき間を充填して廃棄体パッケージの構成要素を一体化する上で、硬化前の流動性や均質性を確保する材料分離抵抗性が必要となる。また、硬化後は、寸法変化に関わる無収縮性、強度特性（硬化性状）が要求される。硬化後の耐久性に関しては、具体的には水密性、低発熱性、鋼材保護性が項目として挙げられるが、これらはすき間充填材の要求性能には含めなかった。これは、水密性は廃棄体パッケージに直接的に求められていないこと、鋼材保護性能はすき間充填材としてセメント系材料を用いる事でその性能を満足すると考えられることが理由である。低発熱性については、すき間充填材として温度上昇がグループ3のアスファルト固化体の熱暴走の可能性のある195℃未満であれば良く、セメント系材料を用いる事で、水分を持つ事から100℃以上にならないと推定される。ただし、廃棄体が熱を持つため、温度上昇による施工時の流動性低下などの性能影響は別途検討が必要である。

次いで、(b) 放射性物質の溶出を抑制する、は、まず、処分場閉鎖後に金属容器が腐食して廃棄体パッケージ内に地下水が浸入した際に、廃棄体パッケージ内に水みちがあると放射性物質の溶出の抑制は難しい。すき間を完全に充填して水みちを無くす事は困難であるが、(a) の機能を満たすようすき間を充填することで、放射性物質の溶出をある程度抑制できると考えられる。また、廃棄体パッケージ内に地下水が浸入した際に、出来るだけ放射性物質の溶出を遅延出来る様、放射性物質と錯形成をしないこと、及び、放射性物質を収着することが求められる。樹脂系材料のすき間充填材では、放射性物質との錯形成による核種移行促進の恐れがあるため、すき間充填材の材料としては無機系の材料である必要がある。更に、その素材が放射性物質の収着を期待できる素材であれば、放射性物質の溶出を遅延させることが期待でき、セメント系材料のすき間充填材が有利と考えられる。

(c) 水素ガスの発生量が少ない、を達成するためには、すき間充填材による水の持込みは出来るだけ少ないことが望まれる。

以上から、廃棄体パッケージに使用するすき間充填材に求められる性能は、以下の通りとすることが望ましいと考えられる。

- A) 流動性
- B) 材料分離抵抗性
- C) 無収縮性
- D) 材料強度特性
- E) 放射性物質と錯形成しない事
- F) 放射性物質を収着する事
- G) 水の持込みが出来るだけ少ない事

なお、これらの要求性能のうち、A) ~D) は(a)土木建築で用いられるすき間充填材（一般）で挙げた各性能と同じである。E) 及びF) はすき間充填材としてセメント系材料を用いる事で達成できると考えられる。G) については検討が必要であるが、平成31年度は、廃棄体パッケージに存在するすき間が充填可能かの試験に注力し、試験に使用したすき間充填材による廃棄体パッケージ内への水の持込み量を推察する事とした。

2) 試験方法

① 要素試験の実施概要

1) ②(b)項において、廃棄体パッケージに使用するすき間充填材に求められる機能を達成するために要求される性能について述べた。

それを踏まえ、本検討においては、すき間充填材の要求性能を評価するための物性値を取得する物性試験、及び、想定されるすき間を設けた型枠へ実際にすき間充填材を注入した際の状況を確認する充填確認試験を実施した。実施概要を以下に記す。

(a) 物性試験

廃棄体パッケージの構成要素の一体化を目指すにあたり要求されるすき間充填材の性能である、流動性、材料分離抵抗性、無収縮性、材料強度特性といった物性値を把握することを目的に、選定したすき間充填材のフレッシュ性状及び硬化後の物性を取得した。

(b) 充填確認試験

実際に近い状態での充填性を確認するため、すき間幅及びすき間充填材の注入速度をパラメータにすき間充填材の充填状況の確認試験を行い、充填に要する時間、残留空気の有無及び充填状況を観察し、設定した数 cm 程度のすき間への充填性を評価するとともに、注入圧を測定し、基礎的データを取得した。

② すき間充填材の調製

(a) 試験に用いたすき間充填材

一般土木建築用すき間充填材は、放射性廃棄物用途に開発されたものではないが、性能的に廃棄体パッケージ内のすき間の充填に適用可能と考えられる。また、その際に着目すべき性能 1) ②で示した A) ~D) である。

規格基準が明確に定められているすき間等への充填材は極めて少ないが、PC グラウトに関しては、適用される構造物の重要性から、規格基準類として、「PC グラウトの設計施工指針—改訂版—」(プレストレストコンクリート工学会, 2012)「PC グラウト&プレグラウト PC 鋼材 施工マニュアル (改訂版)」(プレストレスト・コンクリート建設業協会, 2006)に纏められている。PC グラウトは、PC 鋼材との一体性が使用目的のひとつであり、①適用される構造物は本検討で想定しているドラム缶程度の大きさをはるかに超える寸法形状にも対応可能である、②流動性、強度のほか、材料分離抵抗性(ブリーディングを含む)などの規格基準が定められている、③施工マニュアルでは実際に即した流動性や充填に必要なポンプ選定などが示されている、④プレミックス品として PC グラウトの基準に適合する粘性範囲の異なる製品が供給されている。

すき間充填材の流動性(粘度など)はすき間への充填性に影響が大きいと考えられる。PC グラウトは JP ロート流下時間により、超低粘性型、低粘性型、高粘性型に分類されている。そこで、本検討では粘性が異なる以下の 3 種類の PC グラウトを使用することとした。

- ・超低粘性型 PC グラウト (以下、超低粘性型) : 太平洋ハイジェクター[®] (太平洋マテリアル株式会社)
- ・低粘性型 PC グラウト (以下、低粘性型) : マスターフロー816[®] (BASF ジャパン株式会社)
- ・高粘性型 PC グラウト (以下、高粘性型) : マスターフロー818[®] (BASF ジャパン株式会社)

(b) 配合

試験に用いたすき間充填材の配合比（水材料比）と練混ぜ時の計量値を表 2.2-37 に示す。すき間充填材の水材料比はメーカーの技術資料及び試験成績書に基づき設定した。また、1 バッチの練混ぜ量は、各試験での必要量に応じて設定した。

表 2.2-37 すき間充填材の配合比（水材料比）と練混ぜ時の計量値

すき間充填材	水材料比 (W/P)	練混ぜ量 (L/バッチ)	計量値 (g)		備考
			練混ぜ水(W)	材料(P)	
超低粘性型	0.36	4.1	2,160	6,000	太平洋ハイジェクター
		8.2	4,320	12,000	
低粘性型	0.44	4.5	2,640	6,000	マスターフロー816
		9.1	5,280	12,000	
高粘性型	0.415	4.4	2,490	6,000	マスターフロー818
		8.8	4,980	12,000	

(c) グラウトの練混ぜ方法

すき間充填材の練混ぜには、(株)マキタ製のスピードカクハン機 UT2221(回転速度:1200rpm)を用いた。すき間充填材の練混ぜ状況を図 2.2-73 に示す。また、練混ぜの手順を以下に記す。

- ①練混ぜ水（上水）にすき間充填材（所定量の約半量）を投入。
- ②混合、攪拌（5秒程度）
- ③残りのすき間充填材（所定量の約半量）を投入。
- ④1分間、混合、攪拌。
- ⑤練混ぜ容器の壁や底に付着したペースト部分を欠き落として均質化。
- ⑥再び、1分間の混合、攪拌を行った後、フレッシュ性状を確認した後、各試験へ供した。



図 2.2-73 すき間充填材の練混ぜ

③ 物性試験

すき間充填材の物性試験における測定項目を表 2.2-38 に示す。1) ②(b)に示した様に、廃棄体パッケージに使用するすき間充填材の物性に関わる性能は、流動性、材料分離抵抗性、無収縮性、材料強度特性である。そこで、これらの性能を評価するため、流動性についてはフレッシュ

性状を測定した。材料強度特性については、圧縮強度を測定した。これらは PC グラウトの設計施工指針—改訂版—（プレストレストコンクリート工学会，2012）の PC グラウトの性能に関する品質検査の項目のうち、日常管理試験に設定されている項目である。なお、フレッシュ性状については、試験中に物性が変わると充填に影響が出る可能性があるため、経時変化も確認した。無収縮性及び材料分離抵抗性に関連する物性は、鉛直管試験により沈下の有無や充填高さ毎の圧縮強度を確認する事とした。

表 2.2-38 物性試験の概略

分類	評価する性能	測定項目	試験方法
フレッシュ性状試験	流動性 流動性経時変化	P ロート流下時間	土木学会規準:JSCE-F 522
		JP ロート流下時間	土木学会規準:JSCE-F 531
		SL（セルフレベルング材）フロー	建築学会規準:JASS 15 M-103
		練上がり温度	JIS A1156 に準ずる
		単位容積質量	土木学会規準:JSCE-F 536 (5cm φ × 10cmH、サミット缶使用)
硬化性状試験	材料強度特性	圧縮強度	土木学会規準:JSCE-G 531 材齢 7、28 日で測定 (5cm φ × 10cmH、各材齢 3 本)
鉛直管試験	無収縮性 材料分離抵抗性	沈下の有無 充填高さ毎の圧縮強度	ドラム缶を想定した高さ 890mm の鉛直管に充填し、硬化後に沈下（収縮率）及び圧縮強度を測定

(a) フレッシュ性状試験

フレッシュ性状試験は流動性の指標として実施した。フレッシュ性状のうち、PC グラウトの流下時間の規格値は JP ロートにより規定されている一方、既往の雑固体廃棄物の固化に使用されるモルタルは P ロートで規定されているため、比較可能なように両方のロートで流下時間を測定した。フレッシュ性状の測定状況を図 2.2-74 に示す。

練り上がりから 90 分後までの経時変化の測定に際しては、すき間充填材を常に攪拌していないと流動性低下の影響が懸念されるため、図 2.2-75 に示すプロペラ式攪拌機を使用し、静置せず 200rpm にて攪拌を継続した。



図 2.2-74 フレッシュ性状の測定状況

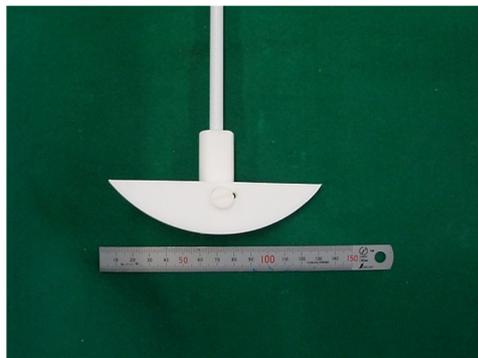


図 2.2-75 フレッシュ性状の経時変化の確認に使用したプロペラ式攪拌機

練り上がり後の単位容積質量の測定には、5cmφ×10cmHの型枠（金属製）を用いた（図 2.2-76）。



図 2.2-76 単位容積質量(生比重)測定

(b) 硬化性状試験

NUMO-SC（原子力発電環境整備機構, 2018）には、「廃棄体パッケージ内充填材に積み上げ時の構造健全性を期待する場合には、 30 N/mm^2 （ 30 MPa ）の強度をめやすとして設計する。」とある。廃棄体パッケージ内に使用するすき間充填材においても、同様の強度が求められると考えられる。また、「PC グラウトの設計施工指針-改訂版-」（プレストレストコンクリート工学会, 2012）には、「PC グラウトの強度が材齢 7 日時点で 30 N/mm^2 （ 30 MPa ）以上を標準とする」と規定されている。これらを踏まえ、本試験においては圧縮強度 30 MPa を基準として、7 日材齢の強度、及び、28 日材例の圧縮強度を測定した。

圧縮強度用試験体は、フレッシュ性状試験にてフレッシュ性状を測定した後のすき間充填材を $5 \text{ cm } \phi \times 10 \text{ cm H}$ の型枠（金属製）に成型し、 20°C の条件で型枠内にて封緘養生した（図 2.2-77）。所定材齢において型枠から脱型し（図 2.2-78）、研磨機を用いて上面を研磨した後（図 2.2-79）、ノギスにて試験体寸法を測定し後、圧縮強度試験を行った（図 2.2-80）。



図 2.2-77 圧縮強度用試験体の養生状況



図 2.2-78 圧縮強度用試験体の状況（脱型後）

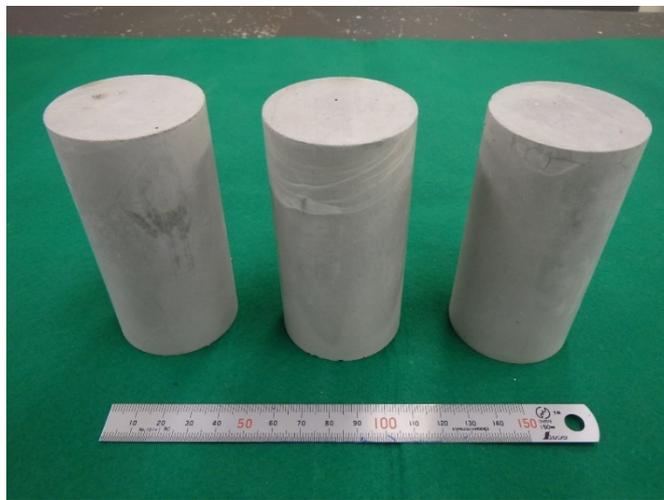


図 2.2-79 圧縮強度用試験体の状況（上端面の研磨処理後）



図 2.2-80 圧縮強度試験の状況

(c) 鉛直管試験

無収縮性及び材料分離抵抗性に関連する物性は、鉛直管試験により沈下の有無や充填高さ毎の圧縮強度を確認する事とした。鉛直管試験の概要図を図 2.2-81 に示す。

廃棄体 Gr.2 のドラム缶を想定し、管内の 890mm の高さまですき間充填材を打設し(図 2.2-82 及び図 2.2-83)、上部開放状態での約 24 時間経過後のすき間充填材の沈下量について確認した(図 2.2-84)。また、28 日経過後に硬化体を上、中、下に切り出して、材齢 28 日の圧縮強度を測定した。なお、各粘性のすき間充填材それぞれにつき、鉛直管試料は 1 本準備した。

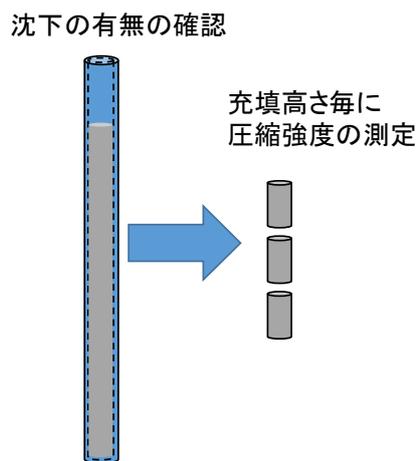


図 2.2-81 鉛直管試験の概要図



図 2.2-82 流し込み充填作業(5cmφ×89cmH)の状況



図 2.2-83 流し込み充填終了直後の状況



図 2.2-84 鉛直管試験装置（すき間充填材の充填直後）

圧縮強度測定用の試験体の切り出し採取は、図 2.2-85 に示すように、すき間充填材の充填高さ（約 89cm）の中央（44.5cm）から 2 分して、中段部として、ひとつの試験体が 10cm 程度となるように切り出した。

なお、上段では、上部端の沈降、ブリーディングにより生じる不均質な部分を除くため、上部から約 5mm 程度下の箇所より、切断を行って試験体を採取した。下段では、底面から各 10cm ずつを採取した。試験体は研磨による端面処理を行った後、圧縮強度試験に供した。



図 2.2-85 試験体の切り出し状況(鉛直管試験)

④ 充填確認試験

(a) 試験装置

廃棄体パッケージ内充填材と廃棄体のすき間を想定した型枠を用いて、すき間充填材の充填状況の確認試験を行った。すき間充填材の充填状況確認試験装置の概要図を図 2.2-86 及び図 2.2-87 に示す。

本試験では、廃棄体パッケージ B (a) の廃棄体パッケージ内充填材とドラム缶のすき間を想定し、廃棄体 Gr.1 の 200L ドラム缶の高さと同等の 900mm (試験時は高さ 800mm の時点でポンプを停止)、幅はドラム缶直径の半分、280mm とした型枠を用意した。この型枠は充填状況を確認できるようにアクリル製とし、すき間充填材の充填時に中央部の膨らみが発生しないよう 150mm 厚のアクリルを用いた。また、塩ビ製のスペーサーをアクリル板の間に設置し、想定される幅 (5mm、10mm、20mm) のすき間を設けた。本試験では、すき間の空気を抜いて、すき間充填材内部に残留する空気を最も少なくできると思われる施工方法 (図 2.2-72 の B 及び C) を想定し、すき間充填材の注入口は型枠の下部に設けた。型枠のすき間及び横幅の設定値と上部開口部をノギスにて実測した値を表 2.2-39 に示す。



図 2.2-86 充填状況の確認試験装置の概要図

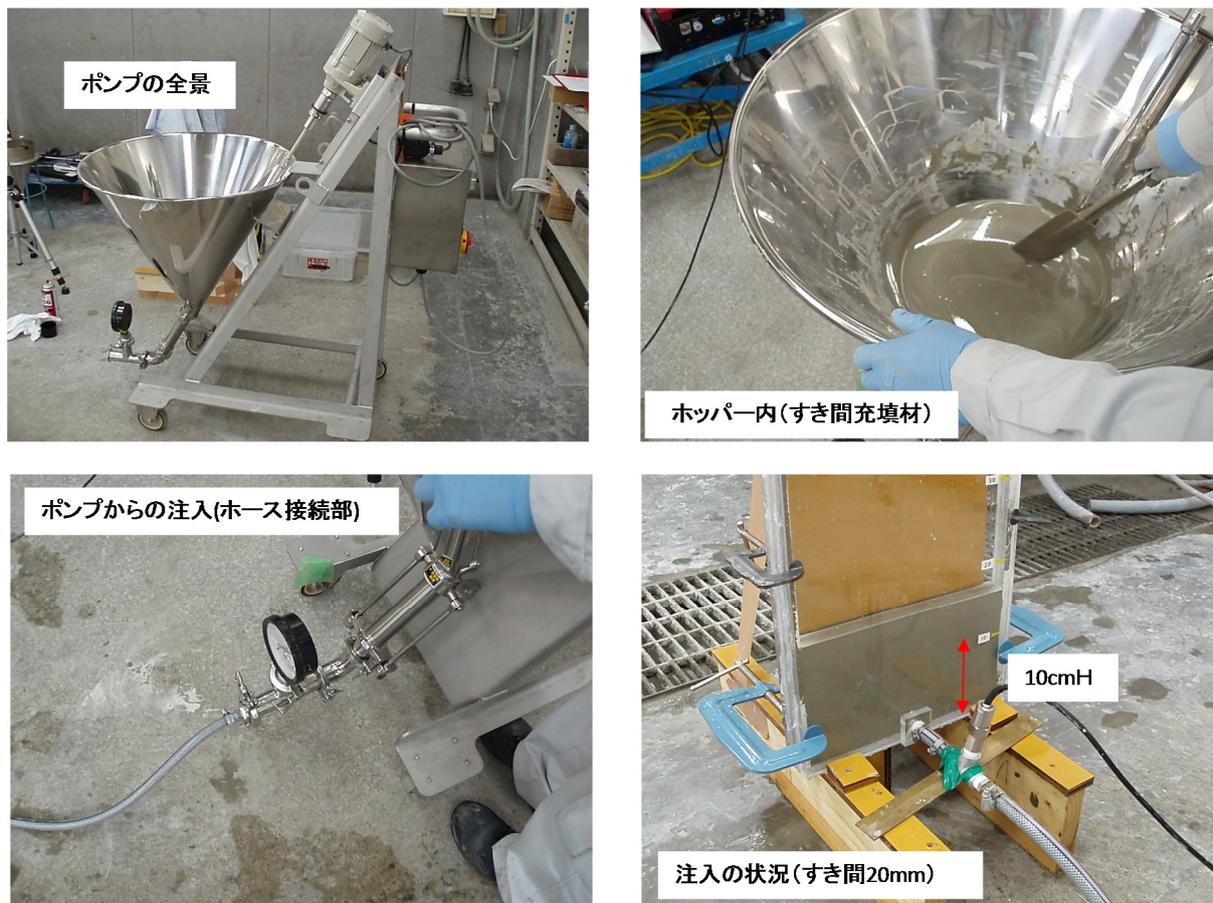


図 2.2-87 充填状況の確認試験装置の写真

表 2.2-39 型枠のすき間及び横幅の設定値と上部開口部をノギスにて実測した値

設定値 (mm)		実測値 (mm)	
すき間幅	横幅	すき間幅*	横幅
5	280	5.01	280.87
10	280	10.07	280.01
20	280	20.09	280.06

※すき間幅の実測値は、上部開口部にて 3 箇所測定した実測値の平均値

(b) すき間充填材の注入方法

すき間充填材の注入は、流速が一定となるようにポンプで圧送して行った。ポンプは、兵神装備株式会社のヘイシン 2NVL15 型モノポンプ (スネーク式ポンプ) を使用した。「PC グラウト & プレグラウト PC 鋼材 施工マニュアル (改訂版)」(プレストレスト・コンクリート建設業協会, 2006) では、グラウトポンプの仕様の一例が示されている。本検討で使用したポンプは、ドラム缶へのすき間充填を想定した時に適当量の吐出量であると同時に、極めて脈流が少ないため安定した注入が可能である。

すき間充填材の注入速度は、本検討で使用したポンプ及び配管で廃棄体パッケージ B (a) の廃棄体パッケージ内充填材とドラム缶のすき間 1 箇所を充填する際の時間が、10 分～30 分程度となるよう設定した。今回使用した型枠が幅 280mm であり、ドラム缶の円周の約 1/6 である事が

ら、型枠への注入時間が2分～4分程度となるような水準を主体とした。注入時のすき間充填材流量については、1分間あたりにポンプから吐出されるすき間充填材の質量を測定し、単位容積質量から体積に換算して確認した。結果は、2.2.3(3) ③ ②に充填高さごとの到達時間と併せて示す。

(c) 測定項目及び試験水準

すき間充填材の充填状況の確認試験における測定項目を表 2.2-40 に、試験水準を表 2.2-41 に示す。試験では、すき間充填材種類（粘性）、注入量、すき間幅をパラメータに、型枠のすき間充填材注入口手前に設置した圧力計で挿入圧を測定するとともに、充填に要する時間や充填状況を観察した。

表 2.2-40 すき間充填材の充填状況の確認試験における測定項目

測定項目	測定方法
充填時間	10cm 刻みで型枠に付けた印の位置にすき間充填材の界面が到達した時間を記録した。時間はストップウォッチで計測した。
圧力変化	注入口手前に設置した圧力計で、すき間充填材注入時の圧力変化を測定し、データロガーを使用し記録した。
充填時形状	すき間充填材を型枠内に注入している際にできる形状の時間変化を目視により確認した。また、残留空気の有無も確認した。

表 2.2-41 試験水準

	注入条件	すき間設定幅(mm)								
		5mm		10mm			20mm			
		0.7L/min	1.4L/min	0.7L/min	1.4L/min	2.8L/min	0.7L/min	1.4L/min	2.8L/min	
すき間 充填材	超低粘性型	○	○	○	○	○	○	○	○	
	低粘性型	○	○	○	○	○	△	○	○	
	高粘性型	○	○	○	○	○	△	○	○	
注入時間 目安 (min)	実験用型枠	2	1	4	2	1	8	4	2	
	廃棄体/パッケージB(a) ドラム缶用を想定	12	6	24	12	6	48	24	12	

3) 試験結果

① 物性試験

(a) フレッシュ性状

(i) 練り上がり直後のフレッシュ性状

各試験に供した練り上がり直後のすき間充填材のフレッシュ性状を表 2.2-42～表 2.2-43 に示す。また参考として、JP ロート流下時間のメーカー品質規格値（すき間充填材の品質規格値）及びPC グラウトの設計施工指針—改訂版—に記載の SL フローの目安値を表 2.2-44 に示す。

測定結果を以下に示す。

- ・ JPロート及びPロート流下時間はいずれも、超低粘性型、低粘性型、高粘性型の順で遅くなったが、SLフローは低粘性型がもっとも小さい値となり、ロート流下時間とフローとの間で相関が認められなかった。

- ・ すき間充填材として用いたいずれのPCグラウトも、JPロート流下時間はメーカー品質規格値を満たしていた。また、低粘性及び高粘性型のSLフローの値は、PCグラウトの設計施工指針—改訂版—に記載の目安値の範囲内であることを確認した。
- ・ 超低粘性型は初期発熱が低粘性型及び高粘性型より大きかった。使用するすき間充填材によって発熱が大きくなり、温度上昇によって流動性に影響を与える可能性があるため、注意が必要である。
- ・ 1バッチ目と2バッチ目（表 2.2-43）、及び、練混ぜ日が異なるバッチ間で比較する（表 2.2-42と表 2.2-43比較、または、表 2.2-42の高粘性型のデータ）と、フレッシュ性状に差異は少なく、安定した品質であった。

なお、各測定項目間の相関性等、フレッシュ性状の測定結果に関する考察は、2.2.3(3)4項「すき間充填材の仕様の具体化」で述べる。

表 2.2-42 圧縮強度測定及び鉛直管試験に供したすき間充填材のフレッシュ性状の測定結果

すき間充填材	練上り温度(°C)	JP ロート (sec)	P ロート (sec)	SL フロー (mm)	単位容積質量(g/cm ³)	備考
超低粘性型	27.2	5.0	20.0	227	2.01	圧縮強度測定及び鉛直管試験に使用
低粘性型	21.3	13.5	55.1	181	1.90	圧縮強度測定及び鉛直管試験に使用
高粘性型	21.2	15.7	59.0	204	1.93	圧縮強度測定に使用
	20.7	15.8	61.2	209	—※	鉛直管試験に使用 圧縮強度測定用の翌日に練混ぜ

※ 測定を実施せず。

表 2.2-43 充填状況の確認試験に供したすき間充填材のフレッシュ性状の測定結果

すき間充填材	練混ぜバッチ	練上り温度(°C)	JP ロート (sec)	P ロート (sec)	SL フロー (mm)
超低粘性型	1 バッチ目	27.9	4.6	20.7	206
	2 バッチ目	27.7	5.1	21.0	225
低粘性型	1 バッチ目	25.2	12.7	56.1	160
	2 バッチ目	25.6	11.4	48.2	163
高粘性型	1 バッチ目	22.8	18.5	68.0	166
	2 バッチ目	22.5	15.5	71.0	182

表 2.2-44 すき間充填材の JP ロート流下時間のメーカー品質規格値及び PC グラウトの設計施工指針—改訂版—に記載の SL フロー目安

すき間充填材	JP ロート メーカー品質規格値 (sec)	SL フロー目安 (mm)
超低粘性型	3.5～6.0	—※
低粘性型	6～14	150～270
高粘性型	14～23	150～270

※ 記載値なし。

(ii) フレッシュ性状の経時変化

実際の施工ではすき間充填に時間がかかることが考えられ、フレッシュ性状が変わる懸念があったため、フレッシュ性状の経時変化を測定した。結果を表 2.2-45～表 2.2-47、図 2.2-88～図 2.2-89、及び、以下に示す。

- ・ JPロート及びPロートでは、すき間充填材として用いたいずれのPCグラウトも時間の経過に伴い流下時間が長くなった。
- ・ JPロートについては、90分後においても概ねメーカーの品質規格値の範囲内であった。また、低粘性型及び高粘性型のSLフローの値は、90分後においてもPCグラウトの設計施工指針－改訂版－に記載の目安値の範囲内であった。
- ・ フロー値は、用いる材料によっては、経時的に変化することがある。

表 2.2-45 超低粘性型のフレッシュ性状の経時変化

測定項目	メーカー品質規格値	測定結果			
		練り上がり直後	30分後	60分後	90分後
JPロート流下時間[sec]	3.5～6.0	4.76	5.21	5.74	6.28
Pロート流下時間[sec]	規定なし	21.95	24.06	27.87	32.09
SLフロー[mm]	規定なし	228	207	192	182
温度[°C]	—	27.6	27.0	24.2	23.7

表 2.2-46 低粘性型のフレッシュ性状の経時変化

測定項目	メーカー品質規格値	測定結果			
		練り上がり直後	30分後	60分後	90分後
JPロート流下時間[sec]	6～14	9.11	11.10	11.75	11.31
Pロート流下時間[sec]	規定なし	46.41	50.33	51.72	48.97
SLフロー[mm]	(150-270)*	162	166	168	170
温度[°C]	—	25.5	23.7	22.9	21.6

※ メーカー品質規格値のSLフローの欄には、PCグラウトの設計施工指針－改訂版－に記載の目安値を記載

表 2.2-47 高粘性型のフレッシュ性状の経時変化

測定項目	メーカー品質規格値	測定結果			
		練り上がり直後	30分後	60分後	90分後
JPロート流下時間[sec]	14～23	14.77	17.05	16.83	17.27
Pロート流下時間[sec]	規定なし	57.58	72.72	72.77	77.13
SLフロー[mm]	(150-270)*	179	172	171	170
温度[°C]	—	22.4	23.7	22.3	21.3

※ メーカー品質規格値のSLフローの欄には、PCグラウトの設計施工指針－改訂版－に記載の目安値を記載

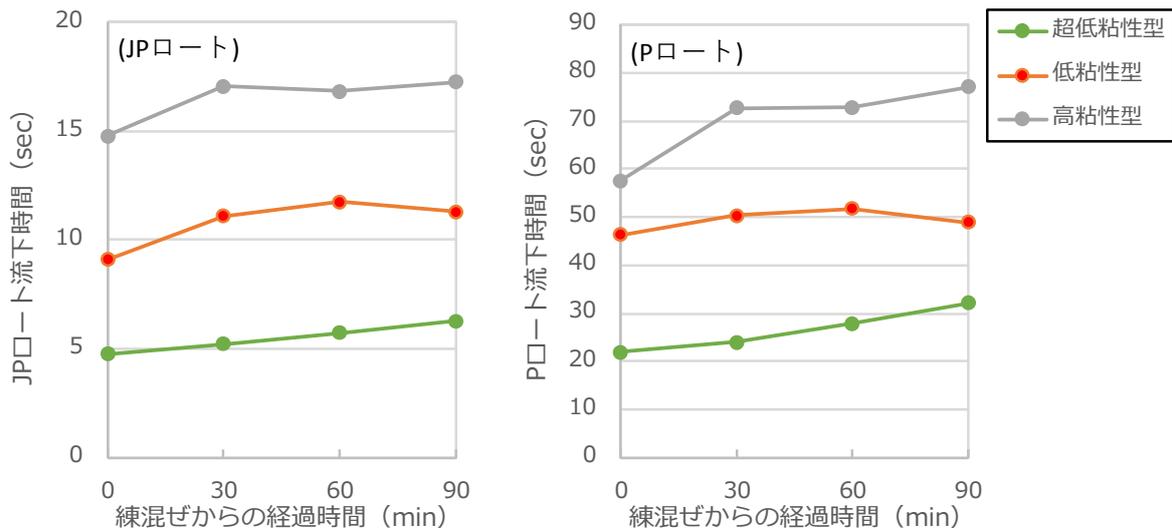


図 2.2-88 JP ロート及びP ロート流下時間の経時変化の比較
(左図：JP ロート、右図：P ロート)

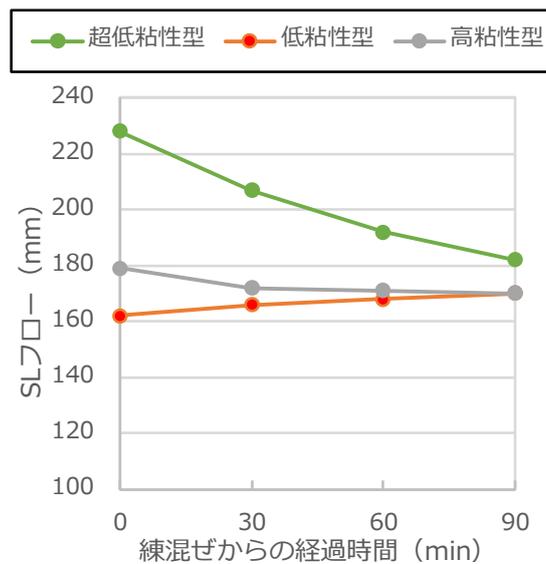


図 2.2-89 SL フローの経時変化の比較

(b) 硬化性状試験の結果

圧縮強度の測定結果を表 2.2-48 に、試験体の見掛け密度の結果を表 2.2-49 に示す。また、圧縮強度と水材料比及び試験体の見掛け密度の関係を図 2.2-90 に示す。得られた知見を以下に示す。

- 図 2.2-90より、圧縮強度と材料水比、及び、試験体の見掛け密度との間には相関性が認められ、材料水比が大きくなるほど、また見掛け密度が大きくなるほど圧縮強度は高かった。水量が少ないすき間充填材の方が緻密な硬化体となって強度が高くなっていると考えられる。
- 本試験で用いたいずれのすき間充填材も、材齢7日の時点で圧縮強度が30MPaを超えており、廃棄体パッケージのすき間を充填するのに十分な強度を有していた。

表 2.2-48 圧縮強度の測定結果

すき間充填材	水材料比	圧縮強度(MPa)			
		材齢 7 日		材齢 28 日	
		平均		平均	
超低粘性型	0.36	86.0	86.2	106	106
		86.5		105	
		86.1		108	
低粘性型	0.44	50.3	49.2	61.5	59.2
		48.8		61.6	
		48.5		54.5	
高粘性型	0.415	52.9	50.1	67.8	68.1
		51.4		70.0	
		46.1		66.4	

表 2.2-49 試験体の見掛け密度

すき間充填材	水材料比	試験体の見掛け密度(g/cm ³)			
		材齢 7 日		材齢 28 日	
		平均		平均	
超低粘性型	0.36	2.04	2.03	2.02	2.02
		2.03		2.01	
		2.03		2.02	
低粘性型	0.44	1.91	1.90	1.93	1.92
		1.90		1.92	
		1.90		1.92	
高粘性型	0.415	1.96	1.96	1.93	1.94
		1.96		1.95	
		1.96		1.94	

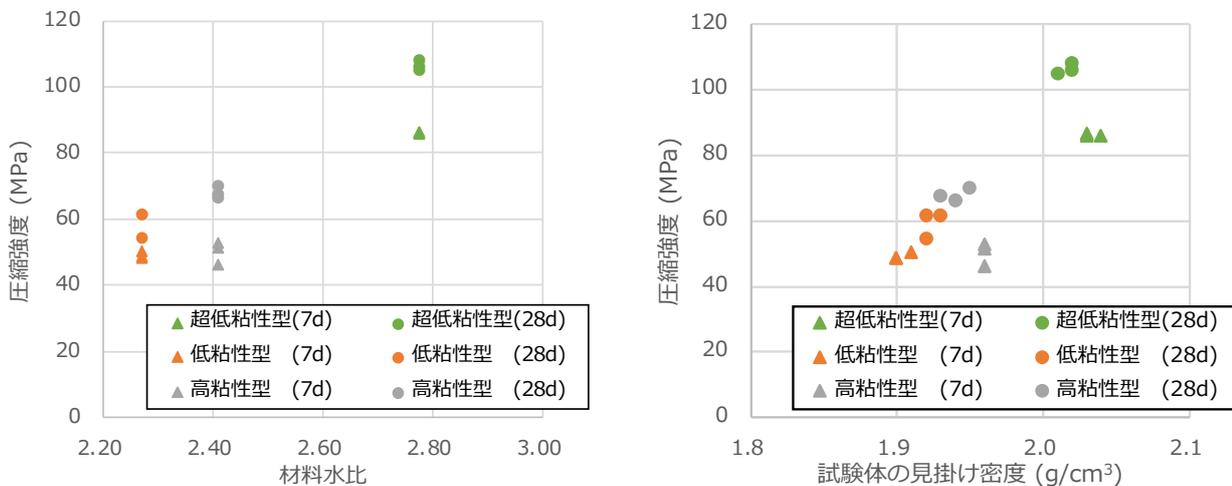


図 2.2-90 圧縮強度—材料水比及び試験体の見掛け密度の関係

(c) 鉛直管試験

(i) 沈下の確認結果

鉛直管へのすき間充填材の充填から約 24 時間後に上部の状況を確認した。結果を表 2.2-50 及び図 2.2-91～図 2.2-93 に示す。結果は以下の通りであった。

- ・ いずれの試料もブリーディング水の発生は認められなかった。
- ・ 充填高さ890mmに対し3mm程度の沈下が認められたが、収縮率としては0.3%程度であった。なお、収縮率の値はメーカーのカタログに示された体積変化率の範囲内である（超低粘性型の体積変化率の判定基準：-0.5%～+0.5%（太平洋マテリアル, 2018）、低粘性型及び高粘性型の膨張率の規格値：-0.5～0.5%（BASFジャパン, 2018a ; 2018b））。

表 2.2-50 沈下の有無の観察結果

すき間充填材	水材料比	沈下の確認結果 (翌日、上部開放状態)
超低粘性型	0.36	ブリーディング水発生なし、 充填高さから約 3mm 程度沈下。
低粘性型	0.44	ブリーディング水発生なし、 充填高さから約 3mm 程度沈下。
高粘性型	0.415	ブリーディング水発生なし、 充填高さから約 3mm 程度沈下。

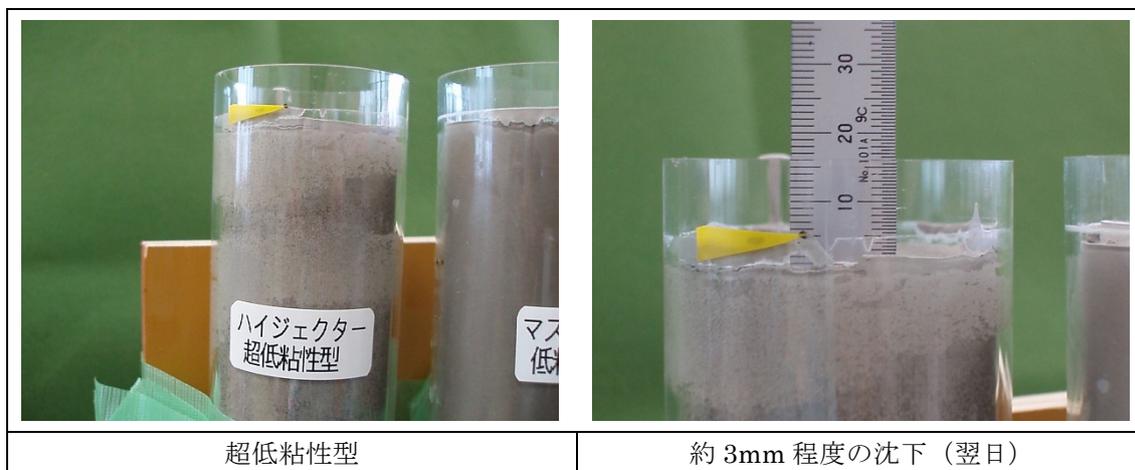


図 2.2-91 沈下の状況（超低粘性型）

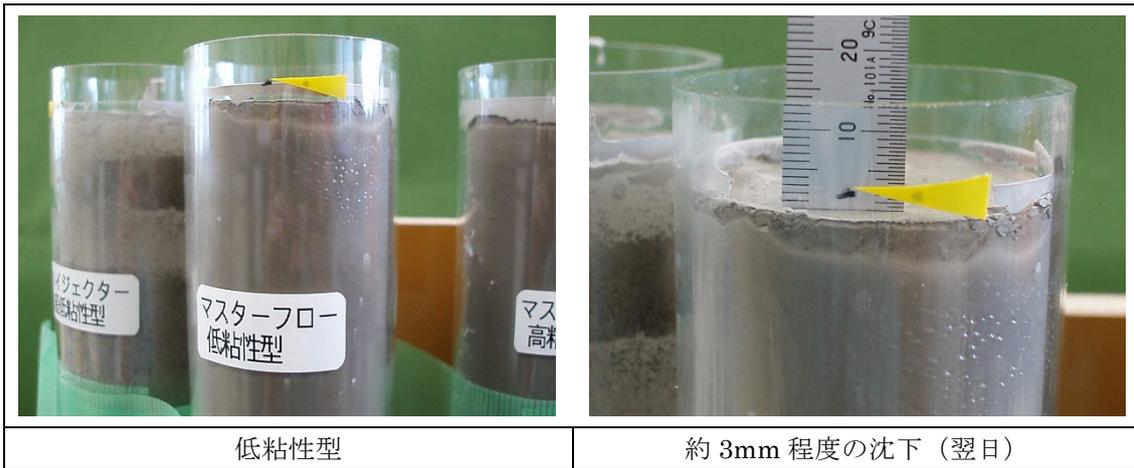


図 2.2-92 沈下の状況（低粘性型）

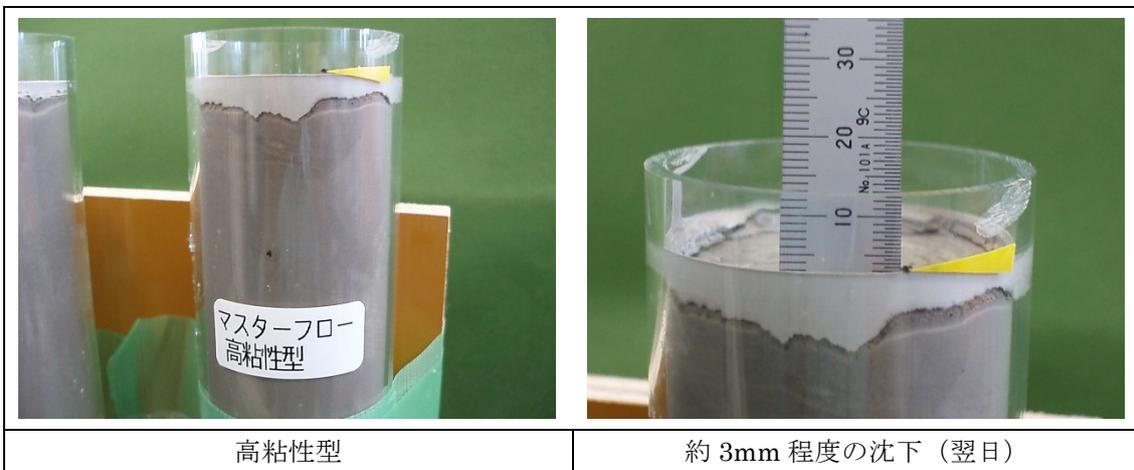


図 2.2-93 沈下の状況（高粘性型）

(ii) 充填高さ毎の圧縮強度

試験体の採取の際、上段では上部端が打設時よりも 3~4mm 程度の沈下が見られたため、均質な部分を採取するため、上端部から約 5mm 程度下の箇所より切断を行って試験体を採取した。下段では、底面から各 10cm ずつを採取した。試験体は研磨による端面処理を行った後、圧縮強度試験に供した。

超低粘性型では、図 2.2-94 左側の上段①の箇所で採取した試験体に欠損が生じたため、上段②及び③の試験体を採取して圧縮強度を測定した。結果を表 2.2-51、及び、以下に示す。

- 超低粘性型では、図 2.2-94に示す鉛直管の上段部分②及び③は圧縮強度が低い傾向を示した。しかし、いずれも圧縮強度の低下率は10%程度であり、大きな材料分離が生じていたとは考えられず、また圧縮強度が30MPaを超えていた事から、強度の点からは890mmの高さでも充填できると考えられる。
- 低粘性型及び高粘性型では、図 2.2-94右側の鉛直管の最上段①部分は圧縮強度が低かった。用いるすき間充填材によっては、最も上段における強度が低下する可能性があることに留意する必要がある。しかし、圧縮強度は30MPaを超えていた事から、強度の点からは890mmの高さでも充填できると考えられる。

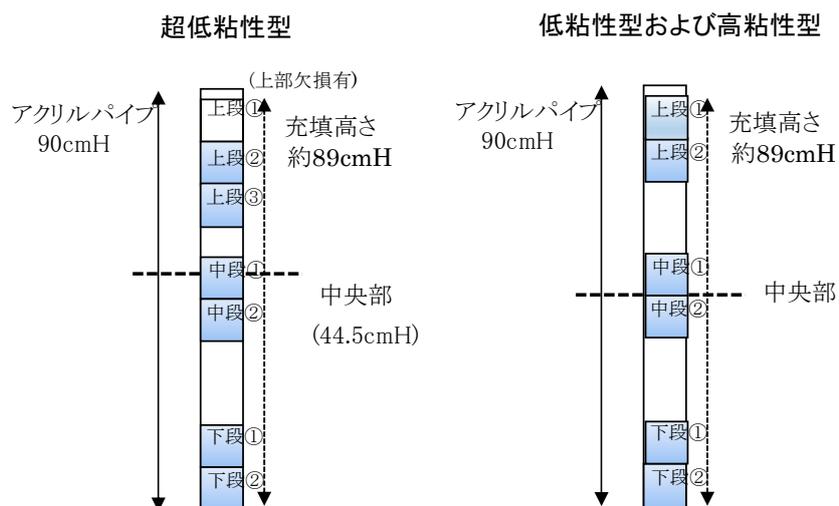


図 2.2-94 採取箇所的位置 (概略図)

表 2.2-51 圧縮強度結果(鉛直管試験:材齢 28 日)

[単位 : MPa]

	すき間充填材	超低粘性型		低粘性型		高粘性型	
	水材料比	0.36		0.44		0.415	
採取箇所	上段①	(上部欠損有)		46.3	78.2%	49.8	73.1%
	上段②	87.9	82.9%	61.0	103%	68.8	101%
	上段③	88.4	83.4%	採取なし		採取なし	
	中段①	102	96.2%	62.3	105%	65.7	96.4%
	中段②	97.4	91.9%	58.5	98.8%	64.8	95.1%
	下段①	96.9	91.4%	63.1	107%	65.0	95.4%
	下段②	102	96.2%	62.2	105%	67.7	99.4%
硬化性状試験 材齢 28 日の結果 (平均値)		106	100%	59.2	100%	68.1	100%

※ %で示した数字は、硬化性状試験材齢28日の結果(平均値)を100%とした時の各試験体の強度を示す。

表 2.2-52 固化体見掛け密度(鉛直管試験:材齢 28 日)

[単位 : g/cm³]

	すき間充填材	超低粘性型	低粘性型	高粘性型
採取箇所	上段①	(上部欠損有)	1.89	1.91
	上段②	2.01	1.89	1.93
	上段③	2.01	採取なし	採取なし
	中段①	1.99	1.90	1.92
	中段②	2.00	1.87	1.92
	下段①	2.00	1.89	1.91
	下段②	2.01	1.89	1.92
硬化性状試験 材齢 28 日の結果 (平均値)		2.02	1.92	1.94

② 充填確認試験

(a) 充填時間

すき間充填材として用いた各 PC グラウトの充填試験時の流量(実測値)と、10~80cm の 10cm 刻みのすき間充填材の到達時間の測定結果を表 2.2-53~表 2.2-55 に、充填高さ到達時間の関係を図 2.2-95 に示す。結果の概略を以下に記す。

- ・ 高粘性型の型枠のすき間5mm、流量0.7L/minの水準において、80mmの高さまでの到達時間が想定される時間より長くなったが、図 2.2-86で示した試験装置により、概ね設定した通りの流量で制御できていることを確認した。

表 2.2-53 充填試験時の流量と到達時間の測定結果 (超低粘性型)

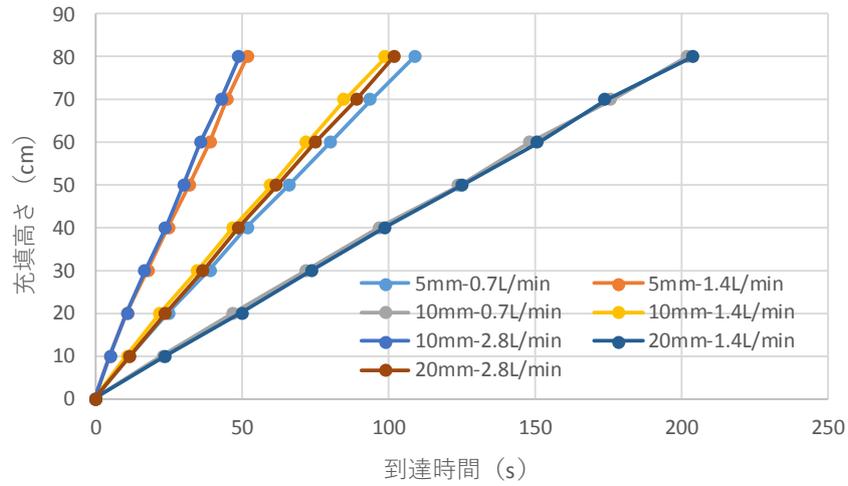
隙間(設定値)		5mm		10mm			20mm		
流量(設定値:L/min)		0.7	1.4	0.7	1.4	2.8	0.7	1.4	2.8
流量(実測値:L/min)		0.68	1.40	0.70	1.42	2.80	0.69	1.39	2.79
到達時間[sec]	10cm	12	5	23	11	5	49	24	12
	20cm	25	11	47	22	11	99	50	24
	30cm	39	18	72	35	17	152	74	37
	40cm	52	25	97	47	24	201	99	49
	50cm	66	32	124	60	30	252	125	62
	60cm	80	39	148	72	36	305	151	75
	70cm	94	45	176	85	43	357	174	89
	80cm	109	52	202	99	49	415	204	102
練混ぜバッチ		1バッチ目				2バッチ目			

表 2.2-54 充填試験時の流量と到達時間の測定結果（低粘性型）

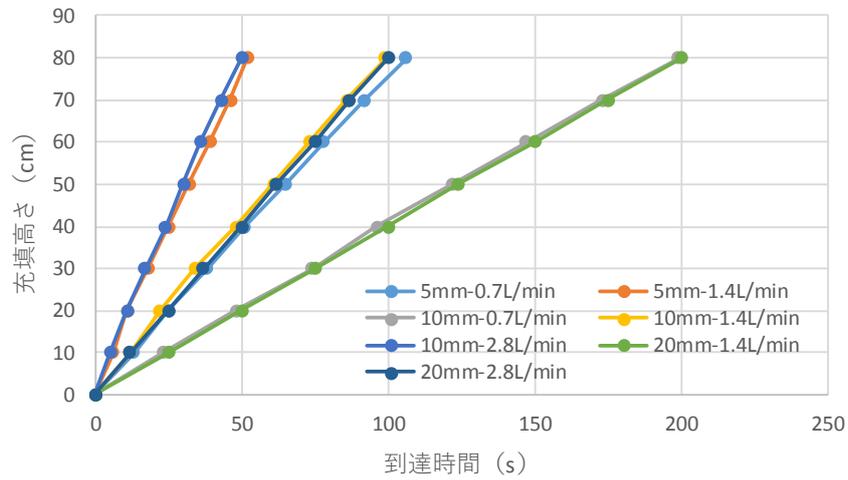
隙間(設定値)		5mm		10mm			20mm	
流量(設定値:L/min)		0.7	1.4	0.7	1.4	2.8	1.4	2.8
流量(実測値:L/min)		0.70	1.40	0.71	1.43	2.85	1.40	2.81
到達時間[sec]	10cm	13	6	23	12	5	25	12
	20cm	25	11	48	22	11	50	25
	30cm	38	18	74	34	17	75	37
	40cm	51	25	96	48	24	100	50
	50cm	65	32	122	61	30	124	62
	60cm	78	39	147	73	36	150	75
	70cm	92	46	173	86	43	175	87
	80cm	106	52	199	99	50	200	100
練混ぜバッチ		2バッチ目			1バッチ目			

表 2.2-55 充填試験時の流量と到達時間の測定結果（高粘性型）

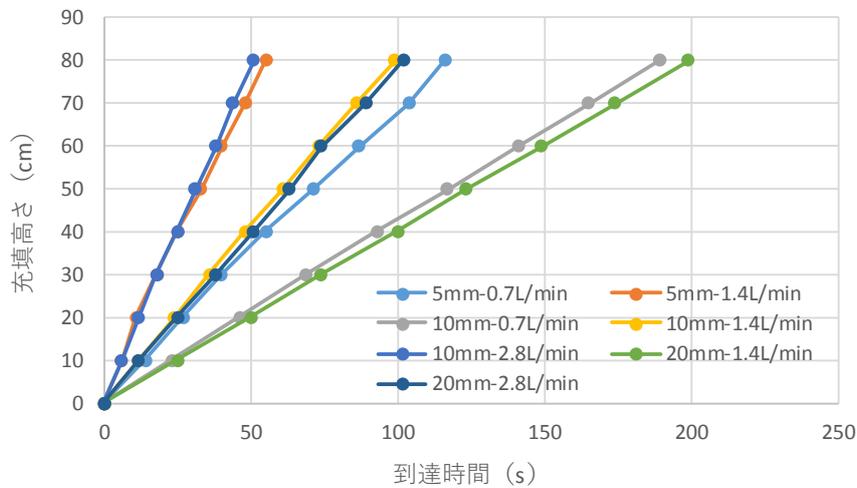
隙間(設定値)		5mm		10mm			20mm	
流量(設定値:L/min)		0.7	1.4	0.7	1.4	2.8	1.4	2.8
流量(実測値:L/min)		0.68	1.40	0.75	1.42	2.79	1.43	2.81
到達時間[sec]	10cm	14	6	23	12	6	25	12
	20cm	27	11	46	24	12	50	25
	30cm	40	18	69	36	18	74	38
	40cm	55	25	93	48	25	100	51
	50cm	71	33	117	61	31	123	63
	60cm	87	40	141	73	38	149	74
	70cm	104	48	165	86	44	174	89
	80cm	116	55	189	99	51	199	102
練混ぜバッチ		1バッチ目			2バッチ目			



(a) 超低粘性型 (型枠のすき間 20mm、流量 0.7L/min のデータは省略)



(b) 低粘性型



(c) 高粘性型

図 2.2-95 充填高さと到達時間の関係

(b) 圧力変化

各すき間充填材の充填時の圧力の経時変化を、すき間充填材の種類ごとに図 2.2-96～図 2.2-98 に示す。また、図 2.2-99 には型枠のすき間間隔 10mm の時のすき間充填材の種類及び流量と圧力変化の関係を、図 2.2-100 には流量が 1.4L/min の時のすき間充填材の種類及び型枠のすき間間隔と圧力変化の関係を示す。結果を以下に示す。

- ・ 充填開始時に圧力が急激に上昇した後は、直線的に圧力が上昇する傾向にあった。
- ・ 急激に上昇した直後の圧力値は、流量が大きいほうが、また、高粘性のすき間充填材の方が高い値となった。すき間充填材の種類、または、流量が同じであれば、急激に上昇した直後の圧力値は型枠のすき間幅によらず概ね同じであった。このように、注入開始時の圧力の急上昇は、すき間充填材の粘性と流量が影響して値が変化しており、注入口の圧力損失と考えられる。
- ・ 充填中の圧力の上昇については、型枠のすき間幅が1/2になれば圧力値が2倍、流量が2倍になれば圧力値が2倍、と、すき間幅及び流量に依存していた。この事から、試験した範囲では注入中の圧力の上昇には型枠の壁面の影響は小さいと考えられる。
- ・ 下記については、グラウト注入が進むにつれて直線の傾きが寝てきている事が確認された。これらはすき間幅が狭い水準であり、注入中にせん断作用を受け、すき間充填材の流動性が注入中に増加していることが一因と考えられる。ただし、この現象は粘性が低下する方向のため、すき間充填材の注入に際し問題とはならないと考えられる。
 - 低粘性型 型枠のすき間幅5mm、流量1.4L/min
 - 高粘性型 型枠のすき間幅5mm、流量1.4L/min
 - 高粘性型 型枠のすき間幅5mm、流量0.7L/min

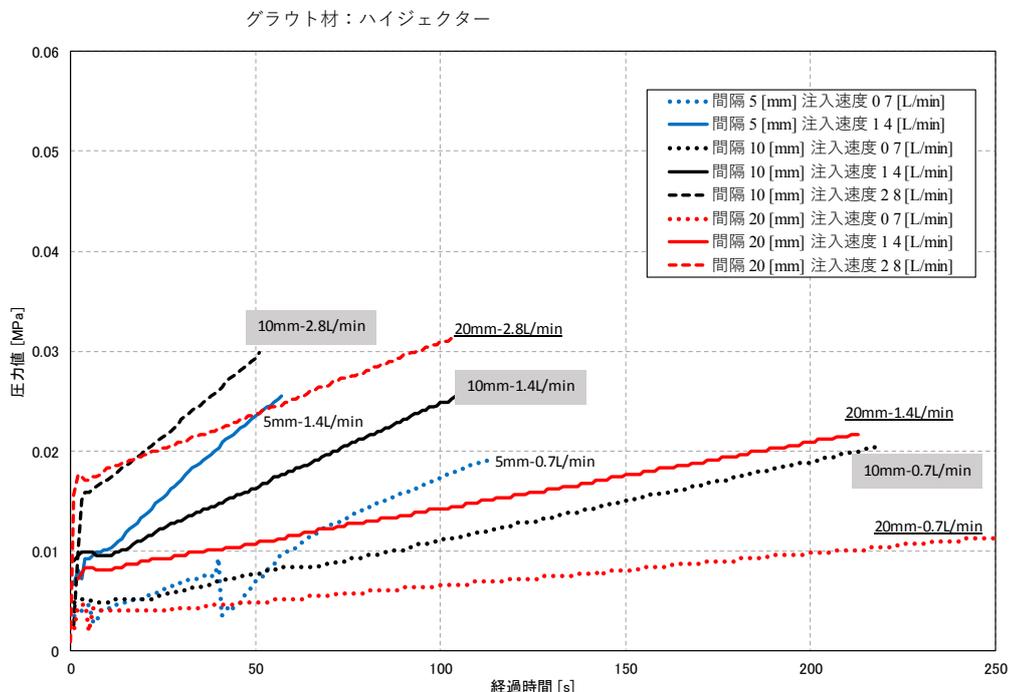


図 2.2-96 すき間充填材の充填時の経過時間と圧力値の関係（超低粘性型）

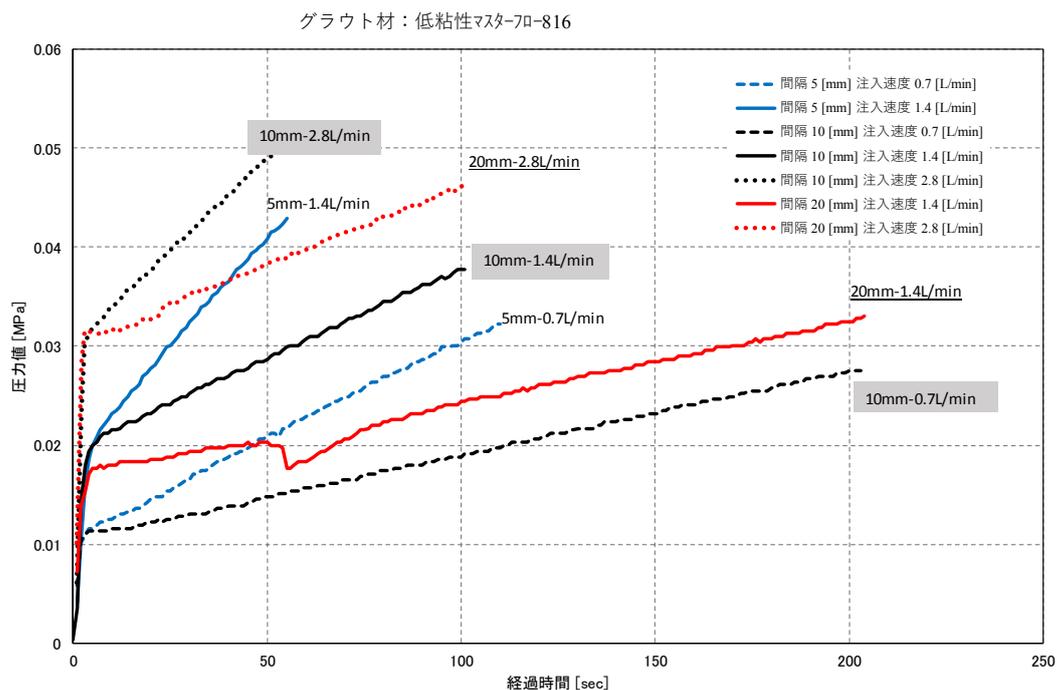


図 2.2-97 すき間充填材の充填時の経過時間と圧力値の関係（低粘性型）

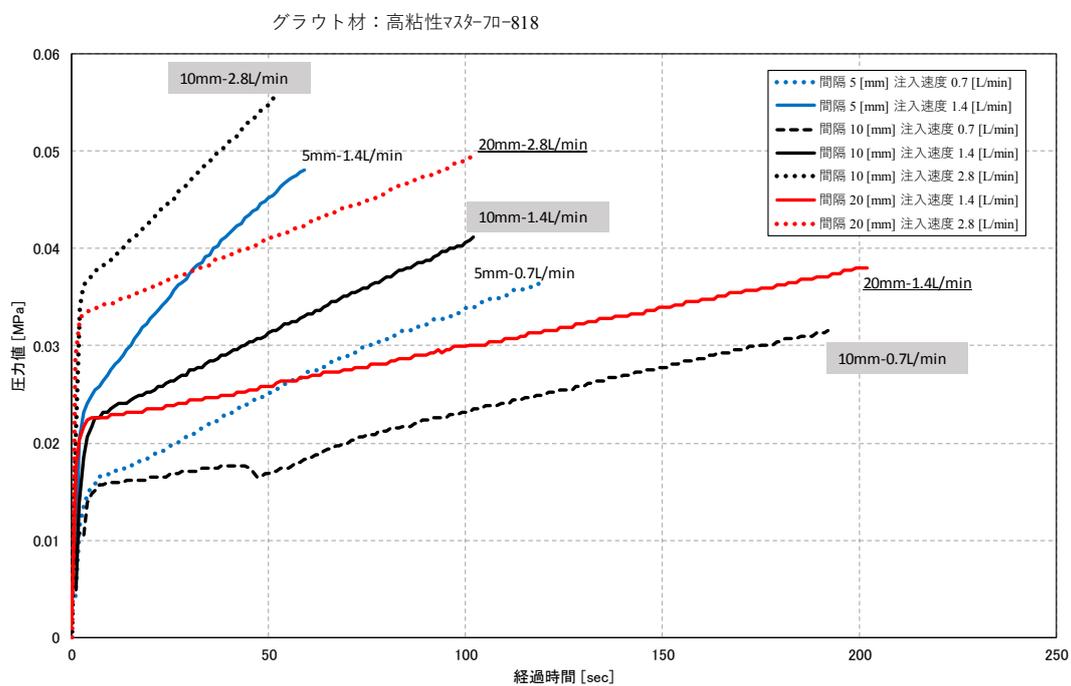


図 2.2-98 すき間充填材の充填時の経過時間と圧力値の関係（高粘性型）

すき間10mm一定・ゲラト材および注入速度の影響

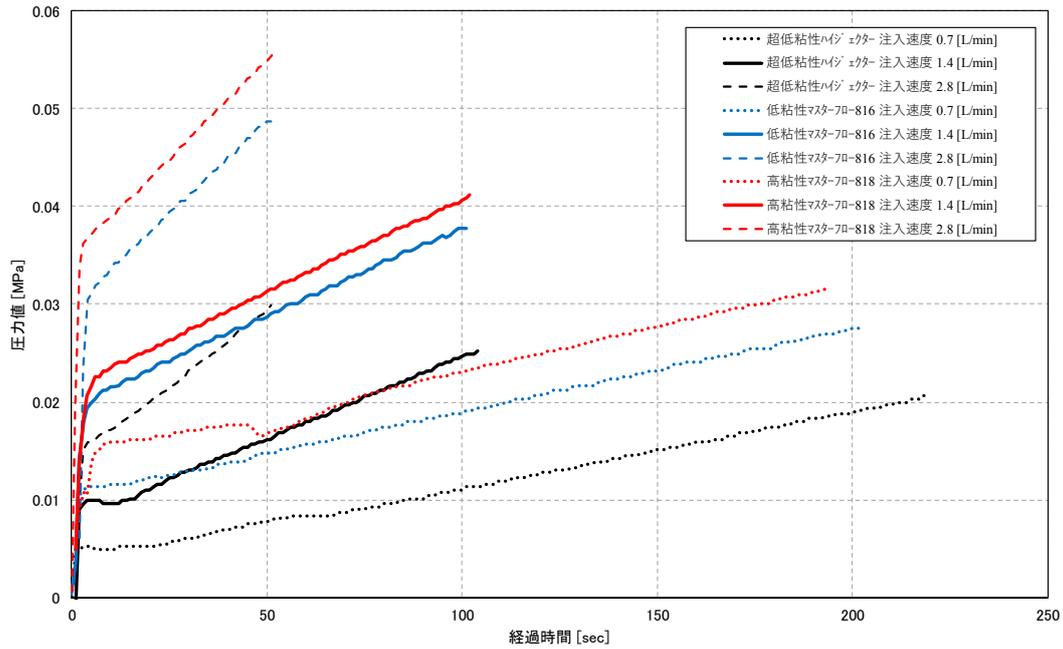


図 2.2-99 すき間充填材の充填時の経過時間と圧力値の関係（型枠のすき間幅 10mm）

注入速度 1.4 L/min 一定・ゲラト材および隙間間隔の影響

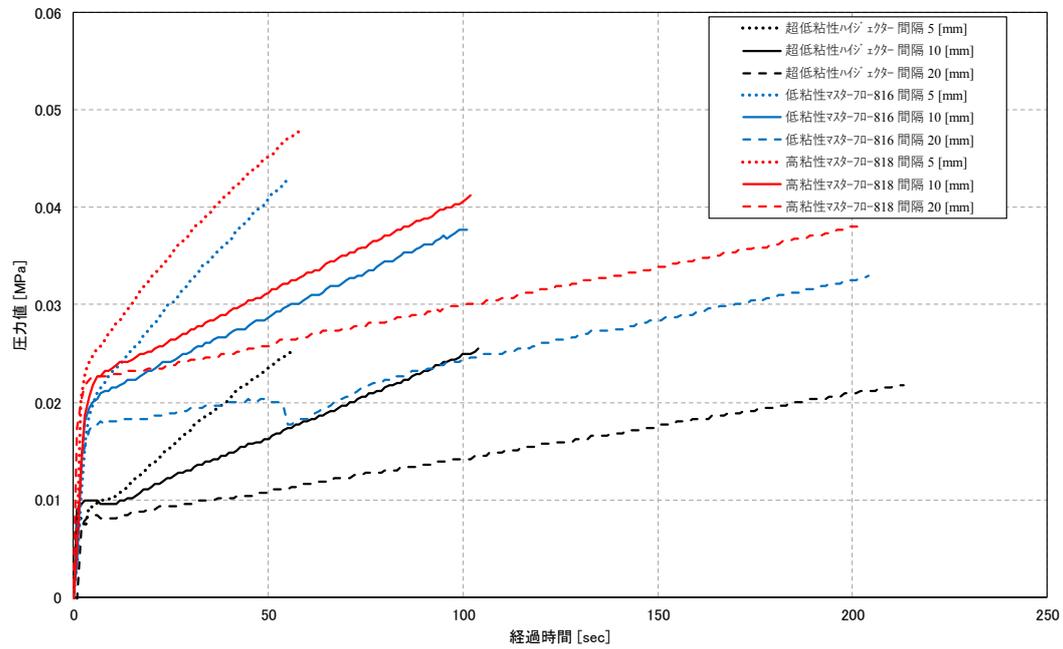


図 2.2-100 すき間充填材の充填時の経過時間と圧力値の関係（流量 1.4L/min）

1) 充填時形状

すき間充填材を型枠へ充填している時の状況の例を報告書本編に示した。なお、他の水準の充填状況は、ここに記した結果と併せ報告書末尾の付録に示す。結果を以下に示す。

- ・ すき間充填材として用いた3種類のPCグラウトについて、いずれのすき間幅及び流量においても、残留空気は認められなかった。型枠の下部からすき間充填材を充填して空気を追い出した効果と考えられる。
- ・ 超低粘性型については、今回の試験において最も狭いすき間幅5mmで、流量を1.4L/minとした場合にも、充填開始当初から80cmの高さまでほぼ水平にすき間充填材が立ち上がっていたことから、ドラム缶の外周約180cmでも十分外周への充填が可能であると考えられる。
- ・ 低粘性型及び高粘性型については、すき間幅5mmで、流量を0.7L/min及び1.4L/minとした場合に、充填当初はすき間充填材の界面が山なりになっていた。しかし、充填高さ20cmから80cmの高さまでほぼ水平にすき間充填材が立ち上がっていた。また、すき間幅10mmの場合は、すき間充填材流量を2.8L/minとしても充填開始当初から80cmの高さまでほぼ水平にすき間充填材が立ち上がっていた。したがって、低粘性型及び高粘性型においても、ドラム缶の外周約180cmでも充填可能であると考えられる。

以上の結果から、今回の試験水準の範囲では超低粘性型～高粘性型のいずれのすき間充填材を用いても充填が出来るものと考えられる。

ただし、今回の試験で最も狭いすき間は5mm幅であるが、廃棄体設置位置の偏りにより廃棄体と内部充填材のすき間幅が5mmより狭くなる可能性があり、今回の試験範囲よりも狭いすき間へのすき間充填材の充填可否の確認が必要である。また、内部充填材の乾燥コンクリート面、または、熱を持った廃棄体とすき間充填材が接触すると、注入中にすき間充填材の水分が失われて流動性が低下する可能性があり、今後、流動性及び充填性の確認が必要である。

4) すき間充填材の仕様の具体化のための検討

本項では、3)項で得られた試験結果より、すき間充填材として用いたPCグラウトを廃棄体パッケージのすき間充填に適用する際の留意点について検討した。また、すき間充填材からの持ち込み水量を検討した。その上で、今後の課題を整理した。

① PCグラウトを廃棄体パッケージのすき間充填に適用する際の留意点

(a) 流動性評価に適している測定項目

すき間充填材の流動性は、すき間への充填施工に際して、適切な管理に基づき所定の性能を達成することが必要な項目である。細野ら（細野ほか, 2015）は、「流下時間と塑性粘度、フロー値と降伏値の関係は線形であり、強い相関が認められた。これらにより、塑性粘度及び降伏値は、漏斗試験及びフロー試験という簡易的な試験方法により評価できることが確認された。」と述べている。施工時の品質管理及び施工管理に際して、どの測定項目が最も適切に流動性を測定できるかを検討した。

図 2.2-101 には P ロート流下時間と JP ロート流下時間の関係、図 2.2-102 には P ロート流下時間と SL フローの関係を示す。

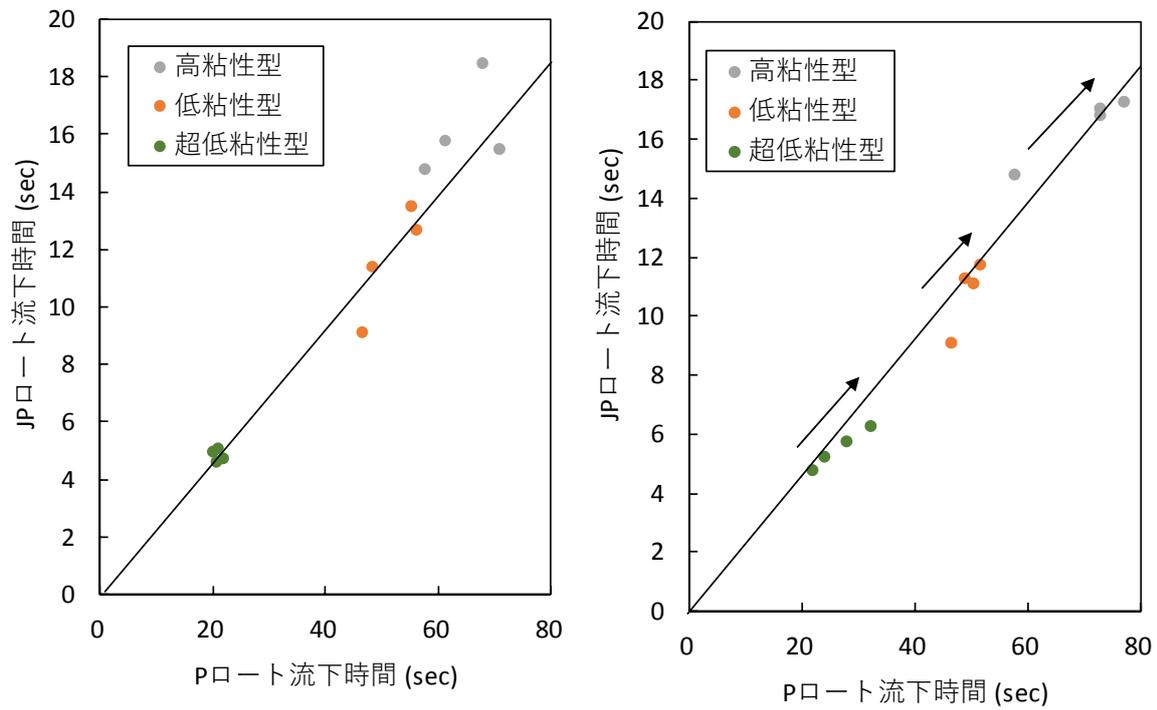


図 2.2-101 P ロート流下時間と JP ロート流下時間の関係
 (左図：練り上がり直後のデータ、右図：経時変化確認時のデータ)

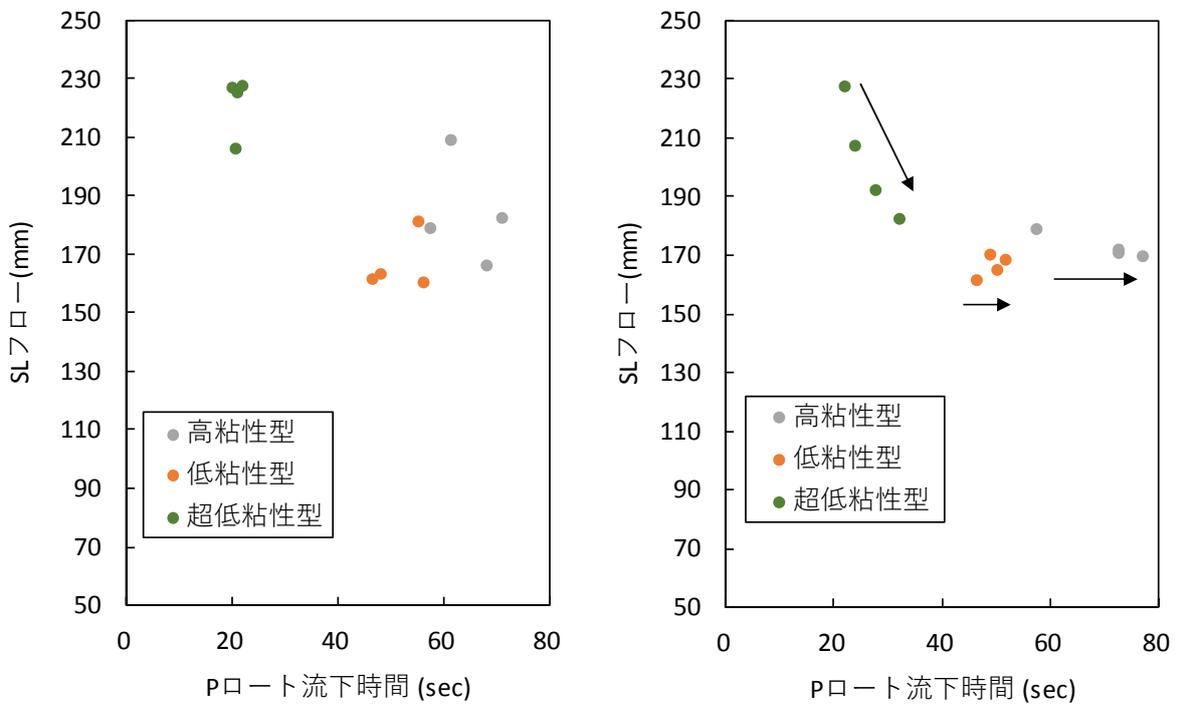


図 2.2-102 P ロート流下時間と SL フローの関係
 (左図：練り上がり直後のデータ、右図：経時変化確認時のデータ)

図 2.2-101 及び図 2.2-102 から得られた知見を以下に示す。

- ・ JPロート流下時間とPロート流下時間は相関が高い。これは、経時変化確認時のデータでも同様であった。
- ・ 降伏値と相関するSLフローは、粘性の指標であるロート流下時間との相関は低い。
- ・ 経時変化について、いずれのすき間充填材も粘性が上昇するが、降伏値は変化しない場合（高粘性、低粘性）場合もあった。

以上の知見は、既往の検討（細野ほか, 2015）と同様であった。

また、上記の知見を基に、品質管理及び施工管理における留意点を検討した結果を以下に記す。

- ・ 流動性は充填圧力などに関連する充填施工に重要な因子である。品質管理及び施工管理を経時変化への感度が低いSLフローを用いて行うことは、流動性の変化を感知できない可能性が高く、望ましくない。
- ・ 既往の検討（細野ほか, 2015）においては超低粘性型のような流下時間が短いすき間充填材について、流量が多いロートまたは流出管の内径が小さいロートを用いると水結合材比の影響が顕著に判定できるとしている。この事を参考にすると、JPロート流下時間は短いため、Pロート流下時間で管理した方が粘性の差異を顕著に検出できるため、品質管理及び施工管理の観点からは望ましいと考えられる。

(b) すき間充填時の圧力上昇

本試験においては種類の異なるすき間充填材を用いる事で、すき間充填材の粘性とすき間幅をパラメータとして、すき間への充填状況を確認した。2.2.3(3) 3) ②(b)にて記したすき間充填材の充填時の経過時間と圧力値の関係の概略は以下の通りである。

- ・ 充填開始時に圧力が急激に上昇した後は、直線的に圧力が上昇する傾向にあった。
- ・ 注入開始時の圧力の急激な上昇は、すき間充填材の粘性と流量が影響して値が変化しており、注入口の圧力損失と考えられる。
- ・ 充填中の圧力の上昇については、すき間幅及び流量に依存していた事から、注入中の圧力の上昇には型枠の壁面の影響は無いと判断される。

この結果に基づいて、施工時の留意点や課題を検討した結果を以下に示す。

- ・ 本試験の結果でも示されたように、すき間充填材の充填の際には注入口の圧力損失の影響が無視できないと考えられる。使用するすき間充填材の粘性や注入時の流量により圧力損失の値が変わるため、注入ポンプの能力の検討、注入口の設計などに留意が必要である。
- ・ 本試験においては、すき間充填材の充填時に型枠の壁面の影響は認められなかった。本試験においてはアクリル製の型枠を用いたが、廃棄体パッケージのすき間充填の際には、金属容器、ドラム缶、キャニスタなどの金属、及び、内部充填材のコンクリートが壁面となる。そのため、壁面の平滑さ、摩擦、乾燥状態が異なるため、今後検討が必要であると考えられる。

(c) 充填状況の確認方法

本試験においては、透明なアクリル製の型枠を用いる事で、充填状況の確認を目視にて行った。廃棄体パッケージのすき間を充填する際には、目視による確認は困難である。すき間充填材が十分に充填されずに残留空気が生じると、内部充填材と廃棄体との一体性の低下が懸念される。また、すき間充填材施工後の残留空気の確認及び補修には多大な労力が必要となる。

PC グラウトの充填検査では、従来から、シース管内の空隙率と注入量との対比による確認する方法が採用されており、廃棄体パッケージにおいても本法は適用可能である。また、充填する

すき間部に設置したセンサにより充填を確認する方法もあるが、廃棄体パッケージ内にセンサが残留することは望ましくないと考えられる。このほか、「PC グラウトの設計施工指針―改訂版―」（プレストレストコンクリート工学会, 2012）には、広帯域超音波法、衝撃弾性波法などの非破壊検査手法も開発されていることが記されている。また、「PC グラウトの設計施工指針―改訂版―」（プレストレストコンクリート工学会, 2012）には、充填性を流体解析による流動性確認などの手法が研究されていることも記されている。

廃棄体パッケージのすき間充填を行う際には、廃棄体パッケージの構成要素の一体化に悪影響を及ぼす空気の残留が無いことを、上記のような方法で確認することが必要となる可能性がある。

② すき間充填材からの水分持ち込み量の検討

廃棄体パッケージ内のすき間を充填するためにすき間充填材を使用することで、すき間充填材中の水分が廃棄体パッケージ内に持ち込まれる。本検討においては、すき間充填材に起因する水素ガスの影響を検討するにあたり、予備的検討として、本試験で使用した PC グラウトによる水分の持ち込み量を概算で見積もった。そして、NUMO-SC（原子力発電環境整備機構, 2018）で示されている廃棄体設置後に打設するモルタル充填材の水分量、及び、(2)で用いたコンクリートを後打設した場合の廃棄体パッケージ内充填材の水分量と比較した。

本検討では、廃棄体パッケージ B の(a)ドラム缶用と(b)キャニスタ用を対象とした。本すき間幅は今年度の試験で充填が可能である事が確認された 5mm とした。図 2.2-103 に示すように、各部分の寸法は NUMO-SC（原子力発電環境整備機構, 2018）に示されている数値を用いた。ただし、金属容器の隅角部、廃棄体の底部及び上部の内部充填材は考慮しなかった。また、キャニスタは円柱形として扱った。内部充填材を先打設方式で製作する場合は、図 2.2-103 の青色と黄色の部分が廃棄体パッケージ内充填材、赤色部分がすき間であり廃棄体設置後にすき間充填材を充填する部分となる。一方、廃棄体パッケージ内充填材をプレキャスト方式で製作する場合は、図 2.2-103 の黄色部分が内部充填材、青色と赤色部分がすき間であり廃棄体設置後にすき間充填材を充填する部分となる。なお、廃棄体パッケージ B の(a)ドラム缶用については、ドラム缶の最も幅が広い部分に対してすき間を設定したため、幅の狭い部分では設定値よりも広いすき間（左右均等だと仮定すると 30.5mm）が存在する。

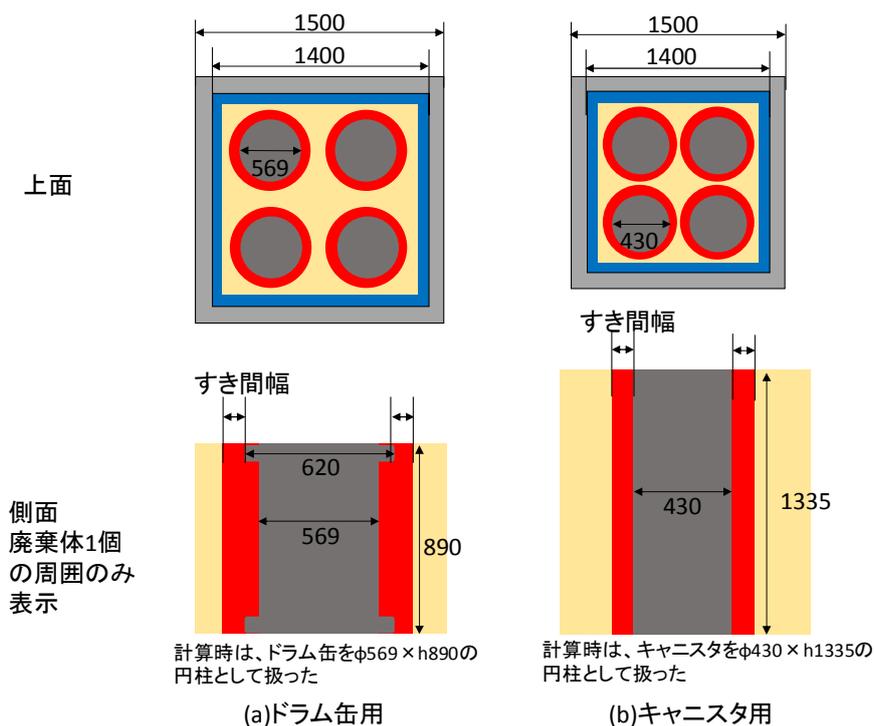


図 2.2-103 廃棄体パッケージ内の水分量の概算において仮定した廃棄体パッケージ
 黄色部分：内部充填材、青色部分：金属容器と内部充填材の間のすき間、赤色部分：廃棄体と内部充填材の間のすき間

すき間充填材からの持ち込み水量を算出する際には、表 2.2-48 に示した材例 7 日の硬化体の見かけ密度と水材料比から求めたすき間充填材の単位水量を用いた。また、比較対象としたモルタル充填材の水分量を求める際には、第 2 次 TRU レポート（電気事業連合会，核燃料サイクル開発機構，2005）の充填モルタルの単位水量の設定値を用いた。また、高流動コンクリートを後打設した場合の内部充填材の水分量を求める際には、(2)で用いた高流動コンクリートの単位水量を用いた。これらの単位水量の値を以下に記す。

充填モルタル：	単位水量 266kg/m ³
高流動コンクリート：	単位水量 175kg/m ³
超低粘性型：	単位水量 537kg/m ³
低粘性型：	単位水量 581kg/m ³
高粘性型：	単位水量 575kg/m ³

すき間充填材として用いた PC グラウトの単位水量には大きな差異は無いいため、ここでは、すき間充填材の中で最も単位水量多い低粘性型を検討した。また、本計算においては、すき間充填材に含まれる水は、フレッシュな状態から廃棄体と接触するためすべてが水素ガス発生源となると仮定した。また、モルタル及びコンクリート製廃棄体パッケージ内充填材について、乾燥による水分の低減は考慮しなかった。

廃棄体パッケージ内の水分量の概算値を表 2.2-56 に示す。

表 2.2-56 廃棄体パッケージ内充填材及びすき間充填材からの持ち込み水量の概算値

廃棄体 パッケージ	組立の方式 ^{注)}	材料	内部充填材の 体積(m ³)	すき間充填材の 体積(m ³)	水分量(kg)
(a)ドラム缶用	後打設方式	モルタル充填材	0.84	0	223
	後打設方式	高流動コンクリート製 内部充填材	0.84	0	147
	先打設方式 (すき間充填材使用)	高流動コンクリート製 内部充填材 + 低粘性型PCグラウト	0.64	0.20	230
	プレキャスト方式 (すき間充填材使用)	高流動コンクリート製 内部充填材 + 低粘性型PCグラウト	0.61	0.23	240
(b) キャニスタ用	後打設方式	モルタル充填材	0.84	0	224
	後打設方式	高流動コンクリート製 内部充填材	0.84	0	147
	先打設方式 (すき間充填材使用)	高流動コンクリート製 内部充填材 + 低粘性型PCグラウト	0.80	0.04	162
	プレキャスト方式 (すき間充填材使用)	高流動コンクリート製 内部充填材 + 低粘性型PCグラウト	0.77	0.07	174

注) 組立の方式は、図 2.2-32 に示した廃棄体パッケージの組立の方式である。

表 2.2-56 に示す様に、(b)キャニスタ用の廃棄体パッケージと比較して(a)ドラム缶用の廃棄体パッケージでは、持ち込み水量が多くなった。これは、ドラム缶で最も幅が広い縁の部分で廃棄体パッケージ内充填材に接触しない様すき間を設定したため、ドラム缶の幅が狭い胴体部分ですき間が広くなり、すき間充填材を大量に使用することが影響したことによる。

廃棄体パッケージ内充填材中の水分を減らすため、コンクリートを廃棄体設置前に打設（先打設方式）、または、廃棄体パッケージ内充填材をプレキャスト材として（プレキャスト方式）、廃棄体パッケージ内充填材を乾燥させて水分を低減することが想定されるが、後の廃棄体パッケージの組立作業を行うためすき間が必要となる。すき間の体積によっては、乾燥により廃棄体パッケージ内充填材から低減した水分を上回る水分をすき間充填材から持ち込む可能性があり、廃棄体パッケージ内充填材の乾燥度合いとすき間充填材からの持ち込み水量とのバランスについては、更に検討が必要である。なお、検討に際し、すき間充填から金属容器の上蓋設置までの期間に発生した水素ガスは、廃棄体パッケージ外に飛散させることが出来ることなど、廃棄体パッケージの組立工程を踏まえた検討が必要である。

(4) まとめ

本章では、廃棄体パッケージ内充填材の候補材料の更なる絞り込みと仕様の具体化を目的に、平成 30 年度の成果をふまえ、廃棄体パッケージの組立手順として考えられる 3 ケースで、施工性や製作性の観点から、廃棄体パッケージ内充填材として候補となるセメント系材料を、特殊コンクリートを含めて幅広く、施工方法を検討して絞り込みを行った。加えて、廃棄体パッケージ内充填材として製作可能な、候補となる配合を暫定的に選定し、それについて施工性や製作性、乾燥による水分の低減に係る試験を行うとともに、伝熱解析に有用な熱物性値を取得した。また、

取得したデータ等から廃棄体パッケージ内充填材の施工性や製作性を検討して仕様の具体化を検討するとともに、課題を抽出してとりまとめた。さらに、廃棄体パッケージの組立において構成要素間にすき間が発生する場合の対策技術として、セメント系材料でのすき間充填について検討した。得られた知見及び成果の概要、今後の検討課題を以下に記す。

1) 得られた知見及び成果の概要

本章で得られた知見及び成果の概要を以下に記す。

① 組立手順を考慮したパッケージ内部充填材の候補材料の検討

- ・水素ガス低減を目的とした乾燥工程の観点から、廃棄体パッケージ内充填材を粗骨材を入れたコンクリート配合にすると、充填モルタルに比べて初期含水率が低下し、みかけの拡散係数が増大するため、乾燥による水分逸散には有利であると考えられた。また、乾燥に伴い生じる変形及び幅の広いひび割れの制御の観点からも、粗骨材の存在により乾燥収縮ひずみが著しく低減されるため、廃棄体パッケージ内充填材としてコンクリートを使用することが有力と考えられた。
- ・遠隔封入性を考慮すると廃棄体パッケージ内充填材は自己充填性を持っていることが好ましいが、コンクリート配合とすると、粗骨材の混入により流動性が低下する可能性がある。そこで本検討では、バイブレータ等を用いた打設後の加振がない環境においても十分な充填性能を有するコンクリート（高流動コンクリート）配合を暫定的に選定し、流動性が十分に確保されていることを検証した。

② 廃棄体パッケージ内充填材の製作性の検討

(a) 施工性、遠隔封入性

- ・想定される3つの組立手順のうち、遠隔封入性が求められ、最も厳しい製作条件である「後打設方式」を想定した組立手順について、60cm角廃棄体パッケージ内充填材試験体（無筋、有筋、繊維補強材混入の計3体）の試作により施工性を確認した。
- ・暫定的に選定した高流動コンクリートが十分高い流動性を有していることを確認した上で、バイブレータ等の加振は行わずに打設した結果、何れの60cm角廃棄体パッケージ内充填材試験体も成形後の状態は概ね良好であったが、試験体の側面の一部で充填不良箇所が確認された。また、最終的に打設面を平坦にするにはコテ仕上げが必要であった。このことから、後打設方式において高流動コンクリートを適用しても、若干の振動締固めやフィニッシャー等を用いた補助工法による平坦仕上げ工程が最終的に必要であると考えられた。
- ・廃棄体パッケージモデルを対象とした伝熱解析に資する目的で、選定したコンクリートの熱物性値（熱伝導率、熱拡散率及び比熱）を取得した。測定の結果、熱伝導率は $1.845\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 、熱拡散率は $0.003259\text{m}^2/\text{h}$ 、比熱は $857.8\text{J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$ であった。

(b) 寸法精度

- ・加振を行わない条件でも十分な寸法精度を確保できることを確認するために、成形後の60cm角廃棄体パッケージ内充填材試験体の寸法を測定し、設計値と比較した。測定の結果、設計値からの誤差は何れの試験体も水平方向で $\pm 1.60\text{mm}$ 以内、鉛直方向で $\pm 4.0\text{mm}$ 以内に収まっており、廃棄体封入容器の格納、及び鋼製容器に納めるために十分な寸法精度を有していると考えられた。

(c) 構造健全性

- ・暫定的に選定した高流動コンクリートについて、十分な構造健全性を有していることを確認

するために、圧縮強度及び静弾性係数を取得した。圧縮強度は暫定的に設定したコンクリートの設計強度（30MPa 以上）を上回っており、圧縮強度、静弾性係数ともに、十分に構造健全性を満たす結果であった。

(d) 乾燥工程時の水分逸散時間

- ・ 選定したコンクリートの乾燥工程時における水分逸散時間を推定するために、 $\phi 100 \times 200\text{mm}$ の円筒試験体を用いて、 80°C 環境における乾燥材齢 14 日までの質量減少量を取得した。乾燥期間中、含水率の低下速度は徐々に緩慢になり乾燥材齢 14 日時点で収束の兆しが見られた。また、乾燥材齢 14 日間時点における水分逸散量は、単位水量に対して繊維無しでは 45.5%、繊維有りでは 48.6%、自由水に対して繊維無しでは 85.7%、繊維有りでは 91.0% であった。なお、水分逸散挙動に及ぼす繊維の影響はほとんど見られなかった。
- ・ 寸法が大きくなった場合の水分逸散時間を確認するために、1)項で製作した 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体を用いて、 80°C 環境における乾燥材齢 14 日までの試験体の温度及び質量変化を測定した。何れの試験体も乾燥工程開始から質量減少が継続しているが、乾燥材齢 14 日でも質量減少は収束せず、更なる水分逸散を見込める結果であった。この結果は $\phi 100 \times 200\text{mm}$ の円筒試験体の結果とは異なっており、水分逸散が試験体の形状に依存することが示唆された。

(e) 乾燥工程時に生じる変形及び粗大なひび割れの制御

- ・ 選定したコンクリートの乾燥工程時における収縮挙動を確認するため、 $100 \times 100 \times 400\text{mm}$ の角柱試験体を用いて 80°C 環境における乾燥収縮試験を実施した。測定の結果、乾燥工程を通して乾燥収縮ひずみは緩やかに進行したが、乾燥 14 日時点で 60×10^{-6} 程度であり、一般的なコンクリートの乾燥収縮ひずみ量と比較して小さい値であった。この要因として、混和材として用いた石灰石微粉末が乾燥収縮ひずみを抑制した、低水粉体比の配合のため自己収縮に比べ乾燥収縮ひずみが小さい、水分拡散係数が小さいため乾燥収縮ひずみが十分に進展していないことが考えられた。
- ・ 乾燥工程時に生じる廃棄体パッケージ内充填材の変形及び幅の広いひび割れを確認するために、変形抑制及び変状制御の条件が異なる 60cm 角廃棄体パッケージ内充填材試験体（無筋、有筋及び繊維補強材）について、 80°C 環境における変形量の計測ならびに乾燥に伴う変状（ひび割れ）の外観観察を実施した。なお変状の外観観察には、目視による観察の他、デジタル画像相関法（DIC）を採用した。無筋の試験体で最も多くのひび割れが発生し、有筋と繊維補強材のひび割れ発生数は、繊維の方がやや小さいものの概ね同程度であった。このことから、試験体に鉄筋や鋼繊維等の拘束材を混入することで、ひび割れの発生を抑制できることが確認された。

③ すき間充填材の要素試験

- ・ 組立手順から、廃棄体パッケージ内に生じる可能性のあるすき間を整理し、生じるすき間に対するすき間充填の施工方法を検討した。また、廃棄体パッケージのすき間を充填する材料に要求されるであろう機能から、すき間充填材に求められる性能は、以下の通りとすることが望ましいと考えられた。

- A) 流動性
- B) 材料分離抵抗性
- C) 無収縮性
- D) 材料強度特性
- E) 放射性物質と錯形成しない事

- F) 放射性物質を収着する事
- G) 水の持込みが出来るだけ少ない事

そのうち、A) ~D) は、一般土木建築用に求められる性能と合致した。加えて、廃棄体パッケージのすき間充填に用いるには、E) ~G) が必要と考えられる。

- ・ 要求性能に基づいて、すき間充填材として粘性の異なるセメント系材料を選定して用いた。空気抜きを考慮してすき間の下部から注入する事を想定し、すき間の幅を変えた透明アクリル型枠への充填試験を行った。また、同時に、選定したすき間充填材の性状を把握した（フレッシュ性状試験、硬化性状試験、鉛直管試験）。その結果、以下のように考えられた。
 - ・ 試験の範囲では、すき間幅5mmに対して、高粘性タイプでもすき間を充填できると考えられた。
 - ・ 品質管理及び施工管理においては、経時変化への感度が低いSLフローより、経時変化への感度が高いロート流下時間が重要である。また、JPロート流下時間は短く、Pロート流下時間の方が粘性の差異を顕著に検出できるため望ましい。
 - ・ 用いるすき間充填材によっては、流動性の経時変化、発熱による流動性の低下、充填後に上部で強度が低下する可能性があるため、選定の際に確認が必要である。
- ・ 廃棄体パッケージ内充填材中の水分を減らすため、コンクリートを廃棄体設置前に打設、または、廃棄体パッケージ内充填材をプレキャスト材として乾燥させることが想定されるが、作業上のすき間が必要となる。すき間の体積によっては、乾燥により内部充填材から低減した水分量を上回る水分をすき間充填材から持ち込む可能性がある。

2) 今後の検討課題

本章の検討で抽出された課題を以下に整理する。

① 廃棄体パッケージ内充填材の製作性の検討

(a) 施工性、遠隔封入性

- ・ 平成 31 年度は、想定される 3 つの組立手順のうち、最も厳しい製作条件である「後打設方式」について施工性を確認したが、「先打設方式」及び「プレキャスト方式」についても、実際の組立手順を想定した要素試験により、それぞれの施工性を確認することが望ましい。
- ・ 平成 31 年度は遠隔封入性が求められる「後打設方式」を想定し、廃棄体パッケージ内充填材として高流動コンクリートの配合を暫定的に選定したが、「先打設方式」及び「プレキャスト方式」では遠隔封入性は求められていない。このため、乾燥工程における水分逸散も考慮した、それぞれの組立手順で要求される性能に応じたコンクリート配合とすることが望ましい。

(b) 乾燥工程時の水分逸散時間

- ・ 廃棄体パッケージ内充填材の含水率をどの程度に設定するかは水素ガス発生量が基準となることから、水素ガス発生量の目安が設定されていない現時点では、任意の乾燥期間における水分逸散量を予測する手法を構築することが望ましい。また、「先打設方式」や「後打設方式」では、「プレキャスト方式」と比較して体積あたりの乾燥面積が小さいことから、数値解析によって乾燥面積の影響を推定する手法の構築が望まれる。
- ・ コンクリート中の物質移動の温度依存性について、既往研究ではアレニウス則を考慮して指数形で表現することが多いが、実際の数値解析に使用される諸係数は、要素実験を再現するような形でフィッティングされているのが実情であり、乾燥工程の温度から乾燥時間を定量的に予測することは現状では困難である。そのため、水分逸散量の予測を数値解析によって

実施する場合には、同様の配合条件によって作製した要素試験体により実験的に見かけの拡散係数を取得することが望ましい。

(c) 乾燥工程時に生じる変形及び幅の広いひび割れの制御

- ・無筋コンクリートを使用する場合、「プレキャスト方式」では自己収縮が進展する期間にほとんど外部拘束体と接触しないため、自己収縮による有害なひび割れの発生の可能性は小さいものの、「先打設方式」や「後打設方式」では、鋼製容器が外部拘束となり得るため、過度な貫通ひび割れが誘発される可能性がある。ひび割れの発生は、廃棄体パッケージ内充填材に期待される地下水の浸入抑制効果、及び地下水に溶出した放射性物質の収着効果を著しく損ねる可能性がある。構成容器による外部拘束を模擬した試験体を製作して乾燥試験を行い、水分移動の挙動確認と併せて、乾燥に伴い生ずる変形挙動も確認することが望ましい。
- ・本検討において試験体に生じたひび割れは最大でも 0.1mm 程度であったこと、ひび割れの主たる要因は何れも内部拘束ひび割れと推定されることから貫通ひび割れが生じている可能性は低く、一般構造物においてはほとんど問題にならない程度の劣化である。しかしながら、千年オーダーの解析を実施する場合には、劣化状態の見かけの水分拡散係数を実験的に取得しておく方が望ましいと考えられる。

② すき間充填材の要素試験

- ・廃棄体パッケージ内充填材中の水分を減らすため、コンクリートを廃棄体設置前に打設、または、廃棄体パッケージ内充填材をプレキャスト材として乾燥させることが想定されるが、作業上のすき間が必要となる。
すき間の体積によっては、乾燥により廃棄体パッケージ内充填材から低減した水分を上回る水分をすき間充填材から持ち込む可能性があり、内部充填材の乾燥度合いとすき間充填材からの持ち込み水量とのバランスについては、更に検討が必要である。
- ・実際の廃棄体パッケージ内のすき間充填に際し、以下が課題と考えられる。
 - 廃棄体パッケージ内充填材の乾燥コンクリート面、または、熱を持った廃棄体とすき間充填材が接触すると、注入中にすき間充填材の水分が失われて流動性が低下する可能性があり、今後、流動性及び充填性の確認が必要である。
 - すき間の下部から注入する事で空気が追い出されるが、廃棄体パッケージのすき間の充填の実施工時には、廃棄体パッケージの構成要素の一体化に悪影響を及ぼす空気の残留が無いことの確認が必要となる可能性がある。そのため、すき間の充填時に空気の残留の無いことの確認方法の検討をしておくことが望ましい。
 - 実際の廃棄体パッケージの製作では、操作上の誤差などにより廃棄体設置位置に偏りが生じ、数mm以下の狭いすき間への充填が必要となる可能性があるため、今回の試験範囲よりも狭いすき間へのすき間充填材の充填可否の確認が必要である。
 - 実際に廃棄体パッケージ内のすき間充填を実現できる事の確認が必要である。そのための方法としては、スケールアップ試験が考えられる。なお、スケールアップ試験は水準を多く設定することが困難なため、シミュレーションの併用も必要であると考えられる。

2.2.4 セメント系材料の熱変質による物性値への影響確認試験

セメント系材料は TRU 廃棄物処分場の人工バリアに多用され、熱による変質の影響が人工バリアの長期挙動へ及ぶ可能性があることから、平成 25 年度～29 年度の「人工バリア材料長期挙動評価・人工バリア評価の初期条件の設定」(原環センター, 2018) おいて、セメント系材料の熱変質条件について検討した。その結果、50℃以上の環境条件で C-S-H が結晶化する可能性があること、結晶化は環境温度とセメント系材料を構成する材料特性に影響されることが確認された(原環センター, 2018)。また、廃棄体の発熱による影響が廃棄体パッケージ内充填材に及ぶ可能性も考えられる。

本検討では、セメント系材料の熱変質による特性値への影響を確認し、必要に応じ熱変質の抑制対策を提示することを目的とする。平成 30 年度は、セメント系材料の機械的特性及び物質移行特性を支配する空隙特性への C-S-H のトバモライト化の影響を把握するために、一定温度(20、50、80℃)で保管を継続しているモルタル試験体の分析を実施し、結晶化挙動と物性値への影響について検討した。その結果、明確な指標となる XRD によるトバモライトのピークはいずれの試料においても確認されなかった。一方、50℃及び 80℃の試料においては、長さ変化が継続的に生じていること、C-S-H が板状の組織へと変化したことから、結晶化過程にあると判断された。平成 31 年度は、定温度試験を継続しているモルタル試験体の測定を実施した。また、セメント系材料の熱変質の加速試験方法を検討した。

(1) モルタル硬化体による定温度試験

セメント系材料は高温環境下に長期間置かれると C-S-H の結晶化により密度に変化が生じることが推測される。この密度変化により微細空隙構造が変化し、硬化体の物理的性状に影響を及ぼすことも考えられる。しかし、硬化体における C-S-H の結晶化は、年単位での期間に亘る反応であることが推測される。そこで、本検討では、モルタル試料の密度変化及び空隙構造の変化を長さ変化の値として把握することにより、長期にわたる温度影響のデータを取得することを目的とした。

環境温度 80℃以下で C-S-H がトバモライトへと変化した硬化体を作製するために、Si 源となるシリカ微粉末を混合したモルタル硬化体を平成 27 年度及び平成 28 年度に作製した。モルタル硬化体では、シリカ微粉末と砂との影響を区別するために石灰石骨材を使用している。平成 31 年度は継続して実施しているモルタルの長さ変化データを取得した。

1) 試験方法

① モルタル試料

モルタル硬化体による定温度試験条件を表 2.2-57 に示す。平成 31 年度の測定対象試料を表 2.2-58 に示す。OPC 硬化体は材齢約 4 年(水準表記 4y)、混合セメント硬化体は材齢約 2 年(水準表記 2y) 及び約 2.5 年(水準表記 3y) を分析対象とした。

表 2.2-57 モルタル硬化体の定温度試験条件

項目	条件
セメントの種類	①普通ポルトランドセメント(OPC)
	②FAC15[OPC にフライアッシュ 15%混合]
	③FAC30[OPC にフライアッシュ 30%混合]
	④SC10[OPC にシリカフューム 10%混合]
シリカ微粉末	シリカ微粉末(SiO ₂)：粒径 4μm、高純度化学社製の試薬
砂	石灰石砂
モルタル配合	セメントにシリカ微粉を 40mass%混合, 水/紛体比=50mass%, 砂/ペースト=1.0 (vol.)
前養生	①：20℃、水中養生 3 ヶ月 ②, ③, ④：20℃、水中養生 6 ヶ月
形状	モルタル：4×4×16cm
温度条件	20℃、50℃、80℃
定温度試験	水中養生

表 2.2-58 モルタル硬化体における評価試料の一覧

セメント	温度(℃)	初期試料	1M	3M	6M	1y	2y	2.5y	(4y)
OPC	20	●	●	●	●	●	●	●(3y)	○
	50	●	●	●	●	●	●	●(3y)	○
	80	●	●	●	●	●	●	●(3y)	○
FAC15	20	●	●	●	●	●	○	○	
	50	●	●	●	●	●	○	○	
	80	●	●	●	●	●	○	○	
FAC30	20	●	●	●	●	●	○	○	
	50	●	●	●	●	●	○	○	
	80	●	●	●	●	●	○	○	
SC10	20	●	●	●	●	●	○	○	
	50	●	●	●	●	●	○	○	
	80	●	●	●	●	●	○	○	

●：実施済，○：2019 年度実施，空白：次年度以降に実施

② 試験方法

(a) モルタル硬化体質量測定

供試体間で大きな差がなく、均一な供試体であるか確認するため、モルタル硬化体の質量を 0.01g まで測定した。

(b) モルタル硬化体による長さ変化

モルタル硬化体の長さ変化をコンパレータ法により測定した。モルタル硬化体の長さ変化測定では、供試体のゆがみなどの影響を考慮するため、供試体 1 検体につき 4 方向（打設面を上にも正及び逆方向、打設面を手前にも正及び逆方向）から測定した。最小値は 0.01mm である。長さ変化の測定方向を図 2.2-104 に示す。

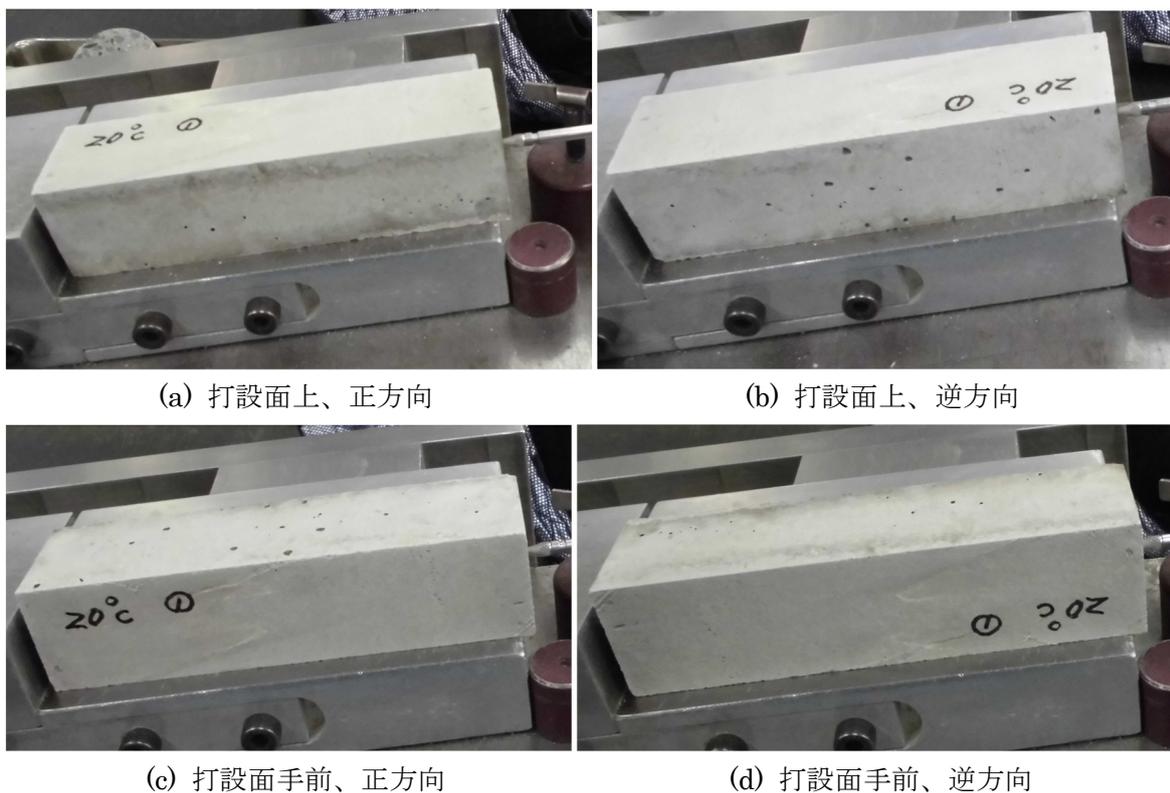


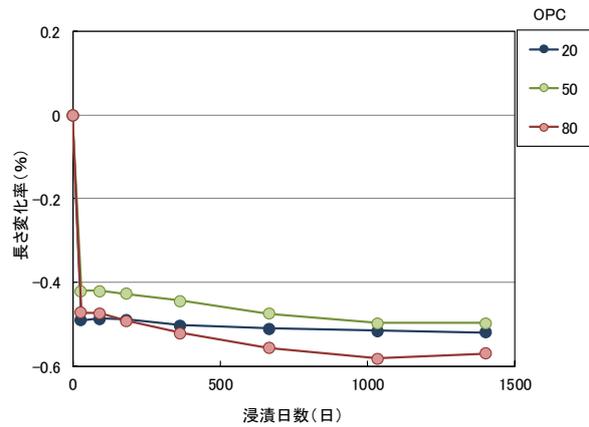
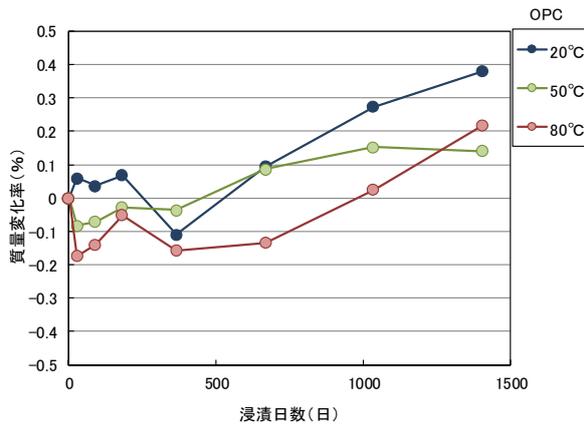
図 2.2-104 長さ変化の測定方向

2) モルタル硬化体の試験結果

モルタル硬化体の質量変化率及び長さ変化率を図 2.2-105～図 2.2-108 に示す。測定値は表 2.2-59～表 2.2-62 に示す。

OPC 硬化体の質量は、20℃、80℃では増加し、50℃の場合は、3 年と比較すると質量変化は見られなかった。FAC15、SC10 硬化体の質量変化においては、20℃及び 50℃では増加の傾向が見られ、80℃では、2 年から 2.5 年にかけて減少する方向であった。FAC30 では、20℃では増加、50℃では変化が見られず、80℃の場合は減少する傾向が見られた。定温度試験においては、いずれの温度においても水中にて養生を継続し、養生水の蒸発による乾燥は受けていないものと考えている。乾燥や養生水への成分の溶脱などの影響を確認するためデータを取得しているが、試験が長期間となっているため、温度の違いに係わらず継続的に質量が増加する場合には炭酸化の影響を考慮する必要があるものと考えられる。

長さ変化の場合、OPC 硬化体の 20℃では定温度試験開始 1 ヶ月に大きく減少しているがその後変化が見られなかった。50℃及び 80℃では、マイナス方向に継続的に変化する傾向が見られていたが、3 年から 4 年にかけては変化が見られなかった。FAC15、FAC30 及び SC10 の場合、20℃及び 50℃では、長さ変化はほとんど見られなかった。80℃では、いずれの試料においてもマイナス方向への変化が継続していた。



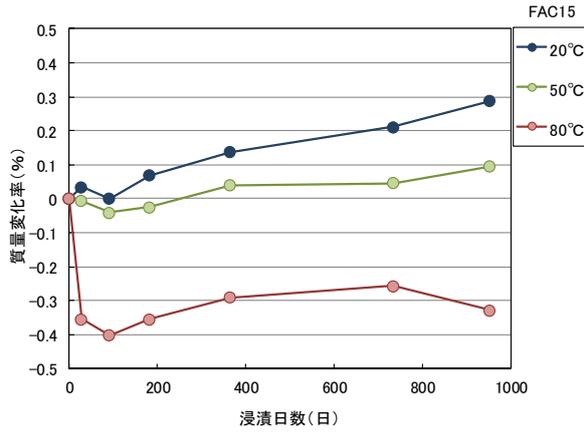
(a) 質量変化

(b) 長さ変化率

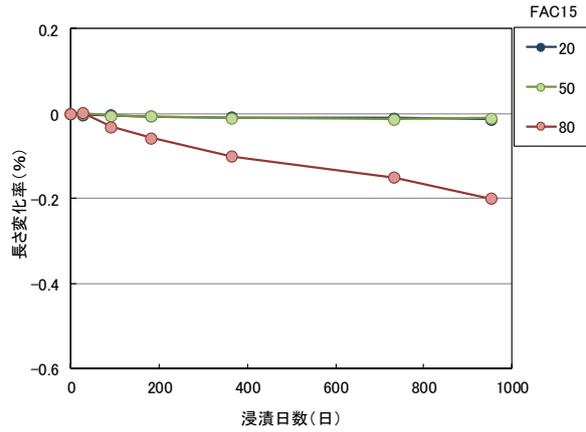
図 2.2-105 OPC モルタル硬化体の質量変化、長さ変化率

表 2.2-59 OPC モルタル硬化体の測定結果

OPC		4y							
温度	N=	質量測定		長さ変化(mm)					
		質量(g)	変化率(%)	打設面 上		打設面 手前		変化量 Ave.	平均 変化量
				正	逆	正	逆		
20°C	①	583.78	0.39	-0.761	-0.813	-0.788	-0.859	-0.805	
	②	582.45	0.33	-0.749	-0.702	-0.797	-0.759	-0.752	-0.831
	③	583.94	0.41	-0.887	-0.915	-0.961	-0.977	-0.935	
	Ave.		0.38					変化率(%)	-0.5192
50°C	①	577.84	0.17	-0.802	-0.801	-0.797	-0.826	-0.807	
	②	576.21	0.12	-0.851	-0.857	-0.843	-0.851	-0.851	-0.796
	③	577.13	0.13	-0.733	-0.707	-0.753	-0.728	-0.730	
	Ave.		0.14					変化率(%)	-0.497
80°C	①	578.16	0.22	-0.858	-0.852	-0.918	-0.813	-0.860	
	②	579.13	0.23	-0.869	-0.932	-0.949	-0.978	-0.932	-0.912
	③	577.19	0.21	-0.934	-0.937	-0.942	-0.957	-0.943	
	Ave.		0.22					変化率(%)	-0.570



(a) 質量変化

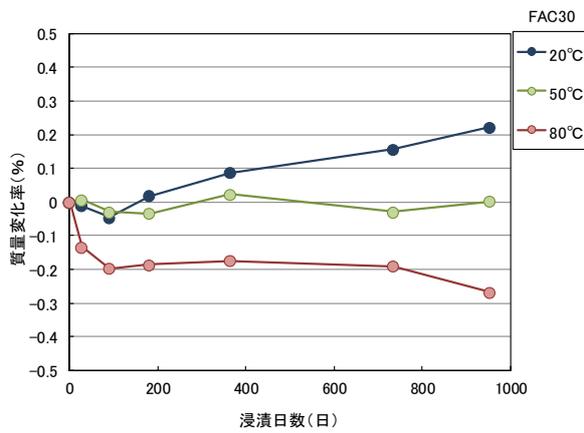


(b) 長さ変化率

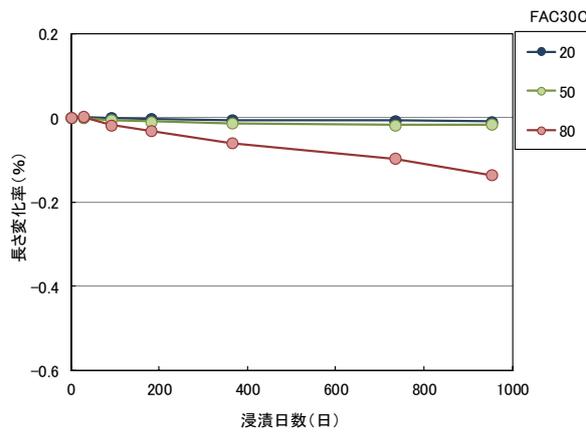
図 2.2-106 FAC15 モルタル硬化体の質量変化、長さ変化率

表 2.2-60 FAC15 モルタル硬化体の測定結果

FAC15		2y							2.5y								
温度	N=	質量測定		長さ変化(mm)					平均 変化量	質量測定		長さ変化(mm)					平均 変化量
		質量(g)	変化率(%)	打設面 上		打設面 手前		変化量 Ave.		質量(g)	変化率(%)	打設面 上		打設面 手前		変化量 Ave.	
				正	逆	正	逆					正	逆	正	逆		
20°C	①	583.60	0.21	-0.016	-0.013	-0.013	-0.014	-0.014		584.03	0.28	-0.021	-0.016	-0.017	-0.019	-0.018	
	②	584.10	0.21	-0.015	-0.014	-0.017	-0.019	-0.016	-0.017	584.50	0.27	-0.017	-0.016	-0.019	-0.022	-0.019	-0.020
	③	582.40	0.22	-0.023	-0.017	-0.018	-0.021	-0.020		582.91	0.31	-0.025	-0.021	-0.018	-0.023	-0.022	
	Ave.		0.21				変化率(%)	-0.0104			0.29				変化率(%)	-0.0122	
50°C	①	574.10	0.02	-0.021	-0.018	-0.021	-0.019	-0.020		574.28	0.05	-0.016	-0.013	-0.016	-0.015	-0.015	
	②	577.60	0.07	-0.017	-0.014	-0.013	-0.019	-0.016	-0.019	577.98	0.14	-0.014	-0.010	-0.011	-0.016	-0.013	-0.016
	③	576.40	0.05	-0.021	-0.025	-0.022	-0.021	-0.022		576.70	0.10	-0.020	-0.021	-0.022	-0.020	-0.021	
	Ave.		0.05				変化率(%)	-0.012			0.10				変化率(%)	-0.010	
80°C	①	573.10	-0.24	-0.215	-0.246	-0.219	-0.234	-0.229		572.62	-0.33	-0.329	-0.339	-0.310	-0.316	-0.324	
	②	571.50	-0.28	-0.266	-0.282	-0.271	-0.269	-0.272	-0.239	571.06	-0.36	-0.342	-0.358	-0.343	-0.349	-0.348	-0.320
	③	573.80	-0.24	-0.256	-0.239	-0.213	-0.163	-0.218		573.47	-0.30	-0.340	-0.319	-0.227	-0.263	-0.287	
	Ave.		-0.26				変化率(%)	-0.150			-0.33				変化率(%)	-0.200	



(a) 質量変化

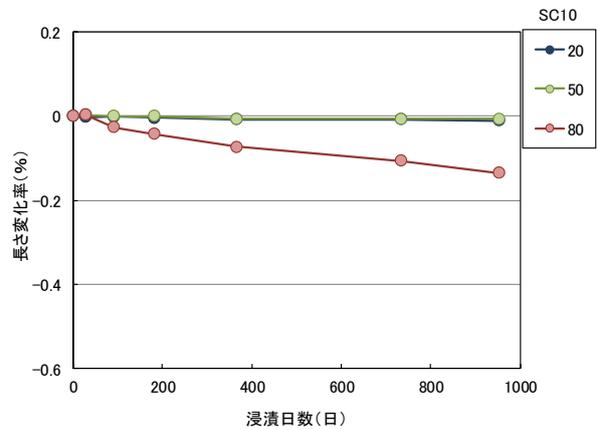
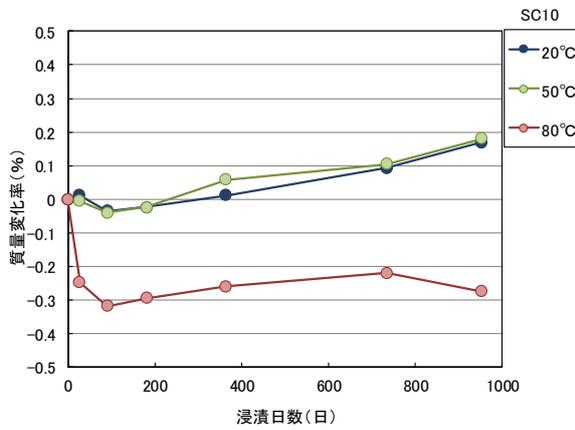


(b) 長さ変化率

図 2.2-107 FAC30 モルタル硬化体の質量変化、長さ変化率

表 2.2-61 FAC30 モルタル硬化体の測定結果

FAC30		2y								2.5y							
温度	N=	質量測定		長さ変化(mm)						質量測定		長さ変化(mm)					
		質量(g)	変化率(%)	打設面 上		打設面 手前		変化量 Ave.	平均 変化量	質量(g)	変化率(%)	打設面 上		打設面 手前		変化量 Ave.	平均 変化量
				正	逆	正	逆					正	逆	正	逆		
20°C	①	575.90	0.16	-0.008	-0.012	-0.008	-0.010	-0.010		576.37	0.24	-0.013	-0.018	-0.012	-0.014	-0.014	
	②	576.50	0.16	-0.014	-0.017	-0.016	-0.019	-0.017	-0.011	576.80	0.21	-0.018	-0.021	-0.020	-0.023	-0.021	-0.016
	③	572.60	0.16	-0.016	0.010	-0.010	-0.015	-0.008		572.95	0.22	-0.020	0.006	-0.015	-0.019	-0.012	
	Ave.		0.16					変化率(%)	-0.0070		0.22					変化率(%)	-0.0097
50°C	①	575.60	-0.03	-0.025	-0.033	-0.027	-0.031	-0.029		575.70	-0.02	-0.022	-0.030	-0.023	-0.030	-0.026	
	②	577.40	-0.02	-0.029	-0.024	-0.028	-0.021	-0.026	-0.027	577.62	0.02	-0.026	-0.020	-0.025	-0.018	-0.022	-0.025
	③	577.20	-0.03	-0.029	-0.025	-0.029	-0.027	-0.028		577.42	0.00	-0.027	-0.023	-0.027	-0.025	-0.026	
	Ave.		-0.03					変化率(%)	-0.017		0.00					変化率(%)	-0.015
80°C	①	570.20	-0.23	-0.148	-0.200	-0.169	-0.194	-0.178		569.82	-0.29	-0.174	-0.267	-0.201	-0.259	-0.225	
	②	573.90	-0.21	-0.105	-0.121	-0.265	-0.178	-0.167	-0.154	573.48	-0.28	-0.217	-0.221	-0.332	-0.237	-0.252	-0.218
	③	577.70	-0.14	-0.111	-0.107	-0.136	-0.115	-0.117		577.19	-0.23	-0.160	-0.160	-0.214	-0.172	-0.177	
	Ave.		-0.19					変化率(%)	-0.096		-0.27					変化率(%)	-0.136



(a) 質量変化

(b) 長さ変化率

図 2.2-108 SC10 モルタル硬化体の質量変化、長さ変化率

表 2.2-62 SC10 モルタル硬化体の測定結果

SC10		2y								2.5y							
温度	N=	質量測定		長さ変化(mm)						質量測定		長さ変化(mm)					
		質量(g)	変化率(%)	打設面 上		打設面 手前		変化量 Ave.	平均 変化量	質量(g)	変化率(%)	打設面 上		打設面 手前		変化量 Ave.	平均 変化量
				正	逆	正	逆					正	逆	正	逆		
20°C	①	576.10	0.10	-0.019	-0.010	-0.016	-0.006	-0.013		576.54	0.18	-0.025	-0.018	-0.020	-0.009	-0.018	
	②	571.80	0.07	-0.021	-0.014	-0.015	-0.011	-0.015	-0.013	572.15	0.13	-0.023	-0.020	-0.019	-0.019	-0.020	-0.019
	③	577.40	0.10	-0.010	-0.011	-0.014	-0.009	-0.011		577.94	0.20	-0.014	-0.020	-0.020	-0.016	-0.018	
	Ave.		0.09					変化率(%)	-0.0081		0.17					変化率(%)	-0.0116
50°C	①	575.30	0.05	-0.011	-0.011	-0.012	-0.006	-0.010		575.72	0.13	-0.010	-0.010	-0.012	-0.007	-0.010	
	②	576.20	0.10	-0.010	-0.018	-0.014	-0.012	-0.014	-0.012	576.66	0.18	-0.011	-0.017	-0.013	-0.012	-0.013	-0.013
	③	575.20	0.16	-0.013	-0.012	-0.015	-0.012	-0.013		575.64	0.23	-0.015	-0.014	-0.016	-0.014	-0.015	
	Ave.		0.10					変化率(%)	-0.008		0.18					変化率(%)	-0.008
80°C	①	577.50	-0.21	-0.243	-0.214	-0.260	-0.189	-0.227		577.20	-0.26	-0.316	-0.223	-0.315	-0.207	-0.265	
	②	572.20	-0.24	-0.104	-0.166	-0.218	-0.176	-0.166	-0.170	571.87	-0.30	-0.168	-0.200	-0.307	-0.183	-0.215	-0.217
	③	580.40	-0.21	-0.123	-0.122	-0.124	-0.104	-0.118		580.06	-0.26	-0.189	-0.171	-0.182	-0.143	-0.171	
	Ave.		-0.22					変化率(%)	-0.106		-0.28					変化率(%)	-0.136

3) まとめ

セメント系材料は C-S-H の結晶化により密度に変化が生じることが推測され、密度の変化により微細空隙構造が変化し、硬化体の物理的性状に影響を及ぼすことが考えられる。そこで、モルタル試料の密度変化及び空隙構造の変化を長さ変化の値として把握することにより長期にわたる温度影響のデータを取得することを目的として、OPC 硬化体については試験期間 4 年の試料、混合セメント系については 2 年及び 2.5 年の試料のデータを取得した。

OPC 硬化体の場合、これまで減少していた長さ変化率が、3 年から 4 年にかけては変化が見られなくなった。FAC15、FAC30、SC10 硬化体では、20℃及び 50℃で変化が見られず、80℃で減少する傾向が継続していた。

セメントと水が反応して生成するセメント水和物の固相の体積は、反応前の未水和セメントと反応水の体積の和より小さくなる（谷村・富田, 2004）。これは、セメントの水和による収縮の影響である。本検討では、C-S-H の結晶化による体積変化を評価することを目的とするため、水和による収縮をできる限りキャンセルするように OPC では 3 ヶ月、混合セメント系では 6 ヶ月の前養生を実施した。但し、定温度試験においては C-S-H と骨材の反応を想定し、シリカ微粉末を添加しているため、シリカ微粉末と水酸化カルシウムが反応し、C-S-H を生成している期間については、結晶化の影響による体積変化であるか判断はできない。平成 30 年度までのペーストの分析結果より、80℃の条件では定温度試験開始 1 年以降、シリカ微粉末の反応は終了し、C-S-H の結晶化が生じていると推測される。80℃の継続的な長さ変化は、結晶化による体積変化の影響であると考えられる。

(2) 加速試験方法の検討

セメント系材料は 50～100℃以下の温度環境下においても長期間その環境下にあることにより、主要な水和物である C-S-H がトバモライトへと結晶化することが想定される。C-S-H の結晶化による微細空隙構造の変化は、硬化体としての物理的性状に影響を及ぼすことが考えられる。しかしながら、100℃以下の温度条件においては C-S-H の結晶化は、年単位での期間に亘る反応であることが推測されるため、本検討では、数年にわたりモルタル及びペーストの硬化体試料を一定温度の環境下に置き、微細構造や寸法変化のデータを取得した。

具体的には、環境温度 80℃以下で C-S-H がトバモライトへと変化した硬化体を作製するために、シリカ微粉末を混合した硬化体を平成 27 年度及び平成 28 年度に作製し、50℃及び 80℃の温度条件で試験を継続している（以下、定温度試験）。平成 30 年度までの硬化体試料の分析結果では、XRD 分析により、明らかなトバモライトのピークを確認できていない。そこで本項においては、平成 31 年度までの定温度試験結果を整理するとともに、硬化体による定温度試験試料が結晶化するかを明確にするために、セメント系材料の熱変質の加速試験方法について検討した。

1) 定温度試験の結果の整理

TRU 廃棄物処分施設ではセメント系材料が多用されることが想定され、セメント系材料の熱変質を抑制する観点から第 2 次 TRU レポート（電気事業連合会、核燃料サイクル開発機構, 2005）において坑道内上限温度は 80℃とされている。この上限温度の設定は、セメントの主要な水和鉱物であるケイ酸カルシウム水和物（C-S-H）が結晶化しない上限であり、セメント系材料が熱変質の影響を受けない温度であると考えられている。しかしながら、100℃以下の温度環境下にあった経年コンクリートによるアナログ試料の分析（原環センター, 2014）においては、トバモライトの含有を確認し、コンクリート中の C-S-H が温度影響によりトバモライトへと変化したことが示唆された。長期間高温環境下に曝される条件では、80℃程度の温度環境においてもコンクリ

ートの C-S-H が結晶化し、トバモライトへと変化することが考えられる。C-S-H のトバモライトへの変化はセメント系材料の物質移行特性や核種の収着性などの変化をもたらし、人工バリアの長期挙動に影響を及ぼす可能性があることが推測される。このような背景の基に、定温度試験では、C-S-H の結晶化、特にトバモライトへの変化について検討を継続している。これまで、合成 C-S-H やペースト微粉末とシリカの混合系を用いて実施した試験では、C-S-H の Ca/Si モル比（以下、C/S）がトバモライト組成に近いことが結晶化条件の一つであった。また、環境温度が高いほど、トバモライトへの変化が促進されることも確認されている（原環センター, 2018）。

一方、機械的特性及び物質移行特性を支配する空隙特性への影響を把握するために実施しているペースト硬化体試料を用いた定温度試験では、明確な指標となる XRD によるトバモライトのピークは確認されていない（図 2.2-109）。ここで、図 2.2-110 に OPC-SiO₂ ペースト硬化体試料 3 年、20°C と 80°C の反射電子像を示す。図 2.2-110(a) より、20°C の場合、混合したシリカ微粉末はほとんど反応せずに残存している。図 2.2-110(a) 内の赤印は、特にシリカ微粉末が明確に残存している箇所を示した。一方、図 2.2-110(b) より、80°C においては、シリカ微粉の粒子は見られず、反応している状況が確認される。図 2.2-111 に OPC-SiO₂ ペースト試料 3 年、20°C と 80°C の C/S 比の分布を示す。20°C の試料では C/S が一定な分布になっていないが、80°C では、C/S が 1.2~0.8 の分布が多くなり、シリカ微粉末が反応することにより、トバモライト組成の C/S=0.83 に近い C-S-H が生成しているものと考えられる。また、図 2.2-112 に OPC-SiO₂ ペースト硬化体試料 3 年、20°C と 80°C の SEM 像を示す。20°C に比較して、80°C の C-S-H の組織は板状に変化しているものが確認され、C-S-H はトバモライトに近い形態へと変化していると推測される。ペースト硬化体試料においても XRD ではトバモライトのピークは確認されないが結晶化は進んでいるものと判断された。

次項において、現在継続して実施しているペースト及びモルタル硬化体試料の結晶化を促進する手法について検討した。

Q:quartz, Po:portlandite, Csh:C-S-H, CC:calcite, K:katoite

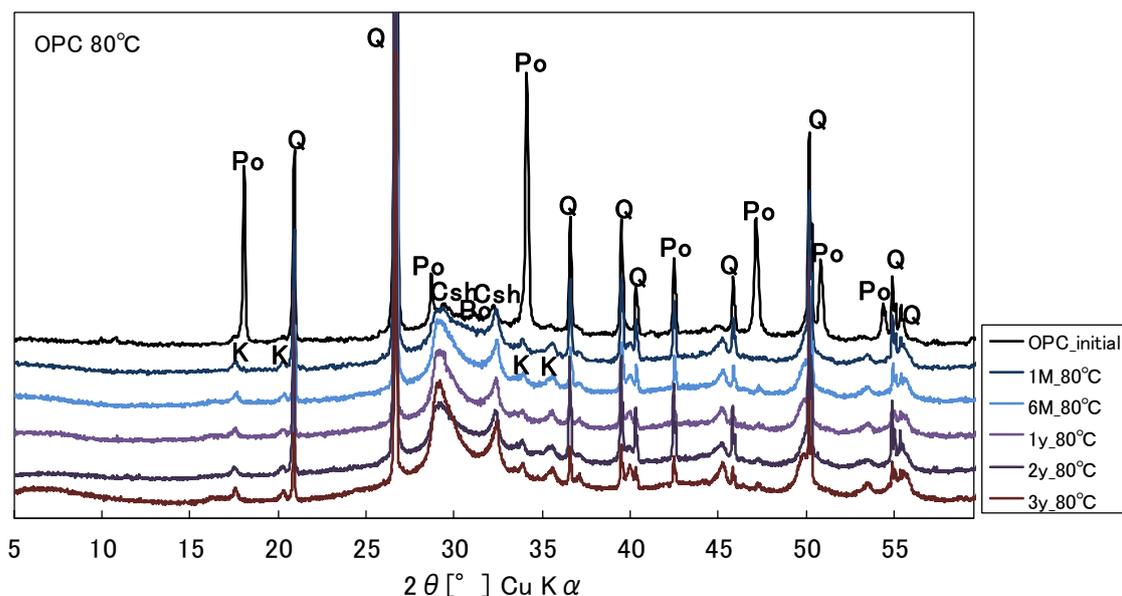
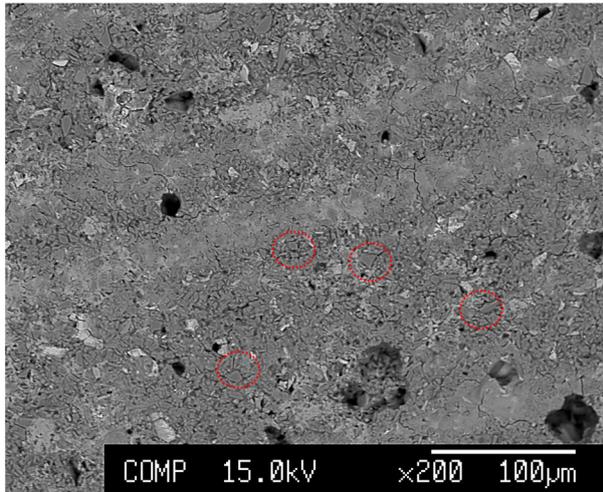
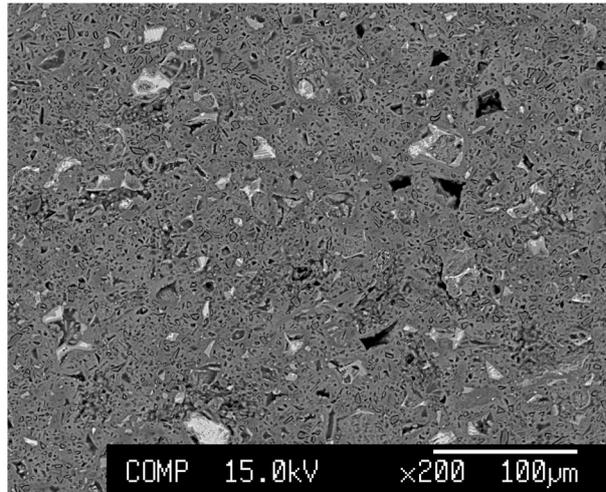


図 2.2-109 OPC-SiO₂ ペースト硬化体試料の XRD

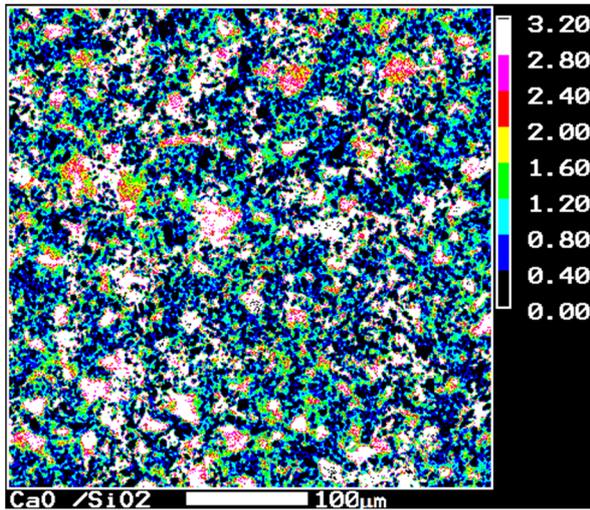


(a) OPC-SiO₂-20°C 3y

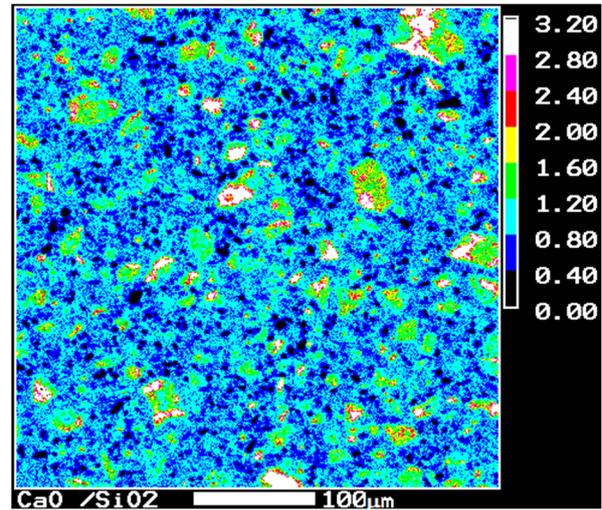


(b) OPC-SiO₂-80°C 3y

図 2.2-110 OPC-SiO₂ ペースト硬化体試料 (3 年) の反射電子像

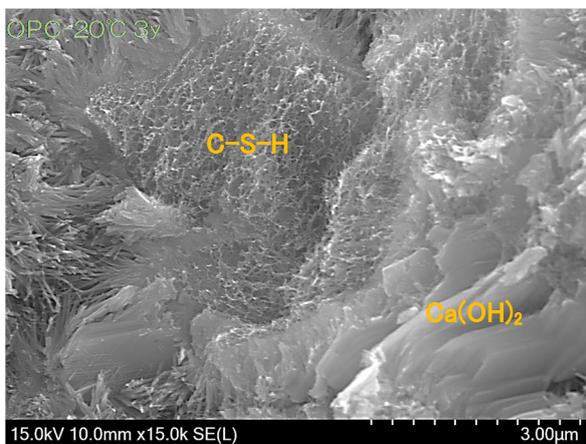


(a) OPC-SiO₂-20°C 3y

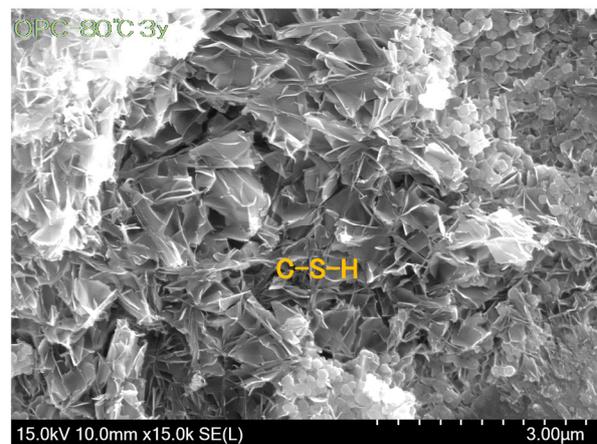


(b) OPC-SiO₂-80°C 3y

図 2.2-111 OPC-SiO₂ ペースト硬化体試料 (3 年) の C/S 比分布



(a) OPC-SiO₂-20°C 3y



(b) OPC-SiO₂-80°C 3y

図 2.2-112 OPC-SiO₂ ペースト硬化体試料 (3 年) の SEM 像

2) セメント系材料の熱変質の加速試験

トバモライトは結晶性のケイ酸カルシウム水和物であり、軽量気泡コンクリート(ALC)やケイカル板などの建築材料に用いられている。一般的にオートクレーブ養生などで作製している。トバモライトの作製条件において、高温・高圧養生条件においても、シリカ質原料の違いによりトバモライトを生成せずに、前駆体である C-S-H の状態であるなど、その生成反応は複雑であることが報告されている(光田, 1982、岡田ほか, 1994)。出発原料によってもトバモライトの生成反応に影響し、さらに本検討の定温度試験では 100°C以下の温度条件であり、一般的なトバモライトの生成温度より低い条件である。どの程度継続することにより XRD 分析で明確にトバモライトのピークを確認できるかどうか、あるいはどのような条件・方法が反応を加速する試験となるか判断することは容易ではない。ここでは、C-S-H が結晶化するための加速試験方法をトバモライトの生成条件及び結晶の成長条件などから以下の4つの手段について考察した。

① 高温・高圧下条件

合成 C-S-H の定温度試験の結果(原環センター, 2018)から温度が高いほど C-S-H がトバモライトへ変化していた。また、トバモライトはオートクレーブ養生で一般的に作製されているため、100°C以上の高温条件あるいは、高温・高圧条件で試験することにより、C-S-H の結晶化が促進される可能性が考えられる。先に述べたようにオートクレーブや高温条件においても試料の状態によってはトバモライトへ変化しない、あるいは長時間かかる可能性がある。トバモライトの生成過程では、高温・高圧養生においても C-S-H を経てトバモライトへと変化するが、このトバモライトの前駆体となる C-S-H は、反応初期に C/S=0.8 の C-S-H が生成すると、長時間水熱状態を保持してもトバモライトへ変化せず、C/S=0.8 以上の富 Ca の C-S-H が生成した後に徐々にケイ酸イオンと反応することにより、C/S=0.8 の C-S-H からトバモライトへと変化すると報告されている(岡田, 2001)。また、小川ら(小川, 2013)は、水熱条件下においてトバモライトの原料となるシリカ粉末の粒径や水/固体比の違いによりトバモライトへ変化する場合としない場合があり、トバモライトへと変化する C-S-H は Si 鎖長が短いことを報告している。本検討で実施している試料において、生成している C-S-H の C/S 比が 0.83 以下、あるいは Si 鎖長が長い C-S-H の状態の場合は、現状以上にトバモライトへ変化しないことが考えられる。図 2.2-111 に示した EPMA の結果はバルク全体の C/S となっているため、C-S-H の C/S を特定できないが、OPC ペースト硬化体 80°C 3 年の硬化体試料の C-S-H の C/S は 0.83 以下まで反応している可能性も考えられる。

一般的にトバモライトを生成する方法は水熱合成であり、トバモライトへの変化を確認するという点のみを考慮するならば、温度条件を高温・高圧にすることは有効な手段であると考えられる。しかし、高温・高圧下でのトバモライトの生成条件では、100°C以下で温度が積算される場合とは生成条件が異なるため、本研究における加速試験にはあてはまらない。定温度試験においては 100°C以下の温度条件での加速試験が必要であると考えられる。

② 反応表面積の拡大

通常反応を促進させる場合、試料を粉砕することにより未反応の部分を表面に出して反応させることが考えられる。また、同時に微粉砕することで反応する表面積を増加させ、反応を加速させることができるものと考えられる。定温度試験においても、OPC ペーストを粉砕した OPC 微粉末とシリカ微粉末を混合した定温度試験においては、トバモライトが生成することを確認している(図 2.2-113)。試料が硬化体であるため反応が遅く、トバモライトが確認されないことも十分考えられ、微粉末化することにより反応が加速されることが推測される。但し、トバモライト

へ変化する場合、液相中の C/S が高く維持されていることが望ましく（光田, 1982）、硬化体試料を微粉碎するだけでは、反応促進の効果が得られない可能性も考えられる。

反応を促進するには、表面積を増加させることは有効な手段であると考えられる。硬化体試料を微粉碎し、定温度試験を実施するには、溶液中で反応させることとなる。その場合、硬化体試料の場合とは液固比が異なり、硬化体の条件とは異なってくることから、硬化体で実施している条件との差を考慮した上で試験系を設定する必要がある。

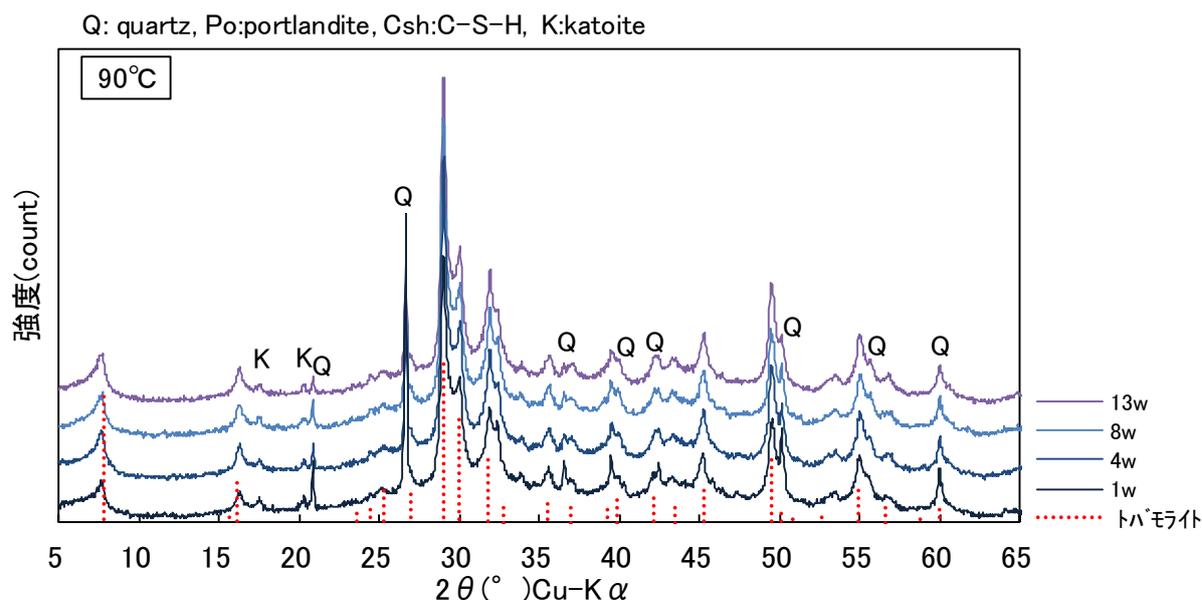


図 2.2-113 微粉 OPC ペースト-シリカ微粉末の XRD

③ 主要元素以外の元素の添加

トバモライトの生成においては、Ca 及び Si 以外の元素、アルカリ、Al 及びセッコウの添加によりトバモライトを生成しやすくなることが確認されている。浅賀らは（浅賀ほか, 1985）、KOH の添加によりトバモライトの生成が促進されるとしている。また、Al の共存では、Si と Al が一部置換することによりトバモライトへ変化しやすい C-S-H を生成することによりトバモライトへの変化を促進すると報告されている（原, 2000 ; 松井ほか, 2014）。その他、セッコウの添加は液相の Ca^{2+} イオン濃度に影響すると報告されている（松井, 2014）。

ここで示した促進方法は、液相からトバモライトを生成する場合となっている。主要元素以外の元素の添加については、定温度試験の硬化体試料が現状の試験条件下において将来的にトバモライトへと変化するか判断する試験方法として適用できない。しかし、試料の状態を把握した上で、主要元素以外の元素を添加し、トバモライトへの変化が促進されるのであれば熱変質の加速試験として有効な手段とあると考えられる。

④ 種結晶の添加

結晶成長過程において、種結晶を添加することにより、核となり結晶成長が促進されることが考えられる。原ら（原ほか, 1979）は、トバモライトの生成過程を C-S-H が結晶核となり粒径が成長していくと考察している。松野らは（松野ほか, 2013）、核となる C-S-H スラリーを添加することで、トバモライトを生成しないシリカ質原料を使用した場合も、結晶成長を促しトバモラ

イトを生成すると報告している。

種結晶の添加によるトバモライトへの結晶成長は、③と同様に液相から生成する場合の促進方法となる。そのため定温度試験の硬化体試料が現状の試験条件下において将来的にトバモライトへと変化するか判断する試験方法としては適用できない。反応表面積を増大させた加速試験において、種結晶となる物質の添加でトバモライトの生成を促進することが考えられ、加速試験の条件の一つとしての適用が考えられる。

3) 90°Cにおける加速試験の予察

前項における加速試験方法の検討より、反応表面積を大きくし、100°C以下で温度を高くすることが、定温度試験の加速試験として適しているものと考えられる。本項では、次年度以降に加速試験を実施するにあたり、反応表面積を拡大させ、90°C条件で反応促進が可能であるか予察試験を行った。

予察試験の条件を表 2.2-63 に示す。一つは、シリカ微粉末を混合した OPC 硬化体を 90°C で 1 年間水中養生した試料（試料名：OPC-Q Initial）を粉砕し、イオン交換水中に浸漬し 90°C で 6 ヶ月間静置した。もう一つの試料は、微粉砕した砂を混合した OPC 硬化体を 50°C で 1 年間水中養生した試料（試料名：OPC-砂 Initial）を微粉砕し、イオン交換水中に浸漬し 90°C で 6 ヶ月間静置した。これらの試料について、XRD により C-S-H の変化を確認した。

表 2.2-63 予察試験の水準

試料名	試料条件
OPC-Q Initial	・ OPC とシリカ微粉末を混合した硬化体を 90°C で 1 年間水中養生した試料 (シリカ微粉/セメント比=2, W/C=0.5)
OPC-Q 90°C	・ 上記試料を微粉砕し、液固比=15、90°C で 6 ヶ月間静置
OPC-砂 Initial	・ OPC と微粉した砂を混合した硬化体を 50°C で 1 年間水中養生した試料 (砂微粉/セメント比=0.5, W/C=0.5)
OPC—砂 90°C	・ 上記試料を微粉砕し、液固比=15、90°C で 6 ヶ月間静置

XRD の結果を図 2.2-114 及び図 2.2-115 に示す。

シリカ微粉末を用いた試料では、OPC-Q Initial でトバモライトのピークは確認されず、微粉砕後の試料 OPC-Q 90°C では、わずかにトバモライトのピークが検出された。OPC-Q Initial 試料において、トバモライトへ変化しにくい C-S-H の状態となっている可能性が考えられる。一方、砂を用いた試料は、OPC-砂 Initial では、トバモライトのピークは確認されないが、OPC-砂 90°C ではトバモライトとジェナイトのピークが確認された。C/S の高いジェナイトも検出されたことから前駆体となる C-S-H の C/S が高い状態であったことが考えられる。また、この試料においては、OPC-砂 Initial で確認されるクォーツ及び長石のピークが消失している。初期に生成される C-S-H の C/S が高いことに加え、アルカリ及び Al の共存がトバモライトへの変化を促進していることが考えられる。

以上、予察試験の結果より、反応する表面積を増加し、90°C で反応を促進することは、現在実施している定温度試験の硬化体がトバモライトへ変化するか予測する手段の一つとして有効ではないかと考えられる。しかし、微粉砕し、新たに液相に浸漬することは、液固比など硬化体試料

を用いた定温度試験とは同一の条件とはならないことから、硬化体による定温度試験と加速試験の試験条件の違いを明確にする必要があり、どのような反応が加速されているか検討する必要があると考えられる。

CSH: C-S-H, CC: Calcite, K: Katoite, T: Tobermorite

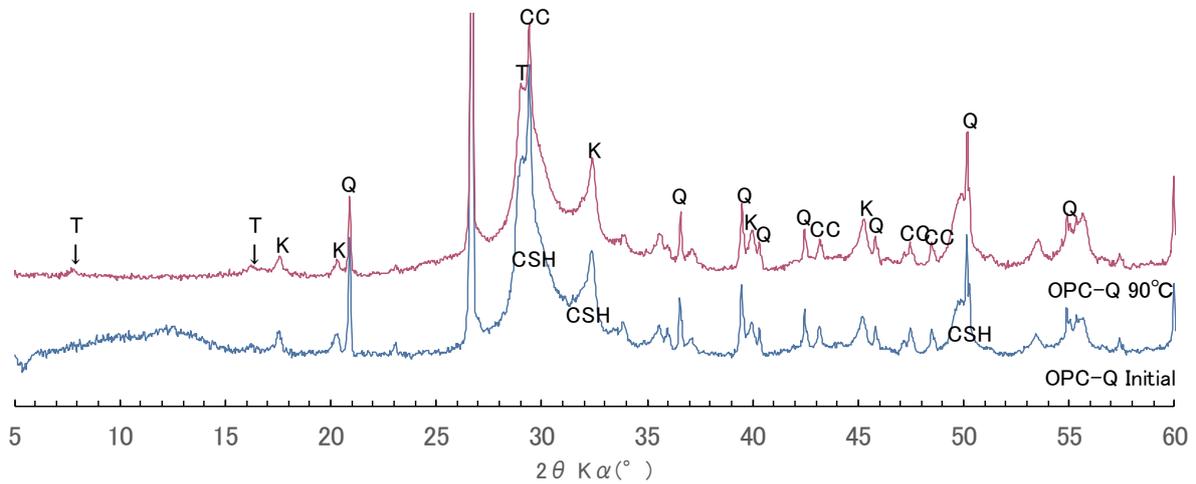


図 2.2-114 シリカ微粉末を混合した OPC 硬化体試料

CSH: C-S-H, P: Portlandite, CC: Calcite, A: 斜長石, T: Tobermorite, J: Jennite

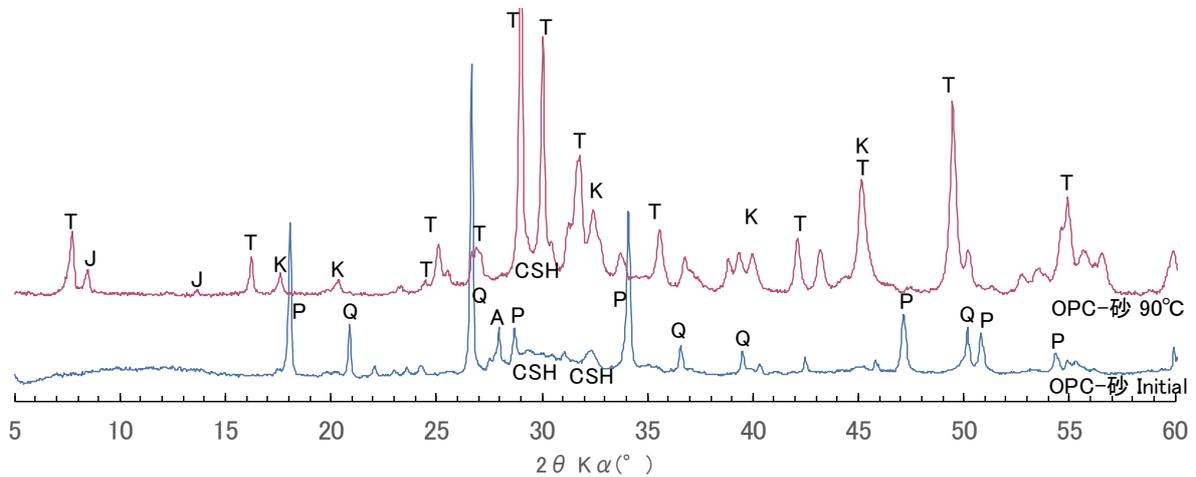


図 2.2-115 微粉碎した砂を混合した OPC 硬化体試料

4) まとめ

定温度試験の硬化体試料が結晶化するかを明確にするための加速試験方法について、トバモライトの生成条件及び生成を促進させる条件から検討した。

トバモライトの作製は一般的に水熱合成で実施されるが、生成している C-S-H の特性により高温・高圧状態を維持してもトバモライトへ変化しない場合がある。定温度試験の硬化体試料がトバモライトへ変化するか判断するという点では、トバモライトを作製する程度の高圧・高温条件下で反応させることは有効な加速方法であると考えられる。しかし、人工バリア材としてのセメ

ント系材料に及ぼす熱影響を評価するための条件としては、高温・高圧条件下ではなく、100℃以下の常圧環境であることが必要と考えられる。そのため加速試験の温度条件としては90℃程度で反応を促進させることが望ましい。また、反応表面積を拡大させ、反応を促進する方法は適用可能と考えられる。その際、固相に対する液相の割合など硬化体試料の定温度試験条件と加速試験の条件を比較し、硬化体試料での定温度試験条件を反映できない事象について明確にする必要がある。さらに、核となる種結晶の添加及び反応促進が期待される元素の添加は、現状の定温度試験条件を維持した状態ではなくなるが、トバモライトへの変化を促進させることができるならば有効な手段として加速試験条件に加えていくことが考えられる。

予察試験として、シリカ微粉を混合した硬化体試料を微粉碎し、90℃の定温度試験を実施した結果、明らかなトバモライトの生成は確認されなかった。加速試験の実施においては、定温度試験の硬化体試料においてトバモライトへの変化を促進するため、アルカリの添加など現状の定温度試験の条件を変えて継続することも検討していく必要がある。

参考文献

- 秋田宏ほか, 毛管作用に基づいたモルタル中の水分移動解析, セメントコンクリート論文集, No.51, pp.624-629, 1997
- 青野義道ほか, 乾燥および乾湿繰返しによる硬化セメントペーストの微細構造変化, コンクリート工学年次論文集, Vol.29, No.1, pp.993-998, 2007.
- 浅賀喜与志, 佐々木学, 崔相紘, 大門正機, トバモライトの形態におよぼす KOH, Al(OH)₃ の影響, セッコウと石灰, No.196, pp.140-148, 1985
- BASF ジャパン株式会社, マスターフロー816[®]商品カタログ, 2018a.
- BASF ジャパン株式会社, マスターフロー818[®]商品カタログ, 2018b.
- G. I. Barenblatt et. al., Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in fissured rocks, Prikladnaya Matematika I Mekhanika, Vol.25, No.5, pp. 852-864, 1960.
- Z.P.Bazant, L.J.Najjar, Nonlinear water diffusion in nonsaturated concrete, Materials and Structures, Vol.5, pp.3-20, 1972.
- Z.Bazant,A.Steffens, Mathematical Model for Kinetics of Alkali-Silica Reaction in Concrete, Cement and Concrete Research, Vol.30, pp.419-428, 2000.
- E. Castillo et. al., Unconfined flow through jointed rock, Journal of the American Water Resources Association, Vol.8, No.2, pp. 266-281, 1972.
- 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取りまとめ—, 2005.
- 土木学会, コンクリート標準示方書【施工編】, 2017.
- 原子力発電環境整備機構, 包括的技術報告: わが国における安全な地層処分の実現—適切なサイトの選定に向けたセーフティケースの構築— (レビュー版), NUMO-TR-18-03, 2018.
- 原子力環境整備促進・資金管理センター, 平成25年度地層処分技術調査等事業 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発報告書 (第4分冊) —人工バリア材料長期挙動評価・人工バリア評価の初期条件の設定—, 2014
- 原子力環境整備促進・資金管理センター, 平成29年度高レベル放射性廃棄物等の地層処分に関する技術開発事業 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発—平成25年度~29年度取りまとめ報告書—, 2018.
- 原子力環境整備促進・資金管理センター, 平成29年度高レベル放射性廃棄物等の地層処分に関する技術開発事業 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発報告書 (第4分冊) —人工バリア材料長期挙動評価・人工バリア評価の初期条件の設定—, 2018

- 原子力環境整備促進・資金管理センター, 日本原子力研究開発機構, 平成 30 年度高レベル放射性廃棄物等の地層処分に関する技術開発事業 TRU 廃棄物処理・処分に関する技術開発報告書, 2019.
- 賀谷隆人ほか, 粒形改善砕砂の生産時に発生する石粉を混入したコンクリートの諸性状に関する実験的研究, 日本建築学会技術報告集, Vol.16, No.32, pp.5-10, 2010.
- 後藤幸正, 藤原忠司, コンクリートの乾燥収縮に及ぼす骨材の影響, 土木学会論文報告集, No.286, pp.125-136, 1979.
- 原尚道, 非晶質シリカによるジェナイトとトバモライトの合成, *J. Soc. Inorg. Mater., Japan*, 7, pp133-142, 2000
- 原尚道, 井上憲弘, 松田応作, X 線回折半値幅法による 11 Å トバモライトの結晶化過程に関する研究, 窯業協会誌, 87,(7),pp.9-16,1979
- 細野宏巳, 山口光俊, 野島昭二, 山口隆裕, 辻幸和, PC グラウトの流動性評価と品質管理方法に関する研究, 土木学会論文集 E2 (材料・コンクリート構造), Vol.71, No.1, 72-85, 2015.
- 石田哲也ほか, 物質・エネルギーの生成・移動と変形・応力場に関する連成解析システム, 土木学会論文集 No.627/V-44, pp.13-25, 1999.
- Karen Scrivener, Ruben Snellings, Barbara Lothenbach, (ed.), A practical guide to microstructural analysis of cementitious materials, Boca Raton: Crc Press, 2016.
- 光田武, CaO-SiO₂-H₂O 系の熱水反応と出発物質, 岩石鉱物床学会誌, 特別号, 3 号, pp.317-329, 1982
- 木ノ村幸士ほか, 移動式バケットを利用した充填材施工性確認試験 余裕深度処分施設を対象とした無人化施工にむけて, 大成建設技術センター報 第 43 号, pp.14-1-14-8, 2010.
- I.Maruyama, H.Sasano, Strain and crack distribution in concrete during drying, *Materials and Structures*, Vol.47, pp.517-532, 2014.
- 松井久仁雄, 小川晃博, 松野信也, 名雪三依, その場 X 線回折と固体 NMR によるトバモライト生成過程の解析: CaO-SiO₂-H₂O 系における γ -Al₂O₃ および石膏添加の影響, セメント・コンクリート論文集, Vol.67, pp10-17,2014
- 松野信也, 東口光晴, 石川哲吏, 松井久仁雄, トバモライト合成への低結晶質シリカの活用, SPring-8 利用研究成果集, pp.178-180, 2013
- Mensi, Sechage du beton: analyse et modelisation, *Materials and Structures*, Vol.21, pp.3-12, 1988.
- 長瀧重義ほか, 微細ひび割れを有する コンクリートの透気性状, コンクリート工学年次論文報告集, Vol. 9, pp. 187-192, 1987.
- 日本建築学会, 鉄筋コンクリート造建築物の収縮ひび割れ制御設計・施工指針(案)・同解説, 2006.
- 小川晃博, 松井久仁雄, 松野信也, 名雪三依, 放射光その場 X 線回折と ²⁹Si 固体 NMR によるトバモライト生成過程の解析: CaO-SiO₂-H₂O 系における C-S-H 構造の影響, セメント・コンクリート論文集, Vol.67, pp.18-24, 2014
- 岡田能彦, 井須紀文, 増田嗣也, 石田秀輝, 1.1nm トバモライトの生成に及ぼす出発物質の影響, 日本セラミック協会学術論文誌, 102,12, pp.1148-1153, 1994
- 岡田能彦, ケイ酸カルシウム水和物に見るナノの世界, *J. Soc. Inorg. Mater., Japan*, 8, pp.553-557, 2001
- プレストレスト・コンクリート建設業協会, PC グラウト&プレグラウト PC 鋼材 施工マニュアル (改訂版), 2006.
- プレストレストコンクリート工学会, PC グラウトの設計施工指針-改訂版-, 2012.
- 酒井正樹ほか, 加熱・乾燥を受けるコンクリート部材の含水率分布の実測と解析的検討, コンクリート工学年次論文集, Vol.35, No.1, pp.619-624, 2013

- 阪田憲次ほか, 乾燥に伴うコンクリート中の水分の逸散と乾燥収縮に関する研究, 土木学会論文集, No.318, pp.145-152, 1981.
- 佐藤博之ほか, ひび割れを有するコンクリートの気体透過抵抗性, 土木学会第 52 回年次学術講演会講演概要集第 5 部, pp.744-745, 1997.
- 太平洋マテリアル株式会社, 超低粘性型 PC グラウトプレミックスタイプ太平洋ハイジェクター[®] (Premix-AD) 技術資料, 2018.
- 谷村充, 富田六郎, 第 4 節 体積変化制御の物理と化学, コンクリート混和材料ハンドブック,(社)日本材料学会編, pp.78-90, 2004
- 楊楊ほか, 結合水量に基づく自己収縮ひずみと乾燥収縮ひずみの定量評価, 土木学会論文報告集, No.690, pp.109-120, 2001.

Appendix II

陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発に係る補足資料

陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発に係る補足資料

1. はじめに

Appendix II 「陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発に係る補足資料」では、本編 2.2 「陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発」に関して、これまでに得られた成果の概要と、以下の項目において実施した試験の詳細と取得したデータ等を収録したものである。Appendix II の構成（章節）と本編 2.1 との対応を表 1 に示す。

表 1 Appendix II と本編 2.1 との対応

Appendix II の構成（章節）	本編 2.1 の項目
2 これまでの成果の概要	
2.1 アルミナ HIP 固化体のこれまでの技術開発の成果	
2.2 BPI ガラス固化体のこれまでの技術開発の成果	
3 平成 31 年度の実施内容の詳細	
3.1 アルミナ HIP 固化体の固相分析に於ける濃度プロファイルの抽出方法	2.2.2 HIP 固化体のヨウ素放出挙動
3.2 BPI ガラス固化体の炭酸塩影響試験の詳細	2.2.3 HIP 固化体のヨウ素放出挙動
3.3 BPI ガラス固化体の浸漬試験の条件	

2. これまでの成果の概要

2.1 アルミナ HIP 固化体のこれまでの技術開発の成果

図 2.1-1 にアルミナ HIP 固化体の製造フロー（西村,1999）を示す。再処理工場で発生したヨウ素を含む廃銀吸着材を熱処理後、HIP 処理をすると、アルミナ（コランダム（ Al_2O_3 ））と AgI を主成分とする固化体となる。廃銀吸着材中のヨウ素を脱離回収する工程が無いシンプルなプロセスであり、固化体組成もアルミナと AgI からなるシンプルな組成であることを特徴としている（Masuda et al., 2016）。

ここでは、アルミナ HIP 固化体に関する主な成果を①アルミナ HIP 固化体の製造条件及びヨウ素放出挙動、②アルミナ HIP 固化体の環境対応性、③長期ヨウ素放出挙動モデルの検討の観点からまとめる。

2.1.1 ヨウ素放出抑制のために低空隙率化したアルミナ HIP 固化体の製造

アルミナ HIP 固化体は、難溶解性の α -アルミナのマトリックスで AgI を閉じ込め、還元性の地下水と AgI との接触を長期にわたって抑制するというコンセプトで開発を進めてきたものである。しかし、硝酸銀を担持した多孔質アルミナでヨウ素を捕集した廃銀吸着材をそのまま HIP 処理した固化体では、アルミナの熱間当方圧焼結としては比較的高温の 1200℃から 1350℃で焼結しているにもかかわらず、固化体の空隙率は 10%を超えていた。

そこで、空隙率の低空隙率化を試みた。

アルミナ HIP 固化体の製造条件の確立の経緯について、整理したものを図 2.1-2 に示す。まず、固化体のヨウ素閉じ込め性の向上を目指し、空隙の少ない固化体の製造技術を確立した（原環センター,2015）。

高空隙率（約 15-20%）のアルミナ HIP 固化体では、微量の残留水分が HIP 処理時に悪影響を及ぼしていたと考え、HIP 処理前に、高温・高真空下での真空加熱脱気処理を行い水分の残留を極力抑えたところ、5%程度の低空隙率の固化体製造が可能になった。

ただし、低空隙率化した HIP 固化体を高 HS 環境 ($[HS^-] = 3 \times 10^{-3} M$) で浸漬試験をしたとこ



図 2.1-1 アルミナ HIP 固化体の製造フロー

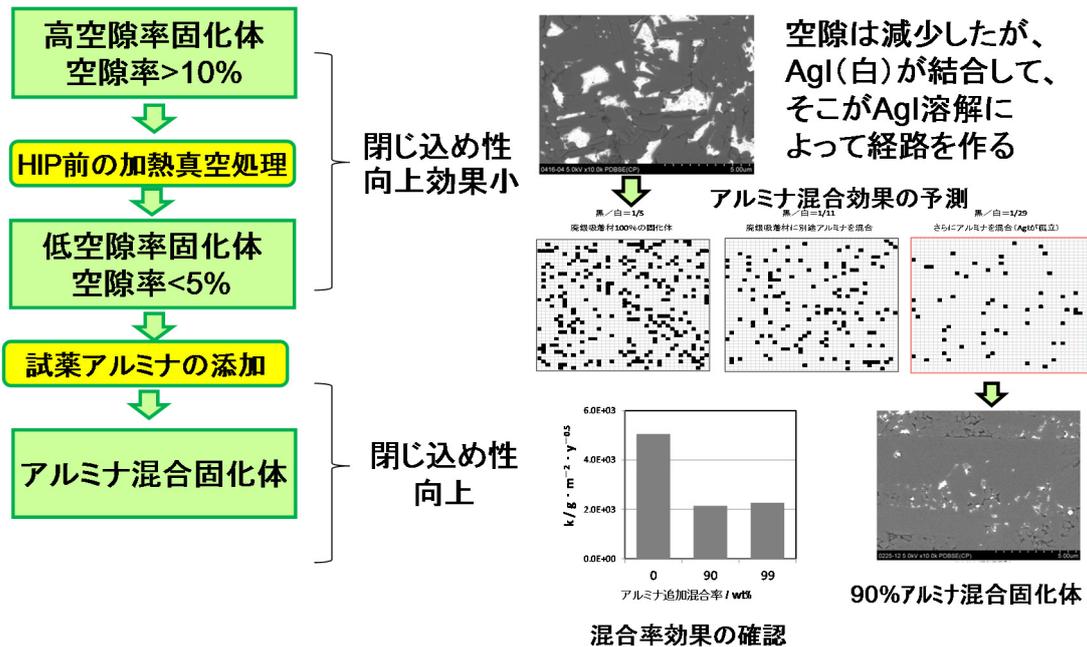


図 2.1-2 アルミナ HIP 固化体の低空隙率化の経緯

ろ、ヨウ素放出速度は、高空隙率の固化体とほとんど変わらなかった (原環センター, 2016)。空隙率の低い固化体を製造するだけではヨウ素閉じ込め性能に限界があったため、固化体内部の観察などから改善方法を考える中で、アルミナ混合固化体を検討するに至った (増田ら, 2017, 原環センター, 2015, 2016)。

浸漬試験における高 HS 環境では AgI の溶解速度が速いため、溶解した AgI は硫化銀 (Ag_2S) を生成する。AgI と Ag_2S は密度差があり、AgI が Ag_2S に変化することによって、あらたに空隙

が生じると考えられた。浸漬後の固化体断面のヨウ素が放出された領域 (Ag_2S が存在する) とヨウ素がまだ残っている領域 (AgI として存在する) では、ヨウ素が放出された領域で空隙率が高いことを確認した。廃銀吸着材の AgI 含有率は約 20% であることから、5% 空隙率の固化体であっても、高 HS 環境下では AgI も含めて 25% 相当の空隙を持つ固化体に相当すると考えられた。

そこで、 AgI の含有率を下げるため、アルミナを添加するアルミナ混合固化体の製造に至った。 AgI の連結性に関するシミュレーション及びアルミナ混合比の異なる固化体による浸漬試験データ取得を行うことによって、アルミナ 90% 混合固化体 (アルミナ 90% + 廃銀吸着材 10% : AgI 含有率約 2%) が、アルミナ未混合固化体 (100% 廃銀吸着材) に比べ、ヨウ素放出速度の有意な低下を示すことを確認した。固化体断面の観察、3D-SEM による 3 次元空隙構造の観察と数値解析結果より、アルミナの混合によって、固化体中の溶液浸入経路のつながりが断たれる傾向にあることを確認した。

2.1.2 pH 及び HS-を指標とした浸漬試験データの蓄積

想定される地層処分環境を念頭におき、種々の条件におけるアルミナ固化体からのヨウ素浸出挙動に関するデータを蓄積してきた (原環センター, 2018)。

保守的な観点から、ヨウ素放出速度が大きい高 HS・高 pH 環境を中心として実施してきた浸漬試験に、実地下環境の条件に近い低 HS・高 pH 環境、低 HS・中性近傍の試験条件を加え、データを蓄積した。

さらに、ヨウ素放出速度に対する HS-濃度の影響を評価するため、HS-濃度 $3 \times 10^{-3} \text{ M}$ に加え、より高濃度 ($3 \times 10^{-2} \text{ M}$) 及び低濃度 ($3 \times 10^{-4} \text{ M}$) 側の試験を行った。また、これまでの試験結果から推測された Ca イオンの共存下によるヨウ素放出抑制効果を検証するための試験も実施した。

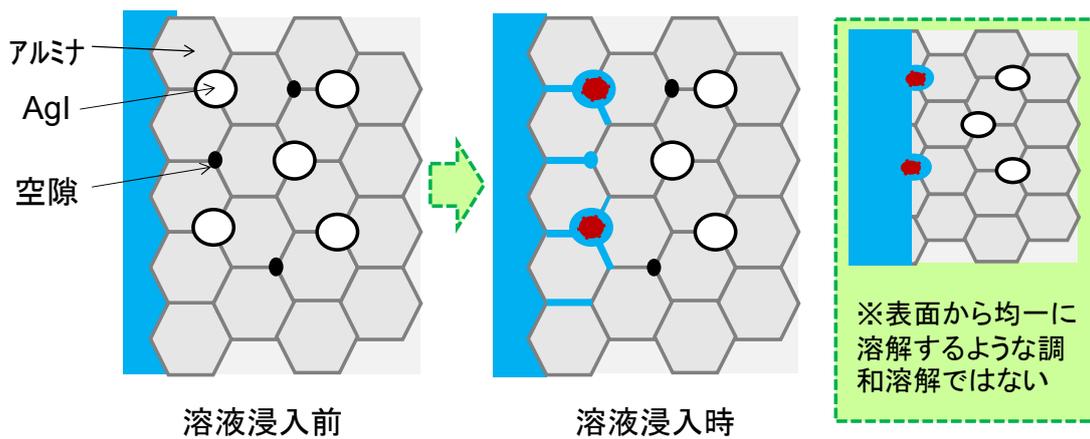
2.1.3 ヨウ素放出モデルの検討

固化体内部の空隙構造や AgI の存在状態の観察から、アルミナ未混合固化体では空隙と AgI が連結して水の通り道を形成するのに対して、アルミナ混合固化体では水の通り道の連続性が低下することが確認された。

したがって、アルミナ固化体からのヨウ素放出は、マトリクスであるアルミナの溶解とは非調和的であった。マトリクス粒界の溶解、 AgI の溶解、マトリクス自身の溶解などが絡み合っていると考えられる。図 2.1-3 に想定しているヨウ素放出概念を示す。

想定するヨウ素放出概念をもとに、SEM 観察によって得られた固化体内部構造をモデル化して、セルオートマトン法による溶液浸入・ヨウ素放出シミュレーションを構築して適用した (原環センター, 2018)。セルオートマトン法によって、HS-濃度が高いと AgI の溶解により新たな空隙が形成され、水の通り道が拡大することによって固化体のさらなる内部へ溶液が浸入し、HS-により AgI 溶解が進むことがわかった。その懐石に於いて用いたセルオートマトンのルールを図 2.2-5 及び表 2.2-1 に示す。

セルオートマトン以外にも、Higuchi 式 (Siepmann, 2011) や反応を伴う物質移行解析などによる解析も行い、ヨウ素放出速度に対しては、時間の平方根則で整理しうると考えられた (原環センター, 2018)。



非調和的：規格化浸出量 ヨウ素>>アルミ

図 2.1-3 アルミナ HIP 固化体からのヨウ素放出機構

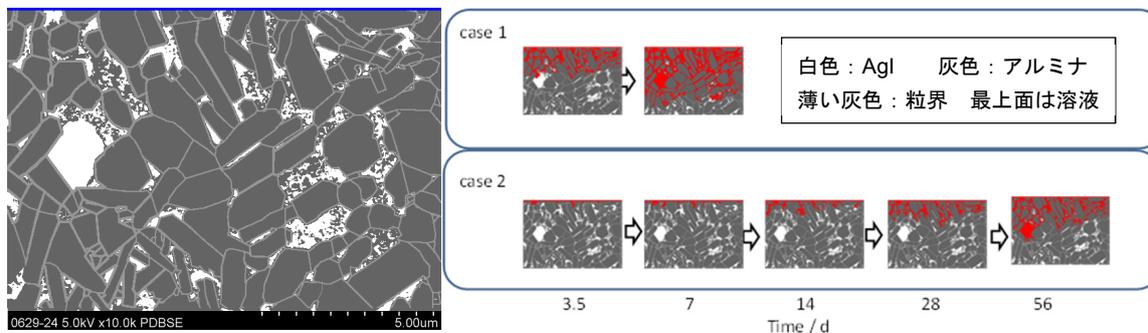


図 2.2-5 セルオートマトンを使ったシミュレーション

表 2.2-1 拡張セルオートマトンのルール

セルの属性	周囲環境	セルの属性変化
アルミナ	溶液あり	溶液の pH に応じて溶けて、既定の溶解量を超えた時点で「溶液」に変化する
	溶液なし	変化なし
AgI	溶液あり	溶液中の HS ⁻ 濃度に応じて（関数化された速度で）Ag ₂ S に変換し、I ⁻ を放出 既定の溶解量を超えた時点で「溶液」に変化する
	溶液なし	変化なし
粒界	溶液あり	溶液の pH に応じて溶けて、既定の溶解量を超えた時点で「溶液」に変化する
	溶液なし	変化なし
空隙	溶液あり	溶液が満たされた空隙に変化して、「溶液」に変化する
	溶液なし	変化なし

2.2 BPI ガラス固化体のこれまでの技術開発の成果

2.2.1 BPI ガラス固化体の化学構造の詳細検討

BPI ガラス固化体の性能を評価するためには、ガラス固化体そのものの溶出挙動とヨウ素放出挙動の解明及び物理・化学的な長期安定性に関する評価が重要であり、そのための基礎データとして、ガラスの構造や物理・化学的な特性に関する理解が不可欠である。

高レベルガラス固化体については分子動力学法等のナノスケールモデルによる解析が試みられ、将来的にはガラスの溶解等の挙動解明やモデル化への発展が期待されている。

そのため、BPI ガラス固化体の構成元素であるホウ素、鉛、酸素、ヨウ素、亜鉛及びビスマスについて、①核磁気共鳴分光法 (^{11}B MAS NMR)、②X 線光電子分光 (XPS)、③X 線回折 (XRD)、④X 線吸収微細構造 (XAFS) 及び⑤中性子線回折 (ND) 等を使用して分析を実施した。(表 2.2-1 参照) 各試料を分析した結果、BPI ガラス固化体のホウ素の配位数、鉛の結合及びヨウ素の化学形態等についての情報が得られている (表 2.2-2)。

表 2.2-1 BPI ガラス固化体の化学構造分析一覧表

分析方法 分析試料	XRD	NMR	XPS		XAFS				ND
	動径分布 関数	ホウ素 周辺構造	酸素 周辺構造	ヨウ素 周辺構造	鉛 周辺構造	ヨウ素 周辺構造	亜鉛 周辺構造	ビスマス 周辺構造	ホウ素 周辺構造
①66.7PbO+ 33.3B ₂ O ₃ ガラス	○	○	○						○
②65PbO + 30B ₂ O ₃ +5ZnO ガラス	○	○	○		○		○		○
③BPI ガラス	○	○	○	○	○	○	○	○	○

表 2.2-2 BPI ガラス固化体の化学構造分析結果のまとめ

分析方法	分析結果
^{11}B MAS NMR	B3(3 配位)と B4(4 配位)との比は、いずれのガラスサンプルにおいても約 7:3 程度
XRD 分析	①2.4Åの Pb-O と 3.9Åの Pb-Pb のピークを確認 ②3 種類の BPI ガラス (ヨウ素濃度: 0.2、1、2 wt%) の RDF は良く相似しており、バルク構造は類似
XPS 分析	①I 3d, O 1s, B 1s, Bi 4f 及び Pb 4f/4d/4p 等の光電子シグナル分離可能 ②BPI ガラス内のヨウ素存在状態は、ヨウ化物イオン (酸化数: -1) であり、選択的に Pb-I 結合を生成
XAFS	3 種類の BPI ガラス中のヨウ素周辺構造は同等
中性子線 回折	軽元素である B 及び O によるホウ酸塩骨格に対してより高精度で構造再現

上記の分析結果を拘束条件として、リバースモンテカルロ法 (RMC 法) により、BPI ガラス固化体の 3 次元構造を再現した。シミュレーション収束後の中性子及び X 線構造因子はいずれも実験により得られた曲線と良い一致を示し、ガラス構造について良好な再現性が確認された (図 2.2-1 参照)。

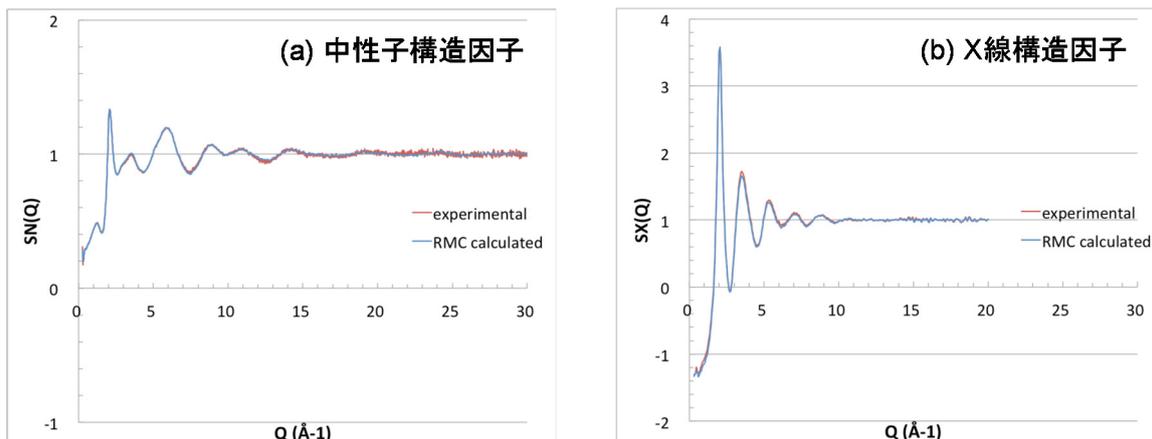


図 2.2-1 BPI ガラスの実測値及び RMC 計算による構造因子の比較

続いて、分子動力学法（MD 法）により配置構造の妥当性を有する分子構造と原子間相互ポテンシャルのモデル（MD モデル）の構築を目指し、各元素に関する原子間相互ポテンシャルを最適化し、その信頼性を高めることとした。具体的には、MD モデルにおける計算量の制約上、全粒子数 1184 粒子に減少させることにより、原子間相互ポテンシャルパラメータの最適化を目的とした繰り返し計算の効率性を高めた。その結果、これまでの RMC と比較して少ない粒子数での構造モデル化においても、構造解析実験で得られた構造関数を再現する構造モデルが得られることを確認した。上記において構築した RMC 構造モデルを初期構造として、密度汎関数法 (DFT) 計算により導出した原子間相互ポテンシャルを適用した MD 計算を実施し、MD 構造モデル中の種々の構造パラメータが RMC 構造モデルのそれらを維持するかに着目し、MD の適用性を検討した。BPI ガラス固化体の MD 構造モデルを図 2.2-2 に示す。

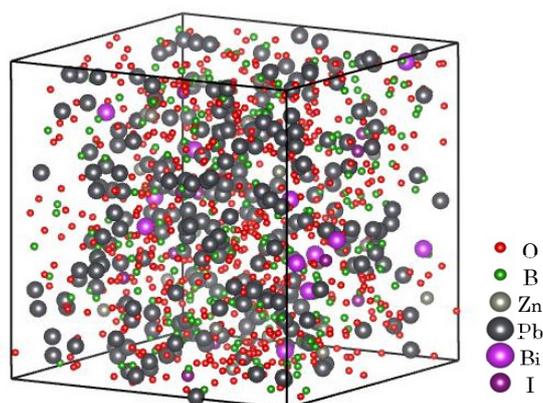


図 2.2-2 RMC 計算により得られた BPI ガラス固化体の構造モデル

2.2.2 BPI ガラス固化体のヨウ素放出特性

BPI ガラスの性能を評価するためには、BPI ガラス固化体からのヨウ素放出挙動の解明及び BPI ガラス固化体の物理・化学的な長期安定性に関する評価が重要である。長期のヨウ素放出の評価は、短期試験で得られた浸出データの単純な外挿だけでなく、ガラスからのヨウ素放出に関する基本的事象の理解と浸出モデルの構築が必要となり、ガラスの特性に加え、処分環境の条件（地下水組成）の影響を理解することが重要となる。

BPI ガラスからのヨウ素の放出挙動を把握するための試験として、多様な環境条件における浸漬試験を実施し、処分環境を考慮したベントナイト平衡水や代表的な地下水組成について、ガラスの溶出挙動と主要成分であるホウ素、ヨウ素および鉛等の浸出挙動を把握するための試験・評価を実施してきた。多様な環境条件における浸漬試験一覧を表 2.2-3 に示す。

多様な浸漬液への浸漬試験の結果、本編 2.2 節で述べるように BPI ガラス固化体からのヨウ素の放出がホウ素の溶出に対して調和的に進行せず、ホウ素の浸出量に対してヨウ素の浸出量が少ない（図の破線の下側にデータが集中する）グループと調和的な挙動を示す（図の破線に沿って浸出が進行する）グループとに大別される（図 2.2-3）。

表 2.2-3 多様な環境条件における浸漬試験一覧

試験条件	浸漬液の種類	溶液性状	雰囲気		還元剤	SA/V (cm ⁻¹)
			大気	低酸素		
溶液種類	イオン交換水	pH9、pH11、pH12.5	○	○	電解鉄	0.1
	NaCl 溶液	0.0055M、0.055M	—	○	電解鉄	0.1
		0.55M	○	○	電解鉄	0.1
	模擬海水	0.55M NaCl+0.05M NaHCO ₃	—	○	電解鉄	0.1
	模擬海水共存イオン影響	硫黄 (HS ⁻) の影響 (0.5、30mM Na ₂ S)	—	○	電解鉄	0.1
		リン酸の影響 (3×10 ⁻⁴ mM NaH ₂ PO ₄)				
	ベントナイト平衡水	クニゲル V1/イオン交換水 =1/50 (g/ ml)	○	○	電解鉄	0.1
	模擬海水を使用したベントナイト平衡水	クニゲル V1/模擬海水 =1/50 (g/ ml)	—	○	電解鉄	0.1
	ベントナイトセメント平衡水	OPC セメント/クニゲル V1 平衡水 HFSC セメント/クニゲル V1 平衡水	—	○	電解鉄	0.1
	ベントナイト平衡水共存イオン影響	炭酸イオン、硫黄 (HS ⁻) 及び リン酸の影響	—	○	電解鉄	0.1
降水系地下水共存イオン影響	リン酸の影響 (3×10 ⁻³ mM NaH ₂ PO ₄)	—	○	電解鉄	0.1	
非調和溶解	イオン交換水	Ca(OH) ₂ (pH9 に調整)	—	○	電解鉄	0.1
温度依存性	ベントナイト平衡水	10℃、40℃、60℃	浸漬	液調整	電解鉄	0.1
固液比	ベントナイト平衡水	クニゲル V1/イオン交換水 =1/50 (g/ ml)	—	○	電解鉄	0.17~ 9.0
ガラス原料 (鉛丹)	ベントナイト平衡水	クニゲル V1/イオン交換水 =1/50 (g/ ml)	—	○	電解鉄	0.1
	降水系地下水	3.55mM NaHCO ₃ +0.11mM CaSO ₄	—	○	電解鉄	0.1
	模擬海水	0.55M NaCl+0.05M NaHCO ₃	—	○	電解鉄	0.1
	イオン交換水	Ca(OH) ₂ (pH9 に調整)	—	○	電解鉄	0.1

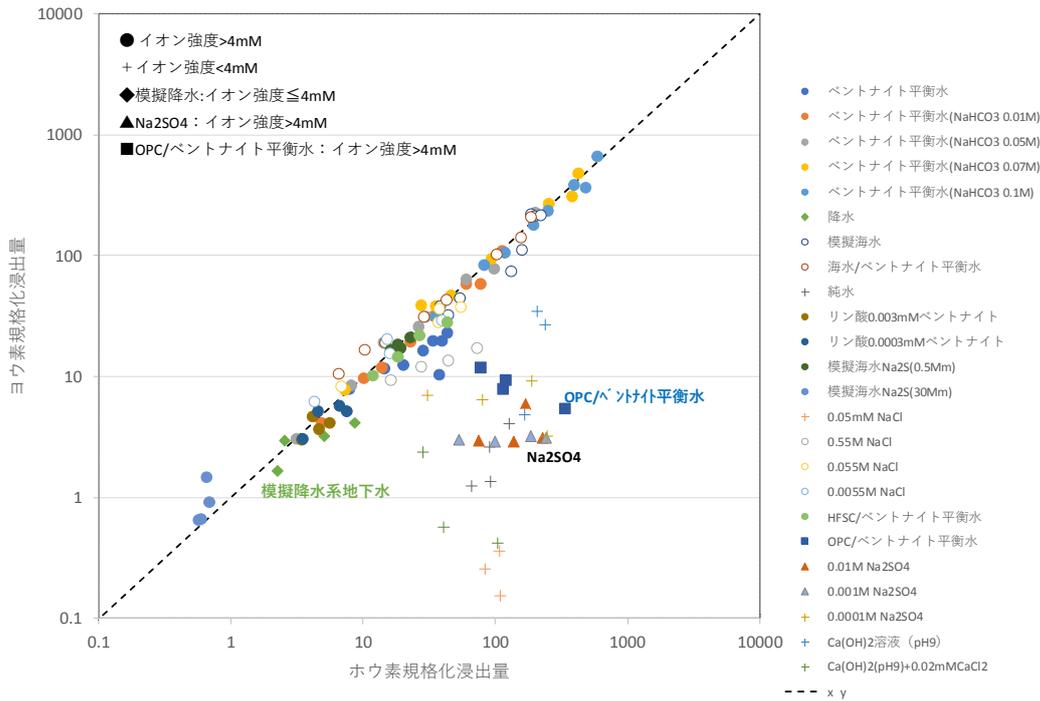


図 2.2-3 ホウ素とヨウ素の規格化浸出量の比較

前者は、BPI ガラスの溶解によってガラス表面に変質層を形成しないか、形成してもごく薄い層のみを形成するグループであり、ホウ素のみが液相に放出された結果、ガラス表面近傍に残存する鉛とヨウ素とが PbI_2 とと思われるヨウ素の濃縮層を形成することで、ヨウ素の放出が抑制されると考えられた。

一方、後者は BPI ガラスの溶解によってガラス表面に鉛を含む変質鉱物の層を形成し、その層の成長によって Pb が消費されることによって、ヨウ素の放出が抑制されず、結果としてヨウ素とホウ素との規格化浸出量が調和的な挙動を示すと考えられた。

ヨウ素の規格化浸出量の経時変化に(1)式に示す拡散則を適用し、各浸漬条件における BPI ガラス固化体中のヨウ素を放出する期間を計算した。

(1)式から、ある規格化浸出量に到達する時間は(2)式で表されるので、固化体が全量溶解する時間（ヨウ素を放出する期間）は、固化体の重量と表面積から計算できる。なお、BPI ガラス固化体の重量は、キャニスタ 1 本分の重量として 10^6g/体 とし、表面積は $1.7\text{m}^2/\text{体}$ を使用した。

$$NL = a \times \sqrt{t} + b \quad \dots \dots \dots (1)$$

$$t = ((NL - b)/a)^2 \quad \dots \dots \dots (2)$$

NL : 規格化浸出量 [g/m^2], a : 定数 [$\text{g/m}^2/\text{d}^{0.5}$], t : 時間 [day], b : 定数 [g/m^2]

BPI ガラスの寿命をセメント影響 (pH で代表、横軸) と海水影響 (炭酸イオン濃度で代表、縦軸) で評価した結果を図 2.2-4 に示す。図中プロット脇の数字は、BPI ガラスの寿命を年単位で示しており、黒数字は 10 万年以上の寿命を、赤数字は 10 万年以下の寿命であることを示している。pH11 以下では、炭酸イオン（ここでは、無機炭素濃度として表示）濃度が 0.05M より高くなると 10 万年以下の寿命となる傾向が認められるが、同じ炭酸イオン濃度でもリン酸イオンや

HS⁻共存下では寿命が長くなっている。

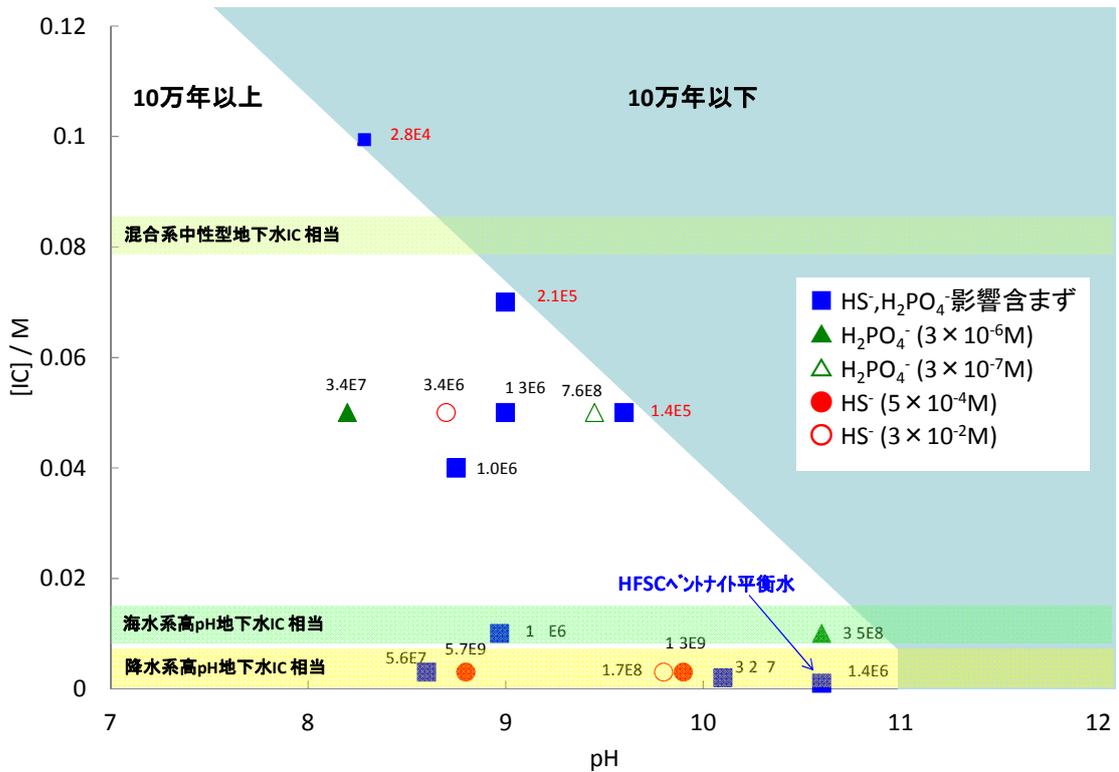


図 2.2-4 BPI ガラスの寿命評価

3. 平成 31 年度の実施内容の詳細

本章では、報告書本編に記載できなかった詳細な実施内容を資料として掲載する。

3.1 アルミナ HIP 固化体の固相分析に於ける濃度プロファイルの抽出方法

EPMA マッピングの情報には分析対象元素の濃度データが 2 次元情報として含まれているので、任意の部位の元素濃度情報が得られる。そこで、アルミナ固化体の主要元素 (Ag、I、S) の深さ方向の濃度プロファイルを抽出して解析した。EPMA の濃度情報は半定量的であるため、元素比については以下のように仮定し、Ag の濃度を基準として、S と I の濃度を補正した。

- ・ 十分深い領域の S が検出されない領域では、AgI が存在するとし、その領域で原子比 I/Ag = 1.0 となるように、全領域の I の強度を補正した。
- ・ 表面領域の S が存在して I が存在しない領域では、Ag₂S が存在するとして、その領域で原子比 S/Ag = 2.0 となるように、全領域の S の強度を補正した。さらに、Ag/S の量論比を議論するため、さらに S の強度を 2 倍した。

図 3.1-1 に 10-1 の EPMA マッピング結果を示し、その中から 2 カ所について深さ方向の元素濃度プロファイルを求めたものを図 3.1-3 に示す。10-1 については、約 100 μm 四方の領域 (図 3.1-2 の 1,000 倍視野の SEM 画像 (A-1) に相当する領域) を分析した。

SEM-EDX 分析で見たように、事前洗浄の影響を受けて Ag₂S が生じているのは表面から 20 μm 程度であり、浸漬試験時には浸漬液の純水が浸入するだけである。このため、AgI が溶解度に従って溶けて行き、深部に AgI が溶け残っていると考えられる。

11-1 の EPMA マッピング結果を図 3.1-4 に示し、その中から 2 カ所について深さ方向の元素濃度プロファイルを求めたものを図 3.1-6 に示す。未粉碎の廃銀吸着材の周囲に着目するため、約 300 μm 四方の領域（図 3.1-5 の 300 倍視野の SEM 画像（B）に相当する領域）を分析した。11-1 では I と S は排他的に存在していて、高 HS 濃度条件の浸漬条件下で AgI → Ag₂S の反応に伴って I が放出される状況を示している。領域 A では表面から S が浸入して I が消失しているが、領域 B では浅い領域（図 3.1-6 緑色の点線で囲んだ領域）において、I が Ag とともに残り、AgI が残留しているところがある。これは、AgI を含む部分が周囲から孤立していて、AgI が浸漬液と接触しないまま保たれているためと考えられる。

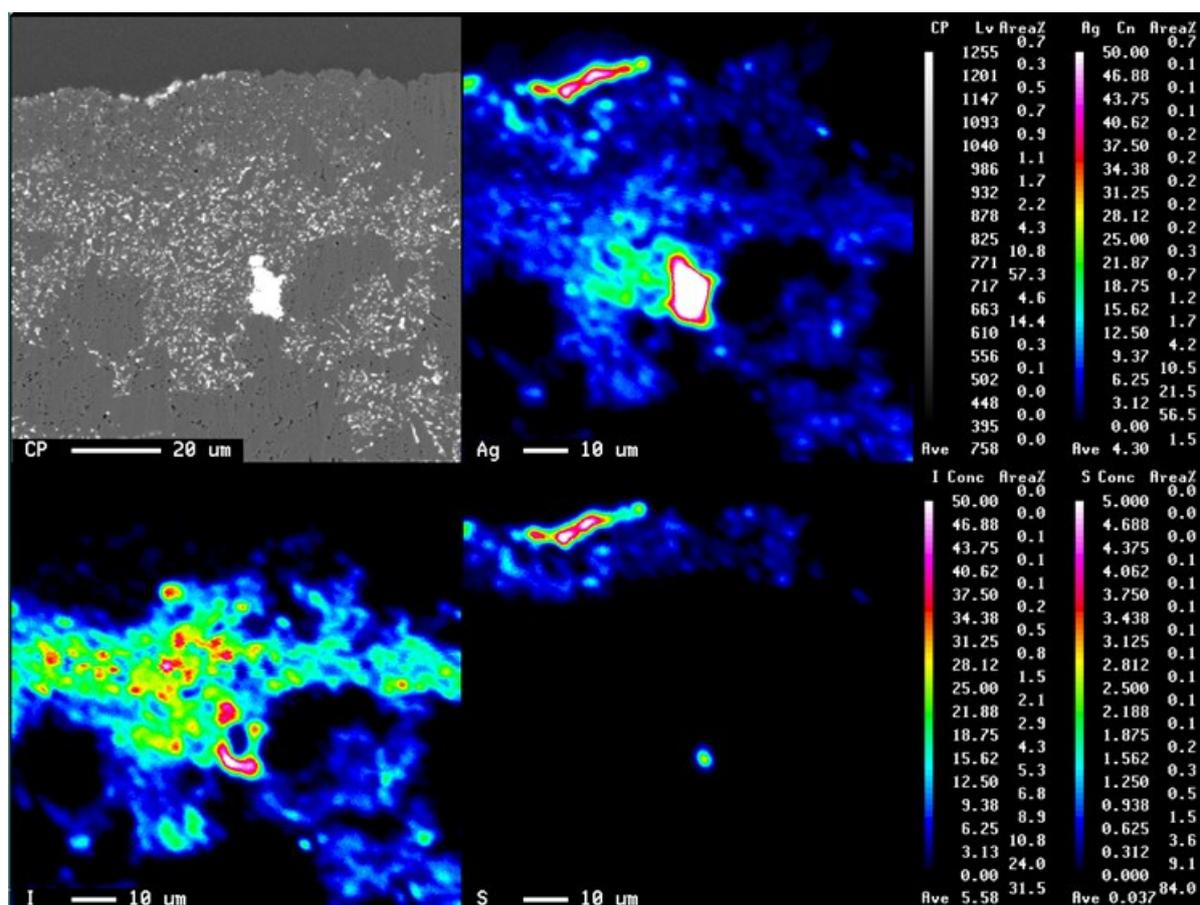


図 3.1-1 浸漬後の固化体断面の EPMA 分析結果（固化体 10-1）

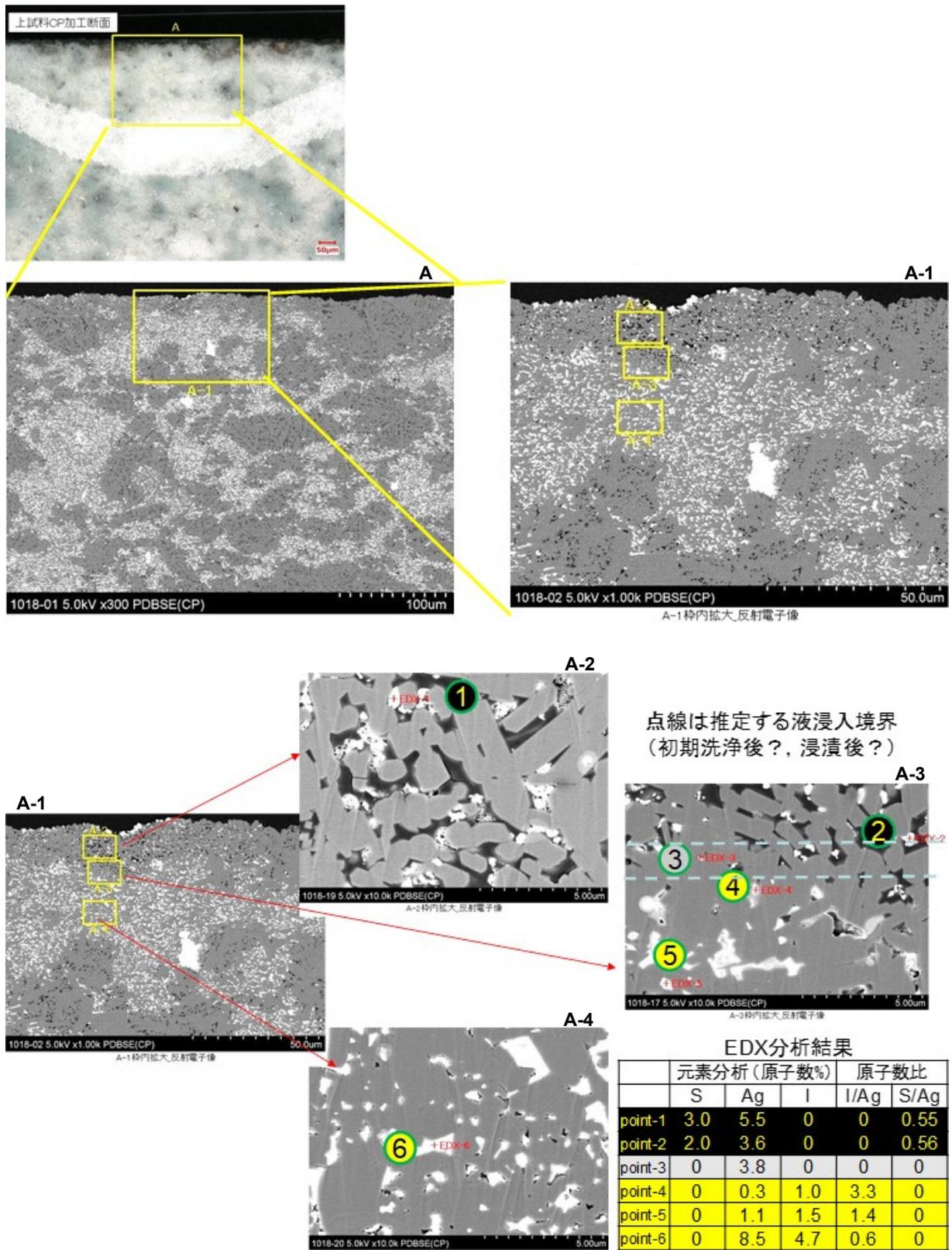
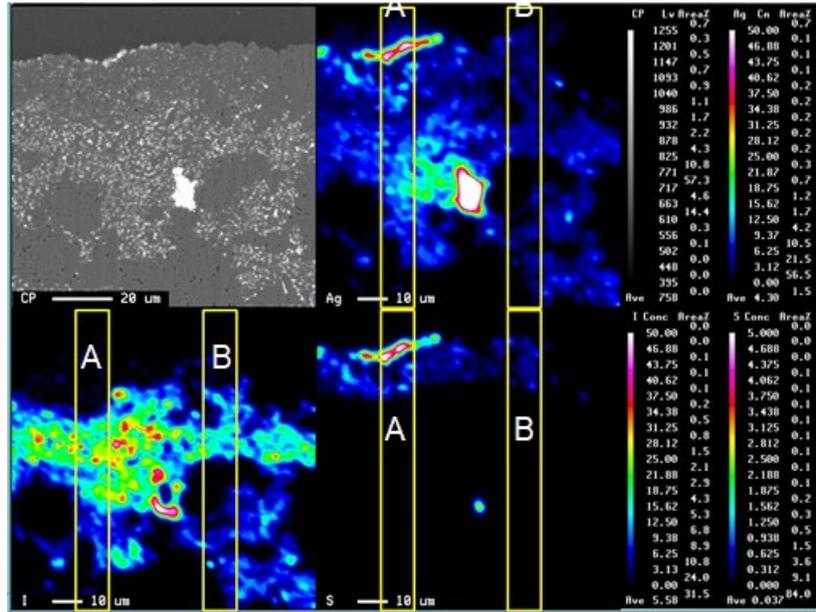
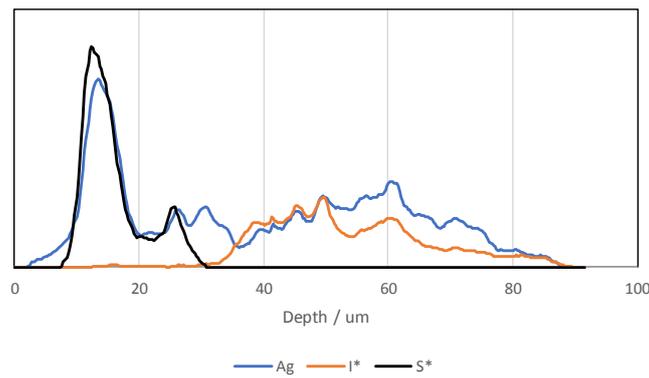


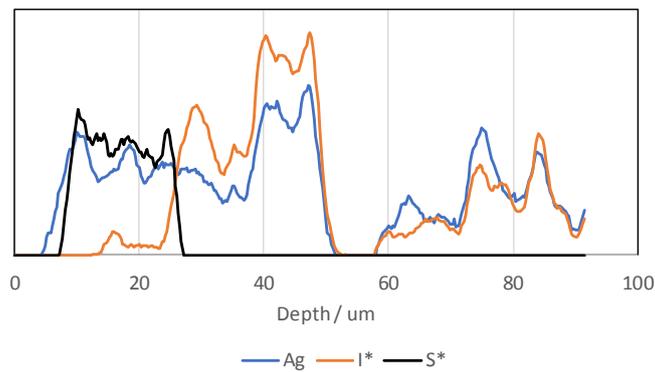
図 3.1-2 浸漬後の固化体断面の SEM-EDX 分析結果 (固化体 10-1)



(1) 固化体 10-1 の EPMA における解析領域



(2) 領域 A の深さ方向の元素濃度プロファイル



(3) 領域 B の深さ方向の元素濃度プロファイル

*I と S の強度は、Ag を基準として、表面は Ag_2S 、深部は AgI を仮定して補正

図 3.1-3 深さ方向の元素濃度プロファイル (固化体 10-1)

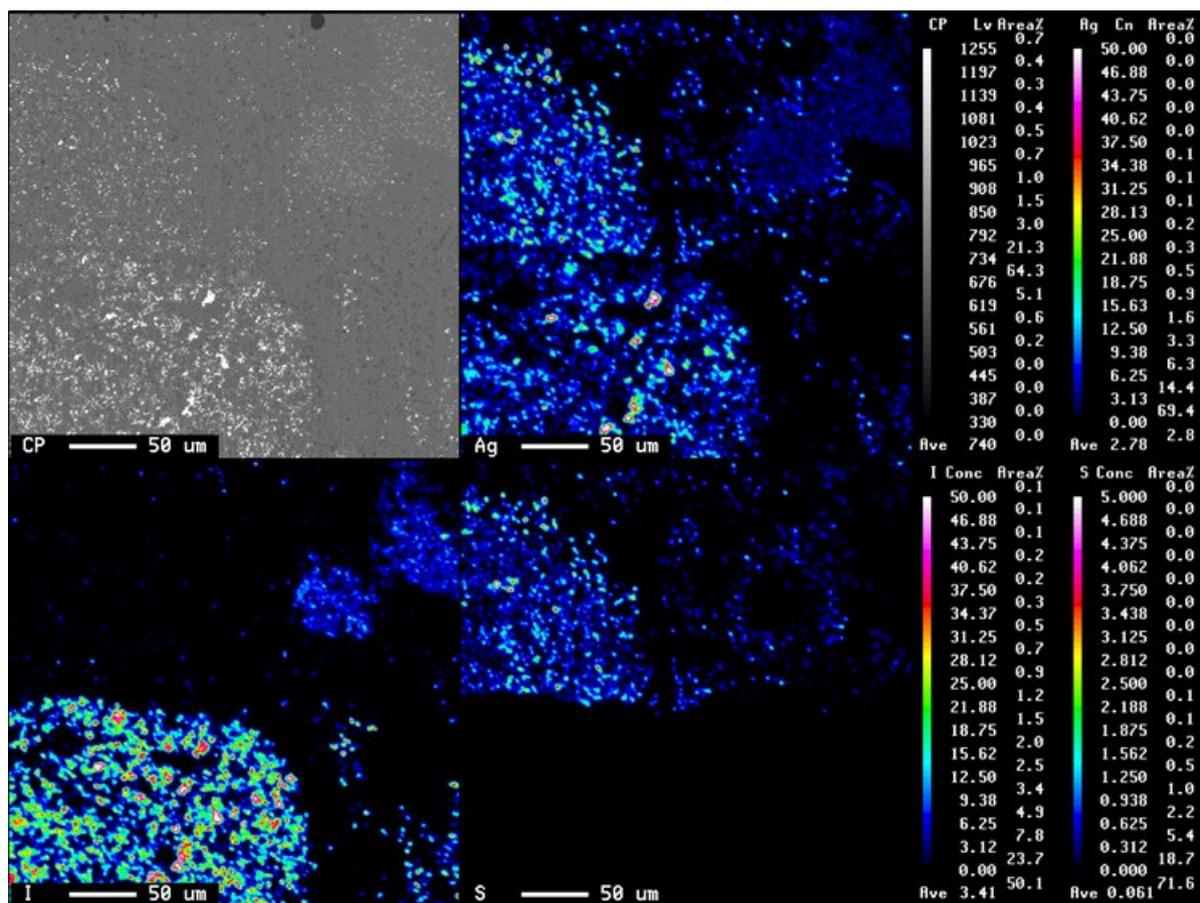


図 3.1-4 浸漬後の固化体断面の EPMA 分析結果 (固化体 11-1)

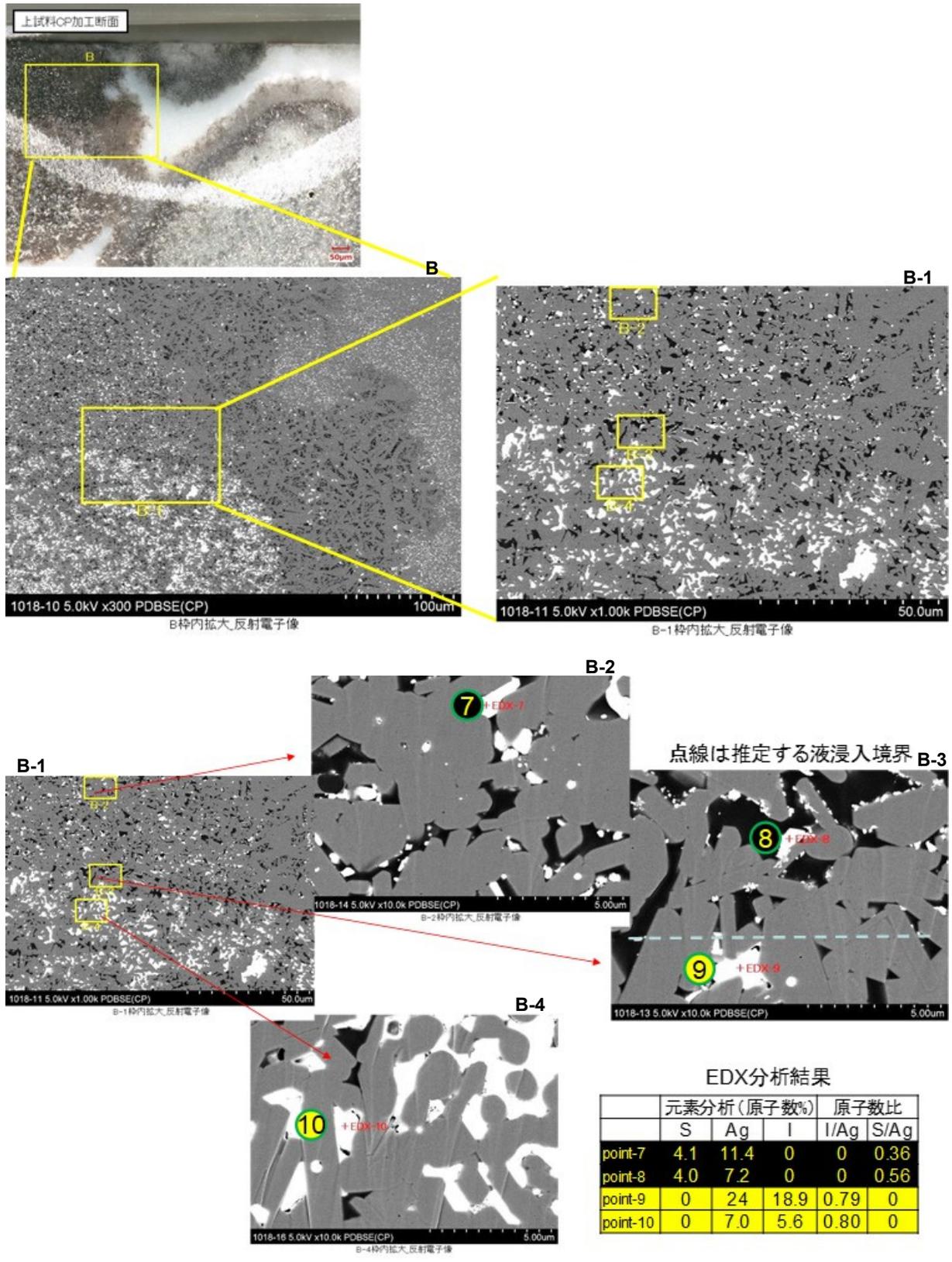
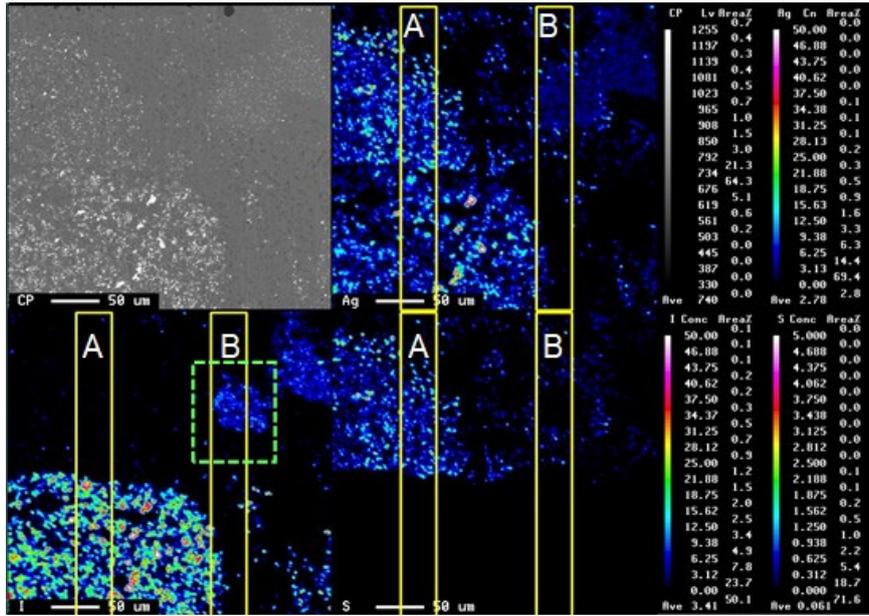
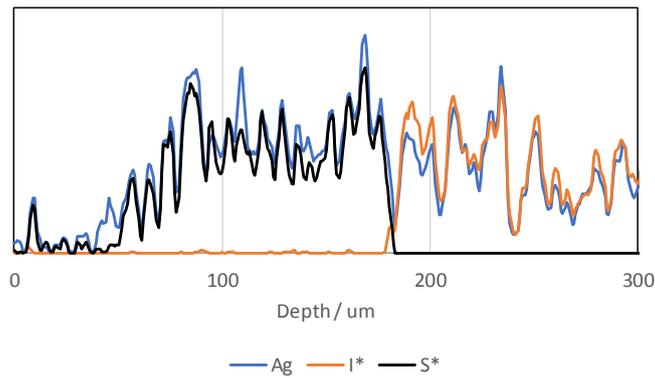


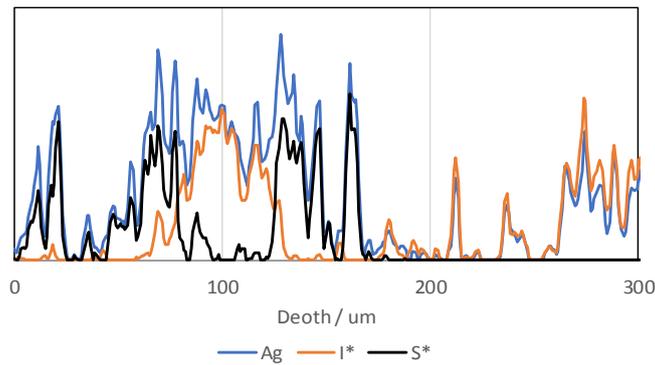
図 3.1-5 浸漬後の固化体断面の SEM-EDX 分析結果 (固化体 11-1)



(1) 固化体 11-1 の EPMA における解析領域



(2) 領域 A の深さ方向の元素濃度プロファイル



(3) 領域 B の深さ方向の元素濃度プロファイル

*I と S の強度は、Ag を基準として、表面は Ag_2S 、深部は AgI を仮定して補正

図 3.1-6 深さ方向の元素濃度プロファイル (固化体 11-1)

3.2 BPI ガラス固化体の炭酸塩影響試験の詳細

工業用鉛ガラスの原料としては鉛丹 (Pb_3O_4) が一般的であることから、汎用性のある鉛原料 (Pb_3O_4) をガラスフリット原料に使用した BPI ガラスについて、ベントナイト平衡水や模擬降水系地下水、模擬海水を用いた浸漬試験を行ってきた。一方、平成 28 年度から実施した炭酸塩影響試験の結果からは、ヨウ素の浸出量は初期炭酸イオン濃度に依存し増加しており、浸出量は炭酸イオン濃度により支配されることが示唆されたことから (原環センター, 2017)、鉛丹を原料として使用した BPI ガラスの炭酸塩影響試験を開始した。試験条件を表 3.2-1 に、浸漬液の組成を表 3.2-2 示す。

表 3.2-1 炭酸塩影響試験条件

項目		浸漬条件
液固比		10 ml/g
固相	ガラス	BPI ガラス固化体 (鉛丹使用), 約 $10 \times 20 \times 5$ mm (約 7 g)
液相	浸漬液	① ベントナイト平衡水+0.1M NaHCO_3 ② ベントナイト平衡水+0.05M NaHCO_3
気相		低酸素雰囲気
試験期間		14 日, 30 日, 60 日, 120 日, 200 日, 400 日, 600 日, 800 日
全試験数		全 32 サンプル (=期間 8 × 繰返し 2 × 浸漬液 2)
分析項目		① 液相の pH, Eh, 温度 ② 液相化学成分 (I, B, Pb, Zn, Bi, Fe, IC)

* : pH 及び Eh は定期的に測定, その他の分析項目は試験期間終了後に実施。

表 3.2-2 浸漬液の分析結果

浸漬液	Na mg/ L	K mg/ L	Ca mg/ L	Si mg/ L	Al mg/ L	Mg mg/ L	IC mg/ L	Cl mg/ L	SO ₄ mg/ L
ベントナイト平衡水+0.1M NaHCO_3	1878	6.7	2.2	0.7	0.02	0.01	1133	2.5	59
ベントナイト平衡水+0.05M NaHCO_3	1008	5.1	4.3	1.0	0.01	0.12	599	2.0	63

浸漬試験は、以下の手順で実施した。

- ・グローブボックス内で、浸漬液に還元剤として電解鉄を浸漬液に対して約 1 wt% 添加し、浸漬液の Eh を -200 mV 以下に調整した。
- ・アルゴンで一昼夜バブリング後に Eh を測定し、所定値になっていない場合には再度電解鉄を添加して性状を調整した。
- ・BPI ガラス固化体を秤量し、所定の液固比となる浸漬液量を算出した
- ・浸漬液を浸漬容器に③で算出した液量を添加した。
- ・所定期間浸漬後の浸漬液をグローブボックス内においてディスミックフィルタ (孔径 0.45 μm) を用いてサンプル容器に採取した。分析試料をグローブボックスから取り出し、ICP-AES または ICP-MS を使用し、ホウ素、ヨウ素、鉛、亜鉛及びビスマスの濃度を分析した。
- ・規格化浸出量 Q (g/m^2) 及び規格化浸出率 R ($\text{g}/\text{m}^2/\text{d}$) は、それぞれ式(3.2-1)と式(3.2-2)に

より算出した。

$$Q = \left(\frac{\frac{A_t}{A_0} \times W_0}{S} \right) \quad (3.2-1)$$

$$R = \frac{Q}{d} \quad (3.2-2)$$

A_t : t 日後の元素浸出量 (g), A_0 : 初期元素含有量 (g) W_0 : 試料初期重量 (g),
 S : 試料表面積 (m^2), d : 浸漬日数 (日)

120 日までの、ホウ素とヨウ素の規格化浸出量の経時変化を図 3.2-1 と図 3.2-2 に示す。比較のために、従来の BPI ガラスの浸漬試験結果も示すが、両者はほぼ同等の浸出量を示すとともに、炭酸イオン濃度が高い方が、浸出量が高くなった。ホウ素とヨウ素の規格化浸出量の比較を図 3.2-3 に示すが、いずれの条件でも調和溶解していた。pH 変化は、図 3.2-4 に示す。いずれも pH は 9 付近であり、 $NaHCO_3$ 濃度にかかわらず、炭酸イオンは主に HCO_3^- の形態であると考えられる。また、図には示していないが、試験期間を通し、Eh は $<-400mV$ となり、還元状態を維持した。

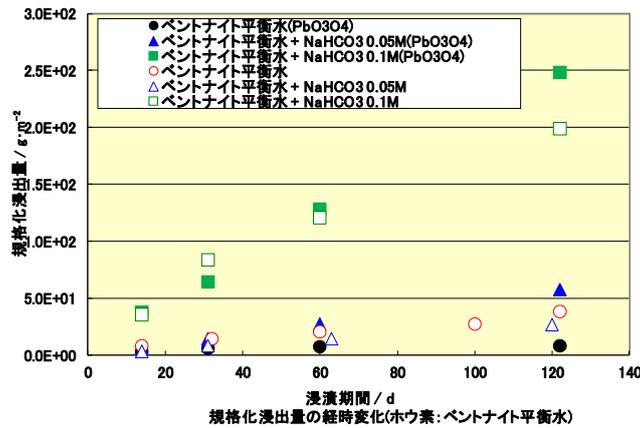


図 3.2-1 ホウ素の規格化浸出量の経時変化 (炭酸塩影響)

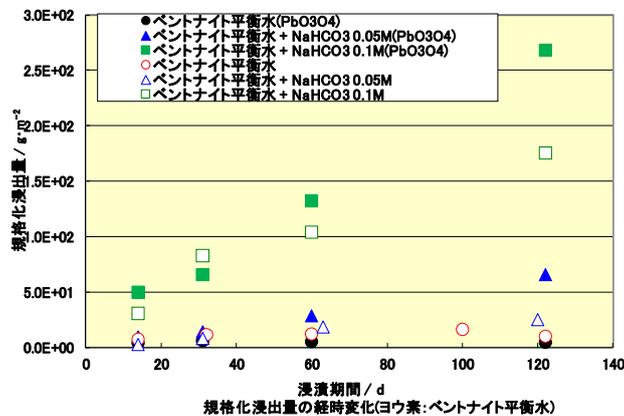


図 3.2-2 ヨウ素の規格化浸出量の経時変化 (炭酸塩影響)

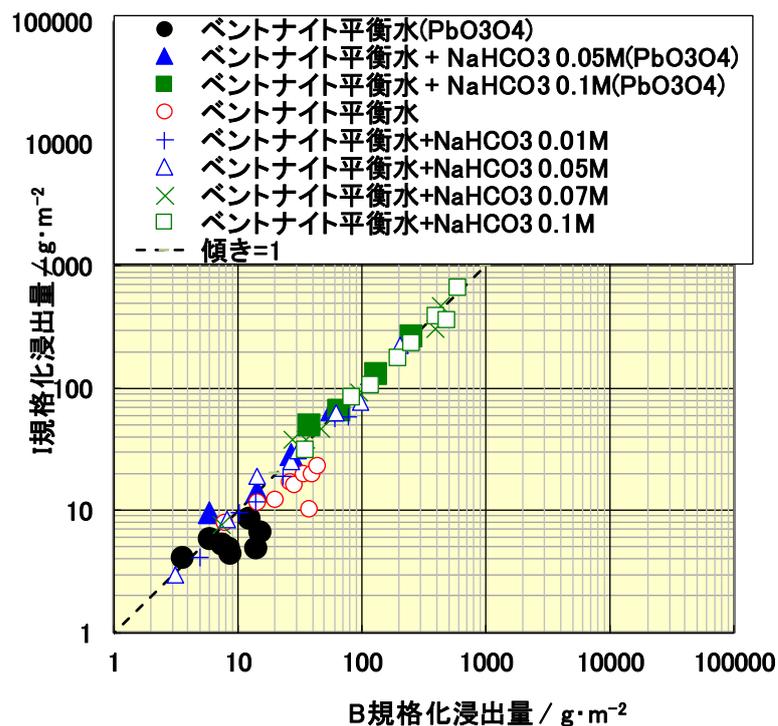


図 3.2-3 ホウ素とヨウ素の規格化浸出量の比較

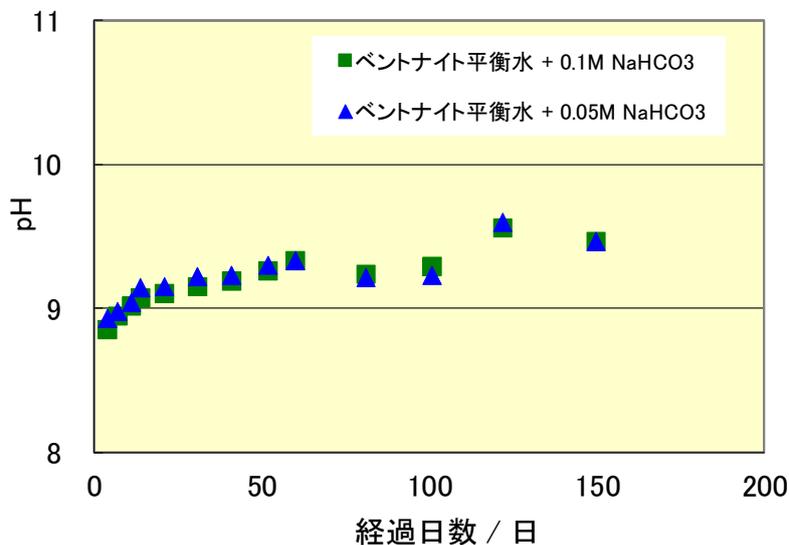


図 3.2-4 pH の経時変化 (炭酸塩影響)

3.3 BPI ガラス固化体の浸漬試験の条件

これまで多様な環境条件における浸漬試験を実施してきており、得られた浸漬試験データに基づき、浸漬液の液性と BPI ガラスの溶解挙動の関連性について検討した。炭酸塩影響試験の結果からは、ヨウ素の浸出量は初期炭酸イオン濃度に依存し増加しており、浸出量は炭酸イオン濃度により支配されることが示唆されているが、炭酸塩を含まない浸漬液についても試験を行って

る。NaCl を使用した炭酸塩フリーの浸漬試験は平成 19 年度に取得している（原環センター，2008）。結果を、図 3.3-1 と図 3.3-2 に示す。NaCl 濃度が低いほど、ホウ素の規格化浸出量は大きい一方、NaCl 濃度が低い場合、ヨウ素の規格化浸出率は低くなった。このため、図 3.3-3 に示すように、NaCl 濃度が 0.0055M 以上では調和溶解するが、0.05mM では調和溶解しないことが分かる。

既に、平成 19 年度以降継続的（原環センター，2008～2018）に取得している、pH9 における Ca(OH)₂（Ca 濃度:約 0.05mM）の影響は、溶解した鉛が反応するイオンなどが存在しないために、鉛はヨウ素と反応し、ホウ素とヨウ素は調和的には溶解しないと考察しており、上述の NaCl 濃度が低いときに、ホウ素とヨウ素は調和溶解しないのは、同様の理由と考え、イオン強度がとホウ素とヨウ素の規格化浸出量に影響を及ぼす影響を調べた。結果を、図 2.2-3 に示す。イオン強度が 4mM 模擬降水系地下水（3.55mM NaHCO₃+0.11mM CaSO₄）中では調和溶解をしており、例外もあるがイオン強度が<4mM 低い場合、ホウ素とヨウ素は調和溶解しない傾向が認められた。

イオン強度が高いにもかかわらず、調和溶解しなかった試験の内、OPC ベントナイト平衡水は、pH が 12 付近と高いことが影響していると考えられる。

同じく、調和溶解しなかった Na₂SO₄ での浸漬試験は平成 20 年度に実施している（原環センター，2009）。結果を図 3.3-5 と図 3.3-6 に再掲するが、ホウ素については、Na₂SO₄ 濃度間（0.0001M、0.001M 及び 0.01M）の差異は顕著ではなく、規格化浸出率がいずれも緩衝材間隙水（ベントナイト平衡水）よりも高い。これに対して、ヨウ素については Na₂SO₄ 濃度間の差異は顕著ではないが、規格化浸出率がいずれも緩衝材間隙水よりも低く、結果として調和溶解しなかった。pH は 10 前後で推移しており、OPC ベントナイト平衡水のように、高 pH が浸出量に影響を及ぼしたわけではなく、他の溶解メカニズムが働いていると思われる。

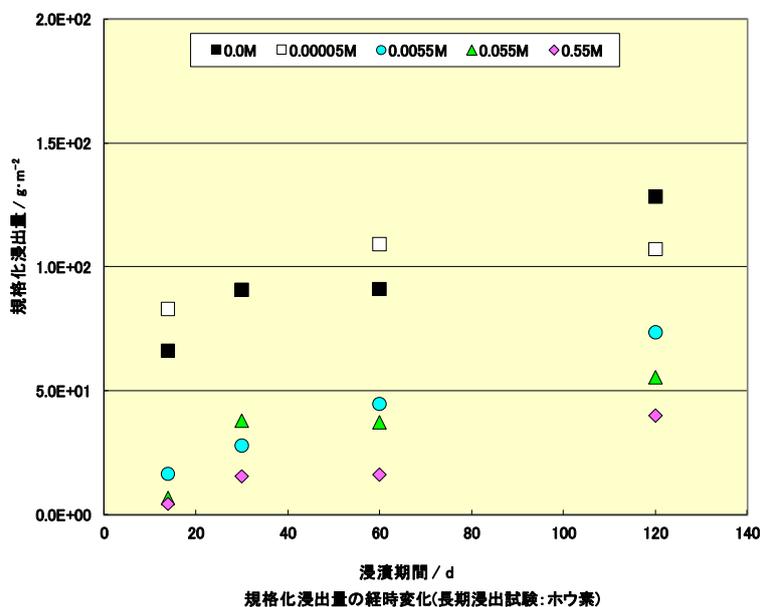


図 3.3-1 NaCl 系での浸出試験結果（ホウ素）

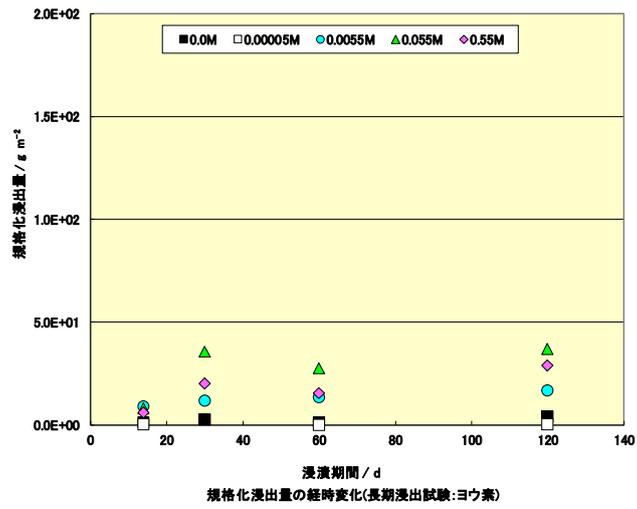


図 3.3-2 NaCl 系での浸出試験結果 (ヨウ素)

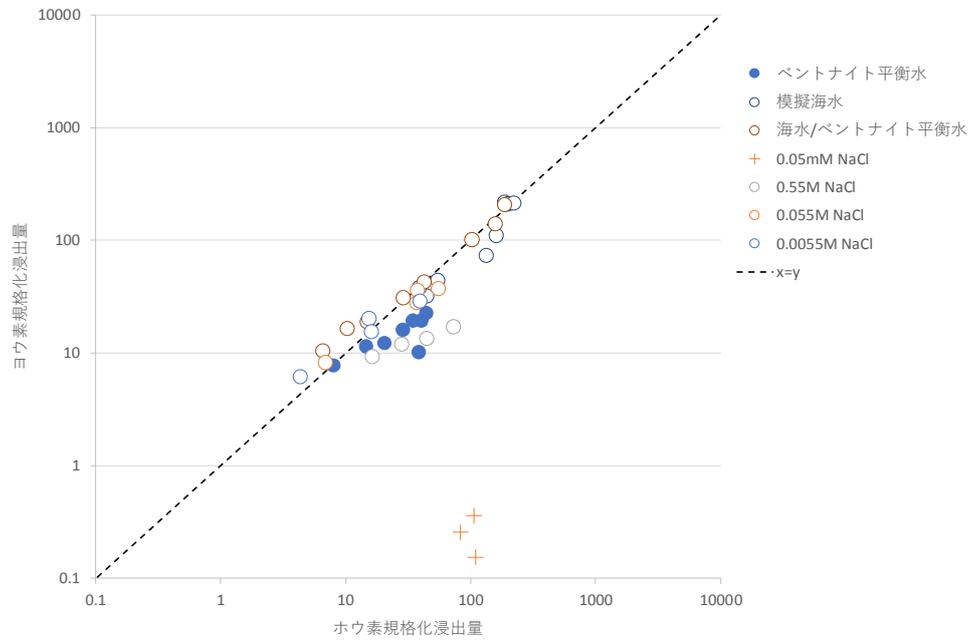


図 3.3-3 NaCl 系でのホウ素とヨウ素の規格化浸出量の比較

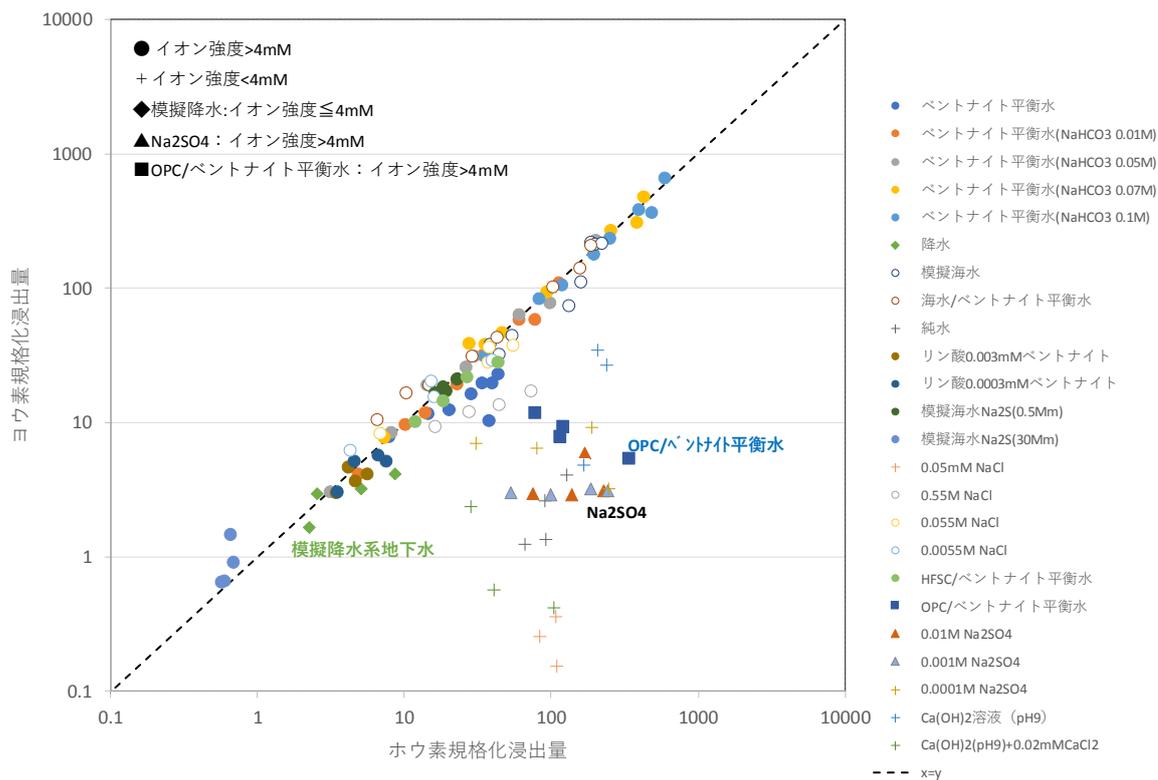


図 3.3-4 ホウ素とヨウ素の規格化浸出量の比較

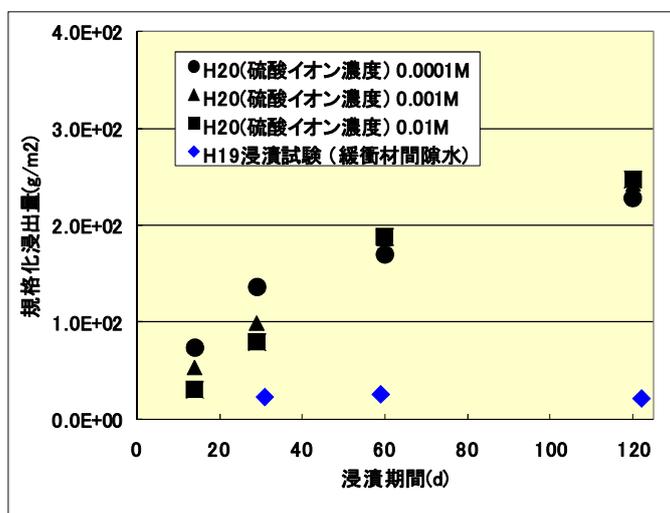


図 3.3-5 Na₂SO₄系の浸出試験結果（ホウ素）（平成20年報告書再掲）

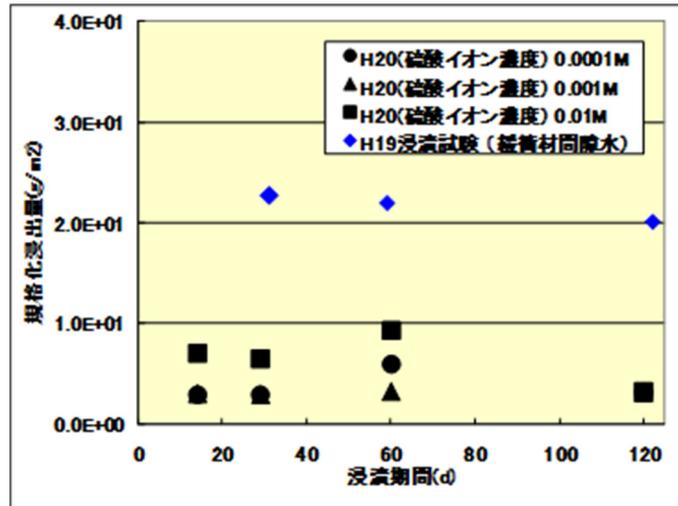


図 3.3-6 Na₂SO₄系の浸出試験結果（ヨウ素）（平成20年報告書再掲）

1) 変質層の固相分析

これまでの地球化学計算の結果からは、ベントナイト平衡水中のリン酸濃度が $1 \times 10^{-6} \text{mM}$ を超えるとパイロモルファイト ($\text{Pb}_5(\text{PO}_4)_3\text{Cl}$) が生成する。また、HS⁻共存下では、HS⁻イオン濃度が $1 \times 10^{-8} \text{mM}$ を超えるとガレナ (PbS) が生成することが示された(原環センター, 2018)。

一方、固相分析の結果からは、 NaH_2PO_4 を $3 \times 10^{-4} \text{mM}$ または $3 \times 10^{-3} \text{mM}$ 添加しても、パイロモルファイトは観察されず(原環センター, 2017)、 Na_2S を 0.5mM 添加してもガレナはほとんど観察されなかった(原環センター, 2016)。しかしながら、リン酸やHS⁻イオン存在下において、ホウ素やヨウ素の浸出率が低下するため、これらのイオンがBPIガラスと何らかの相互作用をしていると考えられる。これを確認するため、昨年度から継続して浸漬している、より高濃度のリン酸イオンとHS⁻イオン共存下で浸漬したBPIガラスの固相分析を実施した。

表 3.3-1 固相分析用リン酸及びHS⁻影響試験条件

項目		浸漬条件
液固比		10 ml/g
固相	ガラス	BPI ガラス固化体, 約 10×20×5 mm (約 7 g)
液相	浸漬液	① ベントナイト平衡水+1mM NaHPO ₄ ② ベントナイト平衡水+1mM Na ₂ S ③ 模擬海水+30mM Na ₂ S
気相		低酸素雰囲気
試験期間		120 日以上
全試験数		全 4 サンプル (=期間 1 × 繰返し 2 × 浸漬液 2)
分析項目		① 液相の pH, Eh, 温度 ② 液相化学成分 (I, B, Pb, Zn, Bi, Fe, IC)

表 3.3-1 のサンプルについて、浸漬期間 350 日で浸漬を終了した。試料の外観を図 3.3-7 に示す。ベントナイトにリン酸を添加した溶液に浸漬した試料は、全体的に黒色を呈した。HS⁻を添加した溶液に浸漬した試料では、表面が鏡面状であった。

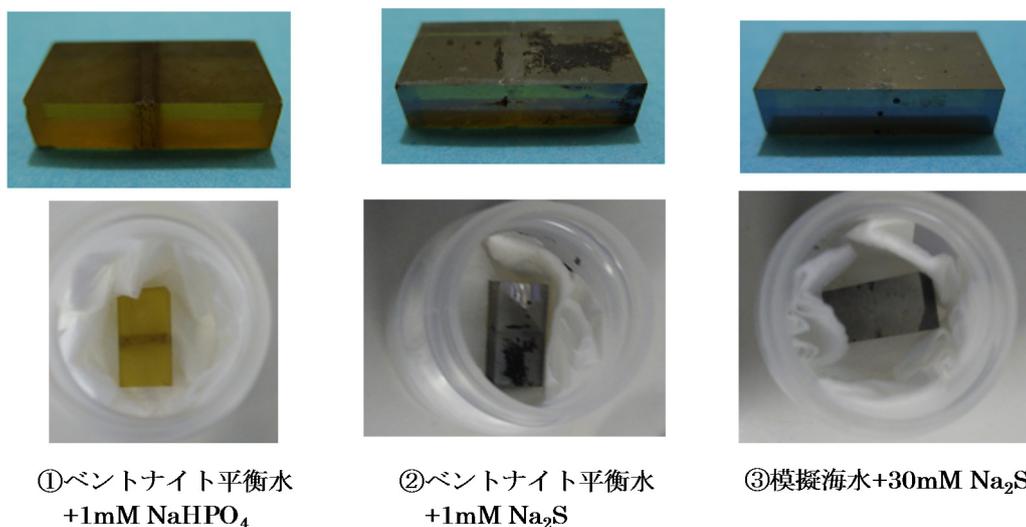


図 3.3-7 浸漬終了後の試料の外観

① リン酸の影響

350 日浸漬後のホウ素とヨウ素の浸漬試験の結果を、これまで報告したリン酸塩を添加したベントナイト平衡水中での試験の結果と合わせて、それぞれ図 3.3-8 と図 3.3-9 に示す。これまでの浸漬試験より浸漬期間が長くなっているにもかかわらず、ホウ素及びヨウ素の規格化浸出量はともにやや低く、リン酸濃度が 3~4 桁高くなったことで、溶解がさらに抑制されることが示された。なお今回、浸漬液中のリン酸濃度を高くしたことにより、ICP-AES でのヨウ素の検出に際し、リンの波長が干渉することが判明したので、ホウ素、ヨウ素とも ICP-MS で計測した（図中◆のプロット）。

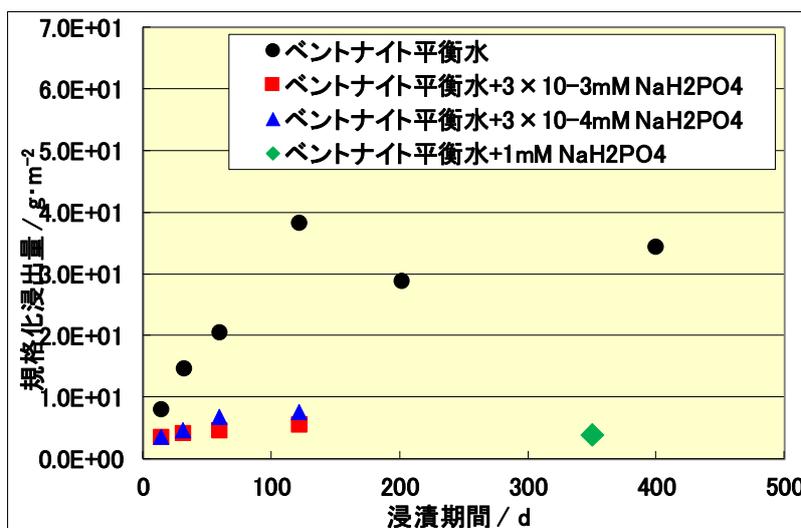


図 3.3-8 リン酸 1mM を添加したベントナイト平衡水中のホウ素の規格化浸出量の経時変化

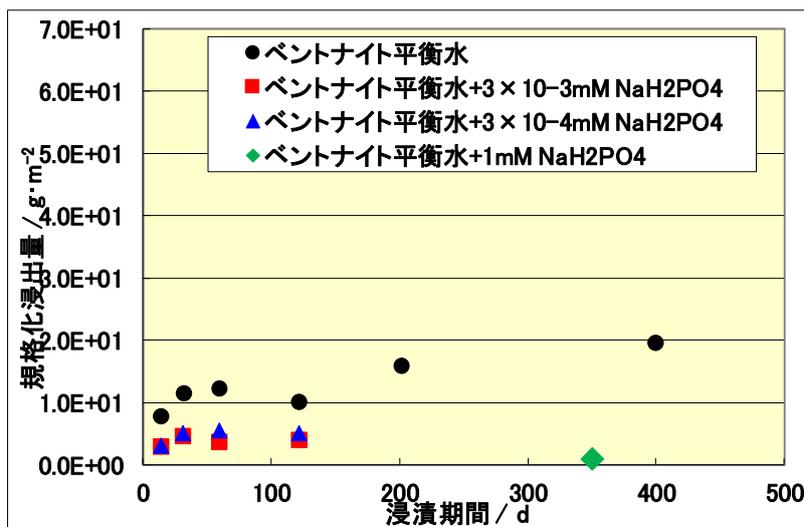


図 3.3-9 リン酸 1mM を添加したベントナイト平衡水中のヨウ素の規格化浸出量の経時変化

XRD の結果を図 3.3-10 に示す。検出された XRD のパターンはガラス基板からのハローを除くと、茶色矢印で示した c 軸配向している hidroセルサイトによるものと考えられるピークの外、溶解度の低いリン酸塩である OH-パイロモルファイト ($\text{Pb}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH})$, 以下 Pb-HAp という) によるものであり、図 3.3-12 に示す SEM-EDS による元素マッピングの結果から、この相全体に浸漬液に由来するカルシウムが分布していること、カルシウムを含む他の相 (例えばトリリン酸カルシウム等の溶解度の低いリン酸カルシウム) が検出されていないこと、OH-パイロモルファイトと水酸アパタイト ($\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH})$, 以下, HAp という) とがともに広義のアパタイトに属しており (金澤孝文ほか,1975;大和田,1990)、全率固溶すること (Takashi Suzuki,et.al,1982) から考えると、この析出層は Pb-HAp の Pb の一部を Ca で置換した固溶体であると推定した。また、BPI ガラス基板のハローピークが出現していることから、析出した結晶は薄いと考えられる。茶色矢印で示した二つのピークは、c 軸配向している hidroセルサイトの 003 と 009 で説明できる。

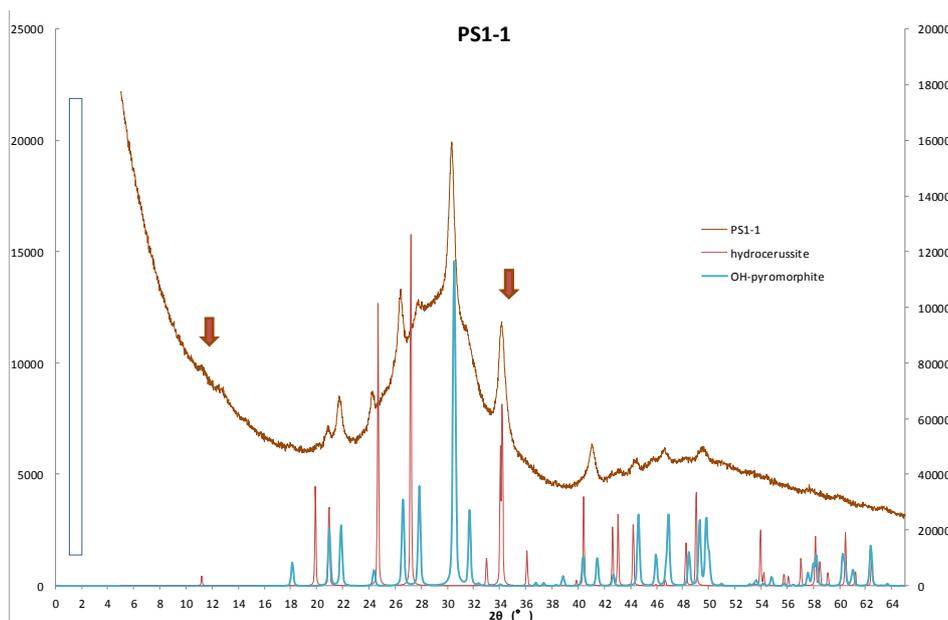


図 3.3-10 リン酸 1mM を添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の XRD

SEMの結果を図 3.3-11 に示す。XRD から予想されたように、変質層は薄く、ガラス上に連続的に $0.3\ \mu\text{m}$ 程度の微粒子で構成される膜が形成されていた。

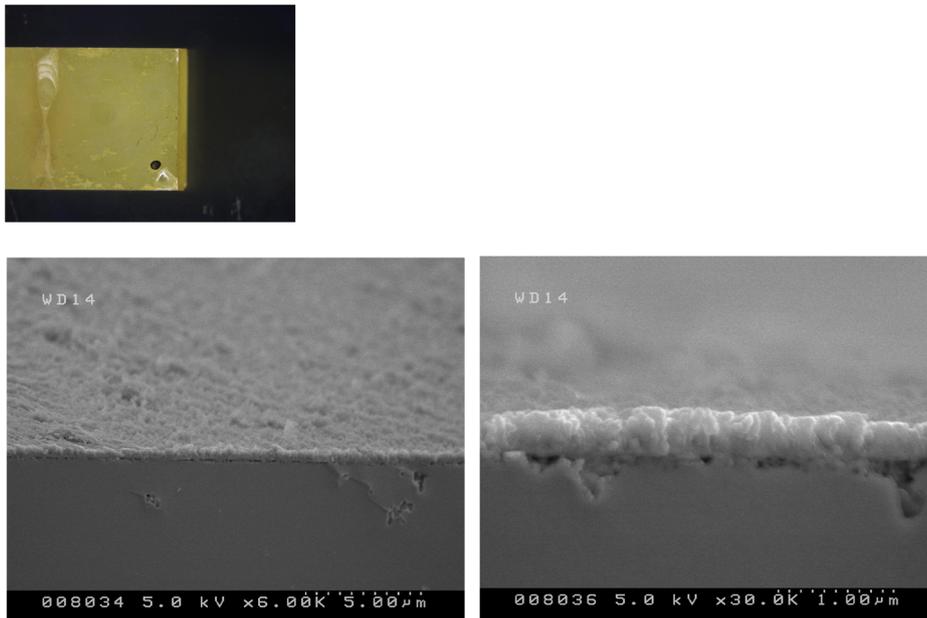


図 3.3-11 リン酸 1mM を添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の SEM 像

SEM-EDSの結果を、図 3.3-12 と図 3.3-13 に示す。Pb は、膜（変質層）の剥がれた部分を含め一様に分布していた。変質層が非常に薄いため、ガラスマトリクス中の Pb が検出されていると考えられる。一方、P と Ca は、変質層の部分で特徴的に検出され、かつ、膜全体に広がっている。

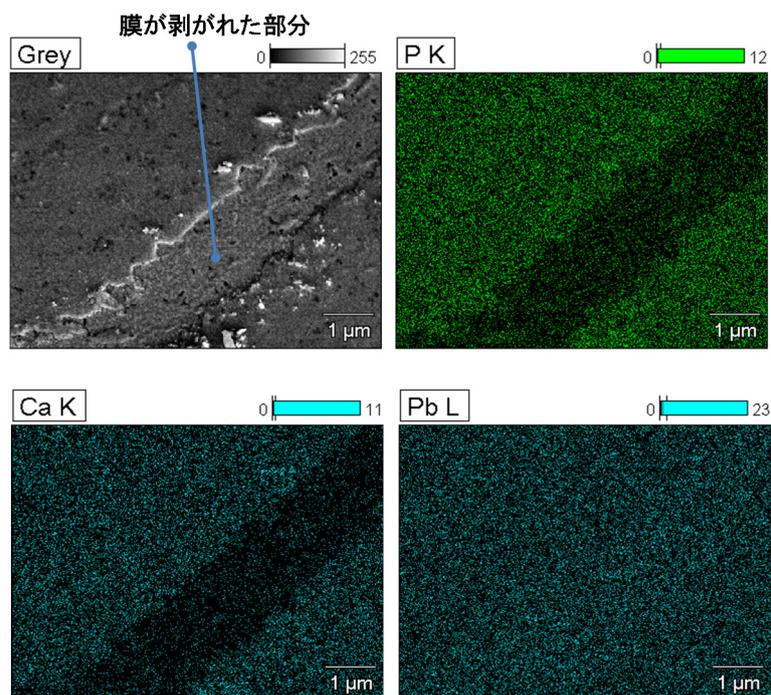


図 3.3-12 リン酸 1mM を添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の SEM-EDS

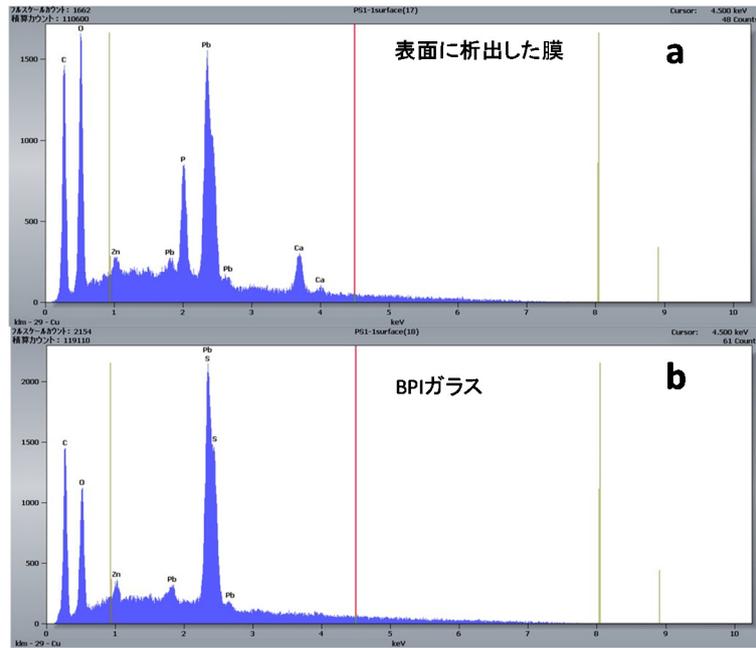


図 3.3-13 リン酸 1mM を添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の EDS

② Na_2S の影響

Na_2S を 1mM 添加したベントナイト平衡水中に 350 日浸漬したときのホウ素とヨウ素の規格化浸出量を、図 3.3-14 と図 3.3-15 に示す。 Na_2S を 0.5mM 添加したときの結果も合わせて示すが、 HS^- の存在により、ホウ素及びヨウ素の浸出が抑制されていることが分かる。

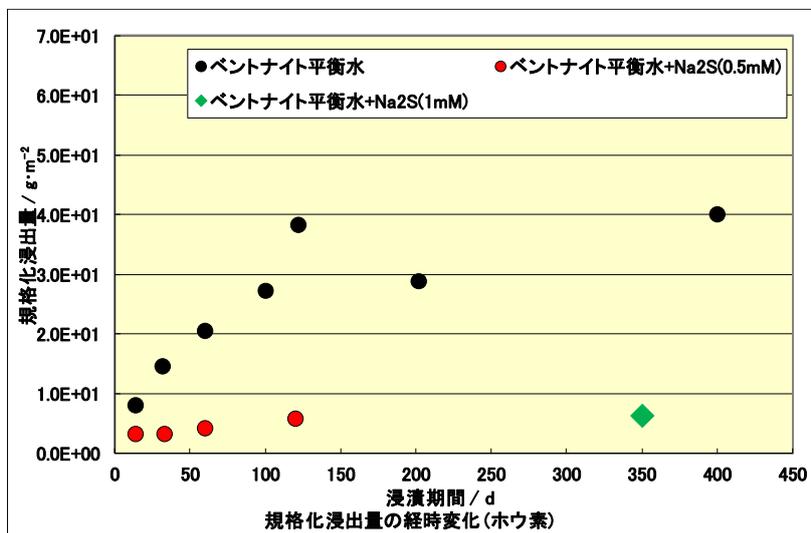


図 3.3-14 Na_2S を 1mM 添加したベントナイト平衡水中のホウ素の規格化浸出量の経時変化

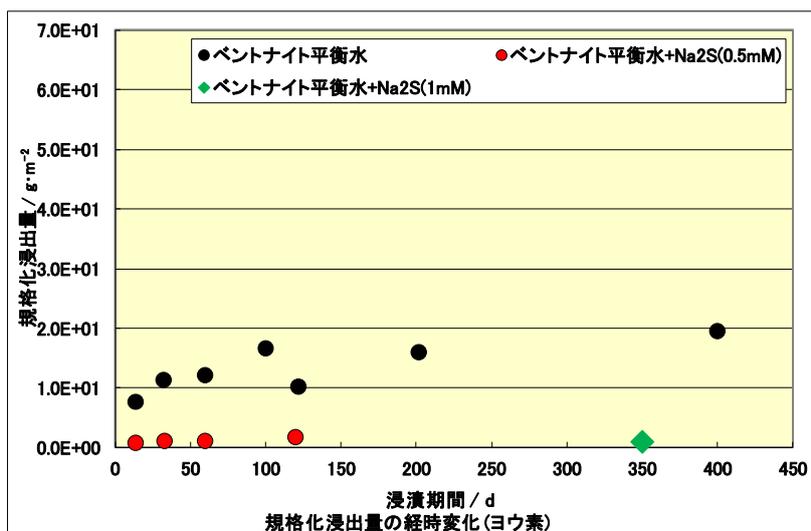


図 3.3-15 Na₂S を 1mM 添加したベントナイト平衡水中のヨウ素の規格化浸出量の経時変化

Na₂S を 30mM 添加した模擬海水中のホウ素とヨウ素の規格化浸出量の経時変化を、図 3.3-16 と図 3.3-17 に示す。HS⁻濃度が高いほど、ホウ素及びヨウ素の浸出量が低いことが分かる。

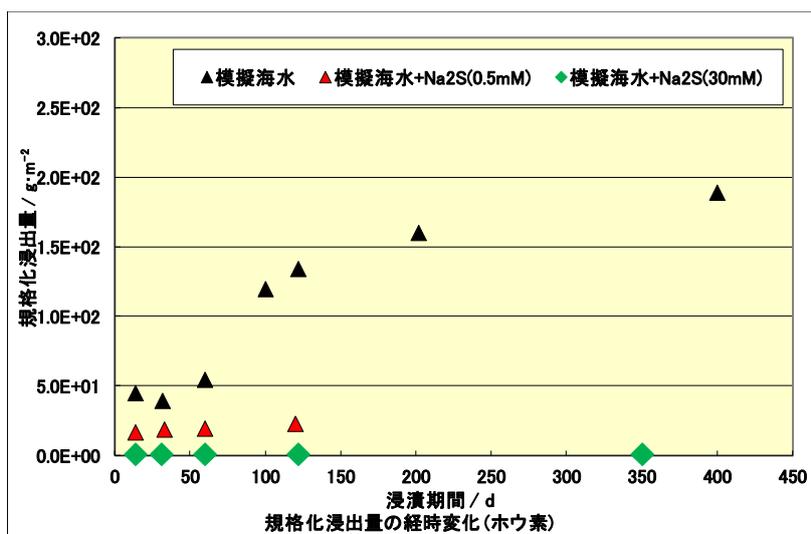


図 3.3-16 Na₂S を 30mM 添加した模擬海水中のホウ素の規格化浸出量の経時変化

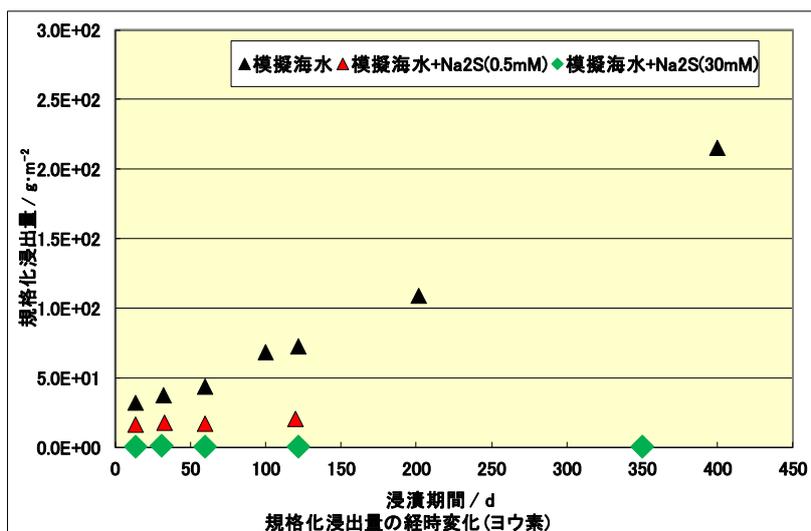


図 3.3-17 Na₂S を 30mM 添加した模擬海水中のヨウ素の規格化浸出量の経時変化

Na₂S を 1mM 添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の XRD を図 3.3-18、Na₂S を 30mM 添加した模擬海水に浸漬した試料の XRD の結果を図 3.3-19 に示す。リン酸の場合と同様、いずれのパターンも、ガラス基板のハローピークが出現していることから、析出した結晶は薄いと考えられる。図 3.3-18 の矢印のピーク以外は galena (PbS) で説明できる。一方、矢印のピークはおそらく hydrocerussite の 009 と考えられる。

模擬海水に浸漬した図 3.3-19 の結果からは、ガラス基板のハロー以外にほとんど強いピークはなく、ベントナイト平衡水に浸漬したときと比較するとかなり弱いですが、galena と hydrocerussite のピークが確認できた。

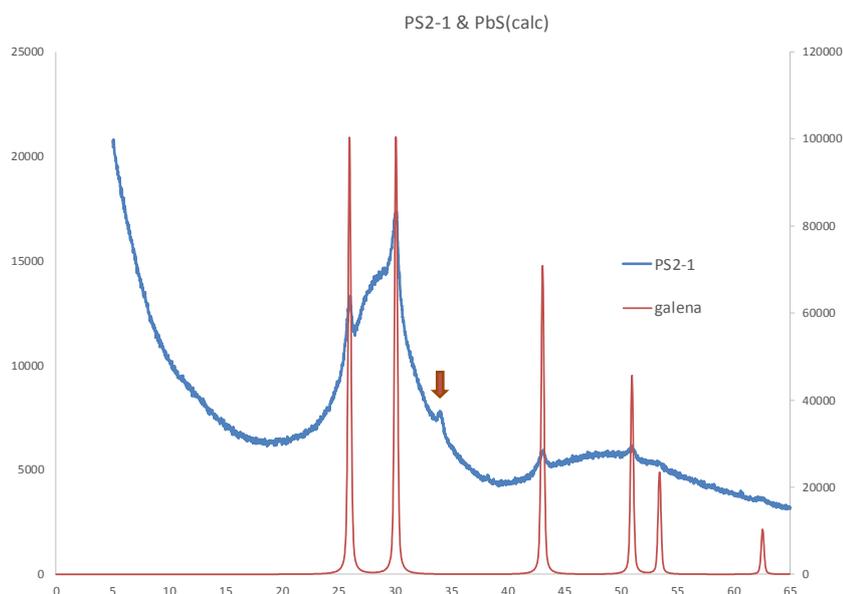


図 3.3-18 Na₂S を 1mM 添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の XRD

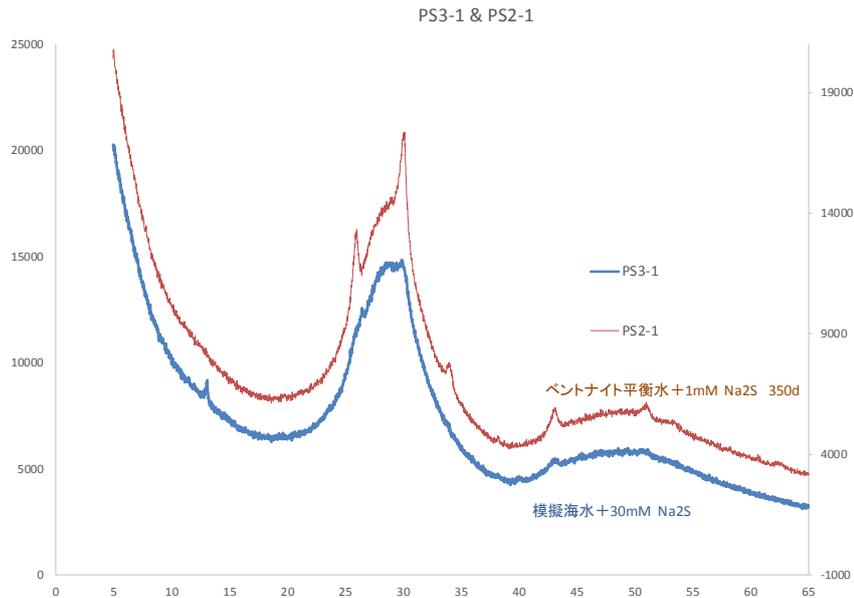


図 3.3-19 Na_2S を 30mM 添加した模擬海水に浸漬した試料の XRD

Na_2S を 1mM 添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の SEM-EDS を、図 3.3-20 と図 3.3-21 に示す。顕微鏡下では部分的に不透明な黒色の析出物ができており、その他の部分は黒色に着色しているが、ほぼガラス本来の鏡面を保持しており、ある程度光を透過した(図 3.3-20 左上)。SEM 観察すると鏡面の部分にも薄く析出物が形成されているように見える(図 3.3-20 a,b)。一方黒色の析出物は塊状の物質で構成されている(図 3.3-20 c)。黒色の析出物の EDS スペクトルはあまり BPI ガラスと差がないが(図 3.3-21 a)、Pb のピークをよく見ると S のピークが重なっており図 3.3-21 の c のピークの低エネルギー側に広がった部分がイオウのピークと考えられ、galena (PbS) であることが確認できた。

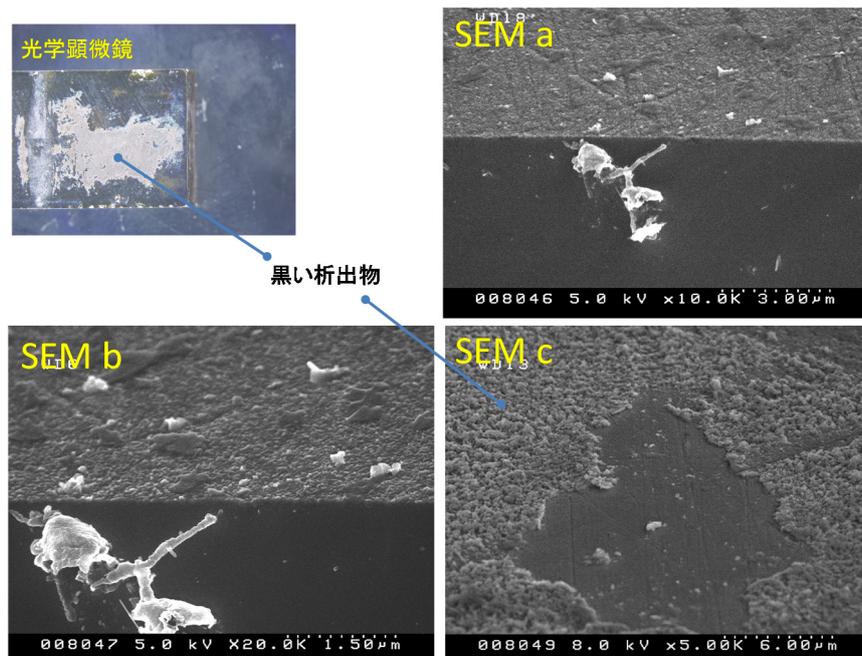
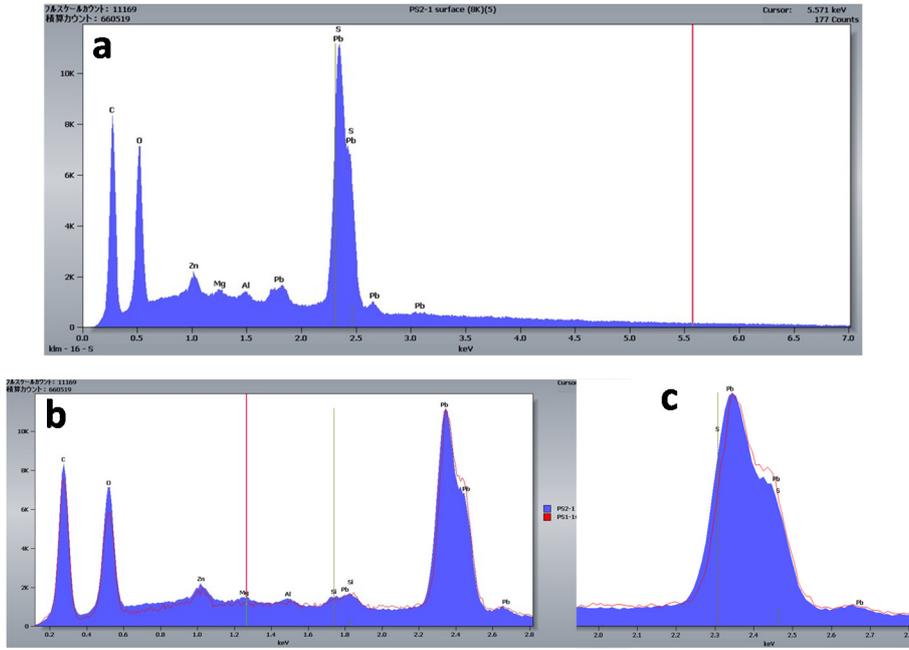


図 3.3-20 Na_2S を 1mM 添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の SEM 画像



青:表面析出粒子 赤:BPIガラス

図 3.3-21 Na₂S を 1mM 添加したベントナイト平衡水に浸漬した試料の EDS

Na₂S を 30mM 添加した模擬海水に浸漬した試料の SEM-EDS を図 3.3-22 と図 3.3-23 に示す。光顕下では黒色に着色しているが表面は鏡面となっており (図 3.3-22 左上)、SEM 像 (図 3.3-22) から析出物の形成はほとんど確認できないが、ところどころに板状の結晶が析出している (図 3.3-22)。この結晶からは Zn が強く検出されることから (図 3.3-23)、Zn の化合物 (Zn,Al の炭酸塩 (layer double-hydroxide (LDH)、鉱物名 zaccagnaite ((Zn_{0.667}Al_{0.333})₂(OH)₄(CO₃)_{0.333}(H₂O)) である可能性が高い。

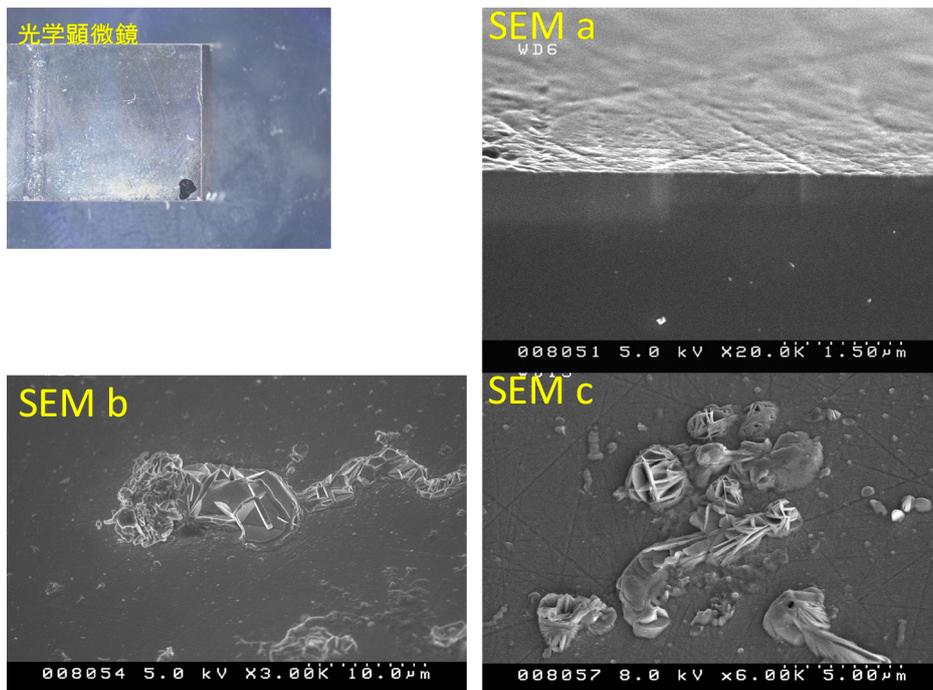
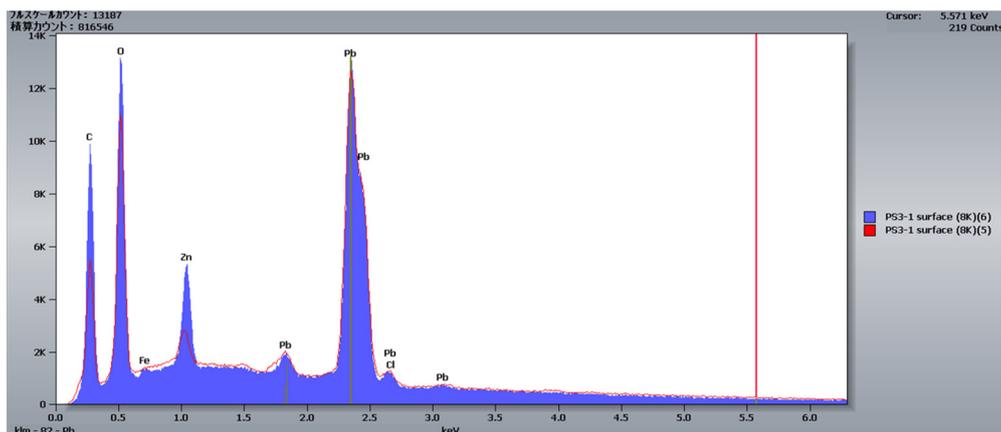


図 3.3-22 Na₂S を 30mM 添加した模擬海水に浸漬した試料の SEM 画像



青:表面析出粒子 赤:BPIガラス

図 3.3-23 Na₂S を 30mM 添加した模擬海水に浸漬した試料の EDS

参考文献

T. Higuchi, "Rates of Release of Medicaments from Ointment Bases Containing Drugs in Suspension", *Journal of Pharmaceutical Sciences*, vol.50(10), p.874,1961.

金澤孝文, 梅垣高士, 門間英毅, 新材料としてのアパタイトの科学, セラミックス, Vol10, (1975).

原子力環境整備促進・資金管理センター:平成 19 年度 地層処分技術調査等 TRU 廃棄物処分技術 ヨウ素・炭素処理・処分技術処理・処分技術開発 報告書 (第 1 分冊), 2008.

原子力環境整備促進・資金管理センター:平成 20 年度 地層処分技術調査等 TRU 廃棄物処分技術 ヨウ素・炭素処理・処分技術処理・処分技術開発 報告書 (第 1 分冊), 2009.

原子力環境整備促進・資金管理センター:平成 19 年度 地層処分技術調査等 TRU 廃棄物処分技術 ヨウ素・炭素処理・処分技術処理・処分技術開発 報告書 (第 1 分冊), 2010.

原子力環境整備促進・資金管理センター:平成 19 年度 地層処分技術調査等 TRU 廃棄物処分技術 ヨウ素・炭素処理・処分技術処理・処分技術開発 報告書 (第 1 分冊), 2011.

原子力環境整備促進・資金管理センター:平成 19 年度 地層処分技術調査等 TRU 廃棄物処分技術 ヨウ素・炭素処理・処分技術処理・処分技術開発 報告書 (第 1 分冊), 2012.

原子力環境整備促進・資金管理センター:平成 19 年度 地層処分技術調査等 TRU 廃棄物処分技術 ヨウ素・炭素処理・処分技術処理・処分技術開発 報告書 (第 1 分冊), 2013.

原子力環境整備促進・資金管理センター:平成 24 年度 地層処分技術調査等 TRU 廃棄物処分技術 ヨウ素・炭素処理・処分技術処理・処分技術開発 平成 19 年度～平成 24 年度の取りまとめ 報告書, 2013.

原子力環境整備促進・資金管理センター:平成 25 年度 地層処分技術調査等事業 TRU 廃棄物 処理・処分 技術高度化開発 報告書 (第 1 分冊) —ヨウ素 129 対策技術の信頼性向上—, 2014.

原子力環境整備促進・資金管理センター:平成 26 年度 地層処分技術調査等事業 TRU 廃棄物 処理・処分技術高度化開発 報告書(第 1 分冊) —ヨウ素 129 対策技術の信頼性向上—, 2015.

原子力環境整備促進・資金管理センター:平成 27 年度 地層処分技術調査等事業 TRU 廃棄物 処理・処分技術高度化開発 報告書 (第 1 分冊) —ヨウ素 129 対策技術の信頼性向上—, 2016.

原子力環境整備促進・資金管理センター:平成 28 年度 地層処分技術調査等事業 TRU 廃棄物 処理・処分技術高度化開発 報告書 (第 1 分冊) —ヨウ素 129 対策技術の信頼性向上—, 2017.

原子力環境整備促進・資金管理センター：平成 29 年度 高レベル放射性廃棄物等の地層処分に
関する技術開発事業 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発報告書（第 1 分冊）—ヨウ素 129 対
策技術の信頼性向上—, 2018.

株式会社 神戸製鋼所, 西村務, 和田隆太郎, 廃棄物固化体及びその製造方法, 特許第 3720620 号
(特願平 11-088133) , 1999.

Masuda, K., Kato, O., Tanaka, Y., Nakajima, S., Okamoto, S., Sakuragi, Y. and Yoshida, S.,
Iodine immobilization: Development of solidification process for spent silver-sorbent using
hot isostatic press technique, *Progress in Nuclear Energy* vol.92, pp.267-272, 2016.

増田薫, 岡本晋也, 村上裕, 加藤修, 吉田誠司, 稲垣八穂広, 桜木智史, アルミナ固化体のヨウ素
閉じ込め性能に及ぼすアルミナ混合の影響評価, 日本原子力学会 2017 秋の大会 (2017 年 9 月
13 日-15 日, 北海道大学) , 1H18, 2017.

大和田仁, イオン導電性固溶アパタイトセラミックスに関する研究, 東京都立大学博士論文, 1990.
Takashi Suzuki, et.al, Synthetic hydroxyapatites as inorganic cation exchangers. Part 2,
Journal of the Chemical Society, Faraday, 48(1982)

地球化学モデリングのための熱力学データベース開発

地球化学モデリングのための熱力学データベース開発

1. 熱力学データベースの更新

JAEA TDB (2019)では、30 種類の元素、305 種類の液相種、545 種類の鉱物、13 種類のガスについて、熱力学特性($\Delta_f G^\circ$ [kcal/mol], $\Delta_f H^\circ$ [kcal/mol], S° [kcal/mol/K], V° [cm³/mol])、改良 Helgeson-Kirkham-Flowers(H-K-F) 式のパラメータ (a_1 [cal/mol/bar], a_2 [cal/mol], a_3 [calK/mol/bar], a_4 [calK/mol], c_1 [cal/mol/K], c_2 [calK/mol], ω^0 [cal/mol]) (Tanger IV and Helgeson, 1988)、Maier-Kelley 熱容量係数(a [cal/mol/K], b [cal/mol/K²], c [calK/mol])が更新された。更新内容の概要を表 1-1 に、詳細を表 1-2 から表 1-12 にそれぞれ示す。

また、PHREEQC のデータベースフォーマットとして整備したデータファイル (PHREEQC16v12.dat) も添付する。

表 1-1 JAEA TDB (2019)における主な更新内容

Item	Description
New and/or revised entries	New and/or revised entries include 101 aqueous species/complexes and 38 minerals/solid phases.
Aqueous species/complexes	
Lead (Table 2)	Lead (Pb) has been added to the JAEA TDB, including the basis species (Pb ²⁺), relevant hydrolysis reactions and formation reactions of lead bearing aqueous species/complexes
Estimation of S° , C_p° and V° for ML complexes (Table 3)	Correlations have been derived to estimate values of S° , C_p° and V° for monovalent and divalent cationic and anionic species in the metal ion (ML) complexes (M ⁺ L ⁻) _(aq) , (M ²⁺ L ²⁻) _(aq) , (M ²⁺ L ⁻) _(aq) , and (M ²⁺ L ²⁻) _(aq) .
ML complexes in cement systems (Table 4)	Estimates of S° , C_p° and V° of ML complexes in cement systems (M = Na ⁺ , K ⁺ , Ca ²⁺ , Mg ²⁺ and L = OH ⁻ , AlO ₂ ⁻ , CO ₃ ²⁻ , FeO ²⁻ , HSiO ₃ ⁻ , SiO ₃ ²⁻ , SO ₄ ²⁻ , HCO ₃ ⁻) have been checked and updated from the correlations shown in Table 3.
Monomeric silica species (Table 5)	Thermodynamic properties and H-K-F EoS parameters of the monomeric silica species Si(OH) _{4(aq)} , HSiO ₃ ⁻ and SiO ₃ ²⁻ have been added or updated following discussions at Goldschmidt2019 held in Barcelona, Spain.
Lithium species/complexes (Table 6)	Thermodynamic properties and H-K-F EoS parameters of lithium species/complexes have been revised following a significant update to the S° value of the basis species Li ⁺ . Estimates of the thermodynamic properties of lithium ion (LiL) complexes (L = Cl ⁻ , OH ⁻ , SO ₄ ²⁻) have been checked and updated from the correlations shown in Table 3.
Tin complexes (Table 7)	Estimates of S° , C_p° and V° of tin ion (SnL) complexes (L = Br ⁻ , Cl ⁻ , F ⁻ , NO ₃ ⁻ , (OHCl) ²⁻) have been checked and updated from the above general purpose correlations shown in Table 3.
Titanium species (Table 8)	Thermodynamic properties and H-K-F EoS parameters of monomeric titanium species have been revised to give more representative temperature extrapolations from the $\Delta_r G^\circ$ at $t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1$ bar.
Formate and cyanide (Table 9)	Formate (CHO ₂ ⁻) and cyanide (CN ⁻) ions have been added into the JAEA TDB as 'elements' using the anionic basis species Formate ⁻ and Cyanide ⁻ , respectively, following discussions at XV ICCO in Prague, Czech Republic. Formation of metal formate (MFormate) and non-metal cyanide (RCyanide) complexes have also been added.
Miscellaneous aqueous species/complexes revisions/updates (Table 10)	Miscellaneous revisions/updates have been made to the thermodynamic properties of aqueous/species in making all of the above changes and also a number of other miscellaneous revisions/updates that were missed in previous versions of the JAEA-TDB.
Minerals	
Lead (Table 11)	Lead has been added including lead in its reference state (Pb _(s) yellow) and other lead bearing minerals.
Miscellaneous mineral revisions/updates (Table 12)	Miscellaneous revisions/updates have been made to the thermodynamic properties of minerals/phases in making all of the above changes and a number of other miscellaneous revisions/updates that were missed in previous versions of the JAEA-TDB.

表 1-2 JAEA TDB (2019)で追加された液相種の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ ($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1$ bar)

Species/ Complex *	$\Delta_f G^{\circ i,t}$	$\Delta_f H^{\circ i,t}$	$S^{\circ ii,t}$	$C_p^{\circ iii,t}$	$V^{\circ iii}$	Revised H-K-F EoS parameters							Der †	Ref
						$a_1 \times 10^{iv}$	$a_2 \times 10^{-2v}$	a_3^{vi}	$a_4 \times 10^{-4vii}$	c_1^{ii}	$c_2 \times 10^{-4vii}$	$\omega^0 \times 10^{-5v}$		
Pb+2	-5.736 ± 0.07	0.220 ± 0.06	4.23 ± 0.3	-12.700	-15.600	-0.0051	-7.7938	8.8133	-2.4568	8.6624	-5.6216	1.0788	R	[1]
PbCO3(aq)	-141.358 ± 0.37	-162.80 ± 1.0	18.5 ± 3	-34.285	-12.307	0.0681	-7.6151	8.7431	-2.4642	-14.2766	-10.0185	-0.0380	K	[2-5]
Pb(CO3)2-2	-272.201 ± 0.26	-316.026	49.569	-52.121	-11.025	1.0987	-5.0988	7.7541	-2.5682	-1.4185	-13.6517	2.4923	K	[3,4,6,7]
Pb(CO3)Cl-	-172.30 ± 0.6	-203.898	26.700	-42.478	21.171	5.0734	4.6061	3.9397	-2.9694	-7.5151	-11.6874	1.2171	K	[3,5]
Pb(CO3)OH-	-186.17 ± 0.6	-223.315	21.570	-73.884	-14.657	0.1969	-7.3004	8.6195	-2.4772	-25.2051	-18.0848	1.2948	K	[3,5,7]
PbHS+	-8.7 ± 4	-6.6 ± 4	30.22 ± 1.3	16 ± 15	13.294	3.6134	1.0412	5.3409	-2.8220	16.3395	0.2246	0.0864	E	[3]
Pb(HS)2(aq)	-20.084	-21.945	55.800	36.477	42.342	7.5462	10.6439	1.5666	-3.2190	27.1942	4.3958	-0.0380	K	[3,8]
Pb(HS)3-	-18.998	-29.034	67.277	52.823	78.901	12.7655	23.3876	-3.4421	-3.7458	42.6766	7.7254	0.6027	K	[3,8]
PbOH+	-52.230 ± 0.16	-54.94 ± 0.4	30.91 ± 1.4	5.300	9.791	3.1305	-0.1378	5.8042	-2.7733	9.9729	-1.9550	0.0760	K	[5,9-12]
PbO(aq) (+ H2O = Pb(OH)2(aq))	-39.266 ± 0.19	-46.711 ± 0.26	15.03 ± 1.1	5.813	7.297	2.7507	-1.0651	6.1687	-2.7350	9.2233	-1.8505	-0.0380	K	[5,10-14]
HPbO2- (+ H2O = Pb(OH)3-)	-80.901 ± 0.14	-104.05 ± 0.7	18.11 ± 2.4	-33.786	4.947	2.8976	-0.7065	6.0278	-2.7498	-1.2142	-9.9168	1.3481	K	[5,10-13,15]
PbO2-2 (+ 2 H2O = Pb(OH)4-2)	-66.11 ± 0.8	-89.142	18.504	-148.391	16.326	5.0004	4.4279	4.0098	-2.9621	-53.5036	-33.2618	2.9628	K	[11,16]
PbCl+	-39.175 ± 0.21	-39.21 ± 0.5	26.40 ± 1.6	8.321	9.348	3.0929	-0.2294	5.8403	-2.7695	12.3725	-1.3397	0.1443	K	[5,17-26]
PbCl2(aq)	-71.359 ± 0.22	-78.43 ± 1.8	45.1 ± 6	9.959	39.827	7.2020	9.8035	1.8970	-3.1843	11.6530	-1.0060	-0.0380	K	[5,18-21,23,24,27,28]
PbCl3-	-102.533 ± 0.32	-118.66 ± 3.0	57 ± 10	-8.878	70.225	11.6293	20.6134	-2.3517	-3.6312	7.9073	-4.8430	0.7537	K	[5,18-23,25,27,29]
PbCl4-2	-132.95 ± 1.9	-157.8 ± 4	70 ± 10	-47.098	100.619	16.2693	31.9427	-6.8046	-4.0995	-1.3830	-12.6285	2.1766	K	[19,20,22,25,27,30]
PbClF(aq)	-109.59 ± 0.7	-122.4 ± 2	23.3 ± 5	7.0 ± 7	17.756	4.1819	2.4294	4.7953	-2.8794	9.9189	-1.6087	-0.0380	K	[3,20,31,32]
PbF+	-76.023 ± 0.19	-80.8 ± 1	8.0 ± 4	12 ± 33	-7.762	0.8458	-5.7162	7.9968	-2.5427	17.0954	-0.5902	0.4229	K	[3,20,22,31-33]
PbF2(aq)	-145.446 ± 0.34	-164.197	1.065	11.902	-4.850	1.0885	-5.1236	7.7639	-2.5672	12.7919	-0.6101	-0.0380	K	[20,23,31,33]
PbFormate+	-92.150	-100.722	37.138	19.100	17.700	4.1809	2.4269	4.7962	-2.8793	17.1918	0.8561	-0.0183	R	[34]
PbFormate2(aq)	-177.718	-202.125	65.665	40.000	54.900	9.2647	14.8398	-0.0825	-3.3925	29.2589	5.1134	-0.0380	R	[34]
PbH2PO4+	-268.09 ± 0.7	-299.1 ± 2	35.1 ± 6	48 ± 25	23.500	4.9850	4.3902	4.0246	-2.9605	34.4126	6.7430	0.0125	K	[3,35]
PbHCO3+	-150.13 ± 0.3	-166.0 ± 2	37.2 ± 6	45 ± 25	17.079	4.0956	2.2186	4.8781	-2.8707	32.3615	6.1319	-0.0193	K	[3,5,36]
PbHPO4	-270.96 ± 1.8	-307.02 ± 2.3	18.03 ± 4.7	-27 ± 34	-2.086	1.4667	-4.2001	7.4009	-2.6054	-10.0071	-8.5345	-0.0380	K	[3,5,35,37]
PbNO3+	-33.72 ± 0.8	-47.59 ± 2.5	49.8 ± 8	32 ± 27	21.297	4.6083	3.4705	4.3861	-2.9225	22.9849	3.4838	-0.2101	K	[3,20,26,38,39]
Pb(NO3)2(aq)	-60.78 ± 1.2	-91.160	106.482	61.858	60.142	9.9820	16.5912	-0.7709	-3.4649	42.0690	9.5659	-0.0380	K	[3,20,38]
Pb(NO3)3-	-86.28 ± 1.2	-131.082	170.172	81.061	99.698	15.0847	29.0502	-5.6678	-3.9799	44.8694	13.4775	-0.9556	K	[3,20,38]
PbSO4(aq)	-187.213 ± 0.31	-217.1 ± 3	21 ± 10	-32.038	9.300	3.0248	-0.3959	5.9057	-2.7626	-12.9597	-9.5607	-0.0380	K	[39,40]
Pb(SO4)2-2	-366.37 ± 0.6	-429.0 ± 4	48 ± 15	-40.961	26.775	6.2793	7.5504	2.7825	-3.0911	5.3414	-11.3784	2.5161	K	[3,40,41]

ⁱ kcal/mol, ⁱⁱ cal/mol/K, ⁱⁱⁱ cm³/mol, ^{iv} cal/mol/bar, ^v cal/mol, ^{vi} calK/mol/bar, ^{vii} calK/mol. * Species/complexes as shown in the SUPCRT19.dat TDB. Parentheses are used to show equivalent hydrated species used in GWB19.dat and PHREEQC19.dat TDBs. All lead bearing species/complexes are new entries in the JAEA-TDB (2019). † Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). ‡ Derivation of $\Delta_f G^{\circ}$: R : As reported, K : Fitted to log equilibrium constant, K_{eq} data. E : Estimated by linear correlation. **References:** [1] (Cox, 1978; Shock and Helgeson, 1988). [2] (Easley and Byrne, 2011; Sipos et al., 1980; Woosley and Millero, 2013). [3] Using methods described in (Sverjensky et al., 1997). [4] (Bilinski and Schindler, 1982). [5] (Powell et al., 2009). [6] (Baranova, 1969; Easley and Byrne, 2011; Schock, 1980). [7] (Ferri et al., 1987). [8] (Hemley, 1953). [9] (Cranston and Brown, 1937; Cruywagen and van de Water, 1993; Hugel, 1964; Kanekiyo et al., 2000; Olin, 1960; Pedersen, 1945; Sylva and Brown, 1980; Wood, 1910). [10] (Lind, 1978; Tugarinov et al., 1975). [11] Using methods described in (Shock et al., 1997). [12] (Brown and Ekberg, 2016). [13] (Carell and Olin, 1960; Garrett et al., 1939; Ziemniak et al., 2005). [14] (Cruywagen and van de Water, 1993; Kanekiyo et al., 2000; Sylva and Brown, 1980). [15] (Ferri et al., 1987; Glasstone, 1921;

Heyrovský, 1923; Nyman et al., 1961; Randall and Spencer, 1928; Töpelmann, 1929; Vlček, 1955). [16] (Perera et al., 2001). [17] (Fromherz and Lih, 1931; Nancollas, 1955; Prasada and Prasada, 1980). [18] (Kivalo, 1955; Kivalo and Luoto, 1957). [19] (Mironov et al., 1963). [20] (Lothenbach et al., 1999). [21] (Lovric and Branica, 1980; Luo and Millero, 2007; Vierling, 1971). [22] (Helgeson, 1969). [23] (Bond and Hefter, 1973). [24] (Bendiab et al., 1982; Bond and Hefter, 1971; Hefter, 1990; Millero and Byrne, 1984; Nriagu and Anderson, 1971; Yurchenko et al., 1976). [25] (Mgaidi et al., 1991). [26] (Biggs et al., 1955; Hutchinson and Higginson, 1973). [27] (Seward, 1984). [28] (Vierling, 1972). [29] (Bendiab et al., 1982; Hefter, 1990; Millero and Byrne, 1984; Papoff et al., 1955). [30] (Federov and Shishin, 1972). [31] (Bond, 1971). [32] (Hefter, 1972). [33] (Bottari and Ciavatta, 1965; Mesarić and Hume, 1963). [34] (Shock and Koretsky, 1995). [35] (Nriagu, 1972a). [36] (Hummel, 2017; Néher-Neumann, 1992). [37] (Ramamoorthy and Manning, 1974). [38] (Federov et al., 1972). [39] (Bond and Hefter, 1972; Gardner and Nancollas, 1970; Nyholm and Wikmark, 1989; Röhl, 1982). [40] (Giordano, 1985). [41] (van't Riet and Kolthoff, 1960).

表 1-3 金属-イオン複合体の熱力学特性の算出に用いた式($t = 25^{\circ}\text{C}$ and $P = 1$ bar)

Complex	Property	Equation *
$(\text{M}^+\text{L}^-)^0$	S^0 i	$S^0_{(\text{M}^+\text{L}^-)_0} = (0.001 \cdot S^0_{\text{L}^-} + 1.314) \cdot S^0_{\text{M}^+} + (0.951 \cdot S^0_{\text{L}^-} - 3.54)$
	C_P^0 i	$C_P^0_{(\text{M}^+\text{L}^-)_0} = (0.007 \cdot C_P^0_{\text{L}^-} + 2.020) \cdot C_P^0_{\text{M}^+} + (1.853 \cdot C_P^0_{\text{L}^-} + 45.358)$
	V^0 ii	$V^0_{(\text{M}^+\text{L}^-)_0} = (1.131) \cdot V^0_{\text{M}^+} + (1.023 \cdot V^0_{\text{L}^-} + 7.683)$
$(\text{M}^+\text{L}^{2-})^-$	S^0 i	$S^0_{(\text{M}^+\text{L}^{2-})^-} = (-0.031 \cdot S^0_{\text{L}^{2-}} + 0.116) \cdot S^0_{\text{M}^+} + (0.884 \cdot S^0_{\text{L}^{2-}} + 24.018)$
	C_P^0 i	$C_P^0_{(\text{M}^+\text{L}^{2-})^-} = (0.326 \cdot C_P^0_{\text{L}^{2-}} + 21.429) \cdot C_P^0_{\text{M}^+} + (2.976 \cdot C_P^0_{\text{L}^{2-}} + 188.453)$
	V^0 ii	$V^0_{(\text{M}^+\text{L}^{2-})^-} = (-0.031 \cdot V^0_{\text{L}^{2-}} + 0.635) \cdot V^0_{\text{M}^+} + (1.097 \cdot V^0_{\text{L}^{2-}} + 11.711)$
$(\text{M}^{2+}\text{L}^-)^+$	S^0 i	$S^0_{(\text{M}^{2+}\text{L}^-)^+} = (0.008 \cdot S^0_{\text{L}^-} + 1.027) \cdot S^0_{\text{M}^{2+}} + (1.060 \cdot S^0_{\text{L}^-} + 7.132)$
	C_P^0 i	$C_P^0_{(\text{M}^{2+}\text{L}^-)^+} = (2.366) \cdot C_P^0_{\text{M}^{2+}} + (1.766 \cdot C_P^0_{\text{L}^-} + 88.810)$
	V^0 ii	$V^0_{(\text{M}^{2+}\text{L}^-)^+} = (0.012 \cdot V^0_{\text{L}^-} + 0.976) \cdot V^0_{\text{M}^{2+}} + (1.114 \cdot V^0_{\text{L}^-} + 6.477)$
$(\text{M}^{2+}\text{L}^{2-})^0$	S^0 i	$S^0_{(\text{M}^{2+}\text{L}^{2-})^0} = (0.008 \cdot S^0_{\text{L}^{2-}} + 1.027) \cdot S^0_{\text{M}^{2+}} + (1.060 \cdot S^0_{\text{L}^{2-}} + 7.132)$
	C_P^0 i	$C_P^0_{(\text{M}^{2+}\text{L}^{2-})^0} = (2.366 \cdot C_P^0_{\text{L}^{2-}} + 21.429) \cdot C_P^0_{\text{M}^{2+}} + (1.766 \cdot C_P^0_{\text{L}^{2-}} + 88.810)$
	V^0 ii	$V^0_{(\text{M}^{2+}\text{L}^{2-})^0} = (0.012 \cdot V^0_{\text{L}^{2-}} + 0.976) \cdot V^0_{\text{M}^{2+}} + (1.114 \cdot V^0_{\text{L}^{2-}} + 6.477)$

ⁱ cal/mol/K, ⁱⁱ cm³/mol. * where $\Xi_{\text{M}^{x+}}$ and $\Xi_{\text{L}^{y-}}$ in the right hand side of the equation refers to the corresponding thermodynamic property of the component cationic metal (M^{x+}) and anionic ligand (L^{y-}), respectively.

表 1-4 JAEA TDB (2019)で改訂された金属-イオン複合体の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ ($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1$ bar)

Species/ Complex *	$\Delta_r G^{\circ i,\dagger}$	$\Delta_r H^{\circ i,\dagger}$	$S^{\circ ii,\dagger}$	$C_p^{\circ ii,\dagger}$	$V^{\circ iii}$	Revised H-K-F EoS parameters							Der ‡	Ref
						$a_1 \times 10^{iv}$	$a_2 \times 10^{-2v}$	a_3^{vi}	$a_4 \times 10^{-4vii}$	c_1^{ii}	$c_2 \times 10^{-4vii}$	$\omega^0 \times 10^{-5v}$		
CaAlO2+ (+ 2 H2O = CaAl(OH)4+)	-333.20 ± 1.1	-351.12 ± 2.3	-9.99 ± 6.7	56 ± 31	-2.952	1.5961	-3.8843	7.2768	-2.6184	45.3926	8.3726	0.6954	E	[1]
CaSiO3(aq) (+ H2O = CaSiO2(OH)2(aq))	-362.04 ± 1.1	-392.3 ± 4	-13.5 ± 8	6 ± 15	-41.716	-3.9563	-17.4411	12.6051	-2.0580	9.3329	-1.8124	-0.0380	K	[1,2]
KCO3-	-192.76 ± 1.4	-214.23 ± 3.5	34 ± 11	-22 ± 14	11.933	3.7734	1.4321	5.1872	-2.8382	3.5097	-7.5160	1.1111	E	[1]
MgAlO2+ (+ 2 H2O = MgAl(OH)4+)	-313.240 ± 0.90	-336.35 ± 1.8	-29.5 ± 5	62 ± 28	-7.021	1.1392	-4.9998	7.7152	-2.5723	51.6322	9.5948	0.9910	E	[1]
MgSO4(aq)	-289.5 ± 4	-327.375	-13.500	-21.720	1.330	1.9369	-3.0547	6.9554	-2.6526	-6.8390	-7.4589	-0.0300	R	[3]
NaFeO2(aq) (+ 2 H2O = NaFe(OH)4(aq))	-149.68 ± 1.7	-164.0 ± 3	19.7 ± 9	77 ± 23	3.575	2.2414	-2.3087	6.6575	-2.6836	50.9431	12.6503	-0.0380	E	[1]

ⁱ kcal/mol, ⁱⁱ cal/mol/K, ⁱⁱⁱ cm³/mol, ^{iv} cal/mol/bar, ^v cal/mol, ^{vi} calK/mol/bar, ^{vii} calK/mol. * Species/complexes as shown in the SUPCRT19.dat TDB. Parentheses are used to show equivalent hydrated species used in GWB19.dat and PHREEQC19.dat TDBs. † Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2 σ). ‡ Derivation of $\Delta_r G^{\circ}$: E : Estimated, K : Fitted to log equilibrium constant, K_{eq} data, R : As reported. **References:** [1] (Walker et al., 2019). [2] (Walker et al., 2016). [3] (McCullom and Shock, 1997).

表 1-5 JAEA TDB (2019)で追加されたシリカ化合物の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ ($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1$ bar)

Species/ Complex *	$\Delta_r G^{\circ i,\dagger}$	$\Delta_r H^{\circ i,\dagger}$	$S^{\circ ii,\dagger}$	$C_p^{\circ ii,\dagger}$	$V^{\circ iii}$	Revised H-K-F EoS parameters							Der ‡	Ref
						$a_1 \times 10^{iv}$	$a_2 \times 10^{-2v}$	a_3^{vi}	$a_4 \times 10^{-4vii}$	c_1^{ii}	$c_2 \times 10^{-4vii}$	$\omega^0 \times 10^{-5v}$		
Si(OH)4(aq) [§]	-312.907	-347.568	44.276	51.727	52.236	10.6686	13.8921	-11.5181	-3.3533	49.4684	1.4591	0.0767	K	[1]
HSiO3- (+ H2O = SiO(OH)3-)	-33.250 ± 0.44	-36.23 ± 0.7	23.01 ± 2.0	1 ± 30	15.600	3.9658	1.9017	5.0026	-2.8576	8.5538	-2.8309	0.1955	K	[2,3]
SiO3-2 (+ H2O = SiO2(OH)2-2)	-58.990 ± 0.47	-69.99 ± 2.7	48.1 ± 9	-11 ± 50	51.200	8.7584	13.6035	0.4034	-3.3414	-0.6301	-5.2753	-0.0380	K	[3]

ⁱ kcal/mol, ⁱⁱ cal/mol/K, ⁱⁱⁱ cm³/mol, ^{iv} cal/mol/bar, ^v cal/mol, ^{vi} calK/mol/bar, ^{vii} calK/mol. * Species/complexes as shown in the SUPCRT19.dat TDB. Parentheses are used to show equivalent hydrated species used in GWB19.dat and PHREEQC19.dat TDBs. [§] New entry in JAEA TDB. Note that the thermodynamic properties of the basis species Si(OH)4(aq) used in the GWB19.dat and PHREEQC19.dat are instead derived from SiO2(aq) using the reaction $\text{SiO}_2(\text{aq}) + 2 \text{H}_2\text{O} = \text{Si}(\text{OH})_4(\text{aq})$ for which $\log K_{eq} = 0$ at all temperatures and pressures. † Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2 σ). ‡ Derivation of $\Delta_r G^{\circ}$: K : Fitted to log equilibrium constant, K_{eq} data. **References:** [1] (Anderson and Burnham, 1965; Crerar and Anderson, 1971; Davis et al., 2011; Fournier, 1960; Hemley et al., 1980; Kennedy, 1950; Kitahara, 1960; Mackenzie and Gees, 1971; Manning, 1994; Morey et al., 1962; Morey and Hesselgesser, 1951; Newton and Manning, 2000; Rimstidt, 1997; Siever, 1962; Van Lier et al., 1960; Walther and Orville, 1983; Weill and Fyfe, 1964; Xie and Walther, 1993). [2] (Bilinski and Ingri, 1967; Flint and Wells, 1934; Greenberg, 1958; Greenberg and Price, 1957; Roller and Ervin, 1940; Santschi and Schindler, 1974; Schwarz and Müller, 1958). [3] (Aveston, 1965; Busey and Mesmer, 1977; Ingri, 1959; Lagerström, 1959; Sjöberg et al., 1983; Sjöberg et al., 1981).

表 1-6 JAEA TDB (2019)で改訂されたリチウム化合物の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ ($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1 \text{ bar}$)

Species/ Complex *	$\Delta_f G^{\circ \text{ i,†}}$	$\Delta_f H^{\circ \text{ i,†}}$	$S^{\circ \text{ ii,†}}$	$C_p^{\circ \text{ ii,†}}$	$V^{\circ \text{ iii}}$	Revised H-K-F EoS parameters							Der †	Ref
						$a_1 \times 10^{\text{ iv}}$	$a_2 \times 10^{-2 \text{ v}}$	$a_3^{\text{ vi}}$	$a_4 \times 10^{-4 \text{ vii}}$	$c_1^{\text{ ii}}$	$c_2 \times 10^{-4 \text{ vii}}$	$\omega^{\circ} \times 10^{-5 \text{ v}}$		
Li+	-70.009 ± 0.03	-66.556 ± 0.02	2.925 ± 0.04	14.200	-0.870	-0.0237	-0.0690	11.5800	-2.7761	18.9679	-0.1421	0.4862	R	[1,2]
LiCl	-99.334	-105.690	12.30 ± 0.7	22.896	28.000	5.5837	5.8521	3.4500	-3.0209	19.2351	1.6294	-0.0380	K	[2,3]
LiOH	-107.80 ± 0.4	-121.01 ± 1.3	2.8 ± 4	5.808	4.227	2.3306	-2.0908	6.5719	-2.6926	9.2203	-1.8515	-0.0380	K	[4,5]
LiSO4- [§]	-248.97 ± 0.3	-283.6 ± 3	12 ± 10	11.0 ± 7	22.945	5.3914	5.3826	3.6345	-3.0015	25.8779	-0.7939	1.4398	K	[5,6]

ⁱ kcal/mol, ⁱⁱ cal/mol/K, ⁱⁱⁱ cm³/mol, ^{iv} cal/mol/bar, ^v cal/mol, ^{vi} calK/mol/bar, ^{vii} calK/mol. * Species/complexes as shown in the SUPCRT19.dat, GWB19.dat and PHREEQC19.dat TDBs. † Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). ‡ Derivation of $\Delta_f G^{\circ}$: R : As reported, K : Fitted to log equilibrium constant, K_{eq} data. § New entry in JAEA TDB. **References:** [1] (Cox et al., 1989; Helgeson and Kirkham, 1976). [2] (Shock and Helgeson, 1988) [3] (Sverjensky et al., 1997). [4] (Corti et al., 1979; Gimblett and Monk, 1954; Ho and Palmer, 1998; Ho et al., 2000; Kolthoff, 1923; Wright et al., 1961). [5] Using methods described in (Sverjensky et al., 1997). [6] (Reardon, 1975; Righellato and Davies, 1930; Sharygin et al., 2006)

表 1-7 JAEA TDB (2019)で改訂されたスズ化合物の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ ($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1 \text{ bar}$)

Species/ Complex *	$\Delta_f G^{\circ \text{ i,†}}$	$\Delta_f H^{\circ \text{ i,†}}$	$S^{\circ \text{ ii,†}}$	$C_p^{\circ \text{ ii,†}}$	$V^{\circ \text{ iii}}$	Revised H-K-F EoS parameters							Der †	Ref
						$a_1 \times 10^{\text{ iv}}$	$a_2 \times 10^{-2 \text{ v}}$	$a_3^{\text{ vi}}$	$a_4 \times 10^{-4 \text{ vii}}$	$c_1^{\text{ ii}}$	$c_2 \times 10^{-4 \text{ vii}}$	$\omega^{\circ} \times 10^{-5 \text{ v}}$		
Sn+4	0.590 ± 0.42	-6.8 ± 15	-75 ± 50	-23.1 ± 5	-60.531	-5.3987	-20.9630	13.9893	-1.9124	23.1424	-7.7401	3.3121	R	[1,2]
SnBr+	-33.250 ± 0.44	-36.23 ± 0.7	23.01 ± 2.0	1 ± 30	15.600	3.9658	1.9017	5.0026	-2.8576	8.5538	-2.8309	0.1955	K	[3,4]
SnBr2(aq)	-58.990 ± 0.47	-69.99 ± 2.7	48.1 ± 9	-11 ± 50	51.200	8.7584	13.6035	0.4034	-3.3414	-0.6301	-5.2753	-0.0380	K	[3,4]
SnBr3-	-83.800 ± 0.53	-103.5 ± 4	71 ± 13	-50 ± 70	90.818	14.3772	27.3227	-4.9888	-3.9085	-18.1034	-13.2196	0.5463	K	[3,4]
SnCl+	-39.87 ± 0.4	-41.60 ± 0.6	17.46 ± 1.3	-0.7 ± 7	8.996	3.0905	-0.2353	5.8426	-2.7693	8.3332	-3.1772	0.2797	K	[3-6]
SnCl2(aq)	-72.470 ± 0.23	-82.30 ± 0.5	32.57 ± 1.6	-9.3 ± 8	36.666	6.7695	8.7475	2.3120	-3.1406	0.3662	-4.9290	-0.0380	K	[3-8]
SnCl3-	-103.630 ± 0.47	-123.37 ± 0.8	41.6 ± 2	-34.0 ± 8	66.590	11.2123	19.5951	-1.9515	-3.5891	-4.6249	-9.9604	0.9915	K	[4,5,7,9]
SnCl4-2	-134.86 ± 0.7	-166.37 ± 1.1	44.4 ± 3	-67.1 ± 3	100.401	16.3725	32.1945	-6.9037	-4.1099	-9.4774	-16.7029	2.5704	K	[3,4]
SnF+	-81.072 ± 0.47	-87.26 ± 0.6	0.08 ± 1.1	3.8 ± 5	-11.277	0.4053	-6.7916	8.4195	-2.4982	13.3953	-2.2605	0.5429	K	[3,4]
SnF2(aq)	-153.38 ± 0.6	-173.35 ± 0.7	-6.29 ± 1.2	6.2 ± 5	-5.700	0.9722	-5.4076	7.8754	-2.5555	9.4501	-1.7717	-0.0380	K	[3,4]
SnNO3+	-34.81 ± 0.8	-50.99 ± 1.7	38.80 ± 5.0	26 ± 25	19.900	4.4734	3.1412	4.5155	-2.9089	21.0034	2.2616	-0.0435	K	[3,4]
SnOHCl(aq)	-91.78 ± 0.5	-106.4 ± 6	30 ± 20	-12.640	34.740	6.5060	8.1040	2.5649	-3.1140	-1.5913	-5.6094	-0.0380	K	[4,10]

ⁱ kcal/mol, ⁱⁱ cal/mol/K, ⁱⁱⁱ cm³/mol, ^{iv} cal/mol/bar, ^v cal/mol, ^{vi} calK/mol/bar, ^{vii} calK/mol. * Species/complexes as shown in the SUPCRT19.dat, GWB19.dat and PHREEQC19.dat TDBs. † Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). ‡ Derivation of $\Delta_f G^{\circ}$: R : As reported, K : Fitted to log equilibrium constant, K_{eq} data. **References:** [1] (Rai et al., 2011). [2] Using methods described in (Shock et al., 1997). [3] (Gamsjager et al., 2012). [4] Using methods described in (Sverjensky et al., 1997). [5] (Müller and Seward, 2001; Prytz, 1928). [6] (Jackson and Helgeson, 1985; Pettine et al., 1981). [7] (Fedorov et al., 1975; Riccoboni et al., 1949). [8] (Sillén and Martell, 1964; Wilson and Eugster, 1990). [9] (Maria Cigala et al., 2012; Uchida et al., 2002). [10] (Lothenbach et al., 1999; Pettine et al., 1981; Vanderzee and Rhodes, 1952; Wagman et al., 1982).

表 1-8 JAEA TDB (2019)で改訂されたチタン化合物の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ ($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1$ bar)

Species/ Complex *	$\Delta_f G^{\circ i,\dagger}$	$\Delta_f H^{\circ i,\dagger}$	$S^{\circ ii,\dagger}$	$C_p^{\circ ii,\dagger}$	$V^{\circ iii}$	Revised H-K-F EoS parameters							Der ‡	Ref
						$a_1 \times 10^{iv}$	$a_2 \times 10^{-2v}$	a_3^{vi}	$a_4 \times 10^{-4vii}$	c_1^{ii}	$c_2 \times 10^{-4vii}$	$\omega^{\circ} \times 10^{-5v}$		
TiO2(aq) (+ 2 H2O = Ti(OH)4(aq))	-200.66 ± 1.7	-226.8 ± 2	-31.2 ± 3	30 ± 20	3.900	2.4584	-1.7788	6.4493	-2.7055	28.1015	3.0764	0.4725	K	[1-4]
TiOH+3	-146.97 ± 2.2	-164.5 ± 6	-58 ± 20	28.920	-4.380	2.0141	-2.8635	6.8756	-2.6606	46.2452	2.8564	2.5106	K	[2,5-8]
TiO+2 (+ H2O = Ti(OH)2+2)	-150.30 ± 1.7	-159.4 ± 5	-30 ± 14	-26.600	0.100	2.3000	-2.1655	6.6012	-2.6895	4.7882	-8.4530	1.5425	K	[2,3, 5-7,9]
HTiO2+ (+ H2O = Ti(OH)3+)	-203.53 ± 3.0	-223.9 ± 5	-12 ± 13	3.360	8.700	3.2008	0.0339	5.7368	-2.7804	14.8224	-2.3502	0.7258	K	[4-7, 9,10]
HTiO3- (+ 2 H2O = Ti(OH)5-)	-241.11 ± 1.9	-279.3 ± 6	-16 ± 20	10 ± 40	13.700	4.2696	2.6436	4.7111	-2.8883	29.1981	-0.9976	1.8638	K	[3-5, 10,11]

ⁱ kcal/mol, ⁱⁱ cal/mol/K, ⁱⁱⁱ cm³/mol, ^{iv} cal/mol/bar, ^v cal/mol, ^{vi} calK/mol/bar, ^{vii} calK/mol. * Species/complexes as shown in the SUPCRT19.dat TDB. Parentheses are used to show equivalent hydrated species used in GWB19.dat and PHREEQC19.dat TDBs. † Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). ‡ Derivation of $\Delta_f G^{\circ}$: K : Fitted to log equilibrium constant, K_{eq} data. **References:** [1] (Shuiling and Vink, 1967). [2] (Vasil'ev et al., 1974). [3] (Ziemniak et al., 1993). [4] (Schmidt and Vogelsberger, 2009). [5] Using methods described in (Shock et al., 1997). [6] (Pichavant et al., 2019). [7] (Lobanov et al., 1969; Nabivanets and Lukachina, 1964). [8] (Nazarenko et al., 1971; Pichavant, 2015). [9] (L berti et al., 1963). [10] (Knauss et al., 2001). [11] (Ryzhenko et al., 2006).

表 1-9 JAEA TDB (2019)で追加されたギ酸及びシアン酸化合物の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ ($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1$ bar)

Species/ Complex *	$\Delta_f G^{\circ i, \dagger}$	$\Delta_f H^{\circ i, \dagger}$	$S^{\circ ii, \dagger}$	$C_p^{\circ iii, \dagger}$	$V^{\circ iii}$	Revised H-K-F EoS parameters							Der ‡	Ref
						$a_1 \times 10^{iv}$	$a_2 \times 10^{-2v}$	a_3^{vi}	$a_4 \times 10^{-4vii}$	c_1^{ii}	$c_2 \times 10^{-4vii}$	$\omega^0 \times 10^{-5v}$		
Formate- [§]	-83.86 ± 0.2	-101.73 ± 0.2	21.7 ± 1	-20.177	26.160	5.7842	4.7242	7.3630	-2.9742	17.0000	-12.4000	1.3003	R	[1]
BaFormate+ [§]	-219.775	-228.954	34.547	20.000	21.100	4.6594	3.5953	4.3370	-2.9276	18.0803	1.0394	0.0209	R	[2]
BaFormate2(aq) [§]	-304.769	-330.020	62.275	41.800	58.600	9.7710	16.0760	-0.5684	-3.4436	30.3138	5.4801	-0.0380	R	[2]
CaFormate+ [§]	-217.933	-232.047	13.005	30.700	15.000	3.9349	1.8264	5.0323	-2.8545	27.3564	3.2190	0.3471	R	[2]
CaFormate2(aq) [§]	-302.982	-335.151	34.084	62.700	51.800	8.8405	13.8040	0.3246	-3.3497	42.5625	9.7374	-0.0380	R	[2]
CuFormate+ [§]	-70.888	-88.343	-0.220	34.800	7.700	3.0037	-0.4474	5.9259	-2.7605	31.6046	4.0542	0.5474	R	[2]
CuFormate2(aq) [§]	-156.551	-193.278	16.777	70.800	43.700	7.7321	11.0977	1.3883	-3.2378	47.3096	11.3874	-0.0380	R	[2]
FeFormate+ [§]	-108.225	-126.237	-3.492	29.400	10.400	3.3899	0.4957	5.5553	-2.7995	28.8968	2.9542	0.5970	R	[2]
FeFormate2(aq) [§]	-193.710	-231.296	12.495	60.200	46.700	8.1426	12.1000	0.9943	-3.2792	41.0973	9.2281	-0.0380	R	[2]
HFormate(aq) [§]	-89.0 ± 2	-101.71 ± 0.2	39 ± 20	22.800	34.690	6.4004	7.8463	2.6662	-3.1034	26.0593	-3.1000	-0.3300	R	[2]
KFormate(aq) [§]	-151.413	-161.195	48.668	6.800	45.200	7.9373	11.5989	1.1913	-3.2585	9.8017	-1.6494	-0.0380	R	[2]
KFormate2- [§]	-234.866	-264.657	63.193	13.900	85.500	13.6894	25.6434	-4.3287	-3.8391	20.4348	-0.2032	0.6645	R	[2]
MgFormate+ [§]	-194.318	-215.724	-13.582	35.700	11.100	3.5373	0.8556	5.4138	-2.8144	33.9967	4.2375	0.7498	R	[2]
MgFormate2(aq) [§]	-279.367	-321.274	-0.709	72.400	47.500	8.2521	12.3673	0.8893	-3.2903	48.2473	11.7133	-0.0380	R	[2]
MnFormate+ [§]	-140.681	-155.779	7.415	38.400	16.100	4.1141	2.2638	4.8603	-2.8726	32.6494	4.7875	0.4318	R	[2]
MnFormate2(aq) [§]	-226.030	-259.697	26.769	77.800	53.000	9.0047	14.2049	0.1670	-3.3662	51.4120	12.8133	-0.0380	R	[2]
NaFormate(aq) [§]	-146.521	-159.326	35.333	22.800	33.900	6.3910	7.8234	2.6752	-3.1024	19.1787	1.6098	-0.0380	R	[2]
NaFormate2- [§]	-230.001	-264.122	45.473	45.000	72.800	12.0422	21.6216	-2.7480	-3.6728	41.1340	6.1319	0.9329	R	[2]
NiFormate+ [§]	-97.313	-117.624	-10.582	21.300	2.800	2.3862	-1.9551	6.5185	-2.6982	25.1383	1.3042	0.7043	R	[2]
NiFormate2(aq) [§]	-182.853	-223.390	3.217	44.400	38.200	6.9794	9.2600	2.1106	-3.1618	31.8376	6.0097	-0.0380	R	[2]
PbFormate+ [§]	-92.150	-100.722	37.138	19.100	17.700	4.1809	2.4269	4.7962	-2.8793	17.1918	0.8561	-0.0183	R	[2]
PbFormate2(aq) [§]	-177.718	-202.125	65.665	40.000	54.900	9.2647	14.8398	-0.0825	-3.3925	29.2589	5.1134	-0.0380	R	[2]
SrFormate+ [§]	-220.518	-233.210	21.145	25.100	15.700	3.9891	1.9586	4.9803	-2.8600	22.9395	2.0783	0.2239	R	[2]
SrFormate2(aq) [§]	-305.513	-335.511	44.736	51.700	52.600	8.9499	14.0713	0.2195	-3.3607	36.1158	7.4967	-0.0380	R	[2]
ZnFormate+ [§]	-121.477	-140.756	-4.310	33.500	8.000	3.0657	-0.2960	5.8664	-2.7668	31.4139	3.7894	0.6094	R	[2]
ZnFormate2(aq) [§]	-206.908	-245.836	11.424	68.100	44.100	7.7868	11.2313	1.3358	-3.2433	45.7272	10.8374	-0.0380	R	[2]
Cyanide- ^a	41.2 ± 2	36.0 ± 2	22.5 ± 2	-17.700	23.900	5.4683	5.5705	3.5607	-3.0093	7.5931	-6.6401	1.2808	R	[3,4]
HCyanide(aq) [§]	28.6 ± 2	25.6 ± 2	29.8 ± 2	40.666	45.878	8.0207	11.6778	1.2382	-3.2618	28.9910	5.2398	-0.1115	R	[3,5]
OCyanide- [§]	-23.3 ± 2	-35.8 ± 2	22.5 ± 2	-17.650	26.120	5.7721	6.3122	3.2692	-3.0400	7.6224	-6.6299	1.2808	R	[3,4]
SCyanide- ^a	22.2 ± 2	18.3 ± 2	34.5 ± 2	-9.6 ± 2	35.700	7.0216	9.3630	2.0701	-3.1661	10.6653	-4.9901	1.0990	R	[3,4]

ⁱ kcal/mol, ⁱⁱ cal/mol/K, ⁱⁱⁱ cm³/mol, ^{iv} cal/mol/bar, ^v cal/mol, ^{vi} calK/mol/bar, ^{vii} calK/mol. * Species/complexes as shown in the SUPCRT19.dat, GWB19.dat and PHREEQC19.dat TDBs. † Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). ‡ Derivation of $\Delta_f G^{\circ}$: K : Fitted to log equilibrium constant, K_{eq} data. § New entry in JAEA TDB (2019). Cyanide- and SCyanide- were formerly written as CN- and SCN-, respectively. **References:** [1] (Shock, 1995). [2] (Shock and Koretsky, 1995). [3] (Wagman et al., 1982). [4] (Shock et al., 1997). [5] (Oelkers et al., 1995).

表 1-10 JAEA TDB (2019)で追加されたその他の化合物の熱力学特性及び改良 H-K-F 式パラメータ ($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1 \text{ bar}$)

Species/ Complex *	$\Delta_f G^{\circ \text{ i,†}}$	$\Delta_f H^{\circ \text{ i,†}}$	$S^{\circ \text{ ii,†}}$	$C_p^{\circ \text{ iii,†}}$	$V^{\circ \text{ iii}}$	Revised H-K-F EoS parameters							Der ‡	Ref
						$a_1 \times 10^{\text{ iv}}$	$a_2 \times 10^{-2 \text{ v}}$	$a_3^{\text{ vi}}$	$a_4 \times 10^{-4 \text{ vii}}$	$c_1^{\text{ ii}}$	$c_2 \times 10^{-4 \text{ vii}}$	$\omega^{\circ \text{ v}}$		
AlHSiO ₃ +2 (+ H ₂ O = AlSiO(OH) ₃ +2) §	-369.50 ± 0.6	-393.7 ± 1	-12.0 ± 3	-5 ± 10	-18.482	-0.3349	-8.5990	9.1298	-2.4235	14.9357	-4.0531	1.2699	R	[1]
BaCl+	-164.03 ± 0.5	-166.1 ± 3	19 ± 10	6.963	12.233	3.5263	0.8287	5.4244	-2.8133	12.6279	-1.6162	0.2584	K	[2,3]
HCuO ₂ - (+ H ₂ O = Cu(OH) ₃ -)	-60.100	-86.304	0.300	-24.700	-4.600	1.6820	-3.6744	7.1943	-2.6271	6.5874	-8.0659	1.6169	R	[4-6]
FeB(OH) ₄ + §	-302.53 ± 0.5	-347.4 ± 3	2.2 ± 9	66 ± 20	6.920	2.8846	-0.7382	6.0402	-2.7485	49.5525	10.4096	0.5108	So	[6,7]
FeCl+	-52.90 ± 0.3	-61.09 ± 0.4	-9.9 ± 1	21.200	1.060	2.1446	-2.5449	6.7503	-2.6738	24.9848	1.2838	0.6940	K	[2,8,9]
FeCl ₂ (aq)	-81.66 ± 0.7	-92.8 ± 1	22.4 ± 3	38.700	27.430	5.5057	5.6618	3.5248	-3.0131	28.4970	4.8486	-0.0380	K	[6,9,10]
FeCO ₃ (aq)	-155.045 ± 0.71	-183.2 ± 2	-13 ± 10	-30 ± 30	-19.014	-0.8497	-9.8559	9.6238	-2.3716	-11.7653	-9.1456	-0.0380	So	[6,11]
FeH ₂ PO ₄ + §	-285.86 ± 0.4	-324.72 ± 2.5	-0.3 ± 8	58 ± 20	11.559	3.5321	0.8430	5.4188	-2.8139	45.2122	8.7800	0.5486	So	[6,12]
FeHPO ₄ (aq) §	-287.09 ± 0.5	-329.11 ± 2.1	-10.9 ± 7	-19 ± 27	-7.962	0.6626	-6.1634	8.1725	-2.5242	-5.3186	-6.9049	-0.0380	So	[6,12]
FeOH+	-65.870 ± 0.71	-78.10 ± 1.7	-10.0 ± 5	15.000	-16.500	-0.2561	-8.4039	9.0457	-2.4315	21.4093	0.0209	0.7003	K	[5,13]
FeSO ₄ (aq) §	-203.133 ± 0.19	-237.5 ± 2	-2.9 ± 5	-25 ± 29	1.032	1.8934	-3.1583	6.9915	-2.6484	-8.8350	-8.1271	-0.0380	So	[2,11]
FeO ₂ - (+ 2 H ₂ O = Fe(OH) ₄ -)	-87.50 ± 1.6	-106.9 ± 3	6.1 ± 9	17 ± 10	-3.000	1.8713	-3.2123	7.0127	-2.6462	30.2170	0.4283	1.5291	K	[14]
HClO(aq)	-19.1 ± 2	-28.9 ± 2	34 ± 20	9.100	28.400	5.5927	5.8740	3.4414	-3.0218	9.9022	-1.1809	-0.1734	R	[5,15]
HClO ₂ (aq)	1.4 ± 2	-12.4 ± 2	45.0 ± 2	27.500	44.000	7.6705	10.9475	1.4473	-3.2316	19.1371	2.5672	-0.3415	R	[5,15]
MgOH+	-149.23 ± 0.7	-162.89 ± 1.4	-13.5 ± 4	20 ± 30	-18.141	-0.4644	-8.9153	9.2542	-2.4104	24.7836	1.0394	0.7485	K	[16-18]
MgSO ₄ (aq)	-289.5 ± 4	-327.375	-13.500	-21.720	1.330	1.9369	-3.0547	6.9554	-2.6526	-6.8390	-7.4589	-0.0300	R	[19]
NiO(aq) (+ H ₂ O = Ni(OH) ₂ (aq))	-38.72 ± 2.1	-51.44 ± 3.7	-11 ± 10	-40 ± 15	3.140	2.1818	-2.4540	6.7146	-2.6776	-17.6259	-11.1826	-0.0380	K	[18,20,21]

III
8

ⁱ kcal/mol, ⁱⁱ cal/mol/K, ⁱⁱⁱ cm³/mol, ^{iv} cal/mol/bar, ^v cal/mol, ^{vi} calK/mol/bar, ^{vii} calK/mol. * Species/complexes as shown in the SUPCRT19.dat TDB. Parentheses are used to show equivalent hydrated species used in GWB19.dat and PHREEQC19.dat TDBs. † Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). ‡ Derivation of $\Delta_f G^{\circ}$: R : As reported, K : Fitted to log equilibrium constant, K_{eq} data, So : Solubility. § New entry in JAEA TDB. **References:** [1] (Farmer and Lumsdon, 1994; Pokrovski et al., 1996; Salvi et al., 1998; Spadini et al., 2005). [2] (Sverjensky et al., 1997). [3] (Majer and Stulik, 1982; Parker, 1995). [4] (Baes and Mesmer, 1976). [5] (Shock et al., 1997). [6] Using methods described in (Sverjensky et al., 1997). [7] (Xiong et al., 2018). [8] (Heinrich and Seward, 1990; Palmer and Hyde, 1993; Raman, 1976; Zhao, 1997). [9] (Fein et al., 1992; Zhao and Pan, 2001). [10] (Ding and Seyfried, 1992). [11] (Lemire et al., 2013). [12] (Nriagu, 1972b). [13] (Sweeton and Baes, 1970). [14] (Diakonov et al., 1999; Dilnesa et al., 2014; Kamnev et al., 1986; Kuma et al., 1996; Liu and Millero, 1999; Perera and Hefter, 2003; Sergeeva et al., 1999; Stefansson, 2007; Yishin et al., 1986; Ziemniak et al., 1995). [15] (Wagman et al., 1982). [16] (Gjaldbaek, 1925; Kolthoff, 1923; Palmer and Wesolowski, 1997; Walther, 1986). [17] $\Delta_f H^{\circ}$ corrected to conform to Gibbs-Helmholtz (G-H-S) relation. [18] (Brown and Ekberg, 2016). [19] (McCullom and Shock, 1997). [20] Using methods described in (Shock et al., 1997). [21] (Palmer et al., 2011; Tremaine and LeBlanc, 1980).

表 1-11 JAEA TDB (2019)で追加された鉛含有鉱物の熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1 \text{ bar}$)

Mineral/Phase ^{*,†}	Composition	$\Delta_f G^{\circ i, \ddagger}$	$\Delta_f H^{\circ i, \ddagger}$	$S^{\circ ii, \ddagger}$	$V^{\circ iii}$	$C_p^{\circ ii, \ddagger}$	Maier-Kelly Coefficients [§]			C_p Tmax ^{vi}	Der ^a	Ref
							a ⁱⁱ	b $\times 10^3$ ^{iv}	c $\times 10^{-5}$ ^v			
Alamosite	PbSiO ₃	-246.25 ± 0.5	-266.320 ± 0.46	26.20 ± 0.3	44.980	21.52 ± 0.2	27.332	5.713	-6.681	762	C	[1-3]
Anglesite	PbSO ₄	-194.31 ± 0.2	-219.871 ± 0.22	35.490 ± 0.10	47.970	24.67 ± 0.5	12.849	28.868	2.857	1100	C	[4,5]
Cerussite	PbCO ₃	-149.893 ± 0.12	-167.90 ± 0.3	30.0 ± 1	40.662	20.84 ± 0.3	12.281	28.712	0	800	K	[6-8]
Cotunnite	PbCl ₂	-75.08 ± 0.3	-85.90 ± 0.2	32.50 ± 0.5	47.068	18.42 ± 0.4	16.417	6.871	-0.040	774	C	[1]
Galena	PbS	-23.06 ± 1.1	-23.46 ± 1.1	21.80 ± 0.3	31.418	11.833 ± 0.28	10.981	2.858	0	1388	C,So	[7,9]
Hydrocerussite	Pb ₃ (CO ₃) ₂ (OH) ₂	-406.37 ± 0.4	-465.038	79.791	113.455	61.383	39.568	78.285	-1.356	762	P	[10,11]
Lead	Pb	0 ± 0	0 ± 0	15.490 ± 0.07	18.260	6.384 ± 0.05	5.290	2.800	0.230	600.6	C	[4,12]
Litharge	PbO (red)	-45.24 ± 0.2	-52.44 ± 0.2	15.85 ± 0.2	23.924	10.93 ± 0.4	12.426	2.162	-1.905	762	C	[1]
Massicot	PbO (yellow)	-45.086 ± 0.15	-52.117 ± 0.15	16.420 ± 0.05	23.152	10.940 ± 0.10	10.800	3.075	-0.691	1159	C	[1]
Pb ₂ SiO ₄ (s)	Pb ₂ SiO ₄	-303.0 ± 4	-329.5 ± 4	44.60 ± 0.5	66.984	32.780	40.669	8.477	-9.260	762	C	[1,2,13]
Pb ₃ (PO ₄) ₂ (s)	Pb ₃ (PO ₄) ₂	-564.98 ± 0.6	-617.99 ± 0.7	84.45 ± 0.4	108.926	61.25 ± 1.0	39.317	73.575	0	453	C,So	[11,12,14,15]
PbB ₂ O ₄ (s)	PbB ₂ O ₄	-346.5 ± 2	-371.89 ± 1.4	31.19 ± 2.9	75.664	25.597	39.540	7.925	-14.494	1000	C	[1]
PbHPO ₄ (s)	PbHPO ₄	-281.60 ± 0.2	-313.069		53.732	29.027	4.978	80.662	0	308	R,So	[11,15-17]
Plattnerite	PbO ₂	-51.48 ± 0.7	-65.60 ± 0.7	17.16 ± 0.1	25.073	14.618	17.709	1.491	-3.143	1200	C	[1]
Plumbonacrite	Pb ₁₀ O ₂ (CO ₃) ₆ (OH) ₄	-1212.6 ± 7	-1381.257		358.170	185.510	124.021	228.775	-5.974	762	So	[6,11,18]
Pyromorphite	Pb ₁₀ (PO ₄) ₆ Cl ₂	-1796.60 ± 1.9	-1968.2 ± 2	279.79 ± 0.5	381.577	198.36 ± 0.2	242.469	27.901	-46.606	762	C,So	[11,17,19]

ⁱ kcal/mol, ⁱⁱ cal/mol/K, ⁱⁱⁱ cm³/mol, ^{iv} cal/mol/K², ^v calK/mol, ^{vi} K. * Minerals/solid phases as shown in SUPCRT19.dat TDB, GWB19.dat and PHREEQC19.dat. † All lead bearing minerals/solid phases are new entries in the JAEA-TDB (2019). ‡ Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). § $C_p = a + b \cdot T + c/T^2$ (Maier and Kelly, 1932).^a Derivation of $\Delta_f G^{\circ}$: C : Calorimetry, K : Fitted to log equilibrium constant, K_{eq} data, So : Solubility, P : Phase relations, R: As reported. **References:** [1] (Chase, 1998). [2] (King, 1959). [3] (Boucher and Peacor, 1968; Kelley, 1962). [4] (Cox, 1978). [5] (DeKock, 1982). [6] (Taylor and Lopata, 1984). [7] (Lothenbach et al., 1999). [8] (Anderson, 1934; Biliński and Schindler, 1982; Bissengaliyeva et al., 2012; Chevrier et al., 1992; Dorange et al., 1989; Hem, 1976; Näsänen et al., 1961; Patterson and O'Brien, 1979; Ugglä, 1959). [9] (Giordano and Barnes, 1979; Helgeson et al., 1978; Hemley, 1953; Mills, 1974; Noda et al., 1987; Thompson and Flengas, 1971). [10] (Garrels, 1957; Marani et al., 1995; Mercy et al., 1998). [11] Using additive methods described in (Helgeson et al., 1978). [12] (Kelley, 1960). [13] (Kato, 1980). [14] (Brixner et al., 1973; Pitzer, 1938; Pitzer et al., 1938). [15] (Nriagu, 1972a). [16] (Lopez-Echarri et al., 1981; Robert and Lefauchaux, 1989). [17] (Jowett and Price, 1932). [18] (Krivovichev and Burns, 2000). [19] (Bissengaliyeva et al., 2011; Dai and Hughes, 1989; Nriagu, 1974; Topolska et al., 2016).

表 1-12 JAEA TDB (2019)で改訂されたその他の鉱物の熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1$ bar)

Mineral/Phase (A-Z) †	Composition	$\Delta_f G^{\circ}$ i, †	$\Delta_f H^{\circ}$ i, †	S° ii, †	V° iii	C_p° 0 ii, †	Maier-Kelley Coefficients §			C_p Tmax vi	Der a	Ref
							a ii	b × 10 ³ iv	c × 10 ⁻⁵ v			
Anatase	TiO ₂	-212.68 ± 0.8	-225.93 ± 0.8	11.928 ± 0.08	20.458	13.49 ± 0.3	17.210	1.080	-3.590	1949	C,P	[1-3]
Bonattite b	CuSO ₄ (H ₂ O) ₃	-334.60 ± 0.2	-402.58 ± 0.6	52.9 ± 2	79.871	49.000	49.024	30.965	-8.228	390	R	[4-6]
Cesium	Cs	0 ± 0	0 ± 0	20.37 ± 0.1	68.863	7.75 ± 0.4	8.541	-2.646	0	301.55	R	[1,7]
Chalcanthite b	CuSO ₄ (H ₂ O) ₅	-449.270 ± 0.02	-544.85 ± 0.6	71.8 ± 2	110.314	66.922	62.032	47.445	-8.228	369	R	[4,5,8]
CuSO ₄ (s) b	CuSO ₄	-158.20 ± 0.3	-184.30 ± 0.3	26.10 ± 0.1	40.821	23.630 ± 0.21	31.024	6.245	-8.228	835	R	[1,7]
Ettringite hiBO4 b	Ca ₆ (Al(OH) ₆) ₂ (B(OH) ₄) ₄ (OH) ₂ (H ₂ O) ₁₈	-3821.38 ± 2.6	-4392.7 ± 7	370 ± 24	678.817	527 ± 18	487.104	184.178	-13.409	363	K	[9,10]
Ettringite loBO4 b,c	Ca ₆ (Al(OH) ₆) ₂ (B(OH) ₄) ₂ (OH) ₄ (H ₂ O) ₂₇	999999	999999	389 ± 27	672.303	588 ± 21	535.873	195.914	-5.247	NR	E	[9]
Friedel Salt Fe	(Ca ₂ Fe(OH) ₆) ₂ (Cl) ₂ (H ₂ O) ₄	-1410.4 ± 2	-1606 ± 11	154 ± 37	277.486	172.4 ± 1	74.654	256.599	18.861	328	K	[9,11,12]
Mg ₃ (PO ₄) ₂ (s) b	Mg ₃ (PO ₄) ₂	-837.27 ± 2.5	-895.10 ± 2.5	45.22 ± 0.2	95.341	51.020	64.480	15.916	-16.183	1626	C	[13]
Monoborate Al b	(Ca ₂ Al(OH) ₆) ₂ (HBO ₃)(H ₂ O) ₆	-1882.5 ± 8	-2111.6 ± 9	191.5 ± 8	285.180	185.8 ± 2	108.119	269.995	-2.494	363	K	[9,10]
Monoborate AlH12 b	(Ca ₂ Al(OH) ₆) ₂ (HBO ₃)(H ₂ O) ₆	-1882.5 ± 8	-2111.6 ± 9	191.5 ± 8	285.180	185.8 ± 2	108.119	269.995	-2.494	363	K	[9,10]
Montmor_MX80(WY) b	K _{0.024} Na _{0.409} Ca _{0.009} (Mg _{0.214} Fe _{0.208} Al _{1.598}) (Al _{0.262} Si _{3.738})O ₁₀ (OH) ₂	-1265.09 ± 1.6	-1351.90 ± 1.6	72.16 ± 0.1	134.920	76.861 ± 0.02	76.379	67.419	-17.440	520	C	[14]
Nontro_NAu-1 b	K _{0.02} Ca _{0.247} (Mg _{0.066} Fe _{1.688} Al _{0.268} Ti _{0.007}) (Al _{0.542} Si _{3.458})O ₁₀ (OH) ₂	-1119.42 ± 1.4	-1203.25 ± 1.3	79.53 ± 1.7	136.380	80.102 ± 0.08	69.266	86.764	-13.363	375	C	[15]
Perovskite	CaTiO ₃	-376.50 ± 0.4	-396.900 ± 0.41	22.40 ± 0.1	33.630	23.350	30.470	1.360	-6.690	1520	K	[4,16]
Phosphorus	P	0 ± 0	0 ± 0	9.821 ± 0.06	17.019	5.69 ± 0.1	4.005	5.642	0	317.3	C	[7,17]
Poitevinite b	CuSO ₄ (H ₂ O)	-219.43 ± 0.2	-259.53 ± 0.6	34.9 ± 2	52.929	32.600	37.537	14.485	-8.228	513	R	[4,5,9,18]
Rutile	TiO ₂	-212.87 ± 0.8	-226.10 ± 0.8	12.020 ± 0.04	18.820	13.165	15.014	2.721	-2.365	1155	C,P	[2,19]
TiO ₂ (am) b	TiO ₂	-208.15 ± 1.7	-221.165	12.730	25.132	10.837	28.807	5.257	-17.367	573	K	[9,20]
TiO ₂ (mic) b	TiO ₂	-210.10 ± 1.8	-223.221	12.375	21.976	12.002	21.911	3.989	-9.866	573	K	[9,21]
Titanite	CaTiSiO ₅	-587.13 1.0	-621.0 ± 1	30.88 ± 0.2	55.650	33.220	42.234	5.704	-9.525	1670	C,P	[2,19,22]
Titanium	Ti	0 ± 0	0 ± 0	7.352 ± 0.05	10.637	6.03 ± 0.5	5.133	3.012	0	1166	R	[1]
Vivianite b	Fe ₃ (PO ₄) ₂ (H ₂ O) ₈	-1054.15 ± 1.0	-1226.2 ± 3	104 ± 10	186.681	136.141	127.186	82.832	-13.993	1000	K	[9,23]

ⁱ kcal/mol, ⁱⁱ cal/mol/K, ⁱⁱⁱ cm³/mol, ^{iv} cal/mol/K², ^v calK/mol, ^{vi} K. * Minerals/solid phases as shown in SUPCRT19.dat TDB, GWB19.dat and PHREEQC19.dat. † Suffix notation is used to denote differences in compositional variation (hiBO4 = high borate, loBO4 = low borate, Fe = Iron end-member, Al = Al end-member, H12 = containing 12 water molecules [AFm phases have a variable water content]), crystallinity (mic = microcrystalline, am = amorphous), provenance (WY = Wyoming), or sample name as given in the original literature (i.e. NAu-1). ‡ Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). § $C_p = a + b \cdot T + c/T^2$ (Maier and Kelly, 1932).^a Derivation of $\Delta_f G^{\circ}$: C : Calorimetry, P : Phase relations, R : As reported, K : Fitted to log equilibrium constant, K_{eq} data. ^b New entry in the JAEA-TDB (2019). ^c $\Delta_f G^{\circ}$ and/or $\Delta_f H^{\circ}$ currently unknown. **References:** [1] (Chase, 1998). [2] (Bowers and Helgeson, 1983). [3] (Naylor, 1946). [4] (Kelley, 1960). [5] (Wagman et al., 1982). [6] (Zahrobsky and Baur, 1968). [7] (Cox, 1978). [8] (Bacon and Titterton, 1975). [9] Using additive methods described in (Helgeson et al., 1978). [10] (Zhang, 2000). [11] (Dilnesa et al., 2011). [12] Monocarbonate reported in (Bellmann et al., 2019) used as a parent mineral to provide estimates of S° and C_p° using additive methods described in (Helgeson et al., 1978). [13] (Nord and Kierkegaard, 1968; Oetting and McDonald, 1963). [14] (Gailhanou et al., 2012). [15] (Gailhanou et al., 2013). [16] (Kelley and King, 1961; Robie and Waldbaum, 1968). [17] (Stephenson et al., 1969). [18] (Giester, 1988; Giester et al., 1994). [19] (Robie et al., 1978). [20] (Babko et al., 1969; Nabivanets and Lukachina, 1964; Shkol'nikov, 2016). [21] (Knauss et al., 2001; Pichavant et al., 2019). [22] $\Delta_f G^{\circ}$ and $\Delta_f H^{\circ}$ corrected to be consistent with $\Delta_f G^{\circ}$ and $\Delta_f H^{\circ}$ of Ca²⁺ and CO₃²⁻ reported by (Shock and Helgeson, 1988) together with the solubilities of calcite and aragonite reported by (Plummer and Busenberg, 1982). [23] (Al-Borno and Tomson, 1994; Bartl, 1989; Nriagu, 1972b; Ogorodova et al., 2017; Rosenqvist, 1970).

引用文献

- Al-Borno, A., and Tomson, M.B. (1994) The temperature dependence of the solubility product of vivianite. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 58(24), 5373-5378.
- Anderson, C.T. (1934) The heat capacities of magnesium, zinc, lead, manganese and iron carbonates at low temperatures. *Journal of the American Chemical Society*, 56(4), 849-851.
- Anderson, G.M., and Burnham, C.W. (1965) The solubility of quartz in supercritical steam. *American Journal of Science*, 263, 494-511.
- Aveston, J. (1965) 821. Hydrolysis of sodium silicate: Ultracentrifugation in chloride solutions. *Journal of the Chemical Society*, 4444-4448.
- Babko, A.K., Mazurenko, E.A., and Nabivanets, B.I. (1969) The sulfato-complexes of titanium(IV) in solution. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 14, 1091-1093.
- Bacon, G.E., and Titterton, D.H. (1975) Neutron diffraction studies of $\text{CuSO}_4 \cdot 5(\text{H}_2\text{O})$ and $\text{CuSO}_4 \cdot 5(\text{D}_2\text{O})$ *Zeitschrift für Kristallographie*, 141, 330-341.
- Baes, C.F., and Mesmer, R.E. (1976) *The hydrolysis of cations*. 490 p. John Wiley & Sons, Inc., New York, NY, USA.
- Baranova, N.N. (1969) Investigation of the carbonatocomplexes of lead at 25°C and 200°C. *Zhurnal Neorganicheskoi Khimii*, 14, 1716-1720.
- Bartl, H. (1989) Water of crystallization and its hydrogen-bonded crosslinking in vivianite $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$; a neutron diffraction investigation. *Zeitschrift für Analytische Chemie*, 333, 401-403.
- Bellmann, F., Majzlan, J., Grevel, K.-D., Dachs, E., and Ludwig, H.-M. (2019) Analysis of thermodynamic data of calcium aluminate monocarbonate. *Cement and Concrete Research*, 116, 89-94.
- Bendiab, H., Meullemeestre, J., Schwing, M.J., and Vierling, F. (1982) Thermodynamic constants and electronic-spectra of lead(II) chloro-complexes in aqueous solutions. *Journal of Chemical Research M*, 2718-2745.
- Biggs, A.I., Parton, H.N., and Robinson, R.A. (1955) The constitution of the lead halides in aqueous solution. *Journal of the American Chemical Society*, 77, 5844-5848.
- Bilinski, H., and Ingri, N. (1967) A determination of the formation constant of $\text{SiO}(\text{OH})_3^*$. *Acta Chemica Scandinavica*, 21, 2503-2510.
- Bilinski, H., and Schindler, P. (1982) Solubility and equilibrium constants of lead in carbonate solutions (25°C, $I = 0.3 \text{ mol dm}^{-3}$)*. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 46, 921-928.
- Bissengaliyeva, M.R., Gogol, D.B., and Bekturganov, N.S. (2011) The heat capacity and thermodynamic functions of pyromorphite over the temperature range 5-320 K. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 85(2), 157-163.
- Bissengaliyeva, M.R., Gogol, D.B., Taimassova, S.T., and Bekturganov, N.S. (2012) The heat capacity and thermodynamic functions of cerussite. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 47, 197-202.
- Bond, A.M. (1971) Use of rapid a.c. polarography for the evaluation of complexes of sparingly soluble salts. *Analytica Chimica Acta*, 53, 159-167.
- Bond, A.M., and Hefter, G. (1971) The validity of the polarographic determination of stability constants *Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry*, 31, 477-485.

- Bond, A.M., and Hefter, G. (1972) Stability constant determination in precipitating systems by rapid alternating current polarography. *Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry*, 34(1), 227-237.
- Bond, A.M., and Hefter, G. (1973) Influence of anion-induced adsorption on half-wave potentials and other polarographic characteristics. *Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry*, 42, 1-23.
- Bottari, E., and Ciavatta, L. (1965) On the complex formation between lead(II) and fluoride ions. *Journal of Inorganic Nuclear Chemistry*, 27, 133-141.
- Boucher, M.L., and Peacor, D.R. (1968) The crystal structure of alamosite, PbSiO_3 . *Zeitschrift für Kristallographie*, 126, 98-111.
- Bowers, T.S., and Helgeson, H.C. (1983) Calculation of the thermodynamic and geochemical consequences of nonideal mixing in the system $\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2-\text{NaCl}$ on phase relations in geologic systems: Equation of state for $\text{H}_2\text{O}-\text{CO}_2-\text{NaCl}$ fluids at high pressures and temperatures. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 47, 1247-1275.
- Brixner, L.H., Bierstedt, P.E., Jaep, W.F., and Barkley, J.R. (1973) α - $\text{Pb}_3(\text{PO}_4)_2$ - A pure ferroelastic. *Materials Research Bulletin*, 8, 497-504.
- Brown, P.L., and Ekberg, C. (2016) *Hydrolysis of metal ions (Vol. 2)*. Wiley-VCH, Weinheim, Germany.
- Busey, R.H., and Mesmer, R.E. (1977) Ionization equilibria of silicic acid and polysilicate formation in aqueous sodium chloride solutions to 300°C. *Inorganic Chemistry*, 16(10), 2444-2450.
- Carell, B., and Olin, A. (1960) Studies on the hydrolysis of metal ions. 34. The complexation between Pb^{2+} and OH^- in Na^+ (OH^- , ClO_4^-) medium. *Acta Chemica Scandinavica*, 14, 1999-2008.
- Chase, M.W.J. (1998) NIST-JANAF Thermochemical tables (4th ed.) Part 1, Al-Co. *Journal of Physical and Chemical Reference Data, Monograph 9*, 1951p.
- Chevrier, G., Giester, G., Heger, G., Jarosch, D., Wildner, M., and Zemmann. (1992) Neutron single-crystal refinement of cerussite, PbCO_3 , and comparison with other aragonite-type carbonates. *Zeitschrift für Kristallographie*, 199, 67-74.
- Corti, H., Crovetto, R., and Fernández-Prini, R. (1979) Aqueous solutions of lithium hydroxide at various temperatures: Conductivity and activity coefficients. *Journal of Solution Chemistry*, 8, 897-908.
- Cox, J.D. (1978) CODATA recommended key values for thermodynamics, 1977 Report of the CODATA task group on key values for thermodynamics, 1977. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 10, 903-906.
- Cox, J.D., Wagman, D.D., and Medvedev, V.A. (1989) *CODATA Key values for thermodynamics*. Hemisphere Publishing Corporation, New York, NY, USA.
- Cranston, J.A., and Brown, H.F. (1937) The hydrolysis of salts. II. KCN, CuSO_4 , Na_2SO_4 , $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$. *Journal of the Royal Technical College, Glasgow*, 4, 54-60.
- Crerar, D.A., and Anderson, G.M. (1971) Solubility and solvation reactions of quartz in dilute hydrothermal solutions. *Chemical Geology*, 8(2), 107-122.
- Cruywagen, J.J., and van de Water, R.F. (1993) The hydrolysis of lead(II). A potentiometric and enthalpimetric study. *Talanta*, 40, 1091-1095.

- Dai, Y.S., and Hughes, J.M. (1989) Crystal structure refinements of vanadinite and pyromorphite. *Canadian Mineralogist*, 27, 189-192.
- Davis, M.C., Wesolowski, D.J., Rosenqvist, J., Brantley, S.L., and Mueller, K.T. (2011) Solubility and near-equilibrium dissolution rates of quartz in dilute NaCl solutions at 398-473 K under alkaline conditions. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 75, 401-415.
- DeKock, C.W. (1982) *Thermodynamic Properties of Selected Transition Metal Sulfates and Their Hydrates*. 45 p. United States Bureau of Mines, Washington, D.C., U.S.A.
- Diakonov, I.I., Schott, J., Martin, F., Harrichoury, J.-C., and Escalier, J. (1999) Iron(III) solubility and speciation in aqueous solutions. Experimental study of the modelling: Part 1. Hematite solubility from 60 to 300°C in NaOH-NaCl solutions and thermodynamic properties of $\text{Fe}(\text{OH})_4^-(\text{aq})$. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 63(15), 2247-2261.
- Dilnesa, B.Z., Lothenbach, B., Le Saout, G., Renaudin, G., Mesbah, A., Filinchuk, Y., Wichser, A., and Wieland, E. (2011) Iron in carbonate containing AFm phases. *Cement and Concrete Research*, 41(3), 311-323.
- Dilnesa, B.Z., Lothenbach, B., Renaudin, G., Wichser, A., and Kulik, D.A. (2014) Synthesis and characterization of hydrogarnet $\text{Ca}_3(\text{Al}_x\text{Fe}_{1-x})_2(\text{SiO}_4)_y(\text{OH})_{4(3-y)}$. *Cement and Concrete Research*, 59(May), 96-111.
- Ding, K., and Seyfried, W.E.J. (1992) Determination of Fe-Cl complexing in the low pressure supercritical region (NaCl fluid): Iron solubility constraints on pH of subseafloor hydrothermal vents. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 56, 3681-3692.
- Dorange, G., Marchand, A., and Franco, A. (1989) Solubilité de la cérusite et constantes de stabilité de PbOH^+ , PbCO_3^0 et PbHCO_3^+ . *Tribune de l'eau*, 42(53-59).
- Easley, R.A., and Byrne, R.H. (2011) The ionic strength dependence of lead (II) carbonate complexation in perchlorate media. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 75, 5638-5647.
- Farmer, V.C., and Lumsdon, D.G. (1994) An assessment of complex formation between aluminium and silicic acid in acid solutions. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 58(16), 3331-3334.
- Fedorov, V.A., Robov, A.M., Grigor, T.I., and Mironov, V.E. (1972) Lead (II) nitrate complexes. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 17, 990-993.
- Fedorov, V.A., and Shishin, L.P. (1972) The thermodynamic constants of dinuclear lead halide complexes Pb_2X^{3+} . *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 50, 210-211.
- Fedorov, V.A., Bol'shakova, I.M., and Moskalenko, T.G. (1975) Formation of mixed bromo/chloro-complexes of tin(II) in aqueous solutions *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 20, 859-861.
- Fein, J.B., Hemley, J.J., d'Angelo, W.M., Komninou, A., and Sverjensky, D.A. (1992) Experimental study of iron-chloride complexing in hydrothermal fluids. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 56, 3179-3190.
- Ferri, D., Grenthe, I., Hietanen, S., and Salvatore, F. (1987) Studies on metal carbonate equilibria. 18. Lead carbonate complexation in alkaline solution. *Acta Chemica Scandinavica A*, 41, 349-354.
- Flint, E.P., and Wells, L.S. (1934) Study of the system $\text{CaO-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$ at 30° C and of the reaction of water on anhydrous calcium silicates. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 12, 751-783.

- Fournier, R.O. (1960) Solubility of quartz in the temperature interval from 25°C to 300°C. *Geological Society of America Bulletin*, 71, 1867-1868.
- Fromherz, H., and Lih, K.-H. (1931) Spektroskopische untersuchung der dissoziationsverhältnisse von blei- und thallohalogeniden in wässrigeren Lösung. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 153A(1), 321-375 [in German].
- Gailhanou, H., Blanc, P., Rogez, J., Mikaelian, G., Horiuchi, K., Yamamura, Y., Saito, K., Kawaji, H., Warmont, F., Greneche, J.-M., Vieillard, P., Fialips, C.I., Giffault, E., and Gaucher, E.C. (2013) Thermodynamic properties of saponite, nontronite, and vermiculite derived from calorimetric measurements. *American Mineralogist*, 98, 1834-1847.
- Gailhanou, H., Blanc, P., Rogez, J., Mikaelian, G., Kawaji, H., Olives, J., Amouric, M., Denoyel, R., Bourrelly, S., Montouillout, V., Vieillard, P., Fialips, C.I., Michau, N., and Gaucher, E.C. (2012) Thermodynamic properties of illite, smectite and beidellite by calorimetric methods: Enthalpies of formation, heat capacities, entropies and Gibbs free energies of formation. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 89, 279-301.
- Gamsjager, H., Gajda, T., Sangster, J., Saxena, S.K., and Voigt, W. (2012) Chemical thermodynamics of Tin. 609 p. OECD Publications, Paris, France.
- Gardner, G., and Nancollas, G.H. (1970) Complex formation in lead sulfate solution. *Analytical Chemistry*, 42, 794-795.
- Garrels, R.M. (1957) Some free energy values from geologic relations. *American Mineralogist*, 42, 780-791.
- Garrett, A.B., Vellenga, S., and Fontana, C.M. (1939) The solubility of red, yellow and black lead oxides (2) and hydrated lead oxide in alkaline solution. The character of the lead-bearing ion. *Journal of the American Chemical Society*, 61, 367-373.
- Giester, G. (1988) The crystal structures of $\text{CuSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ and $\text{CuSeO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, and their relationships to kieserite. *Mineralogy and Petrology*, 38(277-284).
- Giester, G., Lengauer, C.L., and Redhammer, G. (1994) Characterization of the $\text{FeSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ - $\text{CuSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ solid-solution series, and the nature of poitevinite, $(\text{Cu,Fe})\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$. *Canadian Mineralogist*, 32, 873-884.
- Gimblett, F.G.R., and Monk, C.B. (1954) E.M.F. studies of electrolyte dissociation. Part 7. Some alkali and alkaline earth metal hydroxides in water. *Transactions of the Faraday Society*, 50, 965-972.
- Giordano, T.H. (1985) Anglesite solubilities in water and sodium sulfate solutions to 85°C. *EoS*, 66(18), 423.
- Giordano, T.H., and Barnes, H.L. (1979) Ore solution chemistry VI. PbS solubility in bisulfide solutions to 300°C. *Economic Geology*, 74, 1637-1646.
- Gjaldbaek, J.K. (1925) Untersuchungen über die löslichkeit des magnesiumhydroxyds. II. Löslichkeitsprodukte und die dissoziationskonstante der magnesiumhydroxyde. *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie*, 144, 269-288.
- Glasstone, S. (1921) Physical chemistry of the oxides of lead. Part I. The solubility of lead monoxide. *Journal of the Chemical Society*, 119, 1689-1697.
- Greenberg, S.A. (1958) The nature of the silicate species in sodium silicate solutions. *Journal of the American Chemical Society*, 80, 6508-6511.
- Greenberg, S.A., and Price, E.W. (1957) The solubility of silica in solution of electrolytes.

- Journal of Physical Chemistry, 61, 1539-1541.
- Hefter, G. (1972) The use of ion-selective electrodes for the determination of mixed stability constants. *Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry*, 39, 345-355.
- Hefter, G. (1990) Stability constants for the lead(II) halide systems. *Polyhedron*, 9, 2429-2432.
- Heinrich, C.A., and Seward, T.M. (1990) A spectrophotometric study of aqueous iron (II) chloride complexing from 25 to 200°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 54, 2207-2221.
- Helgeson, H.C. (1969) Thermodynamics of hydrothermal systems at elevated temperatures and pressures. *American Journal of Science*, 267, 729-804.
- Helgeson, H.C., Delany, J.M., Nesbitt, H.W., and Bird, D.K. (1978) Summary and critique of the thermodynamic properties of rock-forming minerals. *American Journal of Science*, 278a, 1-229.
- Helgeson, H.C., and Kirkham, D.H. (1976) Theoretical prediction of the thermodynamic behavior of aqueous electrolytes at high pressures and temperatures: III. Equation of state for aqueous species at infinite dilution. *American Journal of Science*, 276, 97-240.
- Hem, J.D. (1976) Geochemical controls on lead concentrations in stream water and sediments. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 40, 599-609.
- Hemley, J.J. (1953) A study of lead sulfide solubility and its relation to ore deposition. *Economic Geology*, 48, 113-138.
- Hemley, J.J., Montoya, J.W., Marinenko, J.W., and Luce, R.W. (1980) Equilibria in the system Al₂O₃-SiO₂-H₂O and some general implications for alteration/mineralization processes. *Economic Geology*, 75(2), 210-228.
- Heyrovský, J. (1923) The process at the mercury dropping cathode. Part I. The deposition of metals. *Transactions of the Faraday Society*, 19, 692-702.
- Ho, P.C., and Palmer, D.A. (1998) Determination of ion association in dilute lithium chloride and lithium hydroxide solutions to 600°C and 300 MPa by electrical measurements. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 43, 162-170.
- Ho, P.C., Palmer, D.A., and Wood, R.H. (2000) Conductivity measurements of dilute aqueous LiOH, NaOH, and KOH solutions to high temperatures and pressures using a flow-through cell. *Journal of Physical Chemistry B*, 104(50), 12084-12089.
- Hugel, R. (1964) Étude de l'hydrolyse de l'ion Pb²⁺ dans les solutions de perchlorate de sodium. *Bulletin de la Société Chimique de France*(2), 1462-1469.
- Hummel, W. (2017) Ionic strength corrections and estimation of SIT iron interaction coefficients, p. 16. Paul Scherrer Institut, Villigen, Aargau, Switzerland.
- Hutchinson, M.H., and Higginson, W.C.E. (1973) Stability constants for association between bivalent cations and some univalent anions. *Journal of the Chemical Society Dalton Transactions*, 1247-1253.
- Ingri, N. (1959) Equilibrium studies of polyanions IV. Silicate ions in NaCl medium. *Acta Chemica Scandinavica*, 13, 758-775.
- Jackson, K.J., and Helgeson, H.C. (1985) Chemical and thermodynamic constraints on the hydrothermal transport and deposition of tin: I. Calculation of the solubility of cassiterite at high pressures and temperatures. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 49, 1-22.
- Jowett, M., and Price, H.I. (1932) Solubilities of the phosphates of lead. *Transactions of the Faraday Society*, 28, 668-681.

- Kamnev, A.A., Ezhov, B.B., Malandin, O.G., and Vasey, A.V. (1986) Investigation of the solution process of goethite (α -FeOOH) in alkaline solutions. *Zhurnal Prikladnoi Khimii* (Russian Journal of Applied Chemistry), 59, 1560-1564.
- Kanekiyo, Y., Aizawa, S., Koshino, N., and Funahashi, S. (2000) Complexation equilibria of oxy-acid-2-amino-2-deoxy-D-gluconic acid metal(II) ion ternary systems in aqueous solution as studied by potentiometry. *Inorganica Chimica Acta*, 298, 154-164.
- Kato, K. (1980) Die OD-Struktur von bleisilicat Pb_2SiO_4 und bleisilicat-germanat-mischkristall $Pb_2(Si,Ge)O_4$. *Acta Crystallographica B*, 36, 2539-2545.
- Kelley, K.K. (1960) Contributions to the data in theoretical metallurgy XIII: High temperature heat content, heat capacities and entropy data for the elements and inorganic compounds. *United States Bureau of Mines Bulletin*, 584, 1-232.
- Kelley, K.K. (1962) Heats and free energies of formation of anhydrous silicates. *United States Bureau of Mines Report of Investigations*, 5901, 32.
- Kelley, K.K., and King, E.G. (1961) Contributions to the data on theoretical metallurgy. XIV. Entropies of the elements and inorganic compounds. *United States Bureau of Mines Bulletin*, 592, 149p.
- Kennedy, G.C. (1950) A portion of the system silica-water. *Economic Geology*, 45, 629-653.
- King, E.G. (1959) Low-temperature heat capacities and entropies at 298.15 K of crystalline lead metasilicate, lead orthosilicate and cadmium metasilicate. *Journal of the American Chemical Society*, 81, 799-800.
- Kitahara, S. (1960) The solubility of quartz in water at high temperature and pressures. *Review of Physical Chemistry of Japan*, 30(2), 109-114.
- Kivalo, P. (1955) Chloro complexes of lead. *Suomen Kemistilehte* 28B, 155-158.
- Kivalo, P., and Luoto, R. (1957) Polarographic determination of stability constants using the indicator method. *Suomen Kemistilehte*, B30, 163-167.
- Knauss, K.G., Dibley, M.J., Bourcier, W.L., and Shaw, H.F. (2001) Ti(IV) hydrolysis constants derived from rutile solubility measurements made from 100 to 300°C. *Applied Geochemistry*, 16, 1115-1128.
- Kolthoff, I.M. (1923) Die Dissoziationskonstante der Erdalkalihydroxyde. *Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas*, 42, 973-979.
- Krivovichev, S.V., and Burns, P.C. (2000) Crystal chemistry of basic lead carbonates. II. Crystal structure of synthetic "plumbonacrite". *Mineralogical Magazine*, 64, 1069-1075.
- Kuma, K., Nishioka, J., and Matsunaga, K. (1996) Controls on iron(III) hydroxide solubility in seawater: The influence of pH and natural organic chelators. *Limnology and Oceanography*, 41(3), 396-407.
- Lagerström, G. (1959) Equilibrium studies of polyanions III. Silicate ions in $NaClO_4$ medium. *Acta Chemica Scandinavica*, 13, 722-736.
- Lemire, R.J., Berner, U., Musikas, C., Palmer, D.A., Taylor, P., and Tochiyama, O. (2013) Chemical thermodynamics of Iron, Part 1. OECD Nuclear Energy Agency, Issy-les-Moulineaux, France.
- Liberti, A., Chiantella, V., and Corigliano, F. (1963) Mononuclear hydrolysis of titanium (IV) from partition equilibria. *Journal of Inorganic Nuclear Chemistry*, 25, 415-427.
- Lind, C.J. (1978) Polarographic determination of lead hydroxide formation constants at low

- ionic strength. *Environmental Science and Technology*, 12, 1406-1410.
- Liu, X., and Millero, F.J. (1999) The solubility of iron hydroxide in sodium chloride solutions. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 63, 3487-3497.
- Lobanov, F.I., Savostina, V.M., Zerzhenko, L.V., and Peshkova, V.M. (1969) Distribution study of complex formation by titanium (IV) with thenoyltrifluoroacetate and hydroxide ions. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 14, 562-565.
- Lopez-Echarri, A., Tello, M.J., and Jubindo, M.A.P. (1981) Specific heat behavior of the ferroelectric PbHPO₄. *Solid State Communications*, 38, 383-387.
- Lothenbach, B., Ochs, M., Wanner, H., and Yui, M. (1999) Thermodynamic data for the speciation and solubility of Pd, Pb, Sn, Sb, Nb and Bi in aqueous solution, p. 340. *Japan Nuclear Cycle*, Tokai, Ibaraki, Japan.
- Lovric, M., and Branica, M. (1980) Application of ASV for trace metal speciation IV: Determination of lead-chloride stability constants by rotating mercury coated glassy carbon electrode. *Croatica Chemica Acta*, 53, 503-508.
- Luo, Y., and Millero, F.J. (2007) Stability constants for the formation of lead chloride complexes as a function of temperature and ionic strength. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 71, 326-334.
- Mackenzie, F.T., and Gees, R. (1971) Quartz: Synthesis at earth surface conditions. *Science*, 173(3996), 533-535.
- Maier, C.G., and Kelly, K.K. (1932) An equation for the representation of high temperature heat content data. *Journal of the American Chemical Society*, 54(8), 3243-3246.
- Majer, V., and Stulik, K. (1982) A study of the stability of alkaline-earth metal complexes with fluoride and chloride ions at various temperatures by potentiometry with ion-selective electrodes. *Talanta*, 29(2), 145-148.
- Manning, C.E. (1994) The solubility of quartz in H₂O in the lower crust and upper-mantle. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 58, 4831-4839.
- Marani, D., Macchi, G., and Pagano, M. (1995) Lead precipitation in the presence of sulphate and carbonate: Testing of thermodynamic predictions. *Water Research*, 29(4), 1085-1092.
- Maria Cigala, R., Crea, F., De Stefano, C., Lando, G., Milea, D., and Sammartano, S. (2012) The inorganic speciation of tin(II) in aqueous solution. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 87, 1-20.
- McCollom, T.M., and Shock, E.L. (1997) Geochemical constraints on chemolithoautotrophic metabolism by microorganisms in seafloor hydrothermal systems. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 61(20), 4375-4391.
- Mercy, M.A., Rock, P.A., Casey, W.H., and Mokarram, M.M. (1998) Gibbs energies of formation for hydrocerussite [Pb(OH)₂.(PbCO₃)₂(s)] and hydrozincite {[Zn(OH)₂]₃.(ZnCO₃)₂(s)} at 298 K and 1 bar from electrochemical cell measurements. *American Mineralogist*, 83, 739-745.
- Mesarić, Š.S., and Hume, D.N. (1963) A polarographic study of lead fluoride complexes and solubility. *Inorganic Chemistry*, 2(4), 788-790.
- Mgaidi, A., Furst, W., and Renon, H. (1991) Representation of the solubility of lead chloride in various chloride solutions with Pitzer's model. *Metallurgical Transactions*, 22B(491-498).
- Millero, F.J., and Byrne, R.H. (1984) Use of Pitzer's equations to determine the media effect on the formation of lead chloro complexes. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 48, 1145-

- 1150.
- Mills, K.C. (1974) Thermodynamic data for inorganic sulphides, selenides and tellurides. 845 p. Butterworths, London, UK.
- Mironov, V.E., Kul'ba, F.Y., Fedorov, V.A., and Tikhomirov, O.B. (1963) Influence of the anionic background on the formation of chloro- and nitrate-complexes of lead(II). *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 8(11), 2536.
- Morey, G.W., Fournier, R.O., and Rowe, J.J. (1962) The solubility of quartz in water in the temperature interval from 250 to 300°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 26(10), 1029-1043.
- Morey, G.W., and Hesselgesser, J.M. (1951) The solubility of quartz and some other substances in superheated steam at high pressures. *American Society of Mechanical Engineers Transactions*, 73, 868-875.
- Müller, B., and Seward, T.M. (2001) Spectrophotometric determination of the stability of tin(II) chloride complexes in aqueous solution up to 300°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 65(22), 4187-4199.
- Nabivanets, B.I., and Lukachina, V.V. (1964) Hydroxy complexes of Ti(IV). *Ukrainskii Khimicheskii Zhurnal*, 30, 1123-1128.
- Nancollas, G.H. (1955) Thermodynamics of ion association. Part 1. Lead chloride, bromide and nitrate. *Journal of the Chemical Society*, 1458-1462.
- Näsänen, R., Meriläinen, P., and Leppänen, K. (1961) Potentiometric determination of the solubility product of lead carbonate. *Acta Chemica Scandinavica*, 15, 913-918.
- Naylor, B.F. (1946) High-temperature heat contents of TiO, Ti₂O₃, Ti₃O₅, and TiO₂. *Journal of the American Chemical Society*, 68, 1077-1080.
- Nazarenko, V.A., Antonovich, V.P., and Nevskaya, E.M. (1971) Spectrophotometric determination of the constants for the mononuclear hydrolysis of titanium(IV) ions. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 16, 530-533.
- Néher-Neumann, E. (1992) Studies on metal carbonate equilibria 24. The hydrogen carbonate and carbonate complexes of the lead(II) and cadmium(II) ions in acid solutions and a 3 M (Na)ClO₄ ionic medium at 25 °C. *Acta Chemica Scandinavica*, 46, 231-239.
- Newton, R.C., and Manning, C.E. (2000) Quartz solubility in H₂O-NaCl and H₂O-CO₂ solutions at deep crust-upper mantle pressures and temperatures: 2-15 kbar and 500-900°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 64(17), 2993-3005.
- Noda, Y., Masumoto, K., Ohba, S., Saito, Y., Toriumi, K., Iwata, Y., and Shibuya, I. (1987) Temperature dependence of atomic thermal parameters of lead chalcogenides, PbS, PbSe and PbTe. *Acta Crystallographica B*, C43(8), 1443-1445.
- Nord, A.G., and Kierkegaard, P. (1968) The crystal structure of Mg₃(PO₄)₂. *Acta Chemica Scandinavica*, 22, 1466-1474.
- Nriagu, J.O. (1972a) Lead orthophosphates. I. Solubility and hydrolysis of secondary lead orthophosphate. *Inorganic Chemistry*, 11(10), 2499-2503.
- Nriagu, J.O. (1972b) Stability of vivianite and ion-pair formation in the system Fe₃(PO₄)₂·H₃PO₄-H₂O. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 36, 459-470.
- Nriagu, J.O. (1974) Lead orthophosphates IV. Formation and stability in the environment. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 37, 367-377.

- Nriagu, J.O., and Anderson, G.M. (1971) Stability of the lead(II) complexes at elevated temperatures. *Chemical Geology*, 7, 171-183.
- Nyholm, L., and Wikmark, G. (1989) Precise polarographic determination of the stability constants of cadmium and lead with oxalate and sulphate. *Analytica Chimica Acta*, 223, 429-440.
- Nyman, C.J., Roe, D.K., and Plane, R.A. (1961) Approximate thermodynamic formation constants of some complexes of lead(II) and thallium(I) from polarographic data. *Journal of the American Chemical Society*, 83, 323-326.
- Oelkers, E.H., Helgeson, H.C., Shock, E.L., Sverjensky, D.A., Johnson, J.W., and Pokrovskii, V.A. (1995) Summary of the apparent standard partial molal gibbs free energies of formation of aqueous species, minerals, and gases at pressures 1 to 5000 bars and temperatures 25 to 1000°C. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 24(4), 1401-1560.
- Oetting, F.L., and McDonald, P.J. (1963) The thermodynamic properties of magnesium orthophosphate and magnesium orthophosphate. *Journal of the American Ceramic Society*, 67, 2737-2743.
- Ogorodova, L., Vighasina, M., Melchakova, L., Rusakov, V., Kosova, D., Ksenofontov, D., and Bryzgalov, I. (2017) Enthalpy of formation of natural hydrous iron phosphate: Vivianite. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 110, 193-200.
- Olin, A. (1960) Studies on the hydrolysis of metal ions. 25. The hydrolysis of lead(II) in perchlorate medium. *Acta Chemica Scandinavica*, 14, 126-150.
- Palmer, D.A., Bénézeth, P., Xiao, C., Wesolowski, D., and Anovitz, L.M. (2011) Solubility measurements of crystalline NiO in aqueous solution as a function of temperature and pH. *Journal of Solution Chemistry*, 40, 680-702.
- Palmer, D.A., and Hyde, K.E. (1993) An experimental determination of ferrous chloride and acetate complexation in aqueous solution to 300°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 57, 1393-1408.
- Palmer, D.A., and Wesolowski, D.J. (1997) Potentiometric measurements of the first hydrolysis quotient of magnesium(II) to 250°C and 5 molal ionic strength (NaCl). *Journal of Solution Chemistry*, 26(2), 217-232.
- Papoff, P., Riccoboni, L., and Caliumi, M. (1955) Polarographic behavior of chloride solutions of bivalent lead. *Gazzetta*, 85, 69-102.
- Parker, V.B. (1995) Thermodynamic properties of aqueous Ba²⁺ ion and the key compounds of barium. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 24(2), 1023-1036.
- Patterson, J.W., and O'Brien, J.E. (1979) Control of lead corrosion. *Journal American Water Works Association*, 71(5), 264-271.
- Pedersen, K.J. (1945) The acid dissociation of the hydrated lead ion and the formation of polynuclear ions. *Kongelige Danske Videnskabernes Selskab*, 22.
- Perera, W.N., and Hefter, G. (2003) Mononuclear cyano- and hydroxo- complexes of iron(III). *Inorganic Chemistry*, 42, 5917-5923.
- Perera, W.N., Hefter, G., and Sipos, P.M. (2001) An investigation of the lead(II)-hydroxide system. *Inorganic Chemistry*, 40, 3974-3978.
- Pettine, M., Millero, F.J., and Macchi, G. (1981) Hydrolysis of Sn(II) in aqueous solutions.

- Analytical Chemistry, 53(7), 1039-1043.
- Pichavant, A. (2015) Coprécipitation d' oxydes mixtes de titane et d' étain en solution aqueuse, Ph.D., p. 184 [in French]. L' École Nationale Supérieure des Mines de Paris, Paris, France.
- Pichavant, A., Provost, E., Fürst, W., and Hocheplied, J.-F. (2019) Determination of the temperature dependence Titanium(IV) hydrolysis and complexation constants in aqueous sulfuric or chlorhydric solutions. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 131, 184-191.
- Pitzer, K.S. (1938) The heats of solution of cesium perchlorate, rubidium perchlorate, rubidium chlorate, and lead phosphate. *Journal of the American Chemical Society*, 60(8), 1828-1829.
- Pitzer, K.S., Smith, W.V., and Latimer, W.M. (1938) The heat capacity and entropy of barium fluoride, cesium perchlorate and lead phosphate. *Journal of the American Chemical Society*, 60(8), 1826-1828.
- Plummer, L.N., and Busenberg, E. (1982) The solubilities of calcite, aragonite and vaterite in CO₂-H₂O solutions between 0 and 90°C, and an evaluation of the aqueous model for the system CaCO₃-CO₂-H₂O. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 46(6), 1011-1040.
- Pokrovski, G.S., Schott, J., Harrichoury, J.-C., and Sergeyeve, A.S. (1996) The stability of aluminium silicate complexes in acidic solutions from 25 to 150°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 60(14), 2495-2501.
- Powell, K.J., Brown, P.L., Bryne, R.H., Gajda, T., Heffer, T., Leuz, A.-K., Sjöberg, S., and Wanner, H. (2009) Chemical speciation of environmentally significant metals with inorganic metals. Part 3: the Pb²⁺ + OH⁻, Cl⁻, CO₃²⁻, SO₄²⁻ and PO₄³⁻ systems. *Pure and Applied Chemistry*, 81, 2425-2476.
- Prasada, K., and Prasada, B. (1980) Dissociation of PbCl⁺ in aqueous solutions and related thermodynamic quantities. *Journal of the Indian Chemical Society*, 57, 155-159.
- Prytz, M. (1928) Komplexbildung in stannochlorid- und stannobromidlösungen. *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*, 172, 147-166.
- Rai, D., Yui, M., Todd Scheaf, H., and Kitamura, A. (2011) Thermodynamic model for SnO₂(cr) and SnO₂(am) solubility in the aqueous Na⁺-H⁺-OH⁻-Cl⁻-H₂O system. *Journal of Solution Chemistry*, 40, 1155-1172.
- Ramamoorthy, S., and Manning, P.G. (1974) Equilibrium studies of metal-ion complexes of interest to natural waters - VIII Fulvate-phosphate, fulvate-NTA and NTA-phosphate complexes of Pb²⁺, Cd²⁺ and Zn²⁺. *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, 36(3), 695-698.
- Raman, S. (1976) Use of the complexation equilibrium between Fe(II) and 2,2'-bipyridine or 1,10 phenanthroline in the determination of the formation constant of FeCl⁺. *Journal of Inorganic Nuclear Chemistry*, 38, 1741-1742.
- Randall, M., and Spencer, H.M. (1928) Solubility of lead monoxide and basic lead carbonate in alkaline solutions. *Journal of the American Chemical Society*, 50, 1572-1583.
- Reardon, E.J. (1975) Dissociation constants of some monovalent sulfate ion pairs at 25° from stoichiometric activity coefficients. *Journal of Physical Chemistry*, 79, 422-425.
- Riccoboni, L., Popoff, P., and Arich, G. (1949) Comportamento polarografico delle soluzioni di stagno stannoso. *Gazzetta Chimica Italiana*, 79, 547-587.
- Righellato, E.C., and Davies, C.W. (1930) The extent of dissociation of salts in water. Part II.

- Uni-bivalent salts. *Transactions of the Faraday Society*, 26, 592-600.
- Rimstidt, J.D. (1997) Quartz solubility at low temperatures. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 61(13), 2553-2558.
- Robert, M.C., and Lefauchaux, F. (1989) Critical remarks about lead phosphate crystal structure determination. *Journal of Crystal Growth*, 94, 814-815.
- Robie, R.A., Hemingway, B.S., and Fisher, J.R. (1978) Thermodynamic properties of minerals and related substances at 298.15K and 1 bar (10^5 pascals) pressure and at higher temperatures. *United States Geological Survey Bulletin*, 1452, 456.
- Robie, R.A., and Waldbaum, D.R. (1968) Thermodynamic properties of minerals and related substances at 298.15oK (25.0oC) and one atmosphere (1.013 bars) pressure and at higher temperatures. *United States Geological Survey Bulletin*, 1259, 1-256.
- Röhl, R. (1982) Trace metal speciation in sea water - A paper electrophoretic approach. *Analytica Chimica Acta*, 135, 99-110.
- Roller, P.S., and Ervin, G., Jr. (1940) The system calcium-silica-water at 30° . The association of silicate ion in dilute alkaline solution. *Journal of the American Chemical Society*, 62(3), 461-471.
- Rosenqvist, I.T. (1970) Formation of vivianite in holocene clay sediments. *Lithos*, 3, 327-334.
- Ryzhenko, B.N., Kovalenko, N.I., and Prisyagina, N.I. (2006) Titanium complexation in hydrothermal systems. *Geochemistry International*, 44(9), 879-895.
- Salvi, S., Pokrovski, G.S., and Schott, J. (1998) Experimental investigation of aluminum-silica aqueous complexing at 300°C. *Chemical Geology*, 151(1-4), 51-67.
- Santschi, P.H., and Schindler, P.W. (1974) Complex formation in the ternary systems CaII-H₄SiO₄-H₂O and MgII-H₄SiO₄-H₂O. *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions*(2), 181-184.
- Schmidt, J., and Vogelsberger, W. (2009) Aqueous long-term solubility of titania nanoparticles and titanium(IV) hydrolysis in a sodium chloride system studied by adsorptive stripping voltammetry. *Journal of Solution Chemistry*, 38, 1267-1282.
- Schock, M.R. (1980) Response of lead solubility to dissolved carbonate in drinking water. *Journal American Water Works Association*, 72, 695-704.
- Schwarz, R., and Müller, W.D. (1958) Zur kenntnis der kieselsäuren. XIV. Die wasserlösliche monokieselsäure. *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie*, 296(1-6), 273-279.
- Sergeeva, E.I., Suleimenov, O.M., and Evstigneev, A.V. (1999) Solubility of hematite, Fe₂O₃ (cr, α) at 200°C and the standard entropy of Fe³⁺ ion in aqueous solution. *Geochemistry International*, 37, 1097-1107.
- Seward, T.M. (1984) The foramation of lead(II) chloride complexes to 300°C: A spectrophotometric study. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 48, 121-134.
- Sharygin, A.V., Grafton, B.K., Xiao, C., Wood, R.H., and Balashov, V.N. (2006) Dissociation constants and speciation in aqueous Li₂SO₄ and K₂SO₄ from measurements of electrical conductance to 673 K and 29 MPa. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 70, 5169-5182.
- Shkol'nikov, E.V. (2016) Thermodynamics of the dissolution of amorphous and polymorphic TiO₂ modifications in acid and alkaline media. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 90(3), 567-571.
- Shock, E.L. (1995) Organic acids in hydrothermal solutions: Standard molal thermodynamic

- properties of carboxylic acids and estimates of dissociation constants at high temperatures and pressures. *American Journal of Science*, 295(May), 496-580.
- Shock, E.L., and Helgeson, H.C. (1988) Calculation of the thermodynamic and transport properties of aqueous species at high pressures and temperatures: Correlation algorithms for ionic species and equation of state predictions to 5kb and 1000degC. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 52, 2009-2036.
- Shock, E.L., and Koretsky, C.M. (1995) Metal-organic complexes in geochemical processes: Estimation of standard partial molal thermodynamic properties of aqueous complexes between metal cations and monovalent organic acid ligands at high pressures and temperatures. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 59(8), 1497-1532.
- Shock, E.L., Sassani, D.C., Willis, M., and Sverjensky, D.A. (1997) Inorganic species in geological fluids: Correlations among standard molal thermodynamic properties of aqueous ions and hydroxide complexes. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 61(5), 907-950.
- Shuiling, R.D., and Vink, B.W. (1967) Stability relations of some titanium minerals. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 31, 2399-2411.
- Siever, R. (1962) Silica solubility, 0°-200°C, and the diagenesis of siliceous sediments. *Journal of Geology*, 70(2), 127-150.
- Sillén, L.G., and Martell, A.E. (1964) Stability constants of metal-ion complexes Chemical Society, London, UK.
- Sipos, L., Valenta, P., Nurnberg, H.W., and Branica, M. (1980) Voltametric determination of the stability constants of the predominant labile lead complexes in sea water. In M. Branica, and Z. Konrad, Eds. Lead in the marine environment. Proceedings of the international experts discussion on lead occurrence, fate and pollution in the Marine Environment, p. 61-76. Pergamon Press, Oxford, UK, Rovinj, Yugoslavia.
- Sjöberg, S., Hägglund, Y., Nordin, A., and Ingri, N. (1983) Equilibrium and structural studies of silicon(IV) and aluminium(III) in aqueous solution. V. Acidity constants of silicic acid and the ionic product of water in the medium range 0.05-2.0 M Na(Cl) at 25°C. *Marine Chemistry*, 13, 35-44.
- Sjöberg, S., Nordin, A., and Ingri, N. (1981) Equilibrium and structural studies of silicon(IV) and aluminium(III) in aqueous solution II. Formation constants for the monosilicate ions $\text{SiO}(\text{OH})_3^-$ and $\text{SiO}_2(\text{OH})_2^{2-}$. A precision study at 25°C in a simplified seawater medium. *Marine Chemistry*, 10, 521-532.
- Spadini, L., Schindler, P.W., and Sjöberg, S. (2005) On the stability of the $\text{AlOSi}(\text{OH})_3^{2+}$ complex in aqueous solution. *Aquatic Geochemistry*, 11(1), 21-31.
- Stefansson, A. (2007) Iron (III) hydrolysis and solubility at 25°C. *Environmental Science and Technology*, 41(17), 6117-6123.
- Stephenson, C.C., Potter, R.L., Maple, T.G., and Morrow. (1969) The thermodynamic properties of elementary phosphorus. The heat capacities of two crystalline modifications of red phosphorus, of α and β white phosphorus from 15 to 300 K. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 1, 59-76.
- Sverjensky, D.A., Shock, E.L., and Helgeson, H.C. (1997) Prediction of the thermodynamic properties of aqueous metal complexes to 1000 C and 5 kb. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 61(7), 1359-1412.

- Sweeton, F.H., and Baes, C.F. (1970) The solubility of magnetite and hydrolysis of ferrous ion in aqueous solutions at elevated temperatures. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 2, 479-500.
- Sylva, R.N., and Brown, P.L. (1980) The hydrolysis of metal ions. Part 3. Lead(II). *Journal of the Chemical Society Dalton Transactions*, 1577-1581.
- Tanger IV, J.C., and Helgeson, H.C. (1988) Calculation of the thermodynamic properties of aqueous species at high pressures and temperatures: Revised equations of state for the standard partial molal properties of ions and electrolytes. *American Journal of Science*, 288, 19-98.
- Taylor, P., and Lopata, V.J. (1984) Stability and solubility relationship between some solids in the system PbO-CO₂-H₂O. *Canadian Journal of Chemistry*, 62, 395-402.
- Thompson, W.T., and Flengas, S.N. (1971) Drop calorimetric measurements on some chlorides, sulfides, and binary melts. *Canadian Journal of Chemistry*, 49, 1550-1563.
- Töpelmann, H. (1929) Die amphoterie des blei(2)- und des blei(4)oxyds. *Journal für Praktische Chemie*, 121, 320-363.
- Topolska, J., Manecki, M., Bajda, T., Borkiewicz, O., and Budzewski, P. (2016) Solubility of pyromorphite Pb₅(PO₄)₃Cl at 5-65°C and its experimentally determined thermodynamic properties. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 98, 282-287.
- Tremaine, P.R., and LeBlanc, J.C. (1980) The solubility of nickel oxide and hydrolysis of Ni²⁺ in water to 573K. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 12, 521-538.
- Tugarinov, I.A., Ganeyev, I.G., and Khodakovskiy, I.L. (1975) Experimental determination of hydrolysis constants of lead ions in aqueous solutions at temperatures up to 300°C. *Geokhimiya*, 9, 1345-1354.
- Uchida, E., Sakamori, T., and Matsunaga, J. (2002) Aqueous speciation of lead and tin chlorides in supercritical hydrothermal solutions. *Geochemical Journal*, 36, 61-72.
- Uggla, R. (1959) Corrosion and passive states of zinc, lead, and tin in the system water-oxygen-nitrogen-carbon dioxide. *Annales Academiae Scientiarum Fennicae A*, 97(2), 74p.
- van't Riet, B., and Kolthoff, I.M. (1960) Studies on formation and aging of precipitates. XLVII. Maxima in particle size of lead sulfate formed under various conditions. *Journal of Physical Chemistry*, 64(8), 1045-1047.
- Van Lier, J.A., de Bruyn, P.L., and Overbeek, J.T.G. (1960) The solubility of quartz. *Journal of Physical Chemistry*, 64(11), 1675-1682.
- Vanderzee, C.E., and Rhodes, D.E. (1952) Thermodynamic data on the stannous chloride complexes from electromotive force measurement. *Journal of the American Chemical Society*, 74, 3552-3555.
- Vasil'ev, V.P., Vorob'ev, P.N., and Khodakovskii, I.L. (1974) Standard formation potentials at constant pressure for the formation of hydroxyl complexes of titanium and the Ti⁴⁺ ion in aqueous solution. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 19, 1481-1483.
- Vierling, F. (1971) Etude des equilibres de coordination entre les ions Pb²⁺ and Cl⁻ par spectrophotometrie dans I' ultraviolet. *Bulletin de la Société Chimique de France*, 25-29.
- Vierling, F. (1972) Interprétation plus élaborée des équilibres entre les ions Pb²⁺ and Cl⁻. Solubilité de PbCl₂ à 25° C dans les solutions Na⁺(ClO₄, Cl⁻)₄M. *Bulletin de la Société Chimique de France*(4), 4096-4099.

- Vlček, A.A. (1955) Polarographische halbstufenpotentiale. II. Des einfluss des grundelektrolyten, das extrapolierte halbstufenpotential und das normalredoxpotential im stromzustand. Collection of Czechoslovak Chemical Communications, 20(2), 400-412.
- Wagman, D.D., Evans, W.H., Parker, V.B., Schumm, R.H., Halow, I., Bailey, S.M., Churney, K.L., and Nuttall, R.L. (1982) The NBS tables of chemical thermodynamic properties, selected values for inorganic and c1 and c2 organic substances in SI units. Journal of Physical and Chemical Reference Data, 11(2), 1-392.
- Walker, C.S., Anraku, S., Oda, C., Mihara, M., and Honda, A. (2019) Formation of metal ion complexes in cementitious porewater and leachates. 15th International Congress on the Chemistry of Cement, Prague, Czech Republic.
- Walker, C.S., Sutou, S., Oda, C., Mihara, M., and Honda, A. (2016) Calcium silicate hydrate (C-S-H) gel solubility data and a discrete solid phase model at 25°C based on two binary non-ideal solid solutions. Cement and Concrete Research, 79, 1-30.
- Walther, J.V. (1986) Experimental determination of portlandite solubility and brucite solubilities in supercritical H₂O. Geochimica et Cosmochimica Acta, 50, 733-739.
- Walther, J.V., and Orville, P.M. (1983) The extraction-quench technique for determination of the thermodynamic properties of solute complexes: application to quartz solubility in fluid mixtures. American Mineralogist, 68(7-8), 731-741.
- Weill, D.F., and Fyfe, W.S. (1964) The solubility of quartz in H₂O in the range 1000-4000 bars and 400-500°C. Geochimica et Cosmochimica Acta, 28(8), 1243-1255.
- Wilson, G.A., and Eugster, H.P. (1990) Cassiterite solubility and tin speciation in supercritical chloride solutions. In R.J. Spencer, and I.-M. Chou, Eds. Fluid Mineral Interactions, p. 179-195. The Geochemical Society, Washington, DC, USA.
- Wood, J.K. (1910) LXIII.-Amphoteric metallic hydroxides. Part II. Journal of the Chemical Society, Transactions, 97, 878-890.
- Wosley, R.J., and Millero, F.J. (2013) Pitzer model for the speciation of lead chloride and carbonate complexes in natural waters. Marine Chemistry, 139, 1-7.
- Wright, J.M., Lindsay, W.T., and Druga, T.R. (1961) The behaviour of electrolytic solutions at elevated temperatures as derived from conductance measurements. U.S. Atomic Energy Commission Research and Development Report, p. 36. Bettis Atomic Power Laboratory.
- Xie, Z., and Walther, J.V. (1993) Quartz solubilities in NaCl solutions with and without wollastonite at elevated temperatures and pressures. Geochimica et Cosmochimica Acta, 57, 1947-1955.
- Xiong, Y., Kirkes, L., Knox, J., Marrs, C., and Burton, H. (2018) Experimental determination of the stability constant of ferrous iron borate complex [FeB(OH)₄⁺] at 25°C from solubility measurements: Implications for transport of iron in reducing conditions. Chemical Geology, 493, 16-23.
- Yishin, Z., Ruiyang, A., and Chen, Y. (1986) Determination of the solubility of Fe₂O₃ in dilute aqueous solutions at 300°C and 10 MPa. Scientia Sinica Series B, 29, 1221-1232.
- Yurchenko, E.N., Kolonin G, R., and Shironsova, G.P. (1976) Determination of the formation constants of the complexes PbCl⁺ and PbCl₂⁰ at elevated temperatures by analysis of the integral intensities of their individual gaussian absorption bands. Russian Journal of Inorganic Chemistry, 21, 1682-1685.

- Zahrobsky, R.F., and Baur, W.H. (1968) On the crystal chemistry of salt hydrates. V. The determination of the crystal structure $\text{CuSO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (bonattite). *Acta Crystallographica B*, 24, 508-513.
- Zhang, M. (2000) Incorporation of oxyanionic B, Cr, Mo, and Se into hydrocalumite and ettringite: Application to cementitious systems. *Earth Sciences*, Ph.D., p. 172. University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada.
- Zhao, R. (1997) Spectroscopic studies of chemical kinetics and complexation at high temperatures, Ph.D. University of Regina, Regina, SK, Canada.
- Zhao, R., and Pan, P. (2001) A spectrophotometric study of Fe(II)-chloride complexes in aqueous solution from 10 to 100°C. *Canadian Journal of Chemistry*, 79, 131-144.
- Ziemniak, S.E., Jones, M.E., and Combs, K.E.S. (1993) Solubility behavior of titanium(IV) oxide in alkaline media at elevated temperatures. *Journal of Solution Chemistry*, 22(7), 601-623.
- Ziemniak, S.E., Jones, M.E., and Combs, K.E.S. (1995) Magnetite solubility and phase stability in alkaline media at elevated temperatures. *Journal of Solution Chemistry*, 24(9), 837-877.
- Ziemniak, S.E., Palmer, D.A., Bénézech, P., and Anovitz, L.M. (2005) Solubility of litharge (α -PbO) in alkaline media at elevated temperatures. *Journal of Solution Chemistry*, 34, 1407-1428.

K	K+	0.0	K	39.0983
Li	Li+	0.0	Li	6.9410
Mg	Mg+2	0.0	Mg	24.3050
Mn	Mn+2	0.0	Mn	54.9380
Mn(+2)	Mn+2	0.0	Mn	
Mn(+3)	Mn+3	0.0	Mn	
Mn(+6)	MnO4-2	0.0	MnO4	
Mn(+7)	MnO4-1	0.0	MnO4	
N	NH4+	0.0	N	14.0067
N(-3)	NH4+	0.0	NH4	
N(0)	N2	0.0	N2	
N(+3)	NO2-	0.0	NO2	
N(+5)	NO3-	0.0	NO3	
Na	Na+	0.0	Na	22.9898
Ni	Ni+2	0.0	Ni	58.6934
O	H2O	0.0	O	15.9994
O(0)	O2	0.0	O2	
O(-2)	H2O	0.0	H2O	
P	HP04-2	0.0	P	30.9738
Pb	Pb+2	0.0	Pb	207.2000
Rb	Rb+	0.0	Rb	85.4678
S	SO4-2	0.0	S	32.0660
S(-2)	HS-	1.0	HS	
S(+2)	S2O3-2	0.0	S2O3	
S(+3)	S2O4-2	0.0	S2O4	
S(+4)	SO3-2	0.0	SO3	
S(+5)	S2O6-2	0.0	S2O6	
S(+6)	SO4-2	0.0	SO4	
S(+7)	S2O8-2	0.0	S2O8	
S(+8)	HSO5-	0.0	HSO5	
Si	Si(OH)4	0.0	Si	28.0855
Sn	Sn+2	0.0	Sn	118.7100
Sn(+2)	Sn+2	0.0	Sn	
Sn(+4)	Sn+4	0.0	Sn	
Sr	Sr+2	0.0	Sr	87.6200
Ti	Ti(OH)4	0.0	Ti	47.8670
Zn	Zn+2	0.0	Zn	65.3900

SOLUTION_SPECIES

```
#####
# Structure of data block for solution species
#####
# Line 1: Formation reaction of SOLUTION_SPECIES from basis/redox species.
# Line 2: Log equilibrium constant, log_k at t = 25 deg C, P = 1 bar # +/- 2 sigma uncertainty (999999 = unknown value).
# Line 3: Enthalpy of reaction, delrHO (kcal/mol) # +/- 2 sigma uncertainty.
# Line 4: Constants a,b,c,d,e used to calculate equilibrium constant as a function of temperature, T (K):
#           log_k = a + b*T + c/T + d*LOG10(T) + e/(T^2).
# Line 5: Activity correction used:
#           (i) H2O: Linear function of species concentration [1965GAR/CHR]
#           (ii) Charged species/complexes: B-dot [1969HEL]
#           (iii) Polar neutral species: Setschenow equation
#           (iv) Non-polar neutral species: Drummond polynomial [1981DRU]
# Line 6: Valid temperature range (deg C). PHREEQC upper limit is 300 deg C.
# Line 7: Method used to derive Gibbs energy of formation, delfG0.
# Line 8: Extrapolation algorithm used to calculate delfG0 and/or log_k values as a function of temperature.
# Line 9: Data source references (see end of file).
# Line 10: Gibbs free energy of formation, delfG0 (cal/mol) at t = 25 deg C, P = 1 bar # +/- 2 sigma uncertainty.
# Line 11: Enthalpy of formation, delfHO (cal/mol) at t = 25 deg C, P = 1 bar # +/- 2 sigma uncertainty.
# Line 12: Entropy, SOPrTr (cal/mol/K) at t = 25 deg C, P = 1 bar # +/- 2 sigma uncertainty.
# Line 13: Isobaric heat capacity, CpPrTr (cal/mol/K) at t = 25 deg C, P = 1 bar # +/- 2 sigma uncertainty.
# Line 14: Molar volume (cm3/mol) at t = 25 deg C, P = 1 bar.
# Line 15: Molecular weight (g/mol).
# Line 16: Date that the thermodynamic data (log_k, delfG0, delfHO, SOPrTr, CpPrTr, and molar volume) were derived.
#####
```

1. Basis species

```
1 H2O = 1 H2O
  log_k      0 # +/- 0 (by convention)
  delta_h    0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
  analytical_expression  0 0 0 0 0
  activity_water = 1 - 0.017*SUM(concentration (mol/kg) of all species in solution) after [1965GAR/CHR]
  #
  # -Range: 0.01 - 300 deg C
  # gflag: 1 [reported delfG0 used]
  # extrapolation algorithm: Not used
  # data source: [1974HEL/KIR_b][1980UEM/FRA][1983LEV/KAM][1983PIT][1984HAA/GAL][1991JOH/NOR]
  # delfG0 = -56.688 +/- 0.024 kcal/mol
  # delfHO = -68.317 +/- 0.025 kcal/mol
  # SOPrTr = 16.712 +/- 0.020 cal/mol/K
  # CpPrTr = 18.012 +/- 0.020 cal/mol/K
  # mole vol. = 18.068 cm3/mol
  # mole wt. = 18.0153 g/mol
  # date: 13. Nov. 1991
```

```
1 Al+3 = 1 Al+3
  log_k      0 # +/- 0 (by convention)
  delta_h    0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
  analytical_expression  0 0 0 0 0
  llnl_gamma  9 # Invokes use of B-dot activity correction for charged aqueous species
  #
  # -Range: 0.01 - 300 deg C
  # gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Gibbsite + 3 H+ = Al+3 + 3 H2O
  # extrapolation algorithm: Not used
  # data source: [1995POK/HEL]
  # delfG0 = -116.543 +/- 0.31 kcal/mol
  # delfHO = -128.681 +/- 0.36 kcal/mol
  # SOPrTr = -80.800 +/- 1.60 cal/mol/K
  # CpPrTr = -32.130 +/- 999999 cal/mol/K
  # mole vol. = -44.401 cm3/mol
  # mole wt. = 26.9815 g/mol
  # date: 29. Apr. 1997
```

```
1 B(OH)3 = 1 B(OH)3
  log_k      0 # +/- 0 (by convention)
  delta_h    0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
  analytical_expression  0 0 0 0 0
  co2_llnl_gamma  # 3, Invokes use of Drummond [1981DRU] polynomial to calculate
  # activity correction for neutral nonpolar aqueous species
  #
  # -Range: 0.01 - 300 deg C
```

```

# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1982WAG/EVA][1995POK/SCH]
# delfG0 = -231.540 +/- 0.24 kcal/mol
# delfH0 = -256.820 +/- 0.24 kcal/mol
# SOPrTr = 38.790 +/- 1.91 cal/mol/K
# CpPrTr = 25.666 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 39.604 cm3/mol
# mole wt. = 61.8329 g/mol
# date: 20. Jan. 1998

1 Ba+2 = 1 Ba+2
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0 0
llnl_gamma 5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1988SHO/HEL][1995PAR][Unpublished]
# delfG0 = -133.27 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -127.78 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 2.10 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = -12.300 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -12.600 cm3/mol
# mole wt. = 137.327 g/mol
# date: 20. Jun. 2016

1 Br- = 1 Br-
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0 0
llnl_gamma 3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -24.867 +/- 0.04 kcal/mol *
# delfH0 = -29.040 +/- 0.036 kcal/mol
# SOPrTr = 19.800 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = -30.408 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 24.853 cm3/mol
# mole wt. = 79.904 g/mol
# date: 1. Jul. 1987

1 Ca+2 = 1 Ca+2
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0 0
llnl_gamma 6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -132.120 +/- 0.19 kcal/mol *
# delfH0 = -129.800 +/- 0.19 kcal/mol
# SOPrTr = -13.50 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = -7.518 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -18.060 cm3/mol
# mole wt. = 40.078 g/mol
# date: 3. Jun. 1987

1 Cl- = 1 Cl-
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0 0
llnl_gamma 3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -31.379 +/- 0.024 kcal/mol *
# delfH0 = -39.933 +/- 0.021 kcal/mol
# SOPrTr = 13.560 +/- 0.04 cal/mol/K
# CpPrTr = -29.425 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 17.786 cm3/mol
# mole wt. = 35.4527 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 Cs+ = 1 Cs+
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0 0
llnl_gamma 2.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -69.710 +/- 0.05 kcal/mol *
# delfH0 = -61.670 +/- 0.03 kcal/mol
# SOPrTr = 31.750 +/- 0.01 cal/mol/K
# CpPrTr = -6.283 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 21.420 cm3/mol
# mole wt. = 132.9055 g/mol
# date: 1. Jul. 1987

1 Cu+2 = 1 Cu+2
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0 0
llnl_gamma 6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfG0 = 15.675 +/- 0.05 kcal/mol *
# delfH0 = 15.700 +/- 0.19 kcal/mol
# SOPrTr = -23.20 +/- 0.3 cal/mol/K
# CpPrTr = -2.227 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -24.600 cm3/mol
# mole wt. = 63.546 g/mol
# date: 1. Jul. 1987

```

```

1 Cyanide- = 1 Cyanide-
  log_k      0 # +/- 0 (by convention)
  delta_h    0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
  analytical_expression 0 0 0 0 0 0
  llnl_gamma 3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfGO = 41.2 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = 36.0 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 22.5 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -17.700 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 23.900 cm3/mol
# mole wt. = 26.0177 g/mol
# date: 11.Sep.1997

1 e- = 1 e- # electron
  log_k      0 # +/- 0
  delta_h    0 kcal/mol # +/- 0
  analytical_expression 0 0 0 0 0 0
# No activity correction defined
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: Not used
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1999ART/SAS]
# delfGO = 0 +/- 0 kcal/mol (by convention)
# delfHO = 0 +/- 0 kcal/mol (by convention)
# SOPrTr = 0 +/- 0 cal/mol/K (by convention)
# CpPrTr = 0 +/- 0 cal/mol/K (by convention)
# mole vol. = 0 cm3/mol (by convention)
# mole wt. = 0 g/mol
# date: 31.May.2018

1 F- = 1 F-
  log_k      0 # +/- 0 (by convention)
  delta_h    0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
  analytical_expression 0 0 0 0 0 0
  llnl_gamma 3.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfGO = -67.340 +/- 0.16 kcal/mol *
# delfHO = -80.150 +/- 0.16 kcal/mol
# SOPrTr = -3.150 +/- 0.13 cal/mol/K
# CpPrTr = -27.220 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -1.320 cm3/mol
# mole wt. = 18.9984 g/mol
# date: 1.Jul.1987

1 Fe+2 = 1 Fe+2
  log_k      0 # +/- 0 (by convention)
  delta_h    0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
  analytical_expression 0 0 0 0 0 0
  llnl_gamma 6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], potentiometry & solubility
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1968LAR/CER][1989SHO/HEL][1997SHO/SAS]
# delfGO = -21.87 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -22.05 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = -25.30 +/- 1.4 cal/mol/K
# CpPrTr = -7.723 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -22.200 cm3/mol
# mole wt. = 55.845 g/mol
# date: 11.Sep.1997

1 Formate- = 1 Formate-
  log_k      0 # +/- 0 (by convention)
  delta_h    0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
  analytical_expression 0 0 0 0 0 0
  llnl_gamma 3.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1995SHO]
# delfGO = -83.86 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -101.73 +/- 0.2 kcal/mol *
# SOPrTr = 21.7 +/- 1 cal/mol/K
# CpPrTr = -20.177 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 26.160 cm3/mol
# mole wt. = 45.0177 g/mol
# date: 8.Oct.2019

1 H+ = 1 H+
  log_k      0 # +/- 0 (by convention)
  delta_h    0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
  analytical_expression 0 0 0 0 0 0
  llnl_gamma 9
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1988SHO/HEL]
# delfGO = 0 +/- 0 kcal/mol (by convention)
# delfHO = 0 +/- 0 kcal/mol (by convention)
# SOPrTr = 0 +/- 0 cal/mol/K (by convention)
# CpPrTr = 0 +/- 0 cal/mol/K (by convention)
# mole vol. = 0 cm3/mol (by convention)
# mole wt. = 1.0079 g/mol
# date: 17.Jul.1989

1 HCO3- = 1 HCO3-
  log_k      0 # +/- 0 (by convention)
  delta_h    0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
  analytical_expression 0 0 0 0 0 0
  llnl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], potentiometry & solubility
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978BER/VAN][1988SHO/HEL]
# delfGO = -140.282 +/- 0.03 kcal/mol
# delfHO = -164.898 +/- 0.05 kcal/mol

```

```

# SPrTr = 23.530 +/- 0.12 cal/mol/K
# CpPrTr = -8.460 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 24.600 cm3/mol
# mole wt. = 61.0168 g/mol
# date: 1. Jul. 1987

1 HPO4-2 = 1 HPO4-2
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0 0
lInl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -260.31 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -308.82 +/- 0.2 kcal/mol
# SPrTr = -8.0 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -58.300 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 5.400 cm3/mol
# mole wt. = 95.9793 g/mol
# date: 3. Jul. 1987

1 I- = 1 I-
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0 0
lInl_gamma 3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -12.410 +/- 0.20 kcal/mol *
# delfH0 = -13.600 +/- 0.20 kcal/mol
# SPrTr = 25.500 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = -28.233 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 36.311 cm3/mol
# mole wt. = 126.9045 g/mol
# date: 1. Jul. 1987

1 K+ = 1 K+
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0 0
lInl_gamma 3.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -67.510 +/- 0.03 kcal/mol *
# delfH0 = -60.270 +/- 0.02 kcal/mol
# SPrTr = 24.150 +/- 0.06 cal/mol/K
# CpPrTr = 1.985 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 9.068 cm3/mol
# mole wt. = 39.0983 g/mol
# date: 3. Jun. 1987

1 Li+ = 1 Li+
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0 0
lInl_gamma 6.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1976HEL/KIR][1988SHO/HEL][1989COX/WAG]
# delfG0 = -70.009 +/- 0.03 kcal/mol *
# delfH0 = -66.556 +/- 0.02 kcal/mol
# SPrTr = 2.925 +/- 0.04 cal/mol/K
# CpPrTr = 14.200 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -0.870 cm3/mol
# mole wt. = 6.9410 g/mol
# date: 25. Oct. 2019

1 Mg+2 = 1 Mg+2
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0 0
lInl_gamma 8.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1979SHI/CR][1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -108.505 +/- 0.26 kcal/mol
# delfH0 = -111.367 +/- 0.26 kcal/mol
# SPrTr = -33.00 +/- 1.9 cal/mol/K
# CpPrTr = -5.335 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -21.543 cm3/mol
# mole wt. = 24.305 g/mol
# date: 1. Jul. 1987

1 Mn+2 = 1 Mn+2
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0 0
lInl_gamma 6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & potentiometry
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1969GED/HEP][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -55.10 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -52.90 +/- 0.3 kcal/mol
# SPrTr = -16.2 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -4.100 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -17.100 cm3/mol
# mole wt. = 54.9380 g/mol
# date: 24. May. 2016

1 Na+ = 1 Na+
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0 0
lInl_gamma 4

```

```

# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1995POK/HEL]
# delfG0 = -62.591 +/- 0.03 kcal/mol *
# delfH0 = -57.432 +/- 0.02 kcal/mol
# S0PrTr = 13.960 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = 9.077 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -1.107 cm3/mol
# mole wt. = 22.9898 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

1 NH4+ = 1 NH4+
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0
lInl_gamma 2.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -18.990 +/- 0.08 kcal/mol
# delfH0 = -31.850 +/- 0.06 kcal/mol
# S0PrTr = 26.57 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 16.024 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 18.130 cm3/mol
# mole wt. = 18.0385 g/mol
# date: 1. Jul. 1987

1 Ni+2 = 1 Ni+2
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0
lInl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -10.9 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -12.9 +/- 2 kcal/mol
# S0PrTr = -30.8 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -11.700 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -29.001 cm3/mol
# mole wt. = 58.6934 g/mol
# date: 1. Jul. 1987

2 H2O - 4 H+ - 4 e- = 1 O2
log_k -86.0033 # +/- 0.4
delta_h 133.73 kcal/mol # +/- 0.1
analytical_expression +2.774309E+2 +3.956785E-2 -4.181446E+4 -9.987326E+1 +1.079603E+6
co2_lInl_gamma # 3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1984LO/OSH][1988SHO/HEL][1989SHO/HEL]
# delfG0 = 3.954 +/- 0.55 kcal/mol
# delfH0 = -2.900 +/- 0.10 kcal/mol
# S0PrTr = 26.040 +/- 1.87 cal/mol/K
# CpPrTr = 56.000 +/- 0.5 cal/mol/K
# mole vol. = 30.380 cm3/mol
# mole wt. = 31.9988 g/mol
# date: 26. Jun. 1987

1 Pb+2 = 1 Pb+2
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0
lInl_gamma 4.5
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -5.736 +/- 0.07 kcal/mol
# delfH0 = 0.220 +/- 0.06 kcal/mol
# S0PrTr = 4.23 +/- 0.3 cal/mol/K *
# CpPrTr = -12.700 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -15.600 cm3/mol
# mole wt. = 207.2000 g/mol
# date: 10. Oct. 2019

1 Rb+ = 1 Rb+
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0
lInl_gamma 5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -67.800 +/- 0.05 kcal/mol *
# delfH0 = -60.020 +/- 0.03 kcal/mol
# S0PrTr = 28.800 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = -3.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 14.261 cm3/mol
# mole wt. = 85.4678 g/mol
# date: 29. Jun. 1987

1 Si(OH)4 = 1 Si(OH)4
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0
co2_lInl_gamma # 3, Invokes Drummond polynomial to calculate activity
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Quartz = SiO2(aq)
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1950KEN][1951MOR/HES][1960FOU][1960KIT_a][1960VAN/DEB][1962MOR/FOU][1962SIE][1964WE1/FYF]
# [1965AND/BUR][1971CRE/AND][1971MAC/GEE][1980HEM/MON][1983WAL/ORV][1993XIE/WAL]
# [1994MAN][1997RIM][2000NEW/MAN][2011DAV/WES]
# delfG0 = -199.531 + 2 H2O = -312.907 +/- 0.42 kcal/mol
# delfH0 = -212.510 + 2 H2O = -349.144 +/- 0.48 kcal/mol
# S0PrTr = 9.97 + 2 H2O = 43.40 +/- 3.4 cal/mol/K
# CpPrTr = -5.110 + 2 H2O = 30.914 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 16.100 + 2 H2O = 52.236 cm3/mol
# mole wt. = 60.0843 + 2 H2O = 96.1147 g/mol

```

```

# date: 30. Jul. 2015

1 Sn+2 = 1 Sn+2
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0
lInI_gamma 6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -6.570 +/- 0.36 kcal/mol *
# delfH0 = -2.100 +/- 0.20 kcal/mol
# SOPrTr = -4.0 +/- 1 cal/mol/K
# CpPrTr = -15.500 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -15.600 cm3/mol
# mole wt. = 118.7100 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 S04-2 = 1 S04-2
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -177.930 +/- 0.11 kcal/mol *
# delfH0 = -217.400 +/- 0.10 kcal/mol
# SOPrTr = 4.500 +/- 0.12 cal/mol/K
# CpPrTr = -63.920 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 13.880 cm3/mol
# mole wt. = 96.0636 g/mol
# date: 3. Jun. 1987

1 Sr+2 = 1 Sr+2
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0
lInI_gamma 5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1984BUS/PLU][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -134.760 +/- 0.19 kcal/mol
# delfH0 = -131.670 +/- 0.12 kcal/mol
# SOPrTr = -7.530 +/- 0.48 cal/mol/K
# CpPrTr = -10.050 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -17.410 cm3/mol
# mole wt. = 87.62 g/mol
# date: 1. Jul. 1987

1 Ti(OH)4 = 1 Ti(OH)4
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0
co2_lInI_gamma # 3 (assumed = Si(OH)4)
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Rutile = TiO2(aq)
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1967SHU/VIN][1974VAS/VOR][1993ZIE/JON][2009SCH/VOG]
# delfG0 = -200.66 + 2 H2O = -314.04 +/- 1.7 kcal/mol
# delfH0 = -226.8 + 2 H2O = -363.4 +/- 2 kcal/mol *
# SOPrTr = -31.2 + 2 H2O = 2.2 +/- 3 cal/mol/K
# CpPrTr = 30 + 2 H2O = 66 +/- 20 cal/mol/K
# mole vol. = 3.900 + 2 H2O = 40.036 cm3/mol
# mole wt. = 79.8656 + 2 H2O = 115.8962 g/mol
# date: 02. Dec. 2019

1 Zn+2 = 1 Zn+2
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0
lInI_gamma 6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -35.200 +/- 0.07 kcal/mol *
# delfH0 = -36.660 +/- 0.05 kcal/mol
# SOPrTr = -26.20 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = -5.599 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -24.300 cm3/mol
# mole wt. = 65.39 g/mol
# date: 15. Sep. 1997

#-----
# 2. Redox couples
#-----

3 Br- + 2 H+ + 0.5 O2 = 1 Br3-
log_k 7.0696 # +/- 0.3
delta_h -10.92 kcal/mol # +/- 0.2
analytical_expression 1.369153E+3 2.180700E-1 -7.484344E+4 -4.971458E+2 4.806721E+6
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -25.59 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -31.17 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 51.5 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 5.600 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 51.501 cm3/mol
# mole wt. = 239.712 g/mol
# date: 12. Jul. 1987

1 Br- + 0.5 O2 = 1 BrO-
log_k -10.9167 # +/- 2
delta_h 8.0 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -1.567606E+2 -2.311507E-2 7.836442E+3 5.423496E+1 -6.887940E+5
lInI_gamma 4

```

```

# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL][1997SHO/SAS]
# delfGO = -8.0 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -22.5 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 9.7 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = -28.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.400 cm3/mol
# mole wt. = 95.9034 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 Br- + 1.5 O2 = 1 BrO3-
log_k -17.1443 # +/- 0.6
delta_h 17.36 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression -2.895779E+2 -4.684507E-2 1.504941E+4 1.019930E+2 -1.462312E+6
lInI_gamma 3.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfGO = 4.45 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -16.03 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 38.65 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = -20.600 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 35.401 cm3/mol
# mole wt. = 127.9022 g/mol
# date: 12. Jul. 1987

1 Br- + 2 O2 = 1 BrO4-
log_k -33.1040 # +/- 2
delta_h 37.9 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -3.458188E+2 -5.682304E-2 1.397370E+4 1.220868E+2 -1.716207E+6
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL][1997SHO/SAS]
# delfGO = 28.2 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = 3.1 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 47.6 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -5.200 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 48.701 cm3/mol
# mole wt. = 143.9016 g/mol
# date: 30. Apr. 1997

1 H2O + 1 H+ + 1 HCO3- - 2 O2 = 1 CH4
log_k -144.1441 # +/- 0.9
delta_h 206.41 kcal/mol # +/- 1.6
analytical_expression 1.284116E+3 2.056624E-1 -1.211052E+5 -4.612539E+2 5.151723E+6
co2_lInI_gamma 3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1984LO/OSH][1990SHO/HEL]
# delfGO = -8.234 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -21.010 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 20.990 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 66.30 +/- 1.4 cal/mol/K
# mole vol. = 37.301 cm3/mol
# mole wt. = 16.0426 g/mol
# date: 31. Aug. 1987

+ 1 Cl- + 0.5 O2 = + 1 ClO-
log_k -15.1014 # +/- 1.5
delta_h 15.8 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression -1.585848E+2 -2.267837E-2 6.542497E+3 5.513483E+1 -7.223674E+5
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfGO = -8.8 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -25.7 +/- 6 kcal/mol *
# SOPrTr = 10 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = -27.800 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.700 cm3/mol
# mole wt. = 51.4521 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 1 Cl- + 1 O2 = + 1 ClO2-
log_k -23.1080 # +/- 1.5
delta_h 26.9 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -2.331904E+2 -3.553798E-2 8.945093E+3 8.205422E+1 -1.098853E+6
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfGO = 4.1 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -15.9 +/- 2 kcal/mol *
# SOPrTr = 24.2 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -19.300 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 22.100 cm3/mol
# mole wt. = 67.4515 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 1 Cl- + 1.5 O2 = + 1 ClO3-
log_k -17.2608 # +/- 0.6
delta_h 19.43 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression -2.820839E+2 -4.468457E-2 1.409988E+4 9.967899E+1 -1.403996E+6
lInI_gamma 3.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfGO = -1.90 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -24.86 +/- 0.2 kcal/mol *
# SOPrTr = 38.8 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -12.300 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 36.901 cm3/mol
# mole wt. = 83.4509 g/mol
# date: 12. Jul. 1987

```

```

+ 1 Cl- + 2 O2 = + 1 ClO4-
log_k      -15.7091 # +/- 0.8
delta_h    14.82 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression  -4.085291E+2    -6.348333E-2    2.303811E+4    1.441639E+2    -1.977549E+6
lInI_gamma 3.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL][1997SHO/SAS]
# delfGO = -2.04 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -30.91 +/- 0.2 kcal/mol *
# SOPrTr = 43.5 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -5.836 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 44.201 cm3/mol
# mole wt. = 99.4503 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 1 Cu+2 + 0.5 H2O - 1 H+ - 0.25 O2 = + 1 Cu+
log_k      -18.7704 # +/- 0.2
delta_h    34.86 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression  2.900963E+02    4.532200E-02    -2.358478E+04    -1.028435E+02    9.959144E+05
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfGO = 11.95 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = 17.13 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 9.7 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 13.700 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -8.000 cm3/mol
# mole wt. = 63.5460 g/mol
# date: 1. May. 1997

+ 1 Fe+2 + 0.25 O2 + 1 H+ - 0.5 H2O = + 1 Fe+3
log_k      8.4899 # +/- 1.7
delta_h    -23.23 kcal/mol # +/- 2.3
analytical_expression  -2.324370E+2    -3.775254E-2    1.724744E+4    8.187247E+1    -7.336735E+5
lInI_gamma 9
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], potentiometry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1972WHI/LAN][1989SHO/HEL][1997SHO/SAS]
# delfGO = -4.12 +/- 1.6 kcal/mol
# delfHO = -11.85 +/- 1.6 kcal/mol
# SOPrTr = -66.30 +/- 5.2 cal/mol/K
# CpPrTr = -18.600 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -37.001 cm3/mol
# mole wt. = 55.8470 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 1 H2O - 0.5 O2 = + 1 H2
log_k      -46.0803 # +/- 1.4
delta_h    65.87 kcal/mol # +/- 1.9
analytical_expression  6.117480E+2    8.746683E-2    -5.165681E+4    -2.177935E+2    2.512089E+6
co2_lInI_gamma # 3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1989SHO/HEL]
# delfGO = 4.2 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -1.0 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 13.8 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 39.900 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 25.200 cm3/mol
# mole wt. = 2.0158 g/mol
# date: 27. Jul. 2015

+ 1 SO4-2 + 1 H+ - 2 O2 = + 1 HS-
log_k      -138.3169 # +/- 0.8
delta_h    207.750 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.229486E+3    1.954627E-1    -1.176967E+5    -4.390483E+2    4.895128E+6
lInI_gamma 3.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982BAR/McC][1988SHO/HEL]
# delfGO = 2.860 +/- 0.10 kcal/mol
# delfHO = -3.850 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 16.300 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -22.597 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 20.650 cm3/mol
# mole wt. = 33.0739 g/mol
# date: 1. Jul. 1987

+ 0.5 O2 + 1 H+ + 1 SO4-2 = + 1 HS05-
log_k      -17.2865 # +/- 0.32
delta_h    33.470 kcal/mol # +/- 0.19
analytical_expression  8.311717E+2    1.297557E-1    -5.484162E+4    -2.980632E+2    3.051857E+6
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry & potentiometry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1985OHA/BAS][1986PRI/TAS][1989SHO/HEL]
# delfGO = -152.370 +/- 0.32 kcal/mol
# delfHO = -185.380 +/- 0.16 kcal/mol
# SOPrTr = 50.70 +/- 0.9 cal/mol/K
# CpPrTr = 36.900 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 50.301 cm3/mol
# mole wt. = 113.0709 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 2 H+ + 0.5 O2 + 3 I- - 1 H2O = + 1 I3-
log_k      24.7278 # +/- 1
delta_h    -38.4 kcal/mol # +/- 12
analytical_expression  1.189174E+3    1.986379E-1    -5.758267E+4    -4.349806E+2    4.070512E+6
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfGO = -12.3 +/- 2 kcal/mol

```

```

# delfH0 = -12.3 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 57.2 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 13.100 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 57.201 cm3/mol
# mole wt. = 380.7134 g/mol
# date: 12. Jul. 1987

+ 0.5 O2 + 1 I- = + 1 I0-
log_k -0.9038 # +/- 1
delta_h -10.7 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -2.201660E+2 -3.207103E-2 1.558904E+4 7.562782E+1 -9.420980E+5
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -9.2 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -25.7 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = -1.4 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -34.600 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -12.500 cm3/mol
# mole wt. = 142.9039 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 1 I- + 1.5 O2 = + 1 I03-
log_k 17.6809 # +/- 2
delta_h -35.0 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -3.615104E+2 -5.674570E-2 3.009763E+4 1.268041E+2 -1.653967E+6
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -30.6 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -52.9 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 28.3 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -16.200 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 25.900 cm3/mol
# mole wt. = 174.9027 g/mol
# date: 12. Jul. 1987

+ 1 I- + 2 O2 = + 1 I04-
log_k 6.9621 # +/- 2
delta_h -16.8 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -3.338939E+2 -5.439954E-2 2.526035E+4 1.176505E+2 -1.668250E+6
lInI_gamma 3.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -14.0 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -36.2 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 53 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = -2.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 52.901 cm3/mol
# mole wt. = 190.9021 g/mol
# date: 30. Apr. 1997

+ 1 Mn+2 + 0.25 O2 + 1 H+ - 0.5 H2O = + 1 Mn+3
log_k -4.0078 # +/- 0.7
delta_h -11.23 kcal/mol # +/- 1.6
analytical_expression -2.555445E+02 -4.161958E-02 1.606384E+04 8.883499E+01 -8.666612E+05
lInI_gamma 9
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1952LAT][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -20.300 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -30.700 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -74.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -25.600 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -41.001 cm3/mol
# mole wt. = 54.9380 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 1 Mn+2 + 1.25 O2 + 1.5 H2O - 3 H+ = + 1 MnO4-
log_k -20.2230 # +/- 0.8
delta_h 29.10 kcal/mol # +/- 1.6
analytical_expression -4.545828E+02 -7.734753E-02 2.218063E+04 1.643764E+02 -2.107551E+06
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1969GED/HEP][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -107.600 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -129.900 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 46.500 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -1.800 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 42.001 cm3/mol
# mole wt. = 118.9356 g/mol
# date: 30. Apr. 1997

+ 1 Mn+2 + 1 O2 + 2 H2O - 4 H+ = + 1 MnO4-2
log_k -32.3413 # +/- 1.6
delta_h 35.83 kcal/mol # +/- 20
analytical_expression -1.252704E+03 -2.033363E-01 6.574662E+04 4.511113E+02 -4.957253E+06
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -120.4 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -156.6 +/- 20 kcal/mol
# SOPrTr = 15.5 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = -66.400 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 21.100 cm3/mol
# mole wt. = 118.9356 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 2 NH4+ + 1.5 O2 - 2 H+ - 3 H2O = + 1 N2
log_k 97.9789 # +/- 999999
delta_h -138.099 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -6.257980E+1 -5.536683E-3 3.456667E+4 2.005773E+1 -2.986240E+5

```

```

co2_llnl_gamma # 3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1977WIL/BAT][1989SHO/HEL]
# delFGO = 4.347 +/- 999999 kcal/mol
# delFHO = -2.479 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 22.900 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 56.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 33.301 cm3/mol
# mole wt. = 28.0134 g/mol
# date: 7. Feb. 1989

+ 1 NH4+ + 1.5 O2 - 2 H+ - 1 H2O = + 1 NO2-
log_k 37.6243 # +/- 1.6
delta_h -57.1 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -1.001511E+3 -1.574756E-1 7.135813E+4 3.600025E+2 -3.915520E+6
llnl_gamma 3.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delFGO = -7.7 +/- 2 kcal/mol
# delFHO = -25.0 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 29.4 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -23.3 +/- 2 cal/mol/K
# mole vol. = 25.000 cm3/mol
# mole wt. = 46.0055 g/mol
# date: 3. Jul. 1987

+ 1 NH4+ + 2 O2 - 2 H+ - 1 H2O = + 1 NO3-
log_k 52.8613 # +/- 0.9
delta_h -80.10 kcal/mol # +/- 1.6
analytical_expression -1.038830E+3 -1.633359E-1 7.922587E+4 3.724726E+2 -4.177117E+6
llnl_gamma 3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delFGO = -26.51 +/- 0.6 kcal/mol
# delFHO = -49.45 +/- 0.1 kcal/mol
# SOPrTr = 35.120 +/- 0.20 cal/mol/K
# CpPrTr = -16.079 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 29.001 cm3/mol
# mole wt. = 62.0049 g/mol
# date: 15. Dec. 2017

+ 2 S04-2 + 2 H+ - 2 O2 - 1 H2O = + 1 S2O3-2
log_k -133.5394 # +/- 2
delta_h 205.7 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression 1.841978E+3 2.955089E-1 -1.508319E+5 -6.612099E+2 6.968037E+6
llnl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delFGO = -124.9 +/- 2 kcal/mol
# delFHO = -155.0 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 16 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = -57.300 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 28.501 cm3/mol
# mole wt. = 112.1302 g/mol
# date: 3. Jul. 1987

+ 2 S04-2 + 2 H+ - 1.5 O2 - 1 H2O = + 1 S2O4-2
log_k -118.4563 # +/- 2
delta_h 182.0 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression 1.757609E+3 2.810233E-1 -1.406067E+5 -6.313110E+2 6.567368E+6
llnl_gamma 5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delFGO = -143.5 +/- 2 kcal/mol
# delFHO = -180.1 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 22 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = -50.100 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 28.800 cm3/mol
# mole wt. = 128.1296 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

2 H+ + 2 S04-2 - 0.5 O2 - 1 H2O = 1 S2O6-2
log_k -51.4199 # +/- 999999
delta_h 84.6 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.546007E+3 2.449440E-1 -1.062691E+5 -5.563719E+2 5.571345E+6
llnl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1952LAT][1997SHO/SAS]
# delFGO = -231.000 +/- 999999 kcal/mol
# delFHO = -280.400 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 30.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -45.300 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 40.401 cm3/mol
# mole wt. = 160.1284 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

0.5 O2 + 2 H+ + 2 S04-2 - 1 H2O = 1 S2O8-2
log_k -22.4999 # +/- 1
delta_h 46.5 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression 1.435388E+3 2.246572E-1 -9.045428E+4 -5.162870E+2 4.980807E+6
llnl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delFGO = -266.5 +/- 2 kcal/mol
# delFHO = -321.4 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 58.4 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -25.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 79.001 cm3/mol
# mole wt. = 192.1272 g/mol

```

```

# date: 3. Jul. 1987
1 S04-2 - 0.5 O2 = 1 S03-2
  log_k      -46.6244 # +/- 1
  delta_h     64.1 kcal/mol # +/- 2
  analytical_expression 1.347305E+2  2.046639E-2  -2.258266E+4  -4.798737E+1  6.246851E+5
  llnl_gamma  4.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -116.3 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -151.9 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = -7 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = -67.500 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -3.100 cm3/mol
# mole wt. = 80.0642 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 1 Sn+2 + 0.5 O2 + 2 H+ - 1 H2O = + 1 Sn+4
  log_k      37.7533 # +/- 0.45
  delta_h    -71.6 kcal/mol # +/- 15
  analytical_expression -4.811857E+2  -7.645426E-2  4.068404E+4  1.704130E+2  -1.457468E+6
  llnl_gamma  11.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used] for Cassiterite + 2 H2O = Sn+4 + 4 OH-
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SHO/SAS_b][2011RAI/YUI]
# delfG0 = 0.590 +/- 0.42 kcal/mol
# delfH0 = -6.8 +/- 15 kcal/mol *
# SOPrTr = -75 +/- 50 cal/mol/K
# CpPrTr = -23.1 +/- 5 cal/mol/K
# mole vol. = -60.531 cm3/mol
# mole wt. = 118.7100 g/mol
# date: 9. Oct. 2019

#-----
# 3. Aqueous species
#-----
1 Al+3 + 1 H2O - 1 H+ = 1 AlOH+2
  log_k      -4.9571 # +/- 0.32
  delta_h    11.902 kcal/mol # +/- 0.72
  analytical_expression 1.592261E+02  2.937545E-02  -1.149373E+04  -5.709848E+01  6.129739E+05
  llnl_gamma  4.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1992PAL/WES][1995POK/HEL]
# delfG0 = -166.468 +/- 0.31 kcal/mol
# delfH0 = -185.096 +/- 0.62 kcal/mol
# SOPrTr = -46.82 +/- 2.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 16.441 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -19.064 cm3/mol
# mole wt. = 43.9889 g/mol
# date: 30. Apr. 1997

1 Al+3 + 2 H2O - 2 H+ = 1 Al(OH)2+
  log_k      -10.5945 # +/- 0.44
  delta_h    23.490 kcal/mol # +/- 0.80
  analytical_expression 3.082958E+02  5.406983E-02  -2.151248E+04  -1.108586E+02  1.018237E+06
  llnl_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Al(OH)+2 + H2O - H+ = Al(OH)2+
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995POK/HEL]
# delfG0 = -215.465 +/- 0.51 kcal/mol
# delfH0 = -241.825 +/- 0.71 kcal/mol
# SOPrTr = -17.00 +/- 2.9 cal/mol/K
# CpPrTr = 36.200 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 6.003 cm3/mol
# mole wt. = 60.9962 g/mol
# date: 3. Aug. 2015

1 Al+3 + 3 H2O - 3 H+ = 1 Al(OH)3
  log_k      -16.4329 # +/- 0.45
  delta_h    34.585 kcal/mol # +/- 0.70
  analytical_expression 3.316637E+2  5.703717E-2  -2.530215E+4  -1.183319E+2  1.117129E+6
  gamma      4 0.041 # Used for polar neutral species. Invokes use of WATEQ extended Debye-Huckel equation.
  # which reduces to Setschenow equation. 0.041 is equivalent to B-dot at 25 deg C.
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Boehmite + H2O = Al(OH)3
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HA102(aq)
# data source: [1995POK/HEL]
# delfG0 = -207.500 + 1 H2O = -264.188 +/- 0.53 kcal/mol
# delfH0 = -230.730 + 1 H2O = -299.047 +/- 0.60 kcal/mol
# SOPrTr = -6.50 + 1 H2O = 10.21 +/- 2.7 cal/mol/K
# CpPrTr = 41.316 + 1 H2O = 59.328 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 13.259 + 1 H2O = 31.327 cm3/mol
# mole wt. = 59.9883 + 1 H2O = 78.0034 g/mol
# date: 29. Apr. 1997

1 Al+3 + 4 H2O - 4 H+ = 1 Al(OH)4-
  log_k      -22.8833 # +/- 0.3
  delta_h    43.24 kcal/mol # +/- 0.5
  analytical_expression -1.586289E+2  -2.478677E-2  6.503313E+2  6.003513E+1  -6.752906E+5
  llnl_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Gibbsite + OH- = Al(OH)4-
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as A102-
# data source: [1995POK/HEL]
# delfG0 = -198.70 + 2 H2O = -312.08 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -222.08 + 2 H2O = -358.71 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = -7.00 + 2 H2O = 26.42 +/- 0.3 cal/mol/K
# CpPrTr = -9.709 + 2 H2O = 26.315 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 10.000 + 2 H2O = 46.136 cm3/mol
# mole wt. = 58.9803 + 2 H2O = 95.0107 g/mol
# date: 29. Apr. 1997

+ 1 Al+3 + 1 Si(OH)4 - 1 H+ = + 1 AlSiO(OH)3+2
  log_k      -2.3909 # +/- 0.21
  delta_h    15.8 kcal/mol # +/- 1
  analytical_expression 5.152575E+2  6.961769E-2  -3.262208E+4  -1.814143E+2  1.769830E+6
  llnl_gamma  4.5

```

```

# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as AlHSiO3+2
# data source: [1994FAR/LUM][1996POK/SCH][1998SAL/POK][2005SPA/SCH]
# delfG0 = -369.50 + 1 H2O = -426.19 +/- 0.6 kcal/mol
# delfH0 = -393.7 + 1 H2O = -462.0 +/- 1 kcal/mol *
# S0PrTr = -12.0 + 1 H2O = 4.7 +/- 3 cal/mol/K
# CpPrTr = -5 + 1 H2O = 13 +/- 10 cal/mol/K
# mole vol. = -18.482 + 1 H2O = -0.414 cm3/mol
# mole wt. = 104.0731 + 1 H2O = 122.0883 g/mol
# date: 13. Nov. 2019

1 B(OH)3 + 3 H+ + 4 F- - 3 H2O = 1 BF4-
log_k 18.0049 # +/- 1.5
delta_h -3.9 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression 2.419074E+3 3.759125E-1 -1.343009E+5 -8.714835E+2 8.330939E+6
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -355.4 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -376.6 +/- 2 kcal/mol
# S0PrTr = 43 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = -5.600 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 43.001 cm3/mol
# mole wt. = 86.8046 g/mol
# date: 16. Feb. 1988

1 B(OH)3 + 1 H2O - 1 H+ = 1 B(OH)4-
log_k -9.2489 # +/- 0.23
delta_h 3.91 kcal/mol # +/- 0.31
analytical_expression -4.896170E+2 -7.358403E-2 2.778994E+4 1.738447E+2 -1.872778E+6
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1995POK/SCH]
# delfG0 = -275.61 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -321.23 +/- 0.2 kcal/mol
# S0PrTr = 24.5 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -2.572 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 25.869 cm3/mol
# mole wt. = 78.8404 g/mol
# date: 20. Jan. 1998

+ 1 Ba+2 + 1 Cl- = + 1 BaCl+
log_k -0.4537 # +/- 0.5
delta_h 1.6 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression 8.494098E+2 1.339991E-1 -4.810394E+4 -3.078285E+2 2.953298E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982MAJ/STU][1995PAR_a][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -164.03 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -166.1 +/- 3 kcal/mol *
# S0PrTr = 19 +/- 10 cal/mol/K
# CpPrTr = 6.963 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 12.233 cm3/mol
# mole wt. = 172.7797 g/mol
# date: 16. May. 2019

1 Ba+2 + 1 HCO3- - 1 H+ = 1 BaCO3
log_k -7.6321 # +/- 0.08
delta_h 6.93 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.695651E+2 1.331832E-1 -4.792432E+4 -3.172256E+2 2.558462E+6
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1986BUS/PLU][1995PAR_a][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -263.14 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -285.750 +/- 999999 kcal/mol
# S0PrTr = 14.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -34.400 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -11.810 cm3/mol
# mole wt. = 197.3359 g/mol
# date: 21. Jun. 2016

1 Ba+2 + 1 F- = 1 BaF+
log_k -0.1833 # +/- 0.2
delta_h -4.96 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.811147E+02 1.377141E-01 -5.011749E+04 -3.187766E+02 3.069100E+06
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], potentiometry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982MAJ/STU][1995PAR_a][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -200.37 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -212.890 +/- 999999 kcal/mol
# S0PrTr = 5.800 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.932 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -7.330 cm3/mol
# mole wt. = 156.3254 g/mol
# date: 21. Jun. 2016

+ 1 Ba+2 + 1 Formate- = + 1 BaFormate+
log_k 1.9388 # +/- 999999
delta_h 0.556 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.438453E+2 1.457087E-1 -5.382121E+4 -3.405539E+2 3.363901E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -219.775 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -228.954 +/- 999999 kcal/mol *
# S0PrTr = 34.547 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 20.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 21.100 cm3/mol
# mole wt. = 182.3447 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

```

```

+ 1 Ba+2 + 2 Formate- = + 1 BaFormate2
log_k      2.7700 # +/- 999999
delta_h    1.220 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.631303E+3 2.498345E-1 -9.376917E+4 -5.879919E+2 5.904522E+6
gamma      3 0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -304.769 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -330.020 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 62.275 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 41.800 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 58.600 cm3/mol
# mole wt. = 227.3624 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

1 Ba+2 + 1 H2O - 1 H+ = 1 BaOH+
log_k      -13.4710 # +/- 0.2
delta_h    20.95 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 2.052473E+02 2.854349E-02 -1.449183E+04 -7.411796E+01 4.245647E+05
lInl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -171.58 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -175.150 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 27.500 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -22.400 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 9.200 cm3/mol
# mole wt. = 154.3343 g/mol
# date: 20. Jun. 2016

+ 1 Ca+2 + 1 Al+3 + 4 H2O - 4 H+ = + 1 CaAl(OH)4+
log_k      -21.1388 # +/- 0.9
delta_h    43.99 kcal/mol # +/- 2.3
analytical_expression 7.291964E+2 1.161135E-1 -5.008185E+4 -2.608737E+2 2.536685E+6
lInl_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as CaAlO2+
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfG0 = -333.20 + 2 H2O = -446.58 +/- 1.1 kcal/mol
# delfH0 = -351.12 + 2 H2O = -487.75 +/- 2.3 kcal/mol *
# SOPrTr = -9.99 + 2 H2O = 23.43 +/- 6.7 cal/mol/K
# CpPrTr = 56 + 2 H2O = 92 +/- 31 cal/mol/K
# mole vol. = -2.952 + 2 H2O = 33.184 cm3/mol
# mole wt. = 99.0583 + 2 H2O = 135.0887 g/mol
# date: 9. Oct. 2019

1 Ca+2 + 1 Cl- = 1 CaCl+
log_k      -0.2925 # +/- 999999
delta_h    1.12 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 7.463112E+2 1.232259E-1 -4.169363E+4 -2.716486E+2 2.548825E+6
lInl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982MAJ/STU][1985ALL][1985SIM/BUS][1989WIL/SEW][1992GIL/OSC][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -163.100 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -168.610 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 4.500 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 17.470 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 5.740 cm3/mol
# mole wt. = 75.5307 g/mol
# date: 17. Sep. 1997

1 Ca+2 + 2 Cl- = 1 CaCl2
log_k      -0.6436 # +/- 999999
delta_h    -1.39 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.487502E+3 2.428120E-1 -8.229321E+4 -5.421530E+2 5.066186E+6
gamma      3 0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1989WIL/SEW][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -194.000 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -211.060 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 6.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 30.960 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 32.641 cm3/mol
# mole wt. = 110.9834 g/mol
# date: 17. Sep. 1997

1 Ca+2 + 1 HCO3- - 1 H+ = 1 CaCO3
log_k      -7.0017 # +/- 0.15
delta_h    7.31 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 7.957894E+2 1.271363E-1 -4.278771E+4 -2.917282E+2 2.193282E+6
gamma      3 0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Ca+2 + CO3-2 = CaCO3
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982PLU/BUS][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -262.850 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -287.390 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 2.500 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -29.600 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -15.660 cm3/mol
# mole wt. = 100.0872 g/mol
# date: 17. Sep. 1997

1 Ca+2 + 1 F- = 1 CaF+
log_k      0.6817 # +/- 999999
delta_h    1.35 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.199520E+2 1.328994E-1 -4.636220E+4 -2.973976E+2 2.888563E+6
lInl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1979RIC/HOL][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -200.390 +/- 999999 kcal/mol

```

```

# delfH0 = -208.600 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -9.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 30.100 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -13.460 cm3/mol
# mole wt. = 59.0764 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

1 Ca+2 + 1 Fe+3 + 4 H2O - 4 H+ = 1 CaFe(OH)4+
log_k      -20.8434 # +/- 1.8
delta_h    41.91 kcal/mol # +/- 3.7
analytical_expression  8.539510E+2    1.352886E-1    -5.933631E+4    -3.048216E+2    3.391015E+6
lInI_gamma  4
# -Range: 0 - 300 oC
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as CaFeO2+
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfG0 = -221.18 + 2 H2O = -334.56 +/- 1.8 kcal/mol
# delfH0 = -236.38 + 2 H2O = -373.01 +/- 3.4 kcal/mol *
# SOPrTr = -1.10 + 2 H2O = 32.32 +/- 9.0 cal/mol/K
# CpPrTr = 124.0 + 2 H2O = 160 +/- 45 cal/mol/K
# mole vol. = -14.028 + 2 H2O = 22.108 cm3/mol
# mole wt. = 127.9238 + 2 H2O = 163.9542 g/mol
# date: 12. Dec. 2018

+ 1 Ca+2 + 1 Formate- = + 1 CaFormate+
log_k      1.4316 # +/- 999999
delta_h    -0.517 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  8.659831E+2    1.363182E-1    -4.934164E+4    -3.131918E+2    3.134980E+6
lInI_gamma  4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -217.933 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -232.047 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 13.005 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 30.700 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 15.000 cm3/mol
# mole wt. = 85.0957 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

+ 1 Ca+2 + 2 Formate- = + 1 CaFormate2
log_k      2.3031 # +/- 999999
delta_h    -1.891 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.658360E+3    2.577211E-1    -9.494072E+4    -5.992231E+2    6.068595E+6
gamma      3.0    0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -302.982 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -335.151 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 34.084 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 62.700 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 51.800 cm3/mol
# mole wt. = 130.1134 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

+ 1 Ca+2 + 1 HCO3- = + 1 CaHCO3+
log_k      1.0687 # +/- 0.3
delta_h    0.66 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  8.818891E+2    1.393445E-1    -5.072426E+4    -3.187128E+2    3.235268E+6
lInI_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1941GRE] [1962GAR/THO] [1968NAK] [1974JAC/LAN] [1974REA] [1976LAR/SOL] [1982PLU/BUS]
# [1990DOR/MAR]
# delfG0 = -273.86 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -294.040 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 17.200 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 57.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 12.000 cm3/mol
# mole wt. = 101.0951 g/mol
# date: 26. Feb. 2018

1 Ca+2 + 1 H2O - 1 H+ = + 1 CaOH+
log_k      -12.7673 # +/- 0.2
delta_h    15.44 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.528763E+2    2.372976E-2    -1.177307E+4    -5.604654E+1    4.846034E+5
lInI_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Ca+2 + OH- = CaOH+
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1976SMI/MAR] [1982PLU/BUS] [1997SHO/SAS] [Unpublished]
# delfG0 = -171.39 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -182.680 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -3.400 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 12.876 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 4.356 cm3/mol
# mole wt. = 57.0853 g/mol
# date: 27. Dec. 2017

+ 1 Ca+2 + 1 Si(OH)4 - 2 H+ = + 1 CaSiO2(OH)2
log_k      -19.2771 # +/- 0.7
delta_h    18.3 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  6.383061E+2    8.773574E-2    -4.058171E+4    -2.311213E+2    2.156913E+6
gamma      3.0    0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] from CSH165 & Portlandite equilibrium
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as CaSiO3(aq)
# data source: [2016WAL/SUT] [2019WAL/ANR]
# delfG0 = -362.04 + 1 H2O = -418.73 +/- 1.1 kcal/mol
# delfH0 = -392.3 + 1 H2O = -460.6 +/- 4 kcal/mol *
# SOPrTr = -13.5 + 1 H2O = 3.2 +/- 8 cal/mol/K
# CpPrTr = 6 + 1 H2O = 24 +/- 15 cal/mol/K
# mole vol. = -41.716 + 1 H2O = -23.648 cm3/mol
# mole wt. = 116.1617 + 1 H2O = 134.1769 g/mol
# date: 10. Oct. 2019

1 Ca+2 + 1 Si(OH)4 - 1 H+ = 1 CaSiO(OH)3+
log_k      -8.6998 # +/- 0.4
delta_h    7.63 kcal/mol # +/- 1.8

```

```

analytical_expression 4.919988E+2 6.381643E-2 -3.094938E+4 -1.763143E+2 1.809671E+6
l lnI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for Ca+2 + SiO(OH)3- = CaSiO(OH)3+
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as CaHSiO3+
# data source: [1974SAN/SCH][1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfGO = -376.47 + 1 H2O = -433.16 +/- 0.7 kcal/mol
# delfHO = -403.000 + 1 H2O = -471.359 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -1.100 + 1 H2O = 15.612 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 15.505 + 1 H2O = 33.517 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -7.071 + 1 H2O = 10.997 cm3/mol
# mole wt. = 117.1696 + 1 H2O = 135.1848 g/mol
# date: 30. Jul. 2015

1 Ca+2 + 1 SO4-2 = 1 CaSO4
log_k 2.1111 # +/- 0.5
delta_h 1.30 kcal/mol # +/- 1.6
analytical_expression 1.519330E+3 2.410610E-1 -8.263208E+4 -5.520842E+2 4.813628E+6
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for Anhydrite = CaSO4
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1969YEA/MAR][1997SVE/SHO]
# delfGO = -312.93 +/- 0.4 kcal/mol
# delfHO = -345.91 +/- 0.7 kcal/mol *
# SOPrTr = 5.0 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -25.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 4.700 cm3/mol
# mole wt. = 136.1416 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

1 HCO3- + 1 H+ - 1 H2O = 1 CO2
log_k 6.3813 # +/- 0.6
delta_h -2.32 kcal/mol # +/- 1.9
analytical_expression 6.447735E+02 1.046232E-01 -3.743301E+04 -2.315688E+02 2.574764E+06
co2_l lnI_gamma # 3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1989SHO/HEL]
# delfGO = -92.3 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -98.9 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 28.1 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 58.100 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 32.801 cm3/mol
# mole wt. = 44.0098 g/mol
# date: 27. Jul. 2015

1 HCO3- - 1 H+ = 1 CO3-2
log_k -10.3288 # +/- 0.06
delta_h 3.513 kcal/mol # +/- 0.098
analytical_expression -7.439784E+2 -1.193474E-1 4.087167E+4 2.674177E+2 -2.627447E+6
l lnI_gamma 4.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], potentiometry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978BER/VAN][1988SHO/HEL]
# delfGO = -126.191 +/- 0.070 kcal/mol
# delfHO = -161.385 +/- 0.108 kcal/mol
# SOPrTr = -11.950 +/- 0.31 cal/mol/K
# CpPrTr = -69.500 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -5.020 cm3/mol
# mole wt. = 60.0092 g/mol
# date: 24. Jun. 2015

1 Cs+ + 1 Br- = 1 CsBr
log_k 0.0220 # +/- 0.4
delta_h 1.69 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 6.698274E+02 1.013260E-01 -3.726758E+04 -2.422410E+02 2.167748E+06
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1988OEL/HEL][1997SVE/SHO]
# delfGO = -94.610 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -89.020 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 57.300 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -26.570 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 57.001 cm3/mol
# mole wt. = 212.8095 g/mol
# date: 18. Sep. 1997

1 Cs+ + 1 Cl- = 1 CsCl
log_k -0.1385 # +/- 999999
delta_h 2.37 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 5.581512E+02 8.552181E-02 -3.117918E+04 -2.018853E+02 1.807755E+06
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1988OEL/HEL][1997SVE/SHO]
# delfGO = -100.90 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -99.23 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 52.600 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -24.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 48.001 cm3/mol
# mole wt. = 168.3582 g/mol
# date: 31. May. 2016

1 Cs+ + 1 I- = 1 CsI
log_k 0.9822 # +/- 999999
delta_h 15.02 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 5.653144E+02 8.661937E-02 -3.097759E+04 -2.048175E+02 1.826363E+06
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1988OEL/HEL][1997SVE/SHO]
# delfGO = -83.460 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -75.690 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 60.300 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -24.400 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 72.001 cm3/mol

```

```

# mole wt. = 259.8099 g/mol
# date: 31. May. 2016

1 Cs+ + 1 H2O - 1 H+ = 1 CsOH
log_k -15.6847 # +/- 999999
delta_h 17.69 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 5.498988E+01 2.586339E-03 -5.775089E+03 -2.068430E+01 -7.953757E+04
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], potentiometry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SHO/SAS]
# delfGO = -105.000 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -112.300 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 35.900 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -31.900 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 28.601 cm3/mol
# mole wt. = 149.9128 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

1 Cu+ + 1 Cl- = 1 CuCl
log_k 2.3302 # +/- 999999
delta_h -3.54 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 7.868147E+02 1.233835E-01 -4.315550E+04 -2.855561E+02 2.672013E+06
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfGO = -22.610 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -26.340 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 22.100 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 19.644 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 17.219 cm3/mol
# mole wt. = 98.9987 g/mol
# date: 14. Sep. 1997

1 Cu+ + 2 Cl- = 1 CuCl2-
log_k 5.2996 # +/- 999999
delta_h -10.16 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.668547E+02 1.383313E-01 -4.793365E+04 -3.146028E+02 3.238587E+06
lInl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfGO = -58.040 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -72.900 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 27.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 32.986 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 45.428 cm3/mol
# mole wt. = 134.4514 g/mol
# date: 2. Jun. 2016

1 Cu+ + 3 Cl- = 1 CuCl3-2
log_k 5.6999 # +/- 999999
delta_h -15.85 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.694528E+02 1.410190E-01 -4.937291E+04 -3.157468E+02 3.652861E+06
lInl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfGO = -89.960 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -118.520 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 23.300 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 53.723 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 76.859 cm3/mol
# mole wt. = 169.9041 g/mol
# date: 2. Jun. 2016

1 Cu+2 + 1 Cl- = 1 CuCl+
log_k 0.4002 # +/- 999999
delta_h 0.38 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.588457E+02 1.360937E-01 -4.880518E+04 -3.110943E+02 3.062437E+06
lInl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfGO = -16.25 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -23.85 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -6.5 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 29.394 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -1.723 cm3/mol
# mole wt. = 98.9987 g/mol
# date: 14. Sep. 1997

1 Cu+2 + 2 Cl- = 1 CuCl2
log_k -0.6898 # +/- 999999
delta_h 0.01 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.702180E+03 2.698521E-01 -9.644926E+04 -6.174190E+02 6.037758E+06
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1972NIK/YER][1997SVE/SHO]
# delfGO = -46.140 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -64.160 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 0.800 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 54.224 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 24.324 cm3/mol
# mole wt. = 134.4514 g/mol
# date: 14. Sep. 1997

1 Cu+2 + 3 Cl- = 1 CuCl3-
log_k -2.2899 # +/- 999999
delta_h -2.75 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.696359E+03 2.709138E-01 -9.799514E+04 -6.154416E+02 6.410972E+06
lInl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]

```

```

# data source: [1972NIK/YER][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -75.340 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -106.850 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -2.200 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 72.388 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 53.345 cm3/mol
# mole wt. = 169.9041 g/mol
# date: 14. Sep. 1997

1 Cu+2 + 4 Cl- = 1 CuCl4-2
log_k -4.5901 # +/- 999999
delta_h -8.50 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.682474E+03 2.701911E-01 -9.846373E+04 -6.115121E+02 6.735373E+06
lnI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1972NIK/YER][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -103.580 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -152.530 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -18.500 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 83.887 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 85.680 cm3/mol
# mole wt. = 205.3568 g/mol
# date: 14. Sep. 1997

1 Cu+2 + 1 F- = 1 CuF+
log_k 1.5203 # +/- 999999
delta_h 0.17 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.276932E+02 1.448885E-01 -5.279326E+04 -3.352647E+02 3.314418E+06
lnI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -53.740 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -64.280 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -18.800 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 33.663 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -20.923 cm3/mol
# mole wt. = 82.5444 g/mol
# date: 2. Jun. 2016

+ 1 Cu+2 + 1 Formate- = + 1 CuFormate+
log_k 1.9813 # +/- 999999
delta_h -2.313 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.824578E+2 1.367343E-1 -5.016085E+4 -3.189125E+2 3.210970E+6
lnI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -70.888 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -88.343 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = -0.220 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 34.800 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 7.700 cm3/mol
# mole wt. = 108.5637 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

+ 1 Cu+2 + 2 Formate- = + 1 CuFormate2
log_k 3.3029 # +/- 999999
delta_h -5.518 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.714060E+3 2.650502E-1 -9.758061E+4 -6.196142E+2 6.284169E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -156.551 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -193.278 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 16.777 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 70.800 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 43.700 cm3/mol
# mole wt. = 153.5814 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

1 Cu+2 + 1 H2O - 1 H+ = 1 CuOH+
log_k -7.9258 # +/- 999999
delta_h 10.92 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 2.121828E+02 3.067217E-02 -1.407902E+04 -7.661466E+01 6.707611E+05
lnI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981BAE/MES][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -30.200 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -41.700 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -6.100 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 16.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -14.700 cm3/mol
# mole wt. = 80.5533 g/mol
# date: 1. May. 1997

1 Cu+2 + 2 H2O - 2 H+ = 1 Cu(OH)2
log_k -14.8161 # +/- 999999
delta_h 18.42 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -9.981549E+01 -1.490896E-02 2.470480E+03 3.503000E+01 -4.905796E+05
lnI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as Cu0(aq)
# data source: [1971SIL/MAR][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -20.800 + 1 H2O = -77.488 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -34.200 + 1 H2O = -102.495 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -12.400 + 1 H2O = 4.312 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -1.400 + 1 H2O = 16.612 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -17.600 + 1 H2O = 0.468 cm3/mol
# mole wt. = 79.5454 + 1 H2O = 97.5606 g/mol
# date: 1. May. 1997

+ 1 Cu+2 + 3 H2O - 3 H+ = + 1 Cu(OH)3-
log_k -27.5614 # +/- 1.8

```

```

delta_h 34.630 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 4.520837E+1 5.203400E-3 -9.378601E+3 -1.734000E+1 3.807464E+3
lInl_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as Hcu02-
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS][1997SVE/SHO_a]
# delfG0 = -60.100 + 1 H2O = -116.788 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -86.304 + 1 H2O = -154.630 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 0.300 + 1 H2O = 17.012 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -24.700 + 1 H2O = -6.688 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -4.600 + 1 H2O = 13.468 cm3/mol
# mole wt. = 96.5527 + 1 H2O = 114.5679 g/mol
# date: 5. Dec. 2019

1 Cu+2 + 4 H2O - 4 H+ = 1 Cu(OH)4-2
log_k -41.4152 # +/- 0.4
delta_h 46.53 kcal/mol # +/- 1.6
analytical_expression -1.030603E+03 -1.669258E-01 4.809087E+04 3.716292E+02 -3.725262E+06
lInl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as Cu02-2
# data source: [1971SIL/MAR][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -41.200 + 2 H2O = -154.576 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -74.400 + 2 H2O = -211.034 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -23.100 + 2 H2O = 10.324 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -53.500 + 2 H2O = -17.476 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -17.300 + 2 H2O = 18.836 cm3/mol
# mole wt. = 95.5448 + 2 H2O = 131.5752 g/mol
# date: 1. May. 1997

+ 1 Fe+2 + 1 B(OH)3 + 1 H2O - 1 H+ = + 1 FeB(OH)4+
log_k -5.5472 # +/- 0.3
delta_h -0.2 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression 4.485953E+2 5.944144E-2 -2.757550E+4 -1.615353E+2 1.807573E+6
lInl_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility for reaction Fe+2 + B(OH)4- = FeB(OH)4+
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2018X10/KIR]
# delfG0 = -302.53 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -347.4 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 2.2 +/- 9 cal/mol/K
# CpPrTr = 66 +/- 20 cal/mol/K
# mole vol. = 6.920 cm3/mol
# mole wt. = 134.6872 g/mol
# date: 20. Aug. 2019

+ 1 Fe+2 + 1 Cl- = + 1 FeCl+
log_k -0.2558 # +/- 0.19
delta_h 0.89 kcal/mol # +/- 0.7
analytical_expression 8.411849E+2 1.335202E-1 -4.788675E+4 -3.048530E+2 2.995531E+6
lInl_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1976RAM][1990HEI/SEW][1992FEI/HEM][1993PAL/HYD][1997SVE/SHO]
# [1997ZHA][2001ZHA/PAN]
# delfG0 = -52.90 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -61.09 +/- 0.4 kcal/mol *
# SOPrTr = -9.9 +/- 1 cal/mol/K
# CpPrTr = 21.200 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1.060 cm3/mol
# mole wt. = 91.2997 g/mol
# date: 8. May. 2019

+ 1 Fe+2 + 2 Cl- = + 1 FeCl2
log_k -2.1756 # +/- 0.5
delta_h 9.1 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression 1.665742E+3 2.631698E-1 -9.578086E+4 -6.025119E+2 5.843592E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1992FEI/HEM][1992DIN/SEY][1997SVE/SHO_a][2001ZHA/PAN]
# delfG0 = -81.66 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -92.8 +/- 1 kcal/mol *
# SOPrTr = 22.4 +/- 3 cal/mol/K
# CpPrTr = 38.700 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 27.430 cm3/mol
# mole wt. = 126.7524 g/mol
# date: 9. May. 2019

+ 1 Fe+2 + 1 HCO3- - 1 H+ = + 1 FeCO3
log_k -5.2095 # +/- 0.5
delta_h 3.7 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression 9.218815E+2 1.417377E-1 -4.999084E+4 -3.363462E+2 2.718420E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility for reaction Siderite = FeCO3(aq)
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2013LEM/BER]
# delfG0 = -155.045 +/- 0.71 kcal/mol
# delfH0 = -183.2 +/- 2 kcal/mol *
# SOPrTr = -13 +/- 10 cal/mol/K
# CpPrTr = -30 +/- 30 cal/mol/K
# mole vol. = -19.014 cm3/mol
# mole wt. = 115.8562 g/mol
# date: 19. Aug. 2019

+ 1 Fe+2 + 1 F- = 1 FeF+
log_k 1.4294 # +/- 999999
delta_h 0.75 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.470222E+2 1.348290E-1 -4.751135E+4 -3.069256E+2 2.935706E+6
lInl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -91.160 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -101.450 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -20.900 +/- 999999 cal/mol/K

```

```

# CpPrTr = 20.838 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -18.137 cm3/mol
# mole wt. = 74.8454 g/mol
# date: 30. Aug. 2015

+ 1 Fe+2 + 1 Formate- = + 1 FeFormate+
log_k 1.8289 # +/- 999999
delta_h -2.457 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.632677E+2 1.342849E-1 -4.906399E+4 -3.121351E+2 3.150397E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -108.225 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -126.237 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = -3.492 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 29.400 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 10.400 cm3/mol
# mole wt. = 100.8647 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

+ 1 Fe+2 + 2 Formate- = + 1 FeFormate2
log_k 3.0200 # +/- 999999
delta_h -5.786 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.694109E+3 2.624670E-1 -9.616142E+4 -6.127975E+2 6.178484E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -193.710 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -231.296 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 12.495 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 60.200 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 46.700 cm3/mol
# mole wt. = 145.8824 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

+ 1 Fe+2 + 1 HPO4-2 + 1 H+ = + 1 FeH2PO4+
log_k 2.6997 # +/- 0.2
delta_h 6.15 kcal/mol # +/- 2.6
analytical_expression 1.659074E+3 2.594229E-1 -9.600017E+4 -5.978582E+2 6.010866E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1972NRI_b][1997SVE/SHO_a]
# delfG0 = -285.86 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -324.72 +/- 2.5 kcal/mol *
# SOPrTr = -0.3 +/- 8 cal/mol/K
# CpPrTr = 58 +/- 20 cal/mol/K
# mole vol. = 11.559 cm3/mol
# mole wt. = 152.8342 g/mol
# date: 2. Jul. 2019

+ 1 Fe+2 + 1 HPO4-2 = + 1 FeHP04
log_k 3.5991 # +/- 0.3
delta_h 1.76 kcal/mol # +/- 2.2
analytical_expression 1.713609E+3 2.661197E-1 -9.441045E+4 -6.204916E+2 5.569760E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1972NRI_b][1997SVE/SHO_a]
# delfG0 = -287.09 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -329.11 +/- 2.1 kcal/mol *
# SOPrTr = -10.9 +/- 7 cal/mol/K
# CpPrTr = -19 +/- 27 cal/mol/K
# mole vol. = -7.962 cm3/mol
# mole wt. = 151.8263 g/mol
# date: 9. Oct. 2019

+ 1 Fe+2 + 1 H2O - 1 H+ = + 1 FeOH+
log_k -9.3002 # +/- 0.5
delta_h 12.27 kcal/mol # +/- 1.7
analytical_expression 2.035545E+2 3.004584E-2 -1.407860E+4 -7.363352E+1 6.763219E+5
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1970SWE/BAE][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -65.870 +/- 0.71 kcal/mol
# delfH0 = -78.10 +/- 1.7 kcal/mol *
# SOPrTr = -10.0 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 15.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -16.500 cm3/mol
# mole wt. = 72.8543 g/mol
# date: 1. Jul. 2019

1 Fe+2 + 2 H2O - 2 H+ = 1 Fe(OH)2
log_k -20.4052 # +/- 1.0
delta_h 32.03 kcal/mol # +/- 3.0
analytical_expression 3.213234E+2 5.013253E-2 -2.248322E+4 -1.175504E+2 8.537079E+5
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as Fe0(aq)
# data source: [1970SWE/BAE][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -50.72 + 1 H2O = -107.41 +/- 2.1 kcal/mol
# delfH0 = -62.95 + 1 H2O = -131.28 +/- 2.9 kcal/mol
# SOPrTr = -10 + 1 H2O = 7 +/- 6 cal/mol/K
# CpPrTr = 0.000 + 1 H2O = 18.012 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -16.500 + 1 H2O = 1.568 cm3/mol
# mole wt. = 71.8444 + 1 H2O = 89.8616 g/mol
# date: 1. May. 1997

1 Fe+2 + 3 H2O - 3 H+ = 1 Fe(OH)3-
log_k -29.2070 # +/- 1.5
delta_h 32.984 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.307752E+2 -4.146172E-2 4.107368E+3 8.370241E+1 -6.187127E+5
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C

```

```

# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HFeO2-
# data source: [1970SWE/BAE][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -95.40 + 1 H2O = -152.09 +/- 2.0 kcal/mol
# delfH0 = -125.70 + 1 H2O = -194.08 +/- 3.6 kcal/mol
# SOPrTr = -15.0 + 1 H2O = 1.7 +/- 7 cal/mol/K
# CpPrTr = 22.000 + 1 H2O = 40.012 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -12.900 + 1 H2O = 5.168 cm3/mol
# mole wt. = 88.8517 + 1 H2O = 106.8689 g/mol
# date: 1. May. 1997

+ 1 Fe+2 + 1 SO4-2 = + 1 FeSO4
log_k      2.4431 # +/- 0.21
delta_h    1.9 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression  1.715193E+3  2.641653E-1  -9.499661E+4  -6.207875E+2  5.617919E+6
gamma      3.0  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2013LEM/BER]
# delfG0 = -203.133 +/- 0.19 kcal/mol
# delfH0 = -237.5 +/- 2 kcal/mol *
# SOPrTr = -2.9 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = -25 +/- 29 cal/mol/K
# mole vol. = 1.032 cm3/mol
# mole wt. = 151.9106 g/mol
# date: 16. Aug. 2019

1 Fe+3 + 1 Cl- = 1 FeCl+2
log_k      1.4814 # +/- 999999
delta_h    0.96 kJ/mol # +/- 999999
analytical_expression  8.377287E+02  1.334192E-01  -4.705596E+04  -3.034118E+02  2.895197E+06
lInI_gamma  4.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -37.520 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -50.820 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -42.700 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 3.369 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -22.336 cm3/mol
# mole wt. = 91.2997 g/mol
# date: 29. Aug. 2015

1 Fe+3 + 1 F- = 1 FeF+2
log_k      6.0033 # +/- 999999
delta_h    4.86 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.054338E+3  1.632205E-1  -5.980625E+4  -3.786913E+2  3.612027E+6
lInI_gamma  4.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -79.650 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -87.140 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -25.700 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 7.638 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -41.536 cm3/mol
# mole wt. = 74.8454 g/mol
# date: 15. Sep. 1997

1 Fe+3 + 1 H2O - 1 H+ = 1 FeOH+2
log_k      -2.2047 # +/- 0.1
delta_h    10.17 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.890820E+2  2.842899E-2  -1.155751E+4  -6.720055E+1  4.697587E+5
lInI_gamma  4.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], potentiometry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -57.80 +/- 1.6 kcal/mol
# delfH0 = -70.000 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -25.400 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -8.200 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -24.901 cm3/mol
# mole wt. = 72.8543 g/mol
# date: 1. May. 1997

1 Fe+3 + 2 H2O - 2 H+ = 1 Fe(OH)2+
log_k      -5.6498 # +/- 0.1
delta_h    23.784 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  2.726215E+2  4.206210E-2  -1.540957E+4  -9.815961E+1  3.342908E+5
lInI_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], potentiometry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as FeO+
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -53.10 + 1 H2O = -109.79 +/- 1.6 kcal/mol
# delfH0 = -61.006 + 1 H2O = -129.323 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -11.100 + 1 H2O = 5.612 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -48.100 + 1 H2O = -30.088 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -41.801 + 1 H2O = -23.732 cm3/mol
# mole wt. = 71.8444 + 1 H2O = 89.8616 g/mol
# date: 1. May. 1997

+ 1 Fe+3 + 3 H2O - 3 H+ = + 1 Fe(OH)3
log_k      -14.3049 # +/- 0.5
delta_h    18.0 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression  5.716245E+2  8.867745E-2  -3.444243E+4  -2.085099E+2  1.697412E+6
gamma      3  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HFeO2(aq)
# data source: [1999LIU/MIL][2007STE]
# delfG0 = -97.99 + 1 H2O = -154.68 +/- 1.7 kcal/mol
# delfH0 = -130.5 + 1 H2O = -198.8 +/- 5 kcal/mol
# SOPrTr = -37.8 + 1 H2O = -21.1 +/- 18 cal/mol/K
# CpPrTr = 17.700 + 1 H2O = 35.712 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -25.212 + 1 H2O = -7.144 cm3/mol
# mole wt. = 88.8537 + 1 H2O = 106.8689 g/mol
# date: 5. Jan. 2018

```

```

+ 1 Fe+3 + 4 H2O - 4 H+ = + 1 Fe(OH)4-
log_k      -21.9868 # +/- 0.2
delta_h    41.6 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -8.923246E+1   -1.462307E-2   -3.350794E+3   3.516799E+1   -3.709419E+5
lInI_gamma 4.0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as FeO2-
# data source: [1986KAM/EZH][1986YIS/RUI][1995ZIE/JON][1996KUM/NIS][1999DIA/SCH][1999LIU/MIL]
# [1999SER/SUL][2003PER/HEF][2007STE][2014DIL/LOT]
#
# delfGO = -87.50 + 2 H2O = -200.88 +/- 1.6 kcal/mol
# delfHO = -106.9 + 2 H2O = -243.5 +/- 3 kcal/mol *
# SPrTr = 6.1 + 2 H2O = 39.5 +/- 9 cal/mol/K
# CpPrTr = 17 + 2 H2O = 53 +/- 10 cal/mol/K
# mole vol. = -3.000 + 2 H2O = 33.136 cm3/mol
# mole wt. = 87.8458 + 2 H2O = 123.8762 g/mol
# date: 9. Oct. 2019

1 HP04-2 + 1 H+ = 1 H2P04-
log_k      7.2055 # +/- 0.20
delta_h    -1.000 kcal/mol # +/- 0.63
analytical_expression  7.721395E+02   1.213448E-01   -4.312638E+04   -2.776283E+02   2.711540E+06
lInI_gamma 4
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
#
# delfGO = -270.14 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -309.82 +/- 0.2 kcal/mol
# SPrTr = 21.6 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -7.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 31.300 cm3/mol
# mole wt. = 96.9872 g/mol
# date: 3. Jul. 1987

1 HS- + 1 H+ = 1 H2S
log_k      6.9856 # +/- 999999
delta_h    -5.15 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  6.677385E+2   1.087606E-1   -3.682665E+4   -2.413580E+2   2.450145E+6
gamma      3 0.041
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for H2S(g) = H2S(aq)
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1964KOZ][1981DRU][1989SHO/HEL]
#
# delfGO = -6.670 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -9.000 +/- 999999 kcal/mol
# SPrTr = 30.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 42.833 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 34.921 cm3/mol
# mole wt. = 34.0819 g/mol
# date: 30. Aug. 2015

1 S203-2 + 2 H+ = 1 H2S203
log_k      2.2723 # +/- 1.1
delta_h    4.60 kcal/mol # +/- 14.1
analytical_expression  1.430702E+3   2.267531E-1   -8.083309E+4   -5.172625E+2   4.889856E+6
gamma      4 0.041
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SHO/SAS]
#
# delfGO = -128.000 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -150.400 +/- 999999 kcal/mol
# SPrTr = 45.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 27.500 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 42.201 cm3/mol
# mole wt. = 114.1460 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 S204-2 + 2 H+ = 1 H2S204
log_k      2.8587 # +/- 2
delta_h    4.800 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.453985E+3   2.301467E-1   -8.209645E+4   -5.255809E+2   4.988673E+6
gamma      4 0.041
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
#
# delfGO = -147.4 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -173.000 +/- 999999 kcal/mol
# SPrTr = 51.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 37.400 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 51.401 cm3/mol
# mole wt. = 130.1454 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 HP04-2 + 2 H+ = 1 H3P04
log_k      9.3751 # +/- 0.2
delta_h    0.90 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression  1.512370E+3   2.350866E-1   -8.489513E+4   -5.444539E+2   5.232453E+6
gamma      3 0.041
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1989SHO/HEL]
#
# delfGO = -273.10 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -307.92 +/- 0.2 kcal/mol
# SPrTr = 38.0 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 23.600 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 48.101 cm3/mol
# mole wt. = 97.9952 g/mol
# date: 11. Jul. 1987

1 H+ + 1 BrO- = 1 HBrO
log_k      8.5762 # +/- 2
delta_h    -4.5 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression  7.939383E+2   1.216034E-1   -4.356883E+4   -2.854630E+2   2.743823E+6
gamma      3 0.041
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
#
# delfGO = -19.7 +/- 2 kcal/mol

```

```

# delfH0 = -27.0 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 33.8 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = 9.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 28.301 cm3/mol
# mole wt. = 96.9113 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 H+ + 1 Cl- = 1 HCl
log_k      -0.7103 # +/- 999999
delta_h    -2.957 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  4.458931E+2  8.551304E-2  -2.400217E+4  -1.655803E+2  1.610820E+6
gamma      3  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997TAG/ZOT]
# delfG0 = -30.411 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -42.895 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 0.421 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 35.740 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 16.384 cm3/mol
# mole wt. = 36.4606 g/mol
# date: 30. Aug. 2015

+ 1 H+ + 1 ClO- = + 1 HClO
log_k      7.5500 # +/- 2.1
delta_h    -3.2 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression  6.567956E+2  1.010865E-1  -3.618339E+4  -2.359395E+2  2.292409E+6
gamma      3  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -19.1 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -28.9 +/- 2 kcal/mol *
# SOPrTr = 34 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = 9.100 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 28.400 cm3/mol
# mole wt. = 52.4600 g/mol
# date: 9. Oct. 2019

+ 1 H+ + 1 ClO2- = + 1 HClO2
log_k      1.9791 # +/- 2.1
delta_h    3.5 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression  6.238269E+2  9.581861E-2  -3.634244E+4  -2.239209E+2  2.271367E+6
gamma      3  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfG0 = 1.4 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -12.4 +/- 2 kcal/mol *
# SOPrTr = 45.0 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 27.500 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 44.000 cm3/mol
# mole wt. = 68.4594 g/mol
# date: 9. Oct. 2019

+ 1 Cyanide- + 1 H+ = + 1 HCyanide
log_k      9.2359 # +/- 2.1
delta_h    -10.4 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression  6.367245E+2  9.919257E-2  -3.476562E+4  -2.294023E+2  2.416092E+6
gamma      3  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1995OEL/HEL]
# delfG0 = 28.6 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = 25.6 +/- 2 kcal/mol *
# SOPrTr = 29.8 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 40.666 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 45.878 cm3/mol
# mole wt. = 27.0256 g/mol
# date: 7. Oct. 2019

1 H+ + 1 F- = 1 HF
log_k      3.1666 # +/- 999999
delta_h    3.31 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  6.360482E+2  1.027378E-1  -3.570874E+4  -2.295036E+2  2.146455E+6
gamma      3  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1989SHO/HEL]
# delfG0 = -71.660 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -76.840 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 22.500 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 14.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 12.500 cm3/mol
# mole wt. = 20.0063 g/mol
# date: 30. Aug. 2015

1 H+ + 2 F- = 1 HF2-
log_k      2.5509 # +/- 0.3
delta_h    4.96 kcal/mol # +/- 9.9
analytical_expression  7.039778E+2  1.121540E-1  -3.874905E+4  -2.544140E+2  2.189304E+6
lnI_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -138.16 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -155.34 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 22.1 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -33.200 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 22.100 cm3/mol
# mole wt. = 39.0047 g/mol
# date: 12. Jul. 1987

+ 1 Formate- + 1 H+ = + 1 HFormate
log_k      3.7677 # +/- 1.5
delta_h    0.01 kcal/mol # +/- 0.2
analytical_expression  6.483158E+2  9.996686E-2  -3.701766E+4  -2.330952E+2  2.362804E+6

```

```

gamma      3.0      0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1995SHO] Formic acid
# delfGO = -89.0 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -101.71 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 39 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = 22.800 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 34.690 cm3/mol
# mole wt. = 46.0256 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

1 H+ + 1 IO- = 1 HIO
log_k      10.6286 # +/- 1.5
delta_h    -7.30 kcal/mol # +/- 2.6
analytical_expression  6.116534E+2  9.684494E-2  -3.166421E+4  -2.206532E+2  1.981718E+6
gamma      3      0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfGO = -23.70 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -33.00 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 22.8 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -9.200 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 15.600 cm3/mol
# mole wt. = 143.9118 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 IO3- + 1 H+ = 1 HIO3
log_k      0.8063 # +/- 2.0
delta_h    2.4 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression  6.839171E+2  1.076198E-1  -3.849698E+4  -2.473709E+2  2.313284E+6
gamma      3      0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfGO = -31.7 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -50.5 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 39.9 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 19.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 37.701 cm3/mol
# mole wt. = 175.9106 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 NO2- + 1 H+ = 1 HNO2
log_k      3.2252 # +/- 2.0
delta_h    -3.5 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression  6.117434E+2  9.662284E-2  -3.319096E+4  -2.219349E+2  2.058619E+6
gamma      3      0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfGO = -12.1 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -28.5 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 32.4 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 6.700 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 30.701 cm3/mol
# mole wt. = 47.0135 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 NO3- + 1 H+ = 1 HNO3
log_k      -1.3048 # +/- 999999
delta_h    4.02 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  6.817848E+2  1.067670E-1  -3.886367E+4  -2.467635E+2  2.313655E+6
gamma      3      0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1989SHO/HEL][1997SHO/SAS]
# delfGO = -24.730 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -45.410 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 42.700 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 18.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 40.201 cm3/mol
# mole wt. = 63.0129 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 S2O3-2 + 1 H+ = 1 HS2O3-
log_k      1.6859 # +/- 999999
delta_h    1.10 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  7.331246E+2  1.174872E-1  -4.191406E+4  -2.648840E+2  2.626796E+6
lInl_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1953PAG][1997SHO/SAS]
# delfGO = -127.200 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -153.900 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 30.500 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 3.500 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 29.500 cm3/mol
# mole wt. = 113.1381 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 S2O4-2 + 1 H+ = 1 HS2O4-
log_k      2.4922 # +/- 1.5
delta_h    1.00 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  7.429861E+2  1.187868E-1  -4.240373E+4  -2.683092E+2  2.686780E+6
lInl_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfGO = -146.90 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -179.100 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 36.500 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 13.400 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 40.101 cm3/mol
# mole wt. = 129.1375 g/mol

```

```

# date: 11. Sep. 1997
1 S03-2 + 1 H+ = 1 HS03-
  log_k      7.2054 # +/- 1.5
  delta_h    2.23 kcal/mol # +/- 2.5
  analytical_expression 7.847293E+2  1.256057E-1  -4.450359E+4  -2.817158E+2  2.789338E+6
  lnln_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -126.13 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -149.67 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 33.4 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -1.400 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 33.300 cm3/mol
# mole wt. = 81.0721 g/mol
# date: 3. Jul. 1987

1 S04-2 + 1 H+ = 1 HS04-
  log_k      1.9791 # +/- 999999
  delta_h    4.90 kcal/mol # +/- 999999
  analytical_expression 7.958471E+2  1.254713E-1  -4.645126E+4  -2.861867E+2  2.904153E+6
  lnln_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1988SHO/HEL]
# delfG0 = -180.63 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -212.50 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 30.0 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 5.300 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 35.201 cm3/mol
# mole wt. = 97.0715 g/mol
# date: 3. Jul. 1987

#2 K+ + 1 Si(OH)4 - 2 H+ = 1 K2SiO2(OH)2
# log_k      -23.2427 # +/- 999999
# delta_h    2.03 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression 4.266141E+2  4.924266E-2  -2.397797E+4  -1.601038E+2  1.071049E+6
# gamma      3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used]
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as K2SiO3
# data source: [Unpublished]
# delfG0 = -359.530 + 1 H2O = -416.218 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -399.340 + 1 H2O = -467.657 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -24.600 + 1 H2O = -7.888 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -59.970 + 1 H2O = -41.958 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -2.344 + 1 H2O = 15.724 cm3/mol
# mole wt. = 154.2803 + 1 H2O = 172.2955 g/mol
# date: 26. May. 2015

1 K+ + 1 Al+3 + 4 H2O - 4 H+ = 1 KAl(OH)4
  log_k      -24.2247 # +/- 999999
  delta_h    50.61 kcal/mol # +/- 999999
  analytical_expression 6.580664E+2  9.741848E-2  -4.572943E+4  -2.342972E+2  1.937309E+6
  gamma      3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used] solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as KAlO2(aq)
# data source: [1997POK/HEL_b]
# delfG0 = -264.380 + 2 H2O = -377.756 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -274.980 + 2 H2O = -411.614 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 35.700 + 2 H2O = 69.124 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 4.318 + 2 H2O = 40.342 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 31.123 + 2 H2O = 67.259 cm3/mol
# mole wt. = 98.0786 + 2 H2O = 134.1092 g/mol
# date: 7. Sep. 2015

1 K+ + 1 Br- = 1 KBr
  log_k      -1.7372 # +/- 999999
  delta_h    2.99 kcal/mol # +/- 999999
  analytical_expression 6.819450E+2  1.058648E-1  -3.842045E+4  -2.471950E+2  2.247287E+6
  gamma      3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1988OEL/HEL][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -90.010 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -86.320 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 47.500 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -7.970 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 46.001 cm3/mol
# mole wt. = 119.0023 g/mol
# date: 13. Sep. 1997

1 K+ + 1 Cl- = 1 KCl
  log_k      -1.7512 # +/- 999999
  delta_h    2.80 kcal/mol # +/- 999999
  analytical_expression 7.624407E+2  1.157495E-1  -4.382406E+4  -2.754679E+2  2.658809E+6
  gamma      3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997POK/HEL_a]
# delfG0 = -96.500 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -97.400 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 39.100 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 11.098 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 40.074 cm3/mol
# mole wt. = 74.5510 g/mol
# date: 15. Sep. 1997

+ 1 K+ + 1 HCO3- - 1 H+ = 1 KC03-
  log_k      -11.0186 # +/- 1.0
  delta_h    10.94 kcal/mol # +/- 3.5
  analytical_expression 1.403735E+2  1.991475E-2  -9.676566E+3  -5.203540E+1  3.451784E+5
  lnln_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [2019WAL/ANR]

```

```

# delfG0 = -192.76 +/- 1.4 kcal/mol
# delfH0 = -214.23 +/- 3.5 kcal/mol *
# SOPrTr = 34 +/- 11 cal/mol/K
# CpPrTr = -22 +/- 14 cal/mol/K
# mole vol. = 11.933 cm3/mol
# mole wt. = 99.1075 g/mol
# date: 9. Oct. 2019

1 K+ + 1 Fe+3 + 4 H2O - 4 H+ = 1 KFe(OH)4
log_k      -22.8445 # +/- 1.7
delta_h    41.05 kcal/mol # +/- 4.1
analytical_expression 7.261633E+2  1.109031E-1  -5.096461E+4  -2.588679E+2  2.614774E+6
gamma      3  0.041
# -Range: 0 - 300 oC
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as KFeO2(aq)
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfG0 = -153.84 + 2 H2O = -267.22 +/- 1.7 kcal/mol
# delfH0 = -167.70 + 2 H2O = -304.33 +/- 3.8 kcal/mol *
# SOPrTr = 36.78 + 2 H2O = 70.20 +/- 7.4 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.7 + 2 H2O = 112.7 +/- 23 cal/mol/K
# mole vol. = 17.651 + 2 H2O = 53.787 cm3/mol
# mole wt. = 126.9441 + 2 H2O = 162.9745 g/mol
# date: 13. Dec. 2018

+ 1 K+ + 1 Formate- = + 1 KFormate
log_k      0.0315 # +/- 999999
delta_h    0.805 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 7.116756E+2  1.081961E-1  -4.040526E+4  -2.571050E+2  2.471488E+6
gamma      3  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -151.413 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -161.195 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 48.668 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 6.800 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 45.200 cm3/mol
# mole wt. = 84.1160 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

+ 1 K+ + 2 Formate- = + 1 KFormate2-
log_k      -0.2668 # +/- 999999
delta_h    -0.927 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.039616E+3  1.575967E-1  -5.979750E+4  -3.754118E+2  3.788526E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -234.866 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -264.657 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 63.193 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 13.900 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 85.500 cm3/mol
# mole wt. = 129.1337 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

1 K+ + 1 HCO3- = 1 KHCO3
log_k      -0.6245 # +/- 1.1
delta_h    1.08 kcal/mol # +/- 3.1
analytical_expression 7.239319E+2  1.103807E-1  -4.122669E+4  -2.617033E+2  2.522145E+6
gamma      3  0.041
# -Range: 0 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfG0 = -206.94 +/- 1.5 kcal/mol
# delfH0 = -224.09 +/- 3.1 kcal/mol *
# SOPrTr = 48.47 +/- 9.0 cal/mol/K
# CpPrTr = 26.7 +/- 14 cal/mol/K
# mole vol. = 45.533 cm3/mol
# mole wt. = 100.1154 g/mol
# date: 13. Dec. 2018

1 K+ + 1 SO4-2 + 1 H+ = 1 KHSO4
log_k      -1.4953 # +/- 999999
delta_h    10.27 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.441864E+3  2.262735E-1  -8.464836E+4  -5.197647E+2  5.263452E+6
gamma      3  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for K+ + HS04- = KHSO4
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1976HEL/KIR][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -243.400 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -267.400 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 55.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 57.720 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 53.771 cm3/mol
# mole wt. = 136.1698 g/mol
# date: 02. Oct. 1997

1 K+ + 1 I- = 1 KI
log_k      -1.5980 # +/- 999999
delta_h    2.04 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 5.741160E+2  9.282031E-2  -3.156712E+4  -2.093701E+2  1.827555E+6
gamma      3  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO]
# delfG0 = -77.740 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -71.830 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 49.200 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -5.800 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 59.001 cm3/mol
# mole wt. = 166.0028 g/mol
# date: 6. Sep. 2015

1 K+ + 1 H2O -1 H+ = 1 KOH
log_k      -14.8930 # +/- 0.2
delta_h    16.49 kcal/mol # +/- 999999

```

```

analytical_expression 1.460396E+2 1.658912E-2 -1.173073E+4 -5.299512E+1 4.088297E+5
gamma 3.67 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for K+ + OH- = KOH
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997POK/HEL_b]
# delfG0 = -103.88 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -112.100 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 28.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 1.298 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 14.124 cm3/mol
# mole wt. = 56.1056 g/mol
# date: 6. Sep. 2015

1 K+ + 1 Si(OH)4 - 2 H+ = 1 KSiO2(OH)2-
log_k -23.4259 # +/- 1.5
delta_h 26.25 kcal/mol # +/- 4.3
analytical_expression -1.680535E+2 -4.133258E-2 2.440834E+3 6.265262E+1 -5.566539E+5
lnln_gamma 4
# -Range: 0 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as KSiO3-
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfG0 = -291.77 + 1 H2O = -348.46 +/- 2.1 kcal/mol
# delfH0 = -314.85 + 1 H2O = -383.17 +/- 4.3 kcal/mol *
# SOPrTr = 31.7 + 1 H2O = 48.4 +/- 12 cal/mol/K
# CpPrTr = -24.0 + 1 H2O = -6.0 +/- 15 cal/mol/K
# mole vol. = 8.837 + 1 H2O = 26.905 cm3/mol
# mole wt. = 115.1820 + 1 H2O = 133.1972 g/mol
# date: 14. Dec. 2018

1 K+ + 1 Si(OH)4 - 1 H+ = 1 KSiO(OH)3
log_k -9.9826 # +/- 1.6
delta_h 9.60 kcal/mol # +/- 3.0
analytical_expression 4.010066E+2 4.612651E-2 -2.565242E+4 -1.430720E+2 1.361781E+6
gamma 3 0.041
# -Range: 0 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as KHSiO3(aq)
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfG0 = -310.11 + 1 H2O = -366.80 +/- 2.2 kcal/mol
# delfH0 = -331.50 + 1 H2O = -399.82 +/- 2.9 kcal/mol *
# SOPrTr = 37.38 + 1 H2O = 54.09 +/- 6.5 cal/mol/K
# CpPrTr = -3.9 + 1 H2O = 14.1 +/- 20 cal/mol/K
# mole vol. = 26.374 + 1 H2O = 44.442 cm3/mol
# mole wt. = 116.1899 + 1 H2O = 134.2051 g/mol
# date: 13. Dec. 2018

1 K+ + 1 SO4-2 = 1 KSO4-
log_k 0.8796 # +/- 999999
delta_h 0.69 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.757565E+2 1.367673E-1 -4.933165E+4 -3.169384E+2 3.026556E+6
lnln_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1953BEL/GEO][1963QUI/FRA][1968TRU/HOS][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -246.640 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -276.980 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 35.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -10.900 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 27.800 cm3/mol
# mole wt. = 135.1619 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

+ 1 Li+ + 1 Cl- = + 1 LiCl
log_k -1.5056 # +/- 999999
delta_h 0.799 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.036079E+2 1.260642E-1 -4.522574E+4 -2.917870E+2 2.754940E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1988SHO/HEL][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -99.334 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -105.690 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 12.30 +/- 0.7 cal/mol/K
# CpPrTr = 22.896 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 28.000 cm3/mol
# mole wt. = 42.3937 g/mol
# date: 28. Oct. 2019

+ 1 Li+ + 1 H2O - 1 H+ = + 1 LiOH
log_k -13.8499 # +/- 0.29
delta_h 13.86 kcal/mol # +/- 1.3
analytical_expression 1.559553E+2 2.097102E-2 -1.086110E+4 -5.791584E+1 3.269790E+5
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1923KOL][1954GIM/MON][1961WR1/LIN][1979COR/CRO][1997SVE/SHO_a][1998HO/PAL][2000HO/PAL]
# delfG0 = -107.80 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -121.01 +/- 1.3 kcal/mol *
# SOPrTr = 2.8 +/- 4 cal/mol/K
# CpPrTr = 5.808 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 4.227 cm3/mol
# mole wt. = 23.9483 g/mol
# date: 21. Nov. 2019

+ 1 Li+ + 1 SO4-2 = + 1 LiSO4-
log_k 0.7547 # +/- 0.20
delta_h 0.4 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression 9.306047E+2 1.422946E-1 -5.349750E+4 -3.357395E+2 3.370694E+6
lnln_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1930RIG/DAV][1975REA][1997SVE/SHO_a][2006SHA/GRA]
# delfG0 = -248.97 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -283.6 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 12 +/- 10 cal/mol/K
# CpPrTr = 11.0 +/- 7 cal/mol/K
# mole vol. = 22.945 cm3/mol

```

```

# mole wt. = 103.0046 g/mol
# date: 22. Nov. 2019

+ 1 Mg+2 + 1 Al+3 + 4 H2O - 4 H+ = + 1 MgAl(OH)4+
log_k -18.4596 # +/- 0.8
delta_h 40.33 kcal/mol # +/- 1.9
analytical_expression 8.002886E+2 1.236213E-1 -5.389519E+4 -2.856619E+2 2.845638E+6
lnI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as MgAlO2+
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfG0 = -313.240 + 2 H2O = -426.616 +/- 0.90 kcal/mol
# delfH0 = -336.35 + 2 H2O = -472.98 +/- 1.8 kcal/mol *
# SOPrTr = -29.5 + 2 H2O = 3.9 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 62 + 2 H2O = 98 +/- 28 cal/mol/K
# mole vol. = -7.021 + 2 H2O = 29.115 cm3/mol
# mole wt. = 83.2853 + 2 H2O = 119.3157 g/mol
# date: 9. Oct. 2019

1 Mg+2 + 1 Cl- = 1 MgCl+
log_k -0.7726 # +/- 0.5
delta_h 1.18 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.628605E+2 1.353543E-1 -4.943464E+4 -3.123982E+2 3.095362E+6
lnI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982MAJ/STU][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -138.830 +/- 0.67 kcal/mol
# delfH0 = -150.120 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -19.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 25.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1.260 cm3/mol
# mole wt. = 59.7577 g/mol
# date: 7. Sep. 2015

1 HCO3- + 1 Mg+2 - 1 H+ = 1 MgCO3
log_k -7.3499 # +/- 0.5
delta_h 5.70 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.744119E+2 1.368261E-1 -4.718455E+4 -3.201598E+2 2.481298E+6
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Mg+2 + CO3-2 = MgCO3
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1974REA/LAN][1977S1E/HOS][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -238.76 +/- 0.6 kcal/mol
# delfH0 = -270.570 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -24.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -27.400 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -18.180 cm3/mol
# mole wt. = 84.3142 g/mol
# date: 17. Sep. 1997

1 Mg+2 + 1 F- = 1 MgF+
log_k 1.9080 # +/- 0.04
delta_h -0.198 kcal/mol # +/- 0.43
analytical_expression 9.569223E+2 1.484441E-1 -5.490737E+4 -3.453034E+2 3.494852E+6
lnI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1979RIC/HOL][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -178.448 +/- 0.31 kcal/mol
# delfH0 = -191.715 +/- 0.31 kcal/mol
# SOPrTr = -28.070 +/- 3.17 cal/mol/K
# CpPrTr = 39.100 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -17.470 cm3/mol
# mole wt. = 43.3034 g/mol
# date: 6. Sep. 2015

1 Mg+2 + 1 Fe+3 + 4 H2O - 4 H+ = 1 MgFe(OH)4+
log_k -19.8941 # +/- 1.8
delta_h 40.42 kcal/mol # +/- 2.5
analytical_expression 9.065617E+2 1.398121E-1 -6.243911E+4 -3.230377E+2 3.610731E+6
lnI_gamma 4
# -Range: 0 - 300 oC
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as MgFeO2+
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfG0 = -198.86 + 2 H2O = -312.24 +/- 1.8 kcal/mol
# delfH0 = -219.43 + 2 H2O = -356.06 +/- 2.0 kcal/mol *
# SOPrTr = -21.25 + 2 H2O = 12.17 +/- 7.6 cal/mol/K
# CpPrTr = 125.6 + 2 H2O = 161.6 +/- 41 cal/mol/K
# mole vol. = -17.482 + 2 H2O = 18.654 cm3/mol
# mole wt. = 112.1508 + 2 H2O = 148.1812 g/mol
# date: 12. Dec. 2018

+ 1 Mg+2 + 1 Formate- = + 1 MgFormate+
log_k 1.4316 # +/- 999999
delta_h -2.627 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.830074E+2 1.357877E-1 -5.059028E+4 -3.189391E+2 3.272229E+6
lnI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -194.318 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -215.724 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = -13.582 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 35.700 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 11.100 cm3/mol
# mole wt. = 69.3227 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

+ 1 Mg+2 + 2 Formate- = + 1 MgFormate2
log_k 2.3031 # +/- 999999
delta_h -6.447 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.732252E+3 2.677622E-1 -9.873929E+4 -6.266000E+2 6.388365E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]

```

```

# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -279.367 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -321.274 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = -0.709 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 72.400 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 47.500 cm3/mol
# mole wt. = 114.3404 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

+ 1 Mg+2 + 1 Si(OH)4 - 2 H+ = + 1 MgSiO2(OH)2
log_k -17.6315 # +/- 0.5
delta_h 18.83 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 7.453098E+2 1.020503E-1 -4.727705E+4 -2.683970E+2 2.607376E+6
gamma 4 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Mg+2 + SiO2(OH)2-2 = MgSiO2(OH)2
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as MgSiO3(aq)
# data source: [1974SAN/SCH][1997SVE/SHO][Unpublished]
# delfG0 = -340.67 + 1 H2O = -397.36 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -373.360 + 1 H2O = -441.677 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -23.800 + 1 H2O = -7.088 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 20.400 + 1 H2O = 38.412 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -38.998 + 1 H2O = -20.930 cm3/mol
# mole wt. = 100.3887 + 1 H2O = 118.4039 g/mol
# date: 10. Aug. 2017

1 Mg+2 + 1 Si(OH)4 - 1 H+ = 1 MgSiO(OH)3+
log_k -8.4983 # +/- 0.3
delta_h 6.36 kcal/mol # +/- 1.7
analytical_expression 5.495207E+2 6.909036E-2 -3.460123E+4 -1.963803E+2 2.077070E+6
lInl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Mg+2 + SiO(OH)3- = MgSiO(OH)3+
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as MgHSiO3+
# data source: [1974SAN/SCH][1997SVE/SHO][Unpublished]
# delfG0 = -353.130 + 1 H2O = -409.818 +/- 0.47 kcal/mol
# delfH0 = -385.830 + 1 H2O = -454.147 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -23.800 + 1 H2O = -7.088 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 20.400 + 1 H2O = 38.412 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -9.826 + 1 H2O = 8.242 cm3/mol
# mole wt. = 101.3966 + 1 H2O = 119.4119 g/mol
# date: 9. Aug. 2017

1 Mg+2 + 1 HCO3- = 1 MgHCO3+
log_k 1.0357 # +/- 999999
delta_h 0.52 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.646079E+2 1.353258E-1 -5.005526E+4 -3.120750E+2 3.215727E+6
lInl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1990SVE][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -250.200 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -275.750 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -3.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 63.690 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 5.480 cm3/mol
# mole wt. = 85.3221 g/mol
# date: Jan. 1991

+ 1 Mg+2 + 1 H2O - 1 H+ = + 1 MgOH+
log_k -11.7008 # +/- 0.15
delta_h 16.79 kcal/mol # +/- 1.4
analytical_expression 2.335284E+2 3.327200E-2 -1.694438E+4 -8.379606E+1 8.027600E+5
lInl_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1923KOL][1925GJA][1986WAL][1997PAL/WES][1997SHO/SAS_a][2016BRO/EKB][Unpublished]
# delfG0 = -149.23 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -162.89 +/- 1.4 kcal/mol *
# SOPrTr = -13.5 +/- 4 cal/mol/K
# CpPrTr = 20 +/- 30 cal/mol/K
# mole vol. = -18.141 cm3/mol
# mole wt. = 41.3123 g/mol
# date: 10. Oct. 2019

+ 1 Mg+2 + 1 SO4-2 = + 1 MgSO4
log_k 2.2467 # +/- 3
delta_h 1.392 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.742703E+3 2.674000E-1 -9.658647E+4 -6.307080E+2 5.725391E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997McC/SHO]
# delfG0 = -289.5 +/- 4 kcal/mol
# delfH0 = -327.375 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = -13.500 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -21.720 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1.330 cm3/mol
# mole wt. = 120.3686 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

1 Mn+2 + 1 Cl- = 1 MnCl+
log_k -0.1385 # +/- 999999
delta_h 4.55 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.810328E+02 1.404336E-01 -5.040434E+04 -3.186945E+02 3.075751E+06
lInl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO]
# delfG0 = -86.290 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -88.290 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 12.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 25.120 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 6.740 cm3/mol
# mole wt. = 90.3907 g/mol
# date: 17. Sep. 1997

1 Mn+2 + 1 F- = 1 MnF+
log_k 0.8803 # +/- 999999

```

```

delta_h      0.60 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  9.089449E+02  1.428560E-01  -5.163053E+04  -3.288635E+02  3.223324E+06
l|n|_gamma    4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -123.640 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -132.450 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -13.300 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 29.388 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -12.455 cm3/mol
# mole wt. = 73.9365 g/mol
# date: 1. Jun. 2016

+ 1 Mn+2 + 1 Formate- = + 1 MnFormate+
log_k      1.2615 # +/- 999999
delta_h    -1.149 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  8.904479E+2  1.390043E-1  -5.094506E+4  -3.218776E+2  3.262580E+6
l|n|_gamma    4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -140.681 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -155.779 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 7.415 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 38.400 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 16.100 cm3/mol
# mole wt. = 99.9557 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

+ 1 Mn+2 + 2 Formate- = + 1 MnFormate2
log_k      2.3530 # +/- 999999
delta_h    -3.337 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.708081E+3  2.648732E-1  -9.803382E+4  -6.171363E+2  6.326004E+6
gamma      3.0  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -226.030 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -259.697 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 26.769 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 77.800 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 53.000 cm3/mol
# mole wt. = 144.9734 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

1 Mn+2 + 1 H2O - 1 H+ = 1 MnOH+
log_k      -10.5895 # +/- 0.08
delta_h     14.41 kcal/mol # +/- 1.0
analytical_expression  2.034580E+02  3.006961E-02  -1.395736E+04  -7.386204E+01  5.837535E+05
l|n|_gamma    4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1976BAE/MES][1981BAE/MES][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -97.341 +/- 0.06 kcal/mol
# delfH0 = -106.81 +/- 1.0 kcal/mol
# SOPrTr = 0.43 +/- 3.4 cal/mol/K
# CpPrTr = 8.510 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -11.800 cm3/mol
# mole wt. = 71.9454 g/mol
# date: 31. May. 2016

1 Mn+2 + 2 H2O - 2 H+ = 1 Mn(OH)2
log_k      -22.2011 # +/- 999999
delta_h     29.38 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  3.250298E+02  4.915557E-02  -2.262828E+04  -1.190729E+02  7.685171E+05
gamma      3  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], stability relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as MnO(aq)
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -81.500 + 1 H2O = -138.188 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -91.840 + 1 H2O = -160.157 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -2.500 + 1 H2O = 14.212 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -12.700 + 1 H2O = 5.312 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -13.100 + 1 H2O = 4.968 cm3/mol
# mole wt. = 70.9374 + 1 H2O = 88.9527 g/mol
# date: 1. Jun. 2016

1 Mn+2 + 3 H2O - 3 H+ = 1 Mn(OH)3-
log_k      -34.7998 # +/- 999999
delta_h     39.63 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -3.174437E+02  -5.370934E-02  9.143265E+03  1.136340E+02  -1.172170E+06
l|n|_gamma    4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], stability relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HMnO2-
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -121.000 + 1 H2O = -177.688 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -149.900 + 1 H2O = -218.217 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -9.100 + 1 H2O = 7.612 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -3.300 + 1 H2O = 14.712 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -9.700 + 1 H2O = 8.368 cm3/mol
# mole wt. = 87.9448 + 1 H2O = 105.9601 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

1 Mn+2 + 4 H2O - 4 H+ = 1 Mn(OH)4-2
log_k      -48.2871 # +/- 0.1
delta_h     56.23 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.056880E+03  -1.705757E-01  4.833174E+04  3.806099E+02  -3.950748E+06
l|n|_gamma    4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as MnO2-2
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -102.60 + 2 H2O = -215.98 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -133.340 + 1 H2O = -201.657 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -15.200 + 1 H2O = 1.512 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -71.500 + 1 H2O = -53.488 +/- 999999 cal/mol/K

```

```

# mole vol. = -13.000 + 1 H2O = 5.068 cm3/mol
# mole wt. = 86.9368 + 2 H2O = 122.9674 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

1 Mn+2 + 1 SO4-2 = 1 MnSO4
log_k 1.9131 # +/- 999999
delta_h 2.35 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.725942E+03 2.664408E-01 -9.554983E+04 -6.249487E+02 5.635236E+06
lnI_gamma 3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1988WHE/CAR][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -235.640 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -267.950 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 5.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -20.600 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 2.800 cm3/mol
# mole wt. = 151.0016 g/mol
# date: 1. Jun. 2016

#+ 2 Na+ + 1 Si(OH)4 - 2 H+ = + 1 Na2SiO2(OH)2
log_k -23.2588 # +/- 999999
delta_h 11.97 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 5.775866E+2 6.704911E-2 -3.456161E+4 -2.112125E+2 1.574685E+6
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as Na2SiO3(aq)
# data source: [Unpublished]
# delfG0 = -349.670 + 1 H2O = -406.358 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -383.740 + 1 H2O = -452.057 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -11.700 + 1 H2O = 5.012 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -46.700 + 1 H2O = -28.688 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -24.029 + 1 H2O = -5.961 cm3/mol
# mole wt. = 122.0632 + 1 H2O = 140.0785 g/mol
# date: 17. Aug. 2017

+ 1 Na+ + 1 Al+3 + 4 H2O - 4 H+ = + 1 NaAl(OH)4
log_k -23.6244 # +/- 0.5
delta_h 45.482 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 7.336609E+2 1.129166E-1 -4.982116E+4 -2.628829E+2 2.367731E+6
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as NaAlO2(aq)
# data source: [1995POK/HEL]
# delfG0 = -260.28 + 2 H2O = -373.66 +/- 0.6 kcal/mol
# delfH0 = -277.265 + 2 H2O = -413.899 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 11.100 + 2 H2O = 44.524 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 41.073 + 2 H2O = 77.096 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 17.286 + 2 H2O = 53.422 cm3/mol
# mole wt. = 81.9701 + 2 H2O = 118.0005 g/mol
# date: 10. Dec. 2019

1 B(OH)3 + 1 Na+ + 1 H2O - 1 H+ = 1 NaB(OH)4
log_k -8.9711 # +/- 0.26
delta_h 3.760 kcal/mol # +/- 0.53
analytical_expression -6.804376E+0 5.794819E-3 1.307688E+3 -2.141505E+0 -2.651132E+5
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995POK/HEL]
# delfG0 = -338.580 +/- 0.43 kcal/mol
# delfH0 = -378.810 +/- 0.47 kcal/mol
# SOPrTr = 39.20 +/- 2.8 cal/mol/K
# CpPrTr = 35.093 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 32.857 cm3/mol
# mole wt. = 101.8301 g/mol
# date: 20. Jan. 1998

1 Na+ + 1 Br- = 1 NaBr
log_k -1.3568 # +/- 999999
delta_h 1.64 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.060572E+2 1.231674E-1 -4.560855E+4 -2.917638E+2 2.736308E+6
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1988OEL/HEL][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -85.610 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -84.830 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 34.100 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 7.970 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 32.040 cm3/mol
# mole wt. = 102.8938 g/mol
# date: 13. Sep. 1997

1 Na+ + 1 Cl- = 1 NaCl
log_k -0.7770 # +/- 999999
delta_h 1.21 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 7.261796E+2 1.143050E-1 -4.029185E+4 -2.638107E+2 2.389738E+6
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1992SHO/OEL][1995POK/HEL][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -92.910 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -96.160 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 28.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 8.508 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 24.000 cm3/mol
# mole wt. = 58.4425 g/mol
# date: 29. Apr. 1997

1 Na+ + 1 HCO3- - 1 H+ = 1 NaCO3-
log_k -9.1574 # +/- 0.22
delta_h 5.57 kcal/mol # +/- 1.2
analytical_expression 1.088868E+2 1.238457E-2 -6.652993E+3 -4.100939E+1 1.824051E+5
lnI_gamma 4
# -Range: 0 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Na+ + CO3-2 = NaCO3-

```

```

# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1961GAR/TOM][1970BUT/HUS][1976LAR/SOL][1998CAP/HEF][2006CRE/DeS][2013STE/BEN]
# delfG0 = -190.379 +/- 0.29 kcal/mol
# delfH0 = -216.76 +/- 1.2 kcal/mol *
# SOPrTr = 14.3 +/- 4 cal/mol/K
# CpPrTr = -29.5 +/- 20 cal/mol/K
# mole vol. = -3.917 cm3/mol
# mole wt. = 82.9990 g/mol
# date: 14. Dec. 2018

1 Na+ + 1 F- = 1 NaF
log_k -0.9976 # +/- 0.15
delta_h 1.72 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.024033E+2 1.249987E-1 -4.466035E+4 -2.911978E+2 2.637484E+6
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1979RIC/HOL][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -128.570 +/- 0.26 kcal/mol
# delfH0 = -135.860 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 12.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 11.200 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 5.710 cm3/mol
# mole wt. = 41.9882 g/mol
# date: 13. Sep. 1997

+ 1 Na+ + 1 Fe+3 + 4 H2O - 4 H+ = + 1 NaFe(OH)4
log_k -22.2881 # +/- 1.7
delta_h 41.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression 7.659680E+2 1.150107E-1 -5.254249E+4 -2.735410E+2 2.714932E+6
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as NaFeO2(aq)
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfG0 = -149.68 + 2 H2O = -263.06 +/- 1.7 kcal/mol
# delfH0 = -164.0 + 2 H2O = -300.6 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 19.7 + 2 H2O = 53.1 +/- 9 cal/mol/K
# CpPrTr = 77 + 2 H2O = 113 +/- 23 cal/mol/K
# mole vol. = 3.575 + 2 H2O = 39.711 cm3/mol
# mole wt. = 110.8356 + 2 H2O = 146.8660 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Na+ + 1 Formate- = + 1 NaFormate
log_k 0.0513 # +/- 999999
delta_h -0.164 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 7.931974E+2 1.191165E-1 -4.536602E+4 -2.862416E+2 2.825046E+6
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -146.521 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -159.326 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 35.333 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 22.800 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 33.900 cm3/mol
# mole wt. = 68.0075 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

+ 1 Na+ + 2 Formate- = + 1 NaFormate2-
log_k -0.2272 # +/- 999999
delta_h -3.230 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.010116E+3 1.524471E-1 -5.913358E+4 -3.643091E+2 3.910959E+6
ln_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -230.001 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -264.122 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 45.473 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 45.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 72.800 cm3/mol
# mole wt. = 113.0252 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

1 Na+ + 1 HCO3- = 1 NaHCO3
log_k 0.1224 # +/- 0.2
delta_h -0.21 kcal/mol # +/- 2.5
analytical_expression 7.991685E+2 1.198871E-1 -4.537959E+4 -2.885458E+2 2.791062E+6
gamma 3 0.041
# -Range: 0 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971NAK][1970BUT/HUS][2006CRE/DeS][2013STE/BEN]
# delfG0 = -203.04 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -222.54 +/- 2.5 kcal/mol *
# SOPrTr = 37.40 +/- 8.5 cal/mol/K
# CpPrTr = 34.2 +/- 15 cal/mol/K
# mole vol. = 31.490 cm3/mol
# mole wt. = 84.0069 g/mol
# date: 14. Dec. 2018

1 Na+ + 1 SO4-2 + 1 H+ = 1 NaHSO4
log_k -1.2718 # +/- 999999
delta_h 9.21 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.620513E+3 2.475544E-1 -9.507917E+4 -5.831905E+2 5.899399E+6
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [Unpublished]
# delfG0 = -238.790 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -265.620 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 43.500 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 55.608 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 42.438 cm3/mol
# mole wt. = 120.0613 g/mol
# date: 25. May. 2015

1 Na+ + 1 I- = 1 NaI

```

```

log_k      -1.5400 # +/- 999999
delta_h    1.93 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  6.563207E+2  1.038479E-1  -3.662911E+4  -2.386330E+2  2.178916E+6
gamma      3  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1988OEL/HEL][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -72.900 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -69.100 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 37.700 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.140 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 43.001 cm3/mol
# mole wt. = 149.8942 g/mol
# date: 8. Sep. 2015

1 Na+ + 1 H2O - 1 H+ = 1 NaOH
log_k      -14.7911 # +/- 0.4
delta_h    12.82 kcal/mol # +/- 1.6
analytical_expression  5.858656E+2  8.644320E-2  -3.593373E+4  -2.133924E+2  1.965868E+6
gamma      3  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995POK/HEL]
# delfG0 = -99.10 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -112.93 +/- 0.7 kcal/mol *
# SOPrTr = 6.0 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 34.730 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -0.396 cm3/mol
# mole wt. = 39.9971 g/mol
# date: 16. Oct. 2018

1 Na+ + 1 Si(OH)4 - 2 H+ = 1 NaSiO2(OH)2-
log_k      -22.2612 # +/- 1.6
delta_h    21.52 kcal/mol # +/- 4.2
analytical_expression  -2.035880E+2  -4.980774E-2  5.595981E+3  7.508716E+1  -7.455098E+5
lInl_gamma  4
# -Range: 0 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as NaSiO3-
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfG0 = -288.44 + 1 H2O = -345.13 +/- 2.2 kcal/mol
# delfH0 = -316.74 + 1 H2O = -385.06 +/- 4.2 kcal/mol *
# SOPrTr = 11.0 + 1 H2O = 27.7 +/- 12 cal/mol/K
# CpPrTr = -34.4 + 1 H2O = -16.4 +/- 17 cal/mol/K
# mole vol. = -3.318 + 1 H2O = 14.750 cm3/mol
# mole wt. = 99.0735 + 1 H2O = 117.0887 g/mol
# date: 17. Dec. 2018

1 Na+ + 1 Si(OH)4 - 1 H+ = + 1 NaSiO(OH)3
log_k      -8.2168 # +/- 1.5
delta_h    5.1 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  4.839499E+2  5.730148E-2  -2.991995E+4  -1.730511E+2  1.716070E+6
gamma      3  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Na+ + SiO(OH)3- = NaSiO(OH)3
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as NaHSiO3(aq)
# data source: [1974SEW][Unpublished]
# delfG0 = -307.6 + 1 H2O = -364.3 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -334.188 + 1 H2O = -402.505 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 16.743 + 1 H2O = 33.455 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 22.000 + 1 H2O = 40.012 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 11.600 + 1 H2O = 29.668 cm3/mol
# mole wt. = 100.0814 + 1 H2O = 118.0966 g/mol
# date: 20. Aug. 2018

1 Na+ + 1 SO4-2 = 1 NaSO4-
log_k      0.9229 # +/- 0.2
delta_h    -0.65 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression  9.088422E+2  1.394306E-1  -5.179274E+4  -3.283107E+2  3.253984E+6
lInl_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data], potentiometry for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995POK/SCH]
# delfG0 = -241.78 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -275.48 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 20.44 +/- 2.0 cal/mol/K
# CpPrTr = 4.876 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 19.074 cm3/mol
# mole wt. = 119.0534 g/mol
# date: 20. Jan. 1998

+ 1 NH4+ + 1 H2O - 1 H+ = + 1 NH4OH
log_k      -9.2410 # +/- 0.08
delta_h    12.410 kcal/mol # +/- 0.09
analytical_expression  2.727511E+1  5.807482E-3  -4.003655E+3  -1.036478E+1  7.353318E+4
gamma      3.0  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as NH3(aq)
# data source: [1972VAN/KIN][1989SHO/HEL]
# delfG0 = -6.383 + 1 H2O = -63.071 +/- 0.08 kcal/mol
# delfH0 = -19.440 + 1 H2O = -87.757 +/- 0.06 kcal/mol
# SOPrTr = 25.770 + 1 H2O = 42.482 +/- 0.09 cal/mol/K
# CpPrTr = 18.383 + 1 H2O = 36.395 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 24.430 + 1 H2O = 42.498 cm3/mol
# mole wt. = 17.0304 + 1 H2O = 35.0456 g/mol
# date: 13. Jul. 1987

1 Ni+2 + 1 Cl- = 1 NiCl+
log_k      -0.9962 # +/- 999999
delta_h    1.43 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  8.235528E+02  1.305774E-01  -4.660641E+04  -2.988110E+02  2.864360E+06
lInl_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1986SEW/RUA][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -40.920 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -51.400 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -17.000 +/- 999999 cal/mol/K

```

```

# CpPrTr = 8.100 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -6.630 cm3/mol
# mole wt. = 94.1461 g/mol
# date: 1. Jun. 2016

1 Ni+2 + 1 F- = 1 NiF+
log_k 1.1200 # +/- 999999
delta_h 0.71 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.039893E+02 1.411350E-01 -5.107232E+04 -3.269766E+02 3.149241E+06
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -79.770 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -92.320 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -26.400 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 12.513 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -25.826 cm3/mol
# mole wt. = 77.6918 g/mol
# date: 1. Jun. 2016

+ 1 Ni+2 + 1 Formate- = + 1 NiFormate+
log_k 1.8714 # +/- 999999
delta_h -2.994 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.517081E+2 1.322832E-1 -4.817112E+4 -3.081204E+2 3.085505E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -97.313 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -117.624 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = -10.582 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 21.300 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 2.800 cm3/mol
# mole wt. = 103.7111 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

+ 1 Ni+2 + 2 Formate- = + 1 NiFormate2
log_k 3.1028 # +/- 999999
delta_h -7.030 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.682441E+3 2.606381E-1 -9.469577E+4 -6.092089E+2 6.045188E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -182.853 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -223.390 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 3.217 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 44.400 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 38.200 cm3/mol
# mole wt. = 148.7288 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

+ 1 Ni+2 + 2 H2O - 2 H+ = + 1 Ni(OH)2
log_k -21.1602 # +/- 0.4
delta_h 29.78 kcal/mol # +/- 4.2
analytical_expression 2.749881E+2 4.051989E-2 -1.903008E+4 -1.008556E+2 4.583602E+5
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as NiO(aq)
# data source: [1980TRE/LEB][1997SHO/SAS_b][2011PAL/BEN][2016BRO/EKB]
# delfG0 = -38.72 + 1 H2O = -95.41 +/- 2.1 kcal/mol
# delfH0 = -51.44 + 1 H2O = -119.76 +/- 3.7 kcal/mol *
# SOPrTr = -11 + 1 H2O = 6 +/- 10 cal/mol/K
# CpPrTr = -40 + 1 H2O = -22 +/- 15 cal/mol/K
# mole vol. = 3.140 + 1 H2O = 21.208 cm3/mol
# mole wt. = 74.6928 + 1 H2O = 92.7080 g/mol
# date: 11. Apr. 2019

1 Ni+2 + 3 H2O - 3 H+ = 1 Ni(OH)3-
log_k -31.0028 # +/- 999999
delta_h 30.76 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.266576E+02 -3.868023E-02 3.005095E+03 8.143345E+01 -3.901963E+05
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HNiO2-
# data source: [1980TRE/LEB][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -81.980 + 1 H2O = -138.668 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -118.760 + 1 H2O = -187.077 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -36.000 + 1 H2O = -19.288 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 48.000 + 1 H2O = 66.012 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -24.200 + 1 H2O = -6.132 cm3/mol
# mole wt. = 91.7001 + 1 H2O = 109.7154 g/mol
# date: 1. Jun. 2016

1 Ni+2 + 4 H2O - 4 H+ = 1 Ni(OH)4-2
log_k -44.0357 # +/- 999999
delta_h 47.68 kcal/mol # +/- 2.6
analytical_expression -9.879253E+02 -1.584462E-01 4.331560E+04 3.565171E+02 -3.228785E+06
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as NiO2-
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -64.200 + 2 H2O = -177.576 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -101.850 + 2 H2O = -238.484 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -38.900 + 2 H2O = -5.476 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -17.500 + 2 H2O = 18.524 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -25.801 + 2 H2O = 10.335 cm3/mol
# mole wt. = 90.6922 + 2 H2O = 126.7228 g/mol
# date: 1. Jun. 2016

1 Ni+2 + 1 H2O - 1 H+ = 1 NiOH+
log_k -10.8028 # +/- 999999
delta_h 13.56 kcal/mol # +/- 2.6
analytical_expression 2.252808E+02 3.395575E-02 -1.652549E+04 -8.121268E+01 9.044937E+05
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C

```

```

# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1964PER][1980TRE/LEB][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -52.850 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -67.660 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -18.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 31.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -20.100 cm3/mol
# mole wt. = 75.7007 g/mol
# date: 1. Jun. 2016

+ 1 Cyanide- + 0.5 O2 = + 1 OCyanide-
log_k      48.7281 # +/- 2.1
delta_h    -70.4 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression  -1.225253E+2   -2.044575E-2   2.297187E+4   4.313110E+1   -5.710035E+5
lInI_gamma 3.0
-Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -23.3 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -35.8 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 22.5 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -17.650 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 26.120 cm3/mol
# mole wt. = 42.0171 g/mol
# date: 7. Oct. 2019

1 H2O - 1 H+ = 1 OH-
log_k      -13.9951 # +/- 0.022
delta_h     13.340 kcal/mol # +/- 0.027
analytical_expression  -6.753940E+2   -1.079632E-1   3.495635E+4   2.437072E+2   -2.372756E+6
lInI_gamma 3.5
-Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -37.595 +/- 0.019 kcal/mol *
# delfH0 = -54.977 +/- 0.011 kcal/mol
# SOPrTr = -2.560 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = -32.763 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -4.180 cm3/mol
# mole wt. = 17.0073 g/mol
# date: 29. Apr. 1997

+ 1 Pb+2 + 1 HCO3- - 1 H+ = + 1 PbCO3
log_k      -3.4158 # +/- 0.27
delta_h     1.88 kcal/mol # +/- 1.0
analytical_expression  9.181408E+2   1.413079E-1   -5.146261E+4   -3.335527E+2   3.046236E+6
gamma      3.0   0.041
-Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Pb+2 + CO3-2 = PbCO3(aq)
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1980SIP/VAL][1982BIL/SCH][1997SVE/SHO_a][2009POW/BRO][2011EAS/BYR][2013W00/MIL]
# delfG0 = -141.358 +/- 0.37 kcal/mol
# delfH0 = -162.80 +/- 1.0 kcal/mol *
# SOPrTr = 18.5 +/- 3 cal/mol/K
# CpPrTr = -34.285 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -12.307 cm3/mol
# mole wt. = 267.2092 g/mol
# date: 15. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 2 HCO3- - 2 H+ = + 1 Pb(CO3)2-2
log_k      -10.3347 # +/- 0.18
delta_h     13.550 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  3.754088E+2   5.380524E-2   -2.266488E+4   -1.362854E+2   1.018775E+6
lInI_gamma 4.0
-Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Pb+2 + 2 CO3-2 = Pb(CO3)2-2
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1969BAR][1980SCH][1982BIL/SCH][1987FER/GRE][1997SVE/SHO_a][2011EAS/BYR]
# delfG0 = -272.201 +/- 0.26 kcal/mol
# delfH0 = -316.026 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 49.569 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -52.121 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -11.025 cm3/mol
# mole wt. = 327.2184 g/mol
# date: 15. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 1 HCO3- + 1 Cl- - 1 H+ = + 1 Pb(CO3)Cl-
log_k      -3.7361 # +/- 0.4
delta_h     0.713 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.101309E+3   1.696356E-1   -5.972000E+4   -4.014386E+2   3.378509E+6
lInI_gamma 4.0
-Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Pb+2 + CO3-2 + Cl- = Pb(CO3)Cl-
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2009POW/BRO][Unpublished]
# delfG0 = -172.30 +/- 0.6 kcal/mol
# delfH0 = -203.898 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 26.700 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -42.478 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 21.171 cm3/mol
# mole wt. = 302.6619 g/mol
# date: 15. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 1 HCO3- + 1 H2O - 2 H+ = + 1 Pb(CO3)OH-
log_k      -12.1208 # +/- 0.4
delta_h     9.680 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  4.571599E+2   6.550206E-2   -2.539143E+4   -1.680939E+2   1.092274E+6
lInI_gamma 4.0
-Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Pb+2 + CO3-2 + OH- = Pb(CO3)OH-
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1987FER/GRE][1997SVE/SHO_a][2009POW/BRO][Unpublished]
# delfG0 = -186.17 +/- 0.6 kcal/mol
# delfH0 = -223.315 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 21.570 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -73.884 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -14.657 cm3/mol
# mole wt. = 284.2165 g/mol
# date: 15. Oct. 2019

```

```

+ 1 Pb+2 + 1 HS- = + 1 PbHS+
log_k      4.2690 # +/- 3
delta_h    -3.0 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  9.390517E+2    1.464567E-1    -5.217085E+4    -3.395350E+2    3.261131E+6
lInI_gamma  4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a] [Unpublished]
# delfG0 = -8.7 +/- 4 kcal/mol
# delfH0 = -6.6 +/- 4 kcal/mol *
# SOPrTr = 30.22 +/- 1.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 16 +/- 15 cal/mol/K
# mole vol. = 13.294 cm3/mol
# mole wt. = 240.2739 g/mol
# date: 15. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 2 HS- = + 1 Pb (HS)2
log_k      14.7100 # +/- 999999
delta_h    -14.465 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.656426E+3    2.557834E-1    -8.958750E+4    -5.986106E+2    5.663784E+6
gamma      3.0    0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1953HEM] [1997SVE/SHO_a]
# delfG0 = -20.084 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -21.945 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 55.800 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 36.477 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 42.342 cm3/mol
# mole wt. = 273.3478 g/mol
# date: 15. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 3 HS- = + 1 Pb (HS)3-
log_k      16.0103 # +/- 999999
delta_h    -17.704 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  2.046658E+3    3.158480E-1    -1.112256E+5    -7.400400E+2    7.058580E+6
lInI_gamma  3.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1953HEM] [1997SVE/SHO_a]
# delfG0 = -18.998 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -29.034 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 67.277 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 52.823 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 78.901 cm3/mol
# mole wt. = 306.4217 g/mol
# date: 15. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 1 Cl- = + 1 PbCl+
log_k      1.5100 # +/- 0.14
delta_h    0.50 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression  8.310426E+2    1.331885E-1    -4.638802E+4    -3.013617E+2    2.848270E+6
lInI_gamma  4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1931FRO/LIH] [1955BIG/PAR] [1955KIV] [1955NAN] [1957KIV/LUO] [1963MIR/KUL] [1969HEL]
# [1971BON/HEF] [1971NRI/AND] [1971VIE] [1973BON/HEF] [1973HUT/HIG] [1976YUR/KOL]
# [1980LOV/BRA] [1980PRA/PRA] [1982BEN/MEU] [1984MIL/BYR] [1990HEF] [1991MGA/FUE]
# [1999LOT/OCH] [2007LUO/MIL] [2009POW/BRO]
# delfG0 = -39.175 +/- 0.21 kcal/mol
# delfH0 = -39.21 +/- 0.5 kcal/mol *
# SOPrTr = 26.40 +/- 1.6 cal/mol/K
# CpPrTr = 8.321 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 9.348 cm3/mol
# mole wt. = 242.6527 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 2 Cl- = + 1 PbCl2
log_k      2.1001 # +/- 0.16
delta_h    1.22 kcal/mol # +/- 1.8
analytical_expression  1.588911E+3    2.490428E-1    -8.923651E+4    -5.751779E+2    5.464104E+6
gamma      3.0    0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1955KIV] [1957KIV/LUO] [1963MIR/KUL] [1971BON/HEF] [1971NRI/AND] [1971VIE] [1972VIE]
# [1973BON/HEF] [1976YUR/KOL] [1980LOV/BRA] [1982BEN/MEU] [1984MIL/BYR] [1984SEW] [1990HEF]
# [1999LOT/OCH] [2007LUO/MIL] [2009POW/BRO]
# delfG0 = -71.359 +/- 0.22 kcal/mol
# delfH0 = -78.43 +/- 1.8 kcal/mol *
# SOPrTr = 45.1 +/- 6 cal/mol/K
# CpPrTr = 9.959 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 39.827 cm3/mol
# mole wt. = 278.1054 g/mol
# date: 15. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 3 Cl- = + 1 PbCl3-
log_k      1.9498 # +/- 0.22
delta_h    0.92 kcal/mol # +/- 3.0
analytical_expression  1.842222E+3    2.894351E-1    -1.032331E+5    -6.673723E+2    6.313645E+6
lInI_gamma  4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1955KIV] [1955PAP/RIC] [1957KIV/LUO] [1963MIR/KUL] [1969HEL] [1971VIE] [1973BON/HEF]
# [1980LOV/BRA] [1982BEN/MEU] [1984MIL/BYR] [1984SEW] [1990HEF] [1991MGA/FUR] [1999LOT/OCH]
# [2007LUO/MIL] [2009POW/BRO]
# delfG0 = -102.533 +/- 0.32 kcal/mol
# delfH0 = -118.66 +/- 3.0 kcal/mol *
# SOPrTr = 57 +/- 10 cal/mol/K
# CpPrTr = -8.878 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 70.225 cm3/mol
# mole wt. = 313.5581 g/mol
# date: 15. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 4 Cl- = + 1 PbCl4-2
log_k      1.2446 # +/- 1.4
delta_h    1.7 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  1.079165E+3    1.908438E-1    -5.689216E+4    -3.964735E+2    3.293603E+6

```

```

lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1963MR/KUL][1969HEL][1972FED/SHI][1984SEW][1991MGA/FUR][1999LOT/OCH]
# delfG0 = -132.95 +/- 1.9 kcal/mol
# delfH0 = -157.8 +/- 4 kcal/mol *
# SOPrTr = 70 +/- 10 cal/mol/K
# CpPrTr = -47.098 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 100.619 cm3/mol
# mole wt. = 349.0108 g/mol
# date: 15. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 1 Cl- + 1 F- = + 1 PbClF
log_k 3.7640 # +/- 0.5
delta_h -2.5 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression 1.677296E+3 2.623122E-1 -9.347842E+4 -6.074767E+2 5.772779E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971BON][1972HEF][1997SVE/SHO_a][1999LOT/OCH] [Unpublished]
# delfG0 = -109.59 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -122.4 +/- 2 kcal/mol *
# SOPrTr = 23.3 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 7.0 +/- 7 cal/mol/K
# mole vol. = 17.756 cm3/mol
# mole wt. = 261.6511 g/mol
# date: 15. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 1 F- = + 1 PbF+
log_k 2.1602 # +/- 0.05
delta_h -0.9 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression 9.027920E+2 1.412484E-1 -5.065164E+4 -3.266484E+2 3.147493E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1963MES/HUM][1965BOT/CIA][1971BON][1972HEF][1973BON/HEF][1997SVE/SHO_a][1999LOT/OCH]
# delfG0 = -76.023 +/- 0.19 kcal/mol
# delfH0 = -80.8 +/- 1 kcal/mol *
# SOPrTr = 8.0 +/- 4 cal/mol/K
# CpPrTr = 12 +/- 33 cal/mol/K
# mole vol. = -7.762 cm3/mol
# mole wt. = 226.1984 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 2 F- = + 1 PbF2
log_k 3.6870 # +/- 0.05
delta_h -4.117 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.657197E+3 2.569652E-1 -9.111274E+4 -6.008325E+2 5.527490E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1963MES/HUM][1965BOT/CIA][1971BON][1973BON/HEF][1999LOT/OCH]
# delfG0 = -145.446 +/- 0.34 kcal/mol
# delfH0 = -164.197 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 1.065 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 11.902 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -4.850 cm3/mol
# mole wt. = 245.1968 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 1 Formate- = + 1 PbFormate+
log_k 1.8721 # +/- 999999
delta_h 0.788 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.029610E+3 1.576544E-1 -5.725958E+4 -3.722535E+2 3.415147E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -92.150 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -100.722 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 37.138 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 19.100 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 17.700 cm3/mol
# mole wt. = 252.2177 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 2 Formate- = + 1 PbFormate2
log_k 3.1241 # +/- 999999
delta_h 1.115 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.572174E+3 2.388420E-1 -8.825402E+4 -5.675142E+2 5.334760E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -177.718 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -202.125 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 65.665 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 40.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 54.900 cm3/mol
# mole wt. = 297.2354 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 1 HPO4-2 + 1 H+ = + 1 PbH2PO4+
log_k 1.4982 # +/- 0.5
delta_h 9.5 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression 1.784965E+3 2.753925E-1 -1.008674E+5 -6.442339E+2 5.941709E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1972NRI_a][1997SVE/SHO_a]
# delfG0 = -268.09 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -299.1 +/- 2 kcal/mol *
# SOPrTr = 35.1 +/- 6 cal/mol/K
# CpPrTr = 48 +/- 25 cal/mol/K
# mole vol. = 23.500 cm3/mol
# mole wt. = 304.1872 g/mol

```

```

# date: 16. Oct. 2019
+ 1 Pb+2 + 1 HCO3- = + 1 PbHCO3+
log_k 3.0141 # +/- 0.2
delta_h -1.3 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression 8.580882E+2 1.353177E-1 -4.855389E+4 -3.100989E+2 3.088908E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1992NEH] [1997SVE/SHO_a] [2009POW/BRO] [2017HUM]
# delfG0 = -150.13 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -166.0 +/- 2 kcal/mol *
# SOPrTr = 37.2 +/- 6 cal/mol/K
# CpPrTr = 45 +/- 25 cal/mol/K
# mole vol. = 17.079 cm3/mol
# mole wt. = 268.2171 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 1 HPO4-2 = + 1 PbHPO4
log_k 3.6020 # +/- 1.3
delta_h 1.58 kcal/mol # +/- 2.3
analytical_expression 1.675106E+3 2.587518E-1 -9.244340E+4 -6.062115E+2 5.460449E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1972NRI_a] [1974RAM/MAN] [1997SVE/SHO_a] [2009POW/BRO]
# delfG0 = -270.96 +/- 1.8 kcal/mol
# delfH0 = -307.02 +/- 2.3 kcal/mol *
# SOPrTr = 18.03 +/- 4.7 cal/mol/K
# CpPrTr = -27 +/- 34 cal/mol/K
# mole vol. = -2.086 cm3/mol
# mole wt. = 303.1793 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 1 NO3- = + 1 PbNO3+
log_k 1.0805 # +/- 0.3
delta_h 1.64 kcal/mol # +/- 2.5
analytical_expression 9.959513E+2 1.535277E-1 -5.702176E+4 -3.593899E+2 3.545914E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1953HER/SMI] [1955BIG/PAR] [1956BAL/DAV] [1965HUG_a] [1965HUG_b]
# [1972FED/ROB] [1973HUT/HIG] [1997SVE/SHO_a] [1999LOT/OCH]
# delfG0 = -33.72 +/- 0.8 kcal/mol
# delfH0 = -47.59 +/- 2.5 kcal/mol *
# SOPrTr = 49.8 +/- 8 cal/mol/K
# CpPrTr = 32 +/- 27 cal/mol/K
# mole vol. = 21.297 cm3/mol
# mole wt. = 269.2049 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 2 NO3- = + 1 Pb(NO3)2
log_k 1.4836 # +/- 0.2
delta_h 7.520 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.528589E+3 2.315903E-1 -8.819324E+4 -5.498920E+2 5.361372E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1972FED/ROB] [1997SVE/SHO_a] [1999LOT/OCH]
# delfG0 = -60.78 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -91.160 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 106.482 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 61.858 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 60.142 cm3/mol
# mole wt. = 331.2098 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 3 NO3- = + 1 Pb(NO3)3-
log_k 0.7433 # +/- 0.5
delta_h 17.048 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.718907E+3 2.577445E-1 -1.014202E+5 -6.156760E+2 6.097921E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1972FED/ROB] [1997SVE/SHO_a] [1999LOT/OCH]
# delfG0 = -86.28 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -131.082 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 170.172 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 81.061 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 99.698 cm3/mol
# mole wt. = 393.2147 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 1 H2O - 1 H+ = + 1 PbOH+
log_k -7.4721 # +/- 0.10
delta_h 13.16 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression 2.736493E+2 4.038530E-2 -1.768397E+4 -9.834598E+1 8.444823E+5
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1910WOO] [1937CRA/BRO] [1945PED] [1960OL1] [1964HUG] [1975TUG/GAN] [1978LIN] [1980SYL/BRO]
# [1993CRU/VAN] [1997SHO/SAS_b] [2000KAN/A1Z] [2009POW/BRO] [2016BRO/EKB]
# delfG0 = -52.230 +/- 0.16 kcal/mol
# delfH0 = -54.94 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 30.91 +/- 1.4 cal/mol/K *
# CpPrTr = 5.300 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 9.791 cm3/mol
# mole wt. = 224.2073 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 2 H2O - 2 H+ = + 1 Pb(OH)2
log_k -16.9748 # +/- 0.12
delta_h 21.386 kcal/mol # +/- 0.27
analytical_expression 2.933985E+2 4.379877E-2 -2.073862E+4 -1.067671E+2 9.167577E+5
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown

```

```

# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as Pb0(aq)
# data source: [1939GAR/VEL][1960CAR/OLI][1975TUG/GAN][1978LIN][1980SYL/BRO][1993CRU/VAN]
# [1997SHO/SAS_b][2000KAN/AIZ][2005ZIE/PAL][2009POW/BRO][2016BRO/EKB]
#
# delfG0 = -39.266 + 1 H2O = -95.954 +/- 0.19 kcal/mol
# delfH0 = -46.711 + 1 H2O = -115.028 +/- 0.26 kcal/mol
# SOPrTr = 15.03 + 1 H2O = 31.74 +/- 1.1 cal/mol/K *
# CpPrTr = 5.813 + 1 H2O = 23.825 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 7.297 + 1 H2O = 25.365 cm3/mol
# mole wt. = 223.1994 + 1 H2O = 241.2146 g/mol
#
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 3 H2O - 3 H+ = + 1 Pb(OH)3-
log_k -28.0085 # +/- 0.07
delta_h 32.36 kcal/mol # +/- 0.7
analytical_expression -3.202680E+2 -5.505501E-2 1.199958E+4 1.146670E+2 -1.360606E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HPb02-
# data source: [1921GLA][1923HEY][1928RAN/SPE][1929TOP][1939GAR/VEL][1955VLC][1960CAR/OLI]
# [1961NYM/ROE][1975TUG/GAN][1978LIN][1987FER/GRE][1997SHO/SAS_b][2005ZIE/PAL]
# [2009POW/BRO][2016BRO/EKB]
#
# delfG0 = -80.901 + 1 H2O = -137.589 +/- 0.14 kcal/mol
# delfH0 = -104.05 + 1 H2O = -172.37 +/- 0.7 kcal/mol
# SOPrTr = 18.11 + 1 H2O = 34.82 +/- 2.4 cal/mol/K *
# CpPrTr = -33.786 + 1 H2O = -15.774 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 4.947 + 1 H2O = 23.015 cm3/mol
# mole wt. = 240.2067 + 1 H2O = 258.2219 g/mol
#
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 4 H2O - 4 H+ = + 1 Pb(OH)4-2
log_k -38.8504 # +/- 0.6
delta_h 47.272 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.124932E+3 -1.837737E-1 5.730072E+4 4.047965E+2 -4.707026E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as Pb02-2
# data source: [2001PER/HEF][1997SHO/SAS_b]
#
# delfG0 = -66.11 + 2 H2O = -179.49 +/- 0.8 kcal/mol
# delfH0 = -89.142 + 2 H2O = -225.776 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 18.504 + 2 H2O = 51.928 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -148.391 + 2 H2O = -112.368 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 16.326 + 2 H2O = 52.462 cm3/mol
# mole wt. = 239.1988 + 2 H2O = 275.2292 g/mol
#
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 1 SO4-2 = + 1 PbSO4
log_k 2.6000 # +/- 0.21
delta_h 0.1 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression 1.674533E+3 2.566683E-1 -9.264309E+4 -6.061012E+2 5.512828E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1970GAR/NAN][1972BON/HEF][1982ROH][1985G10][1989NYH/WIK]
#
# delfG0 = -187.213 +/- 0.31 kcal/mol
# delfH0 = -217.1 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 21 +/- 10 cal/mol/K
# CpPrTr = -32.038 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 9.300 cm3/mol
# mole wt. = 303.2636 g/mol
#
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 2 SO4-2 = + 1 Pb(SO4)2-2
log_k 3.4994 # +/- 0.4
delta_h 5.6 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression 1.860781E+3 2.821666E-1 -1.066638E+5 -6.697128E+2 6.533282E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960VAN/KOL][1985G10][1997SVE/SHO_a]
#
# delfG0 = -366.37 +/- 0.6 kcal/mol
# delfH0 = -429.0 +/- 4 kcal/mol *
# SOPrTr = 48 +/- 15 cal/mol/K
# CpPrTr = -40.961 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 26.775 cm3/mol
# mole wt. = 399.3272 g/mol
#
# date: 16. Oct. 2019

1 HPO4-2 - 1 H+ = 1 PO4-3
log_k -12.5417 # +/- 1.5
delta_h 3.5 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -7.676910E+2 -1.226271E-1 4.270610E+4 2.748068E+2 -2.801542E+6
lInI_gamma 4
# -Range: 0 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1989WAG/EVA][1997SHO/SAS]
#
# delfG0 = -243.2 +/- 2 kcal/mol *
# delfH0 = -305.3 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = -53.7 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -130 +/- 50 cal/mol/K
# mole vol. = -30.286 cm3/mol
# mole wt. = 94.9714 g/mol
#
# date: 27. Feb. 2019

1 Rb+ + 1 Br- = 1 RbBr
log_k -1.2168 # +/- 999999
delta_h 14.21 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 6.769650E+02 1.039530E-01 -3.796707E+04 -2.451296E+02 2.197416E+06
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1988OEL/HEL][1997SVE/SHO]
#
# delfG0 = -91.010 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -85.740 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 54.200 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -19.190 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 49.001 cm3/mol
# mole wt. = 165.3718 g/mol

```

```

# date: 31. May. 2016
1 Rb+ + 1 Cl- = 1 RbCl
log_k -0.9595 # +/- 999999
delta_h 3.15 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 6.773334E+02 1.049225E-01 -3.768341E+04 -2.455317E+02 2.165701E+06
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1988OEL/HEL][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -97.870 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -96.800 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 48.600 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -20.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 41.601 cm3/mol
# mole wt. = 120.9205 g/mol
# date: 13. Sep. 1997

1 Rb+ + 1 F- = 1 RbF
log_k 0.9602 # +/- 999999
delta_h -39.78 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 7.504824E+02 1.153748E-01 -4.122052E+04 -2.718959E+02 2.410591E+06
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1988OEL/HEL][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -136.450 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -139.730 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 31.600 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -16.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 19.000 cm3/mol
# mole wt. = 104.4662 g/mol
# date: 31. May. 2016

1 Rb+ + 1 I- = 1 RbI
log_k -0.9602 # +/- 999999
delta_h 28.17 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 6.262538E+02 9.738965E-02 -3.478064E+04 -2.272817E+02 2.026188E+06
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1988OEL/HEL][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -78.900 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -71.720 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 56.300 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -17.020 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 64.001 cm3/mol
# mole wt. = 212.3723 g/mol
# date: 31. May. 2016

1 Rb+ + 1 H2O - 1 H+ = 1 RbOH
log_k -14.2113 # +/- 999999
delta_h 15.34 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.224908E+02 1.284575E-02 -9.134381E+03 -4.514091E+01 1.600622E+05
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1985BAR/PAR][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -105.100 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -113.000 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 32.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -27.500 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 20.700 cm3/mol
# mole wt. = 102.4751 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

2 HS- + 0.5 O2 - 1 H2O = 1 S2-2
log_k 33.2673 # +/- 1.5
delta_h -52.0 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -1.945080E+2 -2.885857E-2 2.319281E+4 6.789461E+1 -8.365385E+5
lInl_gamma 4
# -mass_balance S(-2)2
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = 19.0 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = 7.2 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 6.8 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -65.100 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 20.201 cm3/mol
# mole wt. = 64.1320 g/mol
# date: 3. Jul. 1987

2 S03-2 + 2 H+ - 1 H2O = 1 S205-2
log_k 9.5934 # +/- 3
delta_h 3.48 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.377777E+3 2.212945E-1 -7.757843E+4 -4.962779E+2 4.803875E+6
lInl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1952LAT][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -189.0 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -232.000 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 25.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -48.300 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 33.901 cm3/mol
# mole wt. = 144.1290 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

3 HS- + 1 O2 + 1 H+ - 2 H2O = 1 S3-2
log_k 79.3915 # +/- 1.5
delta_h -116.0 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression 3.629787E+2 5.935079E-2 6.461696E+3 -1.350393E+2 9.945068E+5
lInl_gamma 4
# -mass_balance S(-2)3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]

```

```

# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = 17.6 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = 6.2 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 15.8 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -57.900 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 29.200 cm3/mol
# mole wt. = 96.1980 g/mol
# date: 3. Jul. 1987

3 S03-2 - 2 H2O - 0.5 O2 + 4 H+ = 1 S306-2
log_k -6.2317 # +/- 4
delta_h 38.6 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 3.043631E+03 4.797069E-01 -1.805081E+05 -1.095134E+03 1.087729E+07
lInI_gamma 4
-mass_balance S(+4)3
-Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1952LAT][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -229.0 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -279.000 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 33.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -43.500 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 41.901 cm3/mol
# mole wt. = 192.1944 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

4 HS- + 1.5 O2 + 2 H+ - 3 H2O = 1 S4-2
log_k 125.2959 # +/- 1.6
delta_h -179.7 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression 8.266005E+2 1.364294E-1 -4.407730E+3 -3.049451E+2 2.432668E+6
lInI_gamma 4
-mass_balance S(-2)4
-Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = 16.5 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = 5.5 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 24.7 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -50.700 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 38.101 cm3/mol
# mole wt. = 128.2640 g/mol
# date: 3. Jul. 1987

6 H+ + 4 S03-2 - 3 H2O - 1.5 O2 = 1 S406-2
log_k -38.3860 # +/- 6
delta_h 105.7 kcal/mol # +/- 8
analytical_expression 4.489279E+3 7.229966E-1 -2.753440E+5 -1.616362E+3 1.598792E+7
lInI_gamma 4
-mass_balance S(+4)4
-Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -248.7 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -292.6 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 61.5 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -26.400 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 56.501 cm3/mol
# mole wt. = 224.2604 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

2 O2 + 3 H+ + 5 HS- - 4 H2O = 1 S5-2
log_k 170.9803 # +/- 2
delta_h -243.1 kcal/mol # +/- 8
analytical_expression 1.350508E+3 2.208629E-1 -1.908114E+4 -4.961424E+2 4.114681E+6
lInI_gamma 4
-mass_balance S(-2)5
-Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = 15.7 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = 5.1 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 33.6 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -43.600 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 47.001 cm3/mol
# mole wt. = 160.3300 g/mol
# date: 3. Jul. 1987

8 H+ + 5 S03-2 - 4 H2O - 2.5 O2 = 1 S506-2
log_k -99.4208 # +/- 7
delta_h 198.0 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression 5.915925E+3 9.541592E-1 -3.762404E+5 -2.132142E+3 2.114968E+7
lInI_gamma 4
-mass_balance S(+4)5
-Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1952LAT][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -229.0 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -281.0 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 40.0 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = -39.300 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 45.501 cm3/mol
# mole wt. = 256.3264 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 1 Cyanide- + 1 S203-2 - 1 S03-2 = + 1 SCyanide-
log_k 7.6233 # +/- 2.9
delta_h -14.6 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression 1.795978E+1 2.302271E-3 1.823950E+3 -7.222064E+0 6.486340E+4
lInI_gamma 3.5
-Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfG0 = 22.2 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = 18.3 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 34.5 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -9.6 +/- 2 cal/mol/K

```

```

# mole vol. = 35.700 cm3/mol
# mole wt. = 58.0837 g/mol
# date: 7. Oct. 2019

1 Si(OH)4 + 4 H+ + 6 F- - 4 H2O = 1 SiF6-2
log_k      26.0250 # +/- 2
delta_h    -14.2 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression  3.274351E+3    5.004669E-1    -1.808950E+5    -1.179244E+3    1.130126E+7
lInI_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -525.7 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -571.0 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 29.2 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -47.100 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 42.601 cm3/mol
# mole wt. = 142.0759 g/mol
# date: 16. Feb. 1988

+ 1 Si(OH)4 - 1 H+ + 1 SiO(OH)3-
log_k      -9.8096 # +/- 0.15
delta_h    6.6 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  -3.543518E+2    -6.784033E-2    1.616692E+4    1.301082E+2    -1.012885E+6
lInI_gamma  4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HSiO3-
# data source: [1934FLI/WEL][1940ROL/ERV][1957GRE/PR1][1958GRE][1958SCH/MUL][1959ING][1959LAG]
# [1965AVE][1967BIL/ING][1974SAN/SCH][1977BUS/MES][1981SJO/NOR][1983SJO/HAG]
# delfG0 = -242.836 + 1 H2O = -299.524 +/- 0.47 kcal/mol
# delfH0 = -274.2 + 1 H2O = -342.5 +/- 1 kcal/mol *
# SOPrTr = 4.0 + 1 H2O = 20.7 +/- 4 cal/mol/K
# CpPrTr = -8 + 1 H2O = 10 +/- 10 cal/mol/K
# mole vol. = 4.000 + 1 H2O = 22.068 cm3/mol
# mole wt. = 77.0916 + 1 H2O = 95.1068 g/mol
# date: 23. Oct. 2019

+ 1 Si(OH)4 - 2 H+ + 1 SiO2(OH)2-2
log_k      -23.1701 # +/- 0.16
delta_h    16.8 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression  -1.116756E+3    -1.884414E-1    5.723793E+4    4.042408E+2    -3.775023E+6
lInI_gamma  4.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as SiO3-2
# data source: [1959ING][1959LAG][1965AVE][1977BUS/MES][1981SJO/NOR][1983SJO/HAG]
# delfG0 = -224.609 + 1 H2O = -281.297 +/- 0.47 kcal/mol
# delfH0 = -264.0 + 1 H2O = -332.3 +/- 6 kcal/mol *
# SOPrTr = -23 + 1 H2O = -6 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = -70 + 1 H2O = -52 +/- 20 cal/mol/K
# mole vol. = -9.600 + 1 H2O = 8.468 cm3/mol
# mole wt. = 76.0837 + 1 H2O = 94.0989 g/mol
# date: 10. Dec. 2019

1 Sn+2 + 2 H2O - 2 H+ = 1 Sn(OH)2
log_k      -7.0792 # +/- 0.4
delta_h    10.32 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  2.797524E+2    4.050818E-2    -1.583216E+4    -1.020319E+2    5.921607E+5
gamma      4    0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as SnO(aq)
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS_b]
# delfG0 = -53.60 + 1 H2O = -110.29 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -60.15 + 1 H2O = -128.47 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 14.800 + 1 H2O = 31.512 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -32.400 + 1 H2O = -14.388 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 7.300 + 1 H2O = 25.368 cm3/mol
# mole wt. = 134.7094 + 1 H2O = 152.7246 g/mol
# date: 20. Jul. 2018

1 Sn+4 + 2 H2O - 2 H+ = 1 Sn(OH)2+2
log_k      1.8342 # +/- 0.6
delta_h    15.32 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  2.834625E+2    4.272407E-2    -1.447047E+4    -1.006268E+2    2.809489E+5
lInI_gamma  4.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Sn(OH)4(aq) + 2 H+ - 2 H2O = Sn(OH)2+2
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as SnO+2
# data source: [1984HOU/KEL][1987BRO/WAN][1997SHO/SAS_b]
# delfG0 = -58.60 + 1 H2O = -115.29 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -59.800 + 1 H2O = -128.117 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 1.500 + 1 H2O = 18.212 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -62.510 + 1 H2O = -44.498 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 5.140 + 1 H2O = 23.208 cm3/mol
# mole wt. = 134.7094 + 1 H2O = 152.7246 g/mol
# date: 03. Jul. 2018

1 Sn+2 + 3 H2O - 3 H+ = 1 Sn(OH)3-
log_k      -16.5992 # +/- 0.1
delta_h    -51.68 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -3.642810E+2    -6.251281E-2    1.810719E+4    1.305521E+2    -1.551377E+6
lInI_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HSnO2-
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS_b]
# delfG0 = -97.30 + 1 H2O = -153.99 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -122.080 + 1 H2O = -190.397 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 9.400 + 1 H2O = 26.112 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -45.400 + 1 H2O = -27.388 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 14.100 + 1 H2O = 32.168 cm3/mol
# mole wt. = 151.7167 + 1 H2O = 169.7319 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

1 Sn+4 + 3 H2O - 3 H+ = 1 Sn(OH)3+
log_k      0.8683 # +/- 0.7
delta_h    18.93 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  4.880643E+2    7.109493E-2    -2.459873E+4    -1.749079E+2    6.139290E+5
lInI_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C

```

```

# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Sn(OH)4(aq) + 1 H+ - H2O = Sn(OH)3+
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HSnO2+
# data source: [1973KIL/BAR][1982WAG/EVA][1984HOU/KEL][1985JAC/HEL_a][1987BRO/WAN][1988PHI/HAL]
# [1997SHO/SAS_b]
# delfG0 = -113.97 + 1 H2O = -170.66 +/- 0.8 kcal/mol
# delfH0 = -124.490 + 1 H2O = -192.807 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 26.000 + 1 H2O = 42.712 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -83.280 + 1 H2O = -65.268 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 18.200 + 1 H2O = 36.268 cm3/mol
# mole wt. = 151.7167 + 1 H2O = 169.7319 g/mol
# date: 03. Jul. 2018

1 Sn+4 + 4 H2O - 4 H+ = 1 Sn(OH)4
log_k 0.1133 # +/- 0.6
delta_h 16.4 kcal/mol # +/- 15
analytical_expression 5.199367E+2 8.341521E-2 -2.645361E+4 -1.882685E+2 8.788599E+5
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Sn+4 + 4 H2O - 4 H+ = Sn(OH)4(aq)
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HSnO2(aq)
# data source: [1952LAT][1963FEI/SCH][1973KIL/BAR][1984HOU/KEL][1985GAL][1985JAC/HEL_a]
# [1987BRO/WAN][1988PHI/HAL][1995SOR/DAD][2011RAI/YUI]
# delfG0 = -112.94 + 2 H2O = -226.32 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -127.0 + 2 H2O = -263.6 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 14 + 2 H2O = 47 +/- 10 cal/mol/K
# CpPrTr = -49.784 + 2 H2O = -13.760 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 15.257 + 2 H2O = 51.393 cm3/mol
# mole wt. = 150.7088 + 2 H2O = 186.7392 g/mol
# date: 03. Jul. 2018

1 Sn+4 + 5 H2O - 5 H+ = 1 Sn(OH)5-
log_k -8.0434 # +/- 0.2
delta_h 18.65 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.020627E+1 -6.448813E-3 -5.444488E+2 4.759092E+0 -5.211048E+5
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] Sn(OH)4 + 1 H2O - 1 H+ = Sn(OH)5-
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HSnO3-
# data source: [1997SHO/SAS_b][1998ODA/AMA]
# delfG0 = -158.5 + 2 H2O = -271.9 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -193.100 + 2 H2O = -329.734 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 1.000 + 2 H2O = 34.424 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -26.280 + 2 H2O = 9.744 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 19.650 + 2 H2O = 55.786 cm3/mol
# mole wt. = 167.7161 + 2 H2O = 203.7465 g/mol
# date: 05. Jul. 2018

1 Sn+4 + 6 H2O - 6 H+ = 1 Sn(OH)6-2
log_k -18.2102 # +/- 0.2
delta_h 12.85 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -7.202526E+2 -1.200355E-1 3.917434E+4 2.581180E+2 -2.866959E+6
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] Sn+4 + 6 H2O - 6 H+ = Sn(OH)6-2
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as SnO3-2
# data source: [1997SHO/SAS_b][1998ODA/AMA]
# delfG0 = -144.63 + 3 H2O = -314.69 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -198.930 + 3 H2O = -403.881 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = -65.100 + 3 H2O = -14.964 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -68.935 + 3 H2O = -14.899 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -18.595 + 3 H2O = 35.609 cm3/mol
# mole wt. = 166.7082 + 3 H2O = 220.7538 g/mol
# date: 05. Jul. 2018

+ 1 Sn+2 + 1 Br- = + 1 SnBr+
log_k 1.3289 # +/- 0.18
delta_h -5.09 kcal/mol # +/- 0.8
analytical_expression 8.363048E+2 1.307387E-1 -4.653579E+4 -3.029057E+2 2.812763E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2012GAM/GAJ]
# delfG0 = -33.250 +/- 0.44 kcal/mol
# delfH0 = -36.23 +/- 0.7 kcal/mol *
# SOPrTr = 23.01 +/- 2.0 cal/mol/K
# CpPrTr = 1 +/- 30 cal/mol/K
# mole vol. = 15.600 cm3/mol
# mole wt. = 198.6140 g/mol
# date: 10. Dec. 2019

+ 1 Sn+2 + 2 Br- = + 1 SnBr2
log_k 1.9688 # +/- 0.21
delta_h -9.81 kcal/mol # +/- 2.7
analytical_expression 1.592717E+3 2.475583E-1 -8.897190E+4 -5.765760E+2 5.382185E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2012GAM/GAJ]
# delfG0 = -58.990 +/- 0.47 kcal/mol
# delfH0 = -69.99 +/- 2.7 kcal/mol *
# SOPrTr = 48.1 +/- 9 cal/mol/K
# CpPrTr = -11 +/- 50 cal/mol/K
# mole vol. = 51.200 cm3/mol
# mole wt. = 278.5180 g/mol
# date: 10. Dec. 2019

+ 1 Sn+2 + 3 Br- = + 1 SnBr3-
log_k 1.9271 # +/- 0.27
delta_h -14.3 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression 1.900323E+3 2.939509E-1 -1.054705E+5 -6.881723E+2 6.270374E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2012GAM/GAJ]
# delfG0 = -83.800 +/- 0.53 kcal/mol
# delfH0 = -103.5 +/- 4 kcal/mol *
# SOPrTr = 71 +/- 13 cal/mol/K
# CpPrTr = -50 +/- 70 cal/mol/K
# mole vol. = 90.818 cm3/mol
# mole wt. = 358.4220 g/mol

```

```

# date: 10. Dec. 2019
+ 1 Sn+2 + 1 Cl- = + 1 SnCl+
log_k 1.4081 # +/- 0.4
delta_h 0.43 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression 8.584937E+2 1.354688E-1 -4.799512E+4 -3.109842E+2 2.934030E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1928PRY][1981PET/MIL][1985JAC/HEL_a][1997SVE/SHO_a][2001MUL/SEW][2012GAM/GAJ]
# delfG0 = -39.87 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -41.60 +/- 0.6 kcal/mol *
# SOPrTr = 17.46 +/- 1.3 cal/mol/K
# CpPrTr = -0.7 +/- 7 cal/mol/K
# mole vol. = 8.996 cm3/mol
# mole wt. = 154.1627 g/mol
# date: 10. Dec. 2019

+ 1 Sn+2 + 2 Cl- = + 1 SnCl2
log_k 2.3031 # +/- 0.17
delta_h -0.33 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression 1.603624E+3 2.511121E-1 -8.899329E+4 -5.812677E+2 5.386444E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1928PRY][1949RIC/POP][1964SIL/MAR][1975FED/BOL][1981PET/MIL][1985JAC/HEL_a]
# [1990WIL/EUG][1997SVE/SHO_a][2001MUL/SEW][2012GAM/GAJ]
# delfG0 = -72.470 +/- 0.23 kcal/mol
# delfH0 = -82.30 +/- 0.5 kcal/mol *
# SOPrTr = 32.57 +/- 1.6 cal/mol/K
# CpPrTr = -9.3 +/- 8 cal/mol/K
# mole vol. = 36.666 cm3/mol
# mole wt. = 189.6154 g/mol
# date: 10. Dec. 2019

+ 1 Sn+2 + 3 Cl- = + 1 SnCl3-
log_k 2.1426 # +/- 0.21
delta_h -1.47 kcal/mol # +/- 0.8
analytical_expression 1.714727E+3 2.693961E-1 -9.484812E+4 -6.221501E+2 5.749339E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1928PRY][1949RIC/POP][1975FED/BOL][1997SVE/SHO_a][2001MUL/SEW][2002UCH/SAK][2012MAR/GRE]
# delfG0 = -103.630 +/- 0.47 kcal/mol
# delfH0 = -123.37 +/- 0.8 kcal/mol *
# SOPrTr = 41.6 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = -34.0 +/- 8 cal/mol/K
# mole vol. = 66.590 cm3/mol
# mole wt. = 225.0681 g/mol
# date: 10. Dec. 2019

+ 1 Sn+2 + 4 Cl- = + 1 SnCl4-2
log_k 2.0333 # +/- 0.4
delta_h -4.54 kcal/mol # +/- 1.1
analytical_expression 1.634923E+3 2.575536E-1 -8.979697E+4 -5.941365E+2 5.479664E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2012GAM/GAJ]
# delfG0 = -134.86 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -166.37 +/- 1.1 kcal/mol *
# SOPrTr = 44.4 +/- 3 cal/mol/K
# CpPrTr = -67.1 +/- 3 cal/mol/K
# mole vol. = 100.401 cm3/mol
# mole wt. = 260.5208 g/mol
# date: 10. Dec. 2019

+ 1 Sn+2 + 1 F- = + 1 SnF+
log_k 5.2498 # +/- 0.19
delta_h -5.01 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression 8.855691E+2 1.381674E-1 -4.861884E+4 -3.204173E+2 3.058099E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2012GAM/GAJ]
# delfG0 = -81.072 +/- 0.47 kcal/mol
# delfH0 = -87.26 +/- 0.6 kcal/mol *
# SOPrTr = 0.08 +/- 1.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 3.8 +/- 5 cal/mol/K
# mole vol. = -11.277 cm3/mol
# mole wt. = 137.7084 g/mol
# date: 10. Dec. 2019

+ 1 Sn+2 + 2 F- = + 1 SnF2
log_k 8.8914 # +/- 0.21
delta_h -10.95 kcal/mol # +/- 0.8
analytical_expression 1.766227E+3 2.749670E-1 -9.607113E+4 -6.402315E+2 5.965585E+6
gamma 4.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2012GAM/GAJ]
# delfG0 = -153.38 +/- 0.6 kcal/mol
# delfH0 = -173.35 +/- 0.7 kcal/mol *
# SOPrTr = -6.29 +/- 1.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 6.2 +/- 5 cal/mol/K
# mole vol. = -5.700 cm3/mol
# mole wt. = 156.7068 g/mol
# date: 10. Dec. 2019

1 Sn+2 + 3 F- = 1 SnF3-
log_k 11.5009 # +/- 1
delta_h -19.82 kcal/mol # +/- 1.6
analytical_expression 1.737872E+3 2.685287E-1 -9.286634E+4 -6.308566E+2 5.871183E+6
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]

```

```

# data source: [1997SVE/SHO_a][2012GAM/GAJ]
# delfG0 = -224.28 +/- 1.5 kcal/mol
# delfH0 = -262.37 +/- 1.5 kcal/mol *
# SOPrTr = -27.20 +/- 1.3 cal/mol/K
# CpPrTr = -30.7 +/- 7 cal/mol/K
# mole vol. = 1.300 cm3/mol
# mole wt. = 175.7052 g/mol
# date: 23. Jul. 2018

+ 1 Sn+2 + 1 NO3- = + 1 SnNO3+
log_k 1.2681 # +/- 0.31
delta_h 0.56 kcal/mol # +/- 1.7
analytical_expression 9.287691E+2 1.433098E-1 -5.300870E+4 -3.353093E+2 3.312201E+6
lnln_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2012GAM/GAJ]
# delfG0 = -34.81 +/- 0.8 kcal/mol
# delfH0 = -50.99 +/- 1.7 kcal/mol *
# SOPrTr = 38.80 +/- 5.0 cal/mol/K
# CpPrTr = 26 +/- 25 cal/mol/K
# mole vol. = 19.900 cm3/mol
# mole wt. = 180.7149 g/mol
# date: 10. Dec. 2019

1 Sn+2 + 2 NO3- = 1 Sn(NO3)2
log_k 1.3927 # +/- 0.53
delta_h 3.40 kcal/mol # +/- 3.9
analytical_expression 1.585301E+3 2.427813E-1 -9.260778E+4 -5.706571E+2 5.899250E+6
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2012GAM/GAJ]
# delfG0 = -61.49 +/- 1.4 kcal/mol
# delfH0 = -97.59 +/- 2.2 kcal/mol *
# SOPrTr = 84.01 +/- 5.7 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.0 +/- 70 cal/mol/K
# mole vol. = 60.400 cm3/mol
# mole wt. = 242.7198 g/mol
# date: 23. Jul. 2018

1 Sn+2 + 1 H2O - 1 H+ = 1 SnOH+
log_k -3.4141 # +/- 0.4
delta_h 6.59 kcal/mol # +/- 1.6
analytical_expression 2.066519E+2 2.955262E-2 -1.197791E+4 -7.459576E+1 5.225600E+5
lnln_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS_a]
# delfG0 = -58.60 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -63.830 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 19.200 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -12.900 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 7.792 cm3/mol
# mole wt. = 135.7173 g/mol
# date: 13. Jun. 2018

1 Sn+4 + 1 H2O - 1 H+ = 1 SnOH+3
log_k 1.6216 # +/- 0.35
delta_h 7.7 kcal/mol # +/- 15
analytical_expression 1.785128E+2 2.687664E-2 -1.046993E+4 -6.261340E+1 4.573414E+5
lnln_gamma 5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Sn(OH)4(aq) + 3 H+ - 3 H2O = SnOH+3
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1979VAS/GLA][1984HOU/KEL][1987BRO/WAN][1997SVE/SHO_a][2011RAI/YUI]
# delfG0 = -58.310 +/- 0.28 kcal/mol
# delfH0 = -67.410 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = -25.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -8.700 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.900 cm3/mol
# mole wt. = 135.7173 g/mol
# date: 03. Jul. 2018

+ 1 Sn+2 + 1 H2O + 1 Cl- - 1 H+ = + 1 SnOHCl
log_k -2.0940 # +/- 0.25
delta_h 3.9 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression 9.359936E+2 1.431606E-1 -5.216237E+4 -3.392837E+2 2.996812E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1952VAN/RHO][1981PET/MIL][1982WAG/EVA][1997SVE/SHO_a][1999LOT/OCH]
# delfG0 = -91.78 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -106.4 +/- 6 kcal/mol *
# SOPrTr = 30 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = -12.640 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 34.740 cm3/mol
# mole wt. = 171.1700 g/mol
# date: 31. May. 2019

1 Sn+2 + 1 SO4-2 = 1 SnSO4
log_k 3.4305 # +/- 0.25
delta_h -0.15 kcal/mol # +/- 1.1
analytical_expression 1.695133E+3 2.605455E-1 -9.343124E+4 -6.136180E+2 5.541167E+6
gamma 4 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2012GAM/GAJ]
# delfG0 = -189.18 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -219.65 +/- 1.1 kcal/mol *
# SOPrTr = 15.78 +/- 3.2 cal/mol/K
# CpPrTr = -35.5 +/- 20 cal/mol/K
# mole vol. = 4.600 cm3/mol
# mole wt. = 214.7736 g/mol
# date: 03. Jul. 2018

1 SO3-2 + 2 H+ - 1 H2O = 1 SO2
log_k 9.0656 # +/- 1.5

```

```

delta_h      6.389 kcal/mol # +/- 2.0
analytical_expression 1.430269E+3  2.314208E-1  -8.202020E+4  -5.145213E+2  5.159558E+6
gamma        3  0.041
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfGO used]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
#
# data source: [1982WAG/EVA][1989SHO/HEL]
#
# delfGO = -71.980 +/- 0.02 kcal/mol
#
# delfHO = -77.194 +/- 0.02 kcal/mol
#
# SOPrTr = 38.7 +/- 2 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 46.600 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 38.501 cm3/mol
#
# mole wt. = 64.0648 g/mol
#
# date: 13. Jul. 1987
#
1 Sr+2 + 1 Cl- = 1 SrCl+
log_k        -0.2485 # +/- 999999
delta_h      1.81 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 7.761694E+2  1.257252E-1  -4.351560E+4  -2.819925E+2  2.650763E+6
lnln_gamma   4
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
#
# data source: [1982MAJ/STU][1997SVE/SHO]
#
# delfGO = -165.800 +/- 999999 kcal/mol
#
# delfHO = -169.790 +/- 999999 kcal/mol
#
# SOPrTr = 11.000 +/- 999999 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 11.840 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 6.410 cm3/mol
#
# mole wt. = 123.0727 g/mol
#
# date: 17. Sep. 1997
#
1 Sr+2 + 1 HCO3- - 1 H+ = 1 SrCO3
log_k        -7.4635 # +/- 999999
delta_h      7.95 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.108848E+2  1.272020E-1  -4.414518E+4  -2.965870E+2  2.282113E+6
gamma        3  0.041
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for Sr+2 + CO3-2 = SrCO3
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
#
# data source: [1984BUS/PLU][1997SVE/SHO]
#
# delfGO = -264.860 +/- 999999 kcal/mol
#
# delfHO = -288.620 +/- 999999 kcal/mol
#
# SOPrTr = 8.500 +/- 999999 cal/mol/K
#
# CpPrTr = -32.100 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = -15.240 cm3/mol
#
# mole wt. = 147.6292 g/mol
#
# date: 17. Sep. 1997
#
1 Sr+2 + 1 F- = 1 SrF+
log_k        0.1393 # +/- 0.05
delta_h      1.15 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.179498E+2  1.303202E-1  -4.605408E+4  -2.966463E+2  2.829559E+6
lnln_gamma   4
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
#
# data source: [1982MAJ/STU][1997SVE/SHO]
#
# delfGO = -202.290 +/- 0.25 kcal/mol
#
# delfHO = -210.670 +/- 999999 kcal/mol
#
# SOPrTr = -6.200 +/- 999999 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 16.110 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = -12.790 cm3/mol
#
# mole wt. = 106.6184 g/mol
#
# date: 17. Sep. 1997
#
+ 1 Sr+2 + 1 Formate- = + 1 SrFormate+
log_k        1.3912 # +/- 999999
delta_h      0.190 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.043538E+2  1.401481E-1  -5.171618E+4  -3.265241E+2  3.259569E+6
lnln_gamma   4.0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfGO used]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
#
# data source: [1995SHO/KOR]
#
# delfGO = -220.518 +/- 999999 kcal/mol
#
# delfHO = -233.210 +/- 999999 kcal/mol *
#
# SOPrTr = 21.145 +/- 999999 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 25.100 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 15.700 cm3/mol
#
# mole wt. = 132.6377 g/mol
#
# date: 9. Oct. 2019
#
+ 1 Sr+2 + 2 Formate- = + 1 SrFormate2
log_k        2.2232 # +/- 999999
delta_h      -0.381 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.660558E+3  2.554325E-1  -9.531967E+4  -5.992482E+2  6.045240E+6
gamma        3.0  0.041
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfGO used]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
#
# data source: [1995SHO/KOR]
#
# delfGO = -305.513 +/- 999999 kcal/mol
#
# delfHO = -335.511 +/- 999999 kcal/mol *
#
# SOPrTr = 44.736 +/- 999999 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 51.700 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 52.600 cm3/mol
#
# mole wt. = 177.6554 g/mol
#
# date: 9. Oct. 2019
#
1 Sr+2 + 1 H2O - 1 H+ = 1 SrOH+
log_k        -13.3024 # +/- 0.2
delta_h      19.79 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.785133E+2  2.548616E-2  -1.327835E+4  -6.453575E+1  4.276283E+5
lnln_gamma   4
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
#
# data source: [1976BAE/MES][1997SVE/SHO]
#
# delfGO = -173.30 +/- 0.3 kcal/mol
#
# delfHO = -180.200 +/- 999999 kcal/mol
#
# SOPrTr = 14.600 +/- 999999 cal/mol/K
#
# CpPrTr = -7.600 +/- 999999 cal/mol/K
#

```

```

# mole vol. = 7.200 cm3/mol
# mole wt. = 104.6273 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

+ 1 Ti(OH)4 + 3 H+ - 3 H2O = + 1 TiOH+3
log_k 2.1995 # +/- 1.0
delta_h -6.0 kcal/mol # +/- 7
analytical_expression -2.080545E+2 -3.545400E-2 1.052113E+4 7.664583E+1 -3.661459E+5
lInI_gamma 5.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1964NAB/LUK][1969LOB/SAV][1971NAZ/ANT][1974VAS/VOR][1997SHO/SAS_b][2015PIC][2019PIC/PRO]
# delfGO = -146.97 +/- 2.2 kcal/mol
# delfHO = -164.5 +/- 6 kcal/mol *
# SOPrTr = -58 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = 28.920 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -4.380 cm3/mol
# mole wt. = 64.8743 g/mol
# date: 2. Dec. 2019

+ 1 Ti(OH)4 + 2 H+ - 2 H2O = + 1 Ti(OH)2+2
log_k 4.6383 # +/- 0.19
delta_h -0.9 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -1.223902E+2 -2.269441E-2 8.216686E+3 4.571403E+1 -6.118486E+5
lInI_gamma 4.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as TiO+2
# data source: [1963LIB/CHI][1974VAS/VOR][1993ZIE/JON][1997SHO/SAS_b][2009SCH/VOG][2019PIC/PRO]
# delfGO = -150.30 + 1 H2O = -206.99 +/- 1.7 kcal/mol
# delfHO = -159.4 + 1 H2O = -227.7 +/- 5 kcal/mol *
# SOPrTr = -30 + 1 H2O = -13 +/- 14 cal/mol/K
# CpPrTr = -26.600 + 1 H2O = -8.588 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.100 + 1 H2O = 18.168 cm3/mol
# mole wt. = 63.8664 + 1 H2O = 81.8816 g/mol
# date: 2. Dec. 2019

+ 1 Ti(OH)4 + 1 H+ - 1 H2O = + 1 Ti(OH)3+
log_k 2.1037 # +/- 1.8
delta_h 2.9 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression 9.565264E+1 1.017900E-2 -4.996148E+3 -3.294551E+1 1.504589E+5
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HTiO3+
# data source: [1963LIB/CHI][1964NAB/LUK][1969LOB/SAV][1974VAS/VOR][1997SHO/SAS_b][2001KNA/DIB]
# [2009SCH/VOG][2019PIC/PRO]
# delfGO = -203.53 + 1 H2O = -260.22 +/- 3.0 kcal/mol
# delfHO = -223.9 + 1 H2O = -292.2 +/- 5 kcal/mol *
# SOPrTr = -12 + 1 H2O = 5 +/- 13 cal/mol/K
# CpPrTr = 3.360 + 1 H2O = 21.372 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 8.700 + 1 H2O = 26.768 cm3/mol
# mole wt. = 80.8737 + 1 H2O = 98.8889 g/mol
# date: 2. Dec. 2019

+ 1 Ti(OH)4 + 1 H2O - 1 H+ = + 1 Ti(OH)5-
log_k -11.9024 # +/- 0.6
delta_h 15.8 kcal/mol # +/- 7
analytical_expression -3.946178E+2 -6.775892E-2 1.852024E+4 1.440618E+2 -1.392867E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HTiO3-
# data source: [1993ZIE/JON][1997SHO/SAS_b][2001KNA/DIB][2006RYZ/KOV][2009SCH/VOG]
# delfGO = -241.11 + 2 H2O = -354.49 +/- 1.9 kcal/mol
# delfHO = -279.3 + 2 H2O = -415.9 +/- 6 kcal/mol *
# SOPrTr = -16 + 2 H2O = 17 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = 10 + 2 H2O = 50 +/- 40 cal/mol/K
# mole vol. = 13.700 + 2 H2O = 49.836 cm3/mol
# mole wt. = 96.8731 + 2 H2O = 132.9035 g/mol
# date: 10. Dec. 2019

1 Zn+2 + 1 Cl- = 1 ZnCl+
log_k 0.1986 # +/- 999999
delta_h 10.342 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.419245E+02 1.484685E-01 -5.459551E+04 -3.391262E+02 3.223665E+06
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1986RUA/SEW][1997SVE/SHO]
# delfGO = -66.850 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -66.251 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 23.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 19.900 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -1.280 cm3/mol
# mole wt. = 100.8427 g/mol
# date: 2. Jun. 2016

1 Zn+2 + 2 Cl- = 1 ZnCl2
log_k 0.2507 # +/- 999999
delta_h 7.42 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.691439E+03 2.662635E-01 -9.647522E+04 -6.114524E+02 5.866644E+06
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1963MAR/MAY][1986RUA/SEW][1987BOU/BAR][1997SVE/SHO]
# delfGO = -98.300 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -109.110 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 27.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 34.700 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 24.820 cm3/mol
# mole wt. = 136.2954 g/mol
# date: 2. Jun. 2016

1 Zn+2 + 3 Cl- = 1 ZnCl3-
log_k -0.0198 # +/- 999999
delta_h 3.14 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.752615E+03 2.782638E-01 -1.005652E+05 -6.343125E+02 6.334196E+06
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C

```

```

# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1986RUA/SEW] [1997SVE/SHO]
# delfG0 = -129.310 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -153.320 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 25.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 41.970 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 53.901 cm3/mol
# mole wt. = 171.7481 g/mol
# date: 2. Jun. 2016

1 Zn+2 + 4 Cl- = 1 ZnCl4-2
log_k 0.8605 # +/- 999999
delta_h 1.19 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.783531E+03 2.845529E-01 -1.031889E+05 -6.451513E+02 6.663993E+06
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1990SVE] [1997SVE/SHO]
# delfG0 = -161.890 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -195.220 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 36.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 43.300 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 87.671 cm3/mol
# mole wt. = 207.2008 g/mol
# date: 2. Jun. 2016

1 Zn+2 + 1 F- = 1 ZnF+
log_k 1.1501 # +/- 999999
delta_h 0.66 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.245790E+02 1.436099E-01 -5.258271E+04 -3.340937E+02 3.271861E+06
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI] [1997SVE/SHO]
# delfG0 = -104.110 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -123.370 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -21.800 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 24.438 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -20.477 cm3/mol
# mole wt. = 84.3884 g/mol
# date: 2. Jun. 2016

+ 1 Zn+2 + 1 Formate- = + 1 ZnFormate+
log_k 1.7717 # +/- 999999
delta_h -2.366 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.818788E+2 1.362053E-1 -5.033469E+4 -3.185845E+2 3.237528E+6
lInI_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -121.477 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -140.756 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = -4.310 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 33.500 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 8.000 cm3/mol
# mole wt. = 110.4077 g/mol
# date: 9. Oct. 2019

+ 1 Zn+2 + 2 Formate- = + 1 ZnFormate2
log_k 2.9232 # +/- 999999
delta_h -5.716 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.718779E+3 2.655383E-1 -9.791424E+4 -6.214067E+2 6.311787E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -206.908 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -245.836 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 11.424 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 68.100 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 44.100 cm3/mol
# mole wt. = 155.4254 g/mol
# date: 9. Oct. 2019

1 Zn+2 + 1 H2O - 1 H+ = 1 ZnOH+
log_k -7.8415 # +/- 999999
delta_h 17.98 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 2.607105E+02 3.783496E-02 -1.769746E+04 -9.258560E+01 7.664324E+05
lInI_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Zincite + H+ = ZnOH+
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1967GUB/STE] [1975KHO/YEL] [1975REI/MCC] [1988PLY/BEL] [1997SHO/SAS]
# delfG0 = -81.190 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -87.000 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 15.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -5.300 cm3/mol
# mole wt. = 82.3973 g/mol
# date: 2. Jun. 2016

1 Zn+2 + 2 H2O - 2 H+ = 1 Zn(OH)2
log_k -17.9350 # +/- 999999
delta_h 26.69 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 3.552249E+02 5.276115E-02 -2.386809E+04 -1.288998E+02 8.992449E+05
gamma 3 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Zincite = Zn0(aq)
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as Zn0(aq)
# data source: [1975KHO/YEL] [1988PLY/BEL] [1992ZIE/JON] [1997SHO/SAS]
# delfG0 = -67.420 + 1 H2O = -124.108 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -78.290 + 1 H2O = -146.607 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -2.000 + 1 H2O = 14.712 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -10.000 + 1 H2O = 8.012 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -21.900 + 1 H2O = -3.832 cm3/mol
# mole wt. = 81.3894 + 1 H2O = 99.4047 g/mol
# date: 16. Sep. 1997

```

```

1 Zn+2 + 3 H2O - 3 H+ = 1 Zn(OH)3-
log_k      -27.7483 # +/- 999999
delta_h    30.91 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -2.696648E+02   -4.684039E-02   7.138685E+03   9.742409E+01   -8.113324E+05
lInl_gamma 4
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for Zincite + H2O = HZnO2- + H+
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HZnO2-
# data source: [1954DIR/POS][1954FUL/SWI][1975KHO/YEL][1975REI/MCC][1988PLY/BEL]
# [1992ZIE/JON][1997SHO/SAS]
# delfGO = -110.720 + 1 H2O = -167.408 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -142.380 + 1 H2O = -210.697 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -16.000 + 1 H2O = 0.712 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 20.000 + 1 H2O = 38.012 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -13.400 + 1 H2O = 4.668 cm3/mol
# mole wt. = 98.3967 + 1 H2O = 116.4120 g/mol
# date: 2. Jun. 2016

1 Zn+2 + 4 H2O - 4 H+ = 1 Zn(OH)4-2
log_k      -40.5246 # +/- 999999
delta_h    41.18 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -9.743482E+02   -1.576865E-01   4.385082E+04   3.514338E+02   -3.185162E+06
lInl_gamma 4
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for Zincite + H2O - 2H+ = ZnO2-2
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as ZnO2-2
# data source: [1954DIR/POS][1954FUL/SWI][1975KHO/YEL][1975REI/MCC][1988PLY/BEL]
# [1992ZIE/JON][1997SHO/SAS]
# delfGO = -93.290 + 2 H2O = -206.666 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -132.110 + 2 H2O = -268.744 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -40.000 + 2 H2O = -6.576 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = -15.000 + 2 H2O = 21.024 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = -26.400 + 2 H2O = 9.736 cm3/mol
# mole wt. = 97.3888 + 2 H2O = 133.4194 g/mol
# date: 2. Jun. 2016

#-----
# PHASES
#-----

#####
# Structure of data block for PHASES. 1. Minerals and 2. Gases:
#####
# Line 1: Name of solid or gas phase.
# Line 2: Dissolution reaction of PHASES written in basis/redox species.
# Line 3: Log equilibrium constant, log_k at t = 25 deg C, P = 1 bar # +/- 2 sigma uncertainty (999999 = unknown value).
# Line 4: Enthalpy of reaction, delfHO (kcal/mol) # +/- 2 sigma uncertainty.
# Line 5: Constants a,b,c,d,e used to calculate equilibrium constant as a function of temperature, T(K):
#           log_k = a + b*T + c/T + d*LOG10(T) + e/(T^2).
# Line 6: Valid temperature range (deg C). Note PHREEQC upper limit is 300 deg C.
# Line 7: Method used to derive Gibbs energy of formation, delfGO.
# Line 8: Extrapolation algorithm used to calculate delfGO and/or log_k values as a function of temperature.
# Line 9: Data source references (see end of file)
# Line 10: Gibbs free energy of formation, delfGO (cal/mol) at t = 25 deg C, P = 1 bar # +/- 2 sigma uncertainty.
# Line 11: Enthalpy of formation, delfHO (cal/mol) at t = 25 deg C, P = 1 bar +/- 2 sigma uncertainty.
# Line 12: Entropy, SOPrTr (cal/mol/K) at t = 25 deg C, P = 1 bar # +/- 2 sigma uncertainty.
# Line 13: Isobaric heat capacity, CpPrTr (cal/mol/K) at t = 25 deg C, P = 1 bar +/- 2 sigma uncertainty.
# Line 14: Molar volume (cm3/mol) at t = 25 deg C, P = 1 bar.
# Line 15: Molecular weight (g/mol).
# Line 16: Date that the thermodynamic data (log_k, delfGO, delfHO, SOPrTr, CpPrTr, and/or molar volume) were derived.
#####

#-----
# 1. Minerals
#-----

Aegirine # Aegerine, Acmite
NaFe(SiO3)2 + 3 H+ + 2.5 H2O = + 1 Na+ + 1 Fe+2 + 0.25 O2 + 2 Si(OH)4
log_k      -5.3095 # +/- 0.9
delta_h    7.95 kcal/mol # +/- 2.0
analytical_expression  -9.934947E+2   -1.290726E-1   5.606355E+4   3.547470E+2   -3.481901E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1984BEN/BRO]
# delfGO = -574.81 +/- 0.7 kcal/mol *
# delfHO = -615.65 +/- 0.7 kcal/mol
# SOPrTr = 37.85 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 38.51 +/- 0.4 cal/mol/K
# mole vol. = 64.596 cm3/mol
# mole wt. = 231.0042 g/mol
# date: 26. Mar. 2019

Afwillite
Ca3Si2O4(OH)6 + 6 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Si(OH)4 + 2 H2O
log_k      49.3365 # +/- 999999
delta_h    -64.085 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.507338E+3   -2.044610E-1   9.981634E+4   5.414092E+2   -5.052029E+6
#
# -Range: not reported
# gflag: 2 [estimated delfGO used], polyhedral model
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], note Cp = constant
# data source: [2010BLA/BOU][2012ART/SAS]
# delfGO = -1068.243 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -1160.230 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 69.148 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 72.550 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 129.567 cm3/mol
# mole wt. = 342.4464 g/mol
# date: 9. Jul. 2015

Akermanite
Ca2MgSi2O7 + 6 H+ + 1 H2O = 1 Mg+2 + 2 Ca+2 + 2 Si(OH)4
log_k      45.8210 # +/- 1
delta_h    -74.38 kcal/mol # +/- 1.5
analytical_expression  -1.537634E+3   -2.162894E-1   1.029922E+5   5.499481E+2   -5.183042E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfGO = -879.36 +/- 1.0 kcal/mol
# delfHO = -926.55 +/- 1.0 kcal/mol
# SOPrTr = 50.03 +/- 0.5 cal/mol/K
# CpPrTr = 50.665 +/- 999999 cal/mol/K

```

```

# mole vol.= 92.810 cm3/mol
# mole wt.= 272.6278 g/mol
# date: 15. Jul. 2015

Al (NO3)3 (H2O)6 (s)
Al (NO3)3 (H2O)6 + 6 H+ = 1 Al+3 + 3 H2O + 6 O2 + 3 NH4+
log_k      -151.5469 # +/- 2.4
delta_h    234.70 kcal/mol # +/- 0.8
analytical_expression  8.862666E+2      1.491031E-1      -1.117147E+5      -3.088162E+2      5.028312E+6
#
# -Range: not reported
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], note Cp = constant
# data source: [1982WAG/EVA]
# delfG0 = -526.60 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -681.28 +/- 0.2 kcal/mol *
# SOPrTr = 111.8 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 103.5 +/- 2 cal/mol/K
# mole vol.= 179.763 cm3/mol
# mole wt.= 321.0874 g/mol
# date: 18. Dec. 2017

Al (OH)3 (mic)
Al (OH)3 + 3 H+ = 1 Al+3 + 3 H2O
log_k      8.4787 # +/- 0.11
delta_h    -32.5 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression  -5.395911E+2      -8.450686E-2      3.430615E+4      1.918657E+2      -1.471845E+6
#
# -Range: 0.01 - 60 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 333K
# data source: [1953DAN/EIC][1958BUT/TAY][1960CAR/BER][1966FAU][1989CAP/MEN][2012LOT/PEL]
# delfG0 = -275.04 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -301.1 +/- 2 kcal/mol *
# SOPrTr = 39.6 +/- 6 cal/mol/K
# CpPrTr = 21.922 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol.= 32.000 cm3/mol
# mole wt.= 78.0034 g/mol
# date: 09. Feb. 2019

Alabandite
MnS + 2 O2 = 1 Mn+2 + 1 SO4-2
log_k      138.3755 # +/- 1.0
delta_h    -213.50 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression  -2.238084E+3      -3.512937E-1      1.748494E+5      8.032970E+2      -8.262278E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1974MIL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -52.16 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -51.00 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 19.20 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 11.94 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol.= 21.460 cm3/mol
# mole wt.= 87.0040 g/mol
# date: 17. Oct. 2016

Alamosite
PbSiO3 + 2 H+ + 1 H2O = 1 Pb+2 + 1 Si (OH)4
log_k      11.5119 # +/- 0.5
delta_h    -14.284 kcal/mol # +/- 0.67
analytical_expression  -5.853262E+2      -8.027196E-2      3.744455E+4      2.098099E+2      -2.131643E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1959KIN][1962KEL][1968BOU/PEA][1998CHA]
# delfG0 = -246.25 +/- 0.5 kcal/mol *
# delfH0 = -266.320 +/- 0.46 kcal/mol
# SOPrTr = 26.20 +/- 0.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 21.52 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol.= 44.980 cm3/mol
# mole wt.= 283.2837 g/mol
# date: 23. Oct. 2019

Albite
NaAlSi3O8 + 4 H+ + 4 H2O = 1 Al+3 + 1 Na+ + 3 Si (OH)4
log_k      3.5133 # +/- 1.2
delta_h    -20.55 kcal/mol # +/- 1.8
analytical_expression  -1.085659E+3      -1.488734E-1      6.666795E+4      3.850588E+2      -3.809899E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][19740PE][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -886.31 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -939.720 +/- 1.0 kcal/mol *
# SOPrTr = 49.510 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 48.959 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol.= 100.250 cm3/mol
# mole wt.= 262.2230 g/mol
# date: 18. Sep. 2018

Albite_high
NaAlSi3O8 + 4 H+ + 4 H2O = 1 Al+3 + 1 Na+ + 3 Si (OH)4
log_k      4.8327 # +/- 1.2
delta_h    -23.181 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.494869E+3      -2.021301E-1      9.168028E+4      5.304996E+2      -5.353055E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], stability relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL]
# delfG0 = -884.51 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -937.088 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 52.300 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 48.959 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol.= 100.430 cm3/mol
# mole wt.= 262.2230 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Albite_low
NaAlSi3O8 + 4 H+ + 4 H2O = 1 Al+3 + 1 Na+ + 3 Si (OH)4
log_k      3.5133 # +/- 1.2
delta_h    -20.55 kcal/mol # +/- 1.8
analytical_expression  -1.494516E+3      -2.021715E-1      9.111873E+4      5.305936E+2      -5.353789E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations

```

```

# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1974OPE][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -886.31 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -939.720 +/- 1.0 kcal/mol *
# SOPrTr = 49.510 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 48.959 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 100.070 cm3/mol
# mole wt. = 262.2230 g/mol
# date: 18. Sep. 2018

AIC13(s)
AIC13 = 1 Al+3 + 3 Cl-
log_k      44.0610 # +/- 0.3
delta_h    -79.83 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression  -2.443462E+3   -3.916424E-1   1.526612E+5   8.832864E+2   -8.298986E+6
# -Range: 0.01 - 193 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 465.7K
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -150.57 +/- 0.2 kcal/mol *
# delfH0 = -168.65 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 26.12 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 21.781 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 53.766 cm3/mol
# mole wt. = 133.3396 g/mol
# date: 31. Aug. 2017

#Almandine
# Fe3Al2Si3O12 + 12 H+ = + 3 Fe+2 + 2 Al+3 + 3 Si(OH)4
# log_k      999999 # +/- 999999
# delta_h    999999 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression  9.999990E+5   0.000000E+0   0.000000E+0   0.000000E+0   0.000000E+0
# -Range: Not given
# gflag: Not used
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978HEL/DEL]
# delfG0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 75.600 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 86.500 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 115.280 cm3/mol
# mole wt. = 497.7533 g/mol
# date: 5. May. 1978

Almandine
Fe3Al2Si3O12 + 12 H+ = + 3 Fe+2 + 2 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k      41.8818 # +/- 1.7
delta_h    -113.50 kcal/mol # +/- 5.1
analytical_expression  -2.913642E+3   -4.249679E-1   1.854055E+5   1.037720E+3   -9.546842E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1993ANO/ESS]
# delfG0 = -1180.28 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -1257.43 +/- 0.2 kcal/mol *
# SOPrTr = 81.88 +/- 0.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 82.00 +/- 0.4 cal/mol/K
# mole vol. = 115.110 cm3/mol
# mole wt. = 497.7533 g/mol
# date: 28. Jun. 2017

Aluminum
Al + 3 H+ + 0.75 O2 = 1 Al+3 + 1.5 H2O
log_k      149.9295 # +/- 0.38
delta_h    -228.981 kcal/mol # +/- 0.37
analytical_expression  -7.074034E+02   -1.127703E-01   8.853689E+04   2.509211E+02   -2.389996E+06
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 6.776 +/- 0.020 cal/mol/K
# CpPrTr = 5.823 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 9.993 cm3/mol
# mole wt. = 26.9815 g/mol
# date: 9. Oct. 2015

Alunite
KA13(OH)6(SO4)2 + 6 H+ = 1 K+ + 2 SO4-2 + 3 Al+3 + 6 H2O
log_k      -0.2514 # +/- 0.8
delta_h    -55.41 kcal/mol # +/- 1.2
analytical_expression  -4.212241E+3   -6.713737E-1   2.417595E+5   1.518269E+3   -1.382726E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1946KEL/SHO][1960KEL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -1113.47 +/- 0.6 kcal/mol
# delfH0 = -1235.60 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 78.400 +/- 0.45 cal/mol/K
# CpPrTr = 91.63 +/- 1.8 cal/mol/K
# mole vol. = 293.600 cm3/mol
# mole wt. = 414.2022 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Amesite_14A
Mg4Al2(A12Si2)O10(OH)8 + 20 H+ = + 4 Mg+2 + 4 Al+3 + 2 Si(OH)4 + 10 H2O
log_k      76.0026 # +/- 4
delta_h    -196.017 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -4.081222E+03   -6.105053E-01   2.605716E+05   1.456936E+03   -1.242807E+07
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][Unpublished]
# delfG0 = -1989.2 +/- 4 kcal/mol
# delfH0 = -2145.624 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 108.900 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 136.143 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 205.400 cm3/mol
# mole wt. = 557.3700 g/mol
# date: 21. Jul. 2016

Amesite_7A

```

```

Mg2Al(AlSi)O5(OH)4 + 10 H+ = + 2 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 Si(OH)4 + 5 H2O
log_k      39.6872 # +/- 2
delta_h    -99.577 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.047170E+03 -3.060102E-01 1.309347E+05 7.310392E+02 -6.220033E+06
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][Unpublished]
# delfG0 = -992.3 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -1071.243 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 52.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 65.648 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 103.000 cm3/mol
# mole wt. = 278.6850 g/mol
# date: 21. Jul. 2016

Analcime # Analcite
NaAlSi2O6(H2O) + 4 H+ + 1 H2O = 1 Na+ + 1 Al+3 + 2 Si(OH)4
log_k      7.1542 # +/- 1.0
delta_h    -25.5 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression -1.193973E+3 -1.643785E-1 7.335947E+4 4.243957E+2 -4.093837E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1955KIN_c][1978HEL/DEL_a][1997RIM_a]
# delfG0 = -738.50 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -790.6 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 56.00 +/- 0.6 cal/mol/K
# CpPrTr = 50.698 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 97.100 cm3/mol
# mole wt. = 220.1539 g/mol
# date: 8. Sep. 2016

Analcime(deh) # Analcite_deh
NaAlSi2O6 + 4 H+ + 2 H2O = 1 Na+ + 1 Al+3 + 2 Si(OH)4
log_k      12.1555 # +/- 999999
delta_h    -33.084 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.213526E+03 -1.680189E-01 7.635727E+04 4.312251E+02 -4.210633E+06
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations & calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1962BAR][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -674.989 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -714.678 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 41.900 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 39.298 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 89.100 cm3/mol
# mole wt. = 202.1387 g/mol
# date: 5. May. 1978

Analcime_II
NaAlSi2O6(H2O) + 4 H+ + 1 H2O = 1 Na+ + 1 Al+3 + 2 Si(OH)4
log_k      6.7877 # +/- 1
delta_h    -25.2 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -7.581999E+02 -1.124139E-01 4.553437E+04 2.710406E+02 -2.214094E+06
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -739.0 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -790.9 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 56.7 +/- 8 cal/mol/K
# CpPrTr = 49.776 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 97.100 cm3/mol
# mole wt. = 220.1540 g/mol
# date: 6. Jul. 2015

Analcime_SiR06
Na2Al2Si3O10(H2O)2 + 8 H+ = + 2 Na+ + 2 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k      16.2647 # +/- 2
delta_h    -53.8 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.191881E+03 -3.058164E-01 1.348017E+05 7.798984E+02 -7.343725E+06
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2010VIE][2011ART/SAS_a][2014ODA/WAL]
# delfG0 = -1274.8 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -1365.8 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 102.8 +/- 12 cal/mol/K
# CpPrTr = 88.908 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 167.721 cm3/mol
# mole wt. = 380.2237 g/mol
# date: 27. Feb. 2014

Anatase
TiO2 + 2 H2O = + 1 Ti(OH)4
log_k      -8.8107 # +/- 0.3
delta_h    -0.84 kcal/mol # +/- 2.2
analytical_expression -2.577437E+2 -3.729940E-2 1.294264E+4 9.049376E+1 -6.466251E+5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1946NAY][1983BOW/HEL][1998CHA]
# delfG0 = -212.68 +/- 0.8 kcal/mol *
# delfH0 = -225.93 +/- 0.8 kcal/mol
# SOPrTr = 11.928 +/- 0.08 cal/mol/K
# CpPrTr = 13.49 +/- 0.3 cal/mol/K
# mole vol. = 20.458 cm3/mol
# mole wt. = 79.8658 g/mol
# date: 3. Dec. 2019

Andalusite
Al2SiO5 + 6 H+ = + 2 Al+3 + 1 H2O + 1 Si(OH)4
log_k      13.9865 # +/- 0.7
delta_h    -55.80 kcal/mol # +/- 1.0
analytical_expression -1.296011E+3 -1.976935E-1 8.175569E+4 4.610162E+2 -4.091398E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry and phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [192JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][1995ROB/HEM][1997RIM_a]
# delfG0 = -583.60 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -619.02 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 21.84 +/- 0.1 cal/mol/K

```

```

# CpPrTr = 28.94 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 51.520 cm3/mol
# mole wt. = 162.0456 g/mol
# date: 7. Sep. 2016

Andradite
Ca3Fe2(SiO4)3 + 10 H+ + 1 H2O = + 2 Fe+2 + 3 Ca+2 + 3 Si(OH)4 + 0.5 O2
log_k      17.1055 # +/- 1.5
delta_h    -33.710 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -2.298349E+3   -3.276930E-1   1.354357E+5   8.257561E+2   -7.500497E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations, SSAS end-member
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -1296.82 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1380.345 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 70.130 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 83.446 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 131.850 cm3/mol
# mole wt. = 508.1733 g/mol
# date: 15. Mar. 1990

Anglesite
PbSO4 = + 1 Pb+2 + 1 SO4-2
log_k      -7.8021 # +/- 0.2
delta_h    2.691 kcal/mol # +/- 0.25
analytical_expression  -1.710449E+3   -2.664403E-1   9.594274E+4   6.174517E+2   -6.004123E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978COX][1982DEK]
# delfG0 = -194.31 +/- 0.2 kcal/mol *
# delfH0 = -219.871 +/- 0.22 kcal/mol
# SOPrTr = 35.490 +/- 0.10 cal/mol/K
# CpPrTr = 24.67 +/- 0.5 cal/mol/K
# mole vol. = 47.970 cm3/mol
# mole wt. = 303.2636 g/mol
# date: 23. Oct. 2019

Anhydrite
CaSO4 = 1 Ca+2 + 1 SO4-2
log_k      -4.3101 # +/- 0
delta_h    -4.44 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression  -1.695072E+3   -2.662431E-1   9.582385E+4   6.121138E+2   -5.856236E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978HEL/DEL][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -315.93 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -342.76 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 25.5 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 23.82 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 45.933 cm3/mol
# mole wt. = 136.1356 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Anhydrite_alpha
CaSO4 = 1 Ca+2 + 1 SO4-2
log_k      -2.7781 # +/- 0.3
delta_h    -6.60 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression  -1.686205E+3   -2.636644E-1   9.606928E+4   6.085059E+2   -5.856238E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C (extrapolated assuming drCp0 = constant)
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1987GAR/PAR]
# delfG0 = -314.02 +/- 0.3 kcal/mol *
# delfH0 = -340.60 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 25.908 +/- 0.04 cal/mol/K
# CpPrTr = 23.950 +/- 0.14 cal/mol/K
# mole vol. = 45.940 cm3/mol
# mole wt. = 136.1356 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Anhydrite_beta
CaSO4 = 1 Ca+2 + 1 SO4-2
log_k      -2.0817 # +/- 0.3
delta_h    -7.55 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression  -1.686613E+3   -2.636644E-1   9.629509E+4   6.086464E+2   -5.856239E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C (extrapolated assuming drCp0 = constant)
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1987GAR/PAR]
# delfG0 = -312.89 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -339.65 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 25.908 +/- 0.04 cal/mol/K
# CpPrTr = 23.671 +/- 0.14 cal/mol/K
# mole vol. = 45.940 cm3/mol
# mole wt. = 136.1356 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Annite
K(Fe3)(AlSi3)O10(OH)2 + 10 H+ = 1 Al+3 + 1 K+ + 3 Fe+2 + 3 Si(OH)4
log_k      30.2175 # +/- 1.8
delta_h    -70.328 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -2.471138E+3   -3.515862E-1   1.537994E+5   8.823678E+2   -8.269476E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL]
# delfG0 = -1147.16 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1232.195 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 95.200 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 93.583 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 154.320 cm3/mol
# mole wt. = 511.8800 g/mol
# date: 15. Jul. 2015

Anorthite
CaAl2Si2O8 + 8 H+ = 1 Ca+2 + 2 Al+3 + 2 Si(OH)4
log_k      27.0773 # +/- 1.1
delta_h    -77.891 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.881600E+3   -2.781654E-1   1.202910E+5   6.698072E+2   -6.155083E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C

```

```

# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -954.08 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1007.552 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 49.100 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 50.353 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 100.790 cm3/mol
# mole wt. = 278.2073 g/mol
# date: 15. Jul. 2015

Anthophyllite
Mg7Si8O22(OH)2 + 14 H+ + 8 H2O = + 7 Mg+2 + 8 Si(OH)4
log_k 68.7979 # +/- 4.1
delta_h -137.410 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -4.879278E+3 -6.587655E-1 3.096337E+5 1.736231E+3 -1.690967E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -2715.43 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -2888.749 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 128.600 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 155.475 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 264.400 cm3/mol
# mole wt. = 780.8205 g/mol
# date: 5. May. 1978

Antigorite
Mg48Si34085(OH)62 + 96 H+ = + 48 Mg+2 + 34 Si(OH)4 + 11 H2O
log_k 485.7243 # +/- 24
delta_h -896.193 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.750985E+4 -3.780510E+0 1.737276E+6 9.825023E+3 -9.027212E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1997RIM_a]
# delfG0 = -15808.00 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -17071.684 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 861.360 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 1059.129 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1749.130 cm3/mol
# mole wt. = 4535.9517 g/mol
# date: 5. Sep. 2016

Aragonite
CaCO3 + 1 H+ = 1 Ca+2 + 1 HCO3-
log_k 1.9931 # +/- 0.19
delta_h -6.142 kcal/mol # +/- 0.42
analytical_expression -8.972839E+2 -1.423083E-1 5.064178E+4 3.253680E+2 -2.955176E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS]
# delfG0 = -269.683 +/- 0.16 kcal/mol
# delfH0 = -288.556 +/- 0.37 kcal/mol
# SOPrTr = 21.560 +/- 1.36 cal/mol/K
# CpPrTr = 19.4 +/- 8 cal/mol/K
# mole vol. = 34.150 cm3/mol
# mole wt. = 100.0872 g/mol
# date: 3. Jul. 2015

Artinite
Mg2(OH)2(CO3)(H2O)3 + 3 H+ = + 2 Mg+2 + 1 HCO3- + 5 H2O
log_k 19.6571 # +/- 0.9
delta_h -31.173 kcal/mol # +/- 0.55
analytical_expression -1.342980E+3 -2.011367E-1 7.965581E+4 4.858144E+2 -4.149214E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1978ROB/HEM]
# delfG0 = -613.915 +/- 0.16 kcal/mol
# delfH0 = -698.043 +/- 0.15 kcal/mol
# SOPrTr = 55.670 +/- 0.16 cal/mol/K
# CpPrTr = 70.759 +/- 0.18 cal/mol/K
# mole vol. = 96.900 cm3/mol
# mole wt. = 196.6794 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Azurite
Cu3(CO3)2(OH)2 + 4 H+ = + 3 Cu+2 + 2 H2O + 2 HCO3-
log_k 9.1736 # +/- 2
delta_h -29.2 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -2.268852E+3 -3.504270E-1 1.296489E+5 8.198318E+2 -7.195904E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -334.4 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -390.1 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 67.0 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 58.934 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 91.010 cm3/mol
# mole wt. = 344.6711 g/mol
# date: 2. Jun. 2016

B203(s)
B2O3 + 3 H2O = + 2 B(OH)3
log_k 5.8245 # +/- 0.5
delta_h -3.64 kcal/mol # +/- 0.7
analytical_expression -2.414378E+2 -3.131848E-2 1.589967E+4 8.667510E+1 -9.956519E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -285.07 +/- 0.5 kcal/mol *
# delfH0 = -303.99 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 12.90 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 14.96 +/- 2.1 cal/mol/K
# mole vol. = 27.302 cm3/mol
# mole wt. = 69.6202 g/mol
# date: 26. Oct. 2016

```

```

Ba(OH)2(s)
Ba(OH)2 + 2 H+ = 1 Ba+2 + 2 H2O
log_k      30.2043 # +/- 1.2
delta_h    -38.24 kcal/mol # +/- 1.6
analytical_expression  -2.912931E+2    -4.323087E-2    2.446582E+4    1.061794E+2    -9.250158E+5
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -205.44 +/- 1.6 kcal/mol *
# delfH0 = -226.17 +/- 1.5 kcal/mol
# SOPrTr = 25.60 +/- 2.0 cal/mol/K
# CpPrTr = 24.28 +/- 1.0 cal/mol/K
# mole vol. = 33.600 cm3/mol
# mole wt. = 171.3417 g/mol
# date: 11. Mar. 2016

BaO(s)
BaO + 2 H+ = 1 Ba+2 + 1 H2O
log_k      48.0838 # +/- 0.4
delta_h    -65.097 kcal/mol # +/- 0.59
analytical_expression  -2.939702E+2    -4.348185E-2    3.064721E+4    1.063473E+2    -9.708986E+5
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1995PAR]
# delfG0 = -124.360 +/- 0.40 kcal/mol
# delfH0 = -131.000 +/- 0.40 kcal/mol
# SOPrTr = 17.225 +/- 0.09 cal/mol/K
# CpPrTr = 11.36 +/- 0.1 cal/mol/K
# mole vol. = 25.588 cm3/mol
# mole wt. = 153.3264 g/mol
# date: 20. Jun. 2016

Barite
BaSO4 = 1 Ba+2 + 1 SO4-2
log_k      -10.3354 # +/- 1.5
delta_h     6.9 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression  -1.665191E+03    -2.607069E-01    9.241412E+04    6.014837E+02    -5.839993E+06
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1968ROB/WAL]
# delfG0 = -325.3 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -352.1 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 31.60 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 24.32 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 52.100 cm3/mol
# mole wt. = 233.3846 g/mol
# date: 7. Jul. 2016

Barium
Ba + 2 H+ + 0.5 O2 = 1 Ba+2 + 1 H2O
log_k      140.6896 # +/- 0.38
delta_h   -194.6467500 kcal/mol # +/- 0.433615
analytical_expression  -4.321362E+02    -6.563647E-02    6.728758E+04    1.553011E+02    -1.561846E+06
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995PAR][1998CHA]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 14.93 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 6.54 +/- 1.3 cal/mol/K
# mole vol. = 37.936 cm3/mol
# mole wt. = 137.3270 g/mol
# date: 20. Jun. 2016

Beidel_Ca
Ca0.165(AI2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.165 Ca+2 + 2.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k      4.8304 # +/- 2
delta_h    -48.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.311512E+03    -3.296736E-01    1.407410E+05    8.210276E+02    -7.911146E+06
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1283.2 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1370.6 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 66.2 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 74.427 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 136.192 cm3/mol
# mole wt. = 366.5623 g/mol
# date: 20. May. 2016

Beidel_Ca(avg)
Ca0.2(Mg0.1Fe0.3Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.5 H+ + 2.35 H2O = + 0.2 Ca+2 + 0.3 Fe+2 + 0.075 O2 + 0.1 Mg+2 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k      3.5788 # +/- 2
delta_h    -45.7 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.293053E+03    -3.264511E-01    1.387674E+05    8.148331E+02    -7.797695E+06
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1261.0 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1347.4 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 70.7 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.295 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 136.781 cm3/mol
# mole wt. = 377.5730 g/mol
# date: 20. May. 2016

Beidel_CaFe(avg)
Ca0.2(Fe0.4Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.5 H+ + 2.35 H2O = + 0.2 Ca+2 + 0.4 Fe+2 + 0.075 O2 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k      3.0191 # +/- 2
delta_h    -45.0 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.290306E+03    -3.261913E-01    1.384668E+05    8.138432E+02    -7.791181E+06
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1253.1 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1339.1 +/- 3 kcal/mol

```

```

# SOPrTr = 71.7 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.581 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 136.856 cm3/mol
# mole wt. = 380.7270 g/mol
# date: 20. May. 2016

Beidel_Cs
Cs0.33(A12)(A10.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 Cs+ + 2.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 2.8546 # +/- 2.3
delta_h -43.6 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.291235E+3 -3.257013E-1 1.389439E+5 8.139324E+2 -7.898076E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1287.1 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1374.8 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 70.4 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.199 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 141.503 cm3/mol
# mole wt. = 403.8081 g/mol
# date: 10. Feb. 2017

Beidel_Cs(avg)
Cs0.4(Mg0.1Fe0.3Al1.65)(A10.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.5 H+ + 2.35 H2O = + 0.4 Cs+ + 0.3 Fe+2 + 0.075 O2 + 0.1 Mg+2 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k 1.1305 # +/- 2.3
delta_h -39.3 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.266820E+3 -3.213687E-1 1.364872E+5 8.056264E+2 -7.777106E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1265.8 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1352.5 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 75.8 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 78.442 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 145.549 cm3/mol
# mole wt. = 422.7201 g/mol
# date: 10. Feb. 2017

Beidel_CsFe(avg)
Cs0.4(Fe0.4Al1.65)(A10.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.5 H+ + 2.35 H2O = + 0.4 Cs+ + 0.4 Fe+2 + 0.075 O2 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k 0.6442 # +/- 2
delta_h -38.7 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.264125E+3 -3.211086E-1 1.362107E+5 8.046547E+2 -7.770571E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1257.8 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1344.1 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 76.8 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 78.728 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 145.624 cm3/mol
# mole wt. = 425.8743 g/mol
# date: 10. Feb. 2017

Beidel_Fe
Fe0.165(A12)(A10.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.165 Fe+2 + 2.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 4.1038 # +/- 2
delta_h -48.8 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.318762E+03 -3.305575E-01 1.411104E+05 8.233792E+02 -7.935245E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1266.0 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1352.9 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 67.3 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 74.701 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 135.406 cm3/mol
# mole wt. = 369.1639 g/mol
# date: 20. May. 2016

Beidel_Fe(avg)
Fe0.2(Mg0.1Fe0.3Al1.65)(A10.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.5 H+ + 2.35 H2O = + 0.5 Fe+2 + 0.075 O2 + 0.1 Mg+2 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k 2.7358 # +/- 2
delta_h -45.7 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.301857E+03 -3.275226E-01 1.392308E+05 8.176842E+02 -7.826905E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1240.1 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1325.8 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 72.1 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.626 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 135.828 cm3/mol
# mole wt. = 380.7264 g/mol
# date: 20. May. 2016

Beidel_FeX2(avg)
Fe0.2(Fe0.4Al1.65)(A10.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.5 H+ + 2.35 H2O = + 0.6 Fe+2 + 0.075 O2 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k 2.1762 # +/- 2
delta_h -45.0 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.299112E+03 -3.272635E-01 1.389303E+05 8.166953E+02 -7.820402E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1232.2 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1317.6 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 73.1 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.913 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 135.903 cm3/mol
# mole wt. = 383.8804 g/mol
# date: 20. May. 2016

Beidel_K
K0.33(A12)(A10.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 K+ + 2.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 3.6419 # +/- 2
delta_h -44.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.287878E+03 -3.257774E-01 1.387676E+05 8.129371E+02 -7.852976E+06

```

```

# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1285.3 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1373.1 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 68.3 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.055 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 140.088 cm3/mol
# mole wt. = 372.8519 g/mol
# date: 20. May. 2016

Beidel_K(avg)
K0.4(Mg0.1Fe0.3Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.5 H+ + 2.35 H2O = + 0.4 K+ + 0.3 Fe+2 + 0.075 O2 + 0.1 Mg+2 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k 2.1714 # +/- 2
delta_h -40.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.264418E+03 -3.217285E-01 1.363888E+05 8.050265E+02 -7.727175E+06
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1263.5 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1350.3 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 73.3 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 78.268 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 141.504 cm3/mol
# mole wt. = 385.1968 g/mol
# date: 20. May. 2016

Beidel_KFe(avg)
K0.4(Fe0.4Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.5 H+ + 2.35 H2O = + 0.4 K+ + 0.4 Fe+2 + 0.075 O2 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k 1.6118 # +/- 2
delta_h -40.2 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.261675E+03 -3.214692E-01 1.360884E+05 8.040380E+02 -7.720672E+06
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1255.6 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1342.1 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 74.3 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 78.554 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 141.579 cm3/mol
# mole wt. = 388.3508 g/mol
# date: 20. May. 2016

Beidel_Mg
Mg0.165(Al2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.165 Mg+2 + 2.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 4.6864 # +/- 3
delta_h -49.6 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.323299E+3 -3.309853E-1 1.415077E+5 8.250102E+2 -7.945982E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1279.5 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1366.9 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 65.7 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 74.230 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 135.282 cm3/mol
# mole wt. = 363.9598 g/mol
# date: 20. May. 2016

Beidel_Mg(avg)
Mg0.2(Mg0.1Fe0.3Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.5 H+ + 2.35 H2O = + 0.3 Mg+2 + 0.3 Fe+2 + 0.075 O2 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k 3.4153 # +/- 2
delta_h -46.5 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.307343E+03 -3.280411E-01 1.397005E+05 8.196610E+02 -7.839911E+06
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1256.5 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1342.9 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 70.1 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.054 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 135.678 cm3/mol
# mole wt. = 374.4184 g/mol
# date: 20. May. 2016

Beidel_MgFe(avg)
Mg0.2(Fe0.4Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.5 H+ + 2.35 H2O = + 0.2 Mg+2 + 0.4 Fe+2 + 0.075 O2 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k 2.8557 # +/- 2
delta_h -45.7 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.304600E+03 -3.277819E-01 1.394001E+05 8.186726E+02 -7.833408E+06
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1248.6 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1334.7 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 71.1 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.340 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 135.753 cm3/mol
# mole wt. = 377.5724 g/mol
# date: 20. May. 2016

Beidel_Na
Na0.33(Al2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 Na+ + 2.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 4.6510 # +/- 2
delta_h -47.0 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.308227E+03 -3.279431E-01 1.402995E+05 8.199819E+02 -7.903359E+06
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1282.3 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1370.0 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 67.6 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 75.454 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 137.551 cm3/mol
# mole wt. = 367.5361 g/mol
# date: 20. May. 2016

```

```

Beidel_Na(avg)
Na0.4(Mg0.1Fe0.3Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.5 H+ + 2.35 H2O = + 0.4 Na+ + 0.3 Fe+2 + 0.075 O2 + 0.1 Mg+2 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k 3.3680 # +/- 2
delta_h -43.5 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.289072E+03 -3.243538E-01 1.382344E+05 8.135659E+02 -7.788253E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1259.9 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1346.6 +/- 3 kcal/mol
# S0PrTr = 72.4 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 77.539 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 138.428 cm3/mol
# mole wt. = 378.7533 g/mol
# date: 20. May. 2016

Beidel_NaFe(avg)
Na0.4(Fe0.4Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.5 H+ + 2.35 H2O = + 0.4 Na+ + 0.4 Fe+2 + 0.075 O2 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k 2.8816 # +/- 2
delta_h -42.8 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.286329E+03 -3.240946E-01 1.379559E+05 8.125776E+02 -7.781750E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1251.9 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1338.3 +/- 3 kcal/mol
# S0PrTr = 73.4 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 77.825 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 138.503 cm3/mol
# mole wt. = 381.9073 g/mol
# date: 20. May. 2016

Beidel_NH4
(NH4)0.33(Al2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 NH4+ + 2.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k -1.2045 # +/- 3
delta_h -38.2 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.281461E+3 -3.250005E-1 1.367996E+5 8.107617E+2 -7.809545E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1275.9 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1370.4 +/- 3 kcal/mol *
# S0PrTr = 68.8 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 78.343 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 141.587 cm3/mol
# mole wt. = 365.9019 g/mol
# date: 18. Dec. 2016

Beidel_NH4(avg)
(NH4)0.4(Mg0.1Fe0.3Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.5 H+ + 2.35 H2O = + 0.4 NH4+ + 0.1 Mg+2 + 0.3 Fe+2 + 0.075 O2 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -3.6985 # +/- 3
delta_h -32.7 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.256639E+3 -3.207868E-1 1.340043E+5 8.023899E+2 -7.674534E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1252.1 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1347.1 +/- 3 kcal/mol *
# S0PrTr = 73.9 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 81.040 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 143.320 cm3/mol
# mole wt. = 376.7732 g/mol
# date: 18. Dec. 2016

Beidel_NH4Fe(avg)
(NH4)0.4(Fe0.4Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.5 H+ + 2.35 H2O = + 0.4 NH4+ + 0.4 Fe+2 + 0.075 O2 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -4.2581 # +/- 3
delta_h -32.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.253885E+3 -3.205262E-1 1.337032E+5 8.013974E+2 -7.667987E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1244.2 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1338.8 +/- 3 kcal/mol *
# S0PrTr = 74.9 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 81.326 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 143.395 cm3/mol
# mole wt. = 379.9274 g/mol
# date: 18. Dec. 2017

Beidel_SBI d-1 # Black Jack Mine. Parent mineral for other beidellites.
K0.104Ca0.185(Mg0.09Fe0.112Al1.812)(Al0.426Si3.574)O10(OH)2 + 7.592 H+ + 2.352 H2O = + 0.104 K+ + 0.185 Ca+2 + 0.09 Mg+2 + 0.112 Fe+2 + 0.028 O2
+ 2.238 Al+3 + 3.574 Si(OH)4
log_k 6.5825 # +/- 1.7
delta_h -50.71 kcal/mol # +/- 2.5
analytical_expression -2.316960E+3 -3.305597E-1 1.412263E+5 8.233017E+2 -7.892491E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used] calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [2012GAI/BLA]
# delfG0 = -1280.41 +/- 1.6 kcal/mol *
# delfH0 = -1367.28 +/- 1.6 kcal/mol
# S0PrTr = 70.150 +/- 0.10 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.122 +/- 0.08 cal/mol/K
# mole vol. = 137.980 cm3/mol
# mole wt. = 374.6937 g/mol
# date: 28. Feb. 2019

Berndtite
SnS2 + 1 H2O + 3.5 O2 = 1 Sn+2 + 2 H+ + 2 SO4-2
log_k 208.8197 # +/- 1.6
delta_h -321.7 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression -3.987103E+3 -6.280335E-1 3.005607E+5 1.432212E+3 -1.500614E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used] calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1953KIN/TOD][1958ORR/CHR][1974MIL][1985JAC/HEL_b]

```

```

# delfG0 = -34.7 +/- 1 kcal/mol *
# delfH0 = -36.7 +/- 1 kcal/mol
# S0PrTr = 20.900 +/- 0.04 cal/mol/K
# CpPrTr = 16.760 +/- 0.15 cal/mol/K
# mole vol. = 40.960 cm3/mol
# mole wt. = 182.842 g/mol
# date: 05. Jul. 2018

Berthierine_7A
Fe2Al(AlSi)05(OH)4 + 10 H+ = + 2 Fe+2 + 2 Al+3 + 1 Si(OH)4 + 5 H2O
log_k      32.4524 # +/- 2
delta_h    -91.194 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.992073E+03 -3.007776E-01 1.261112E+05 7.111615E+02 -6.089150E+06
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][Unpublished]
# delfG0 = -828.9 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -900.992 +/- 999999 kcal/mol
# S0PrTr = 72.302 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 71.372 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 104.940 cm3/mol
# mole wt. = 341.7650 g/mol
# date: 21. Jul. 2016

Boehmite
AlO(OH) + 3 H+ = 1 Al+3 + 2 H2O
log_k      7.5646 # +/- 0.34
delta_h    -27.075 kcal/mol # +/- 0.50
analytical_expression -5.192352E+2 -8.255940E-2 3.257267E+4 1.854579E+2 -1.487883E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1995POK/HEL]
# delfG0 = -219.599 +/- 0.34 kcal/mol
# delfH0 = -238.240 +/- 0.34 kcal/mol
# S0PrTr = 8.890 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 12.97 +/- 0.1 cal/mol/K
# mole vol. = 19.535 cm3/mol
# mole wt. = 59.9883 g/mol
# date: 29. Apr. 1997

Bonattite
CuSO4(H2O)3 = + 1 Cu+2 + 1 SO4-2 + 3 H2O
log_k      -1.6720 # +/- 0.2
delta_h    -4.07 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression -1.745336E+3 -2.684908E-1 9.776673E+4 6.309708E+2 -5.821178E+6
# -Range: 0.01 - 117 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 390K
# data source: [1960KEL][1968ZAH/BAU][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -334.60 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -402.58 +/- 0.6 kcal/mol *
# S0PrTr = 52.9 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 49.000 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 79.871 cm3/mol
# mole wt. = 213.6552 g/mol
# date: 25. Jun. 2019

Bornite
Cu5FeS4 + 4 H+ + 9 O2 = + 5 Cu+2 + 1 Fe+2 + 4 SO4-2 + 2 H2O
log_k      525.9154 # +/- 3.8
delta_h    -843.760 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.001220E+4 -1.569163E+0 7.534217E+5 3.591700E+3 -3.630545E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1970PAN/KIN][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -86.70 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -79.922 +/- 999999 kcal/mol
# S0PrTr = 99.290 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 58.70 +/- 0.1 cal/mol/K
# mole vol. = 98.600 cm3/mol
# mole wt. = 501.8410 g/mol
# date: 4. Oct. 2016

Boron # Element
B + 1.5 O2 + 1.5 H2 = 1 B(OH)3
log_k      178.6858 # +/- 2.3
delta_h    -250.44 kcal/mol # +/- 3.2
analytical_expression -7.032954E+2 -1.084766E-1 9.863997E+4 2.501552E+2 -3.156463E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1978COX][1998CHA]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# S0PrTr = 1.410 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 2.70 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 4.377 cm3/mol
# mole wt. = 10.8110 g/mol
# date: 9. Aug. 2016

Bromine(l)
Br2 + 1 H2O = + 2 Br- + 2 H+ + 0.5 O2
log_k      -6.5421 # +/- 0.2
delta_h    8.8 kcal/mol # +/- 0.1
analytical_expression 4.537238E+2 8.126309E-2 -1.992235E+4 -1.708949E+2 4.617038E+5
# -Range: 0.01 - 60 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL], Tmax for Cp = 333K
# data source: [1971STU/PRO][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# S0PrTr = 36.379 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 18.076 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 51.460 cm3/mol
# mole wt. = 159.808 g/mol
# date: 29. Oct. 2015

Brucite
Mg(OH)2 + 2 H+ = + 1 Mg+2 + 2 H2O
log_k      17.1014 # +/- 0.2

```

```

delta_h -27.69 kcal/mol # +/- 0.8
analytical_expression -7.179809E+1 -1.511296E-2 7.565760E+3 2.704406E+1 9.825839E+4
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1929TRA/NOU][1968ROB/WAL][1975KIN/FER][1977McG/HOS][1996BRO/DRU][2008X10]
# delfG0 = -198.55 +/- 0.7 kcal/mol *
# delfH0 = -220.31 +/- 0.8 kcal/mol
# SOPrTr = 15.1 +/- 1 cal/mol/K
# CpPrTr = 18.47 +/- 0.1 cal/mol/K
# mole vol. = 24.630 cm3/mol
# mole wt. = 58.3196 g/mol
# date: 23. Dec. 2019
#
Brushite
CaHPO4 (H2O)2 = 1 Ca+2 + 1 HP04-2 + 2 H2O
log_k -6.6953 # +/- 0.3
delta_h -0.78 kcal/mol # +/- 0.7
analytical_expression -1.671942E+3 -2.605220E-1 9.325941E+4 6.037706E+2 -5.676214E+6
#
# -Range: Not given
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not given
# data source: [1982WAG/EVA]
# delfG0 = -514.94 +/- 0.2 kcal/mol *
# delfH0 = -574.47 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 45.28 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 47.10 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 74.123 cm3/mol
# mole wt. = 172.0877 g/mol
# date: 1. Dec. 2017
#
Bunsenite
NiO + 2 H+ = 1 Ni+2 + 1 H2O
log_k 12.4743 # +/- 1.47
delta_h -23.92 kcal/mol # +/- 2.0
analytical_expression -8.961559E+01 -1.991262E-02 8.143953E+03 3.289883E+01 -6.215217E+04
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -50.57 +/- 0.1 kcal/mol
# delfH0 = -57.30 +/- 0.1 kcal/mol
# SOPrTr = 9.080 +/- 0.04 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.591 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 10.970 cm3/mol
# mole wt. = 74.6928 g/mol
# date: 5. May. 1978
#
C12A7 # Chlormayenite
(CaO)12(Al2O3)7 + 66 H+ = 12 Ca+2 + 14 Al+3 + 33 H2O
log_k 494.6924 # +/- 999999
delta_h -970.107 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.071876E+4 -1.695467E+0 7.694084E+5 3.836366E+3 -3.151087E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1955KIN_bj][1960KEL][1961GRJ/HER]
# delfG0 = -4412.865 +/- 999999 kcal/mol *
# delfH0 = -4643.480 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 249.70 +/- 1.5 cal/mol/K
# CpPrTr = 259.279 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 517.638 cm3/mol
# mole wt. = 1386.6572 g/mol
# date: 1. Dec. 2017
#
C2AH5
Ca2Al2(OH)10 + 10 H+ = + 2 Ca+2 + 2 Al+3 + 10 H2O
log_k 62.3980 # +/- 0.5
delta_h -117.43 kcal/mol # +/- 1.7
analytical_expression -1.757121E+3 -2.750178E-1 1.166226E+5 6.330433E+2 -4.983575E+6
#
# -Range: 0.01 - 50 deg C
#
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for C2AH5 = C2AH75 - 2.5 H2O
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 323K
# data source: [2015BAQ/MAT][2017POL]
# delfG0 = -979.08 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1082.70 +/- 1.5 kcal/mol *
# SOPrTr = 87.20 +/- 5.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 99.69 +/- 6.8 cal/mol/K
# mole vol. = 149.755 cm3/mol
# mole wt. = 304.1920 g/mol
# date: 24. Jan. 2019
#
C2AH75
Ca2Al2(OH)10 (H2O)2.5 + 10 H+ = + 2 Ca+2 + 2 Al+3 + 12.5 H2O
log_k 60.0963 # +/- 0.36
delta_h -108.58 kcal/mol # +/- 1.7
analytical_expression -1.757602E+3 -2.694661E-1 1.149655E+5 6.336777E+2 -4.938041E+6
#
# -Range: 0.01 - 50 deg C
#
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for C2AH75 = C2AH8 - 0.5 H2O
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 323K
# data source: [2015BAQ/MAT][2017POL]
# delfG0 = -1123.94 +/- 0.9 kcal/mol
# delfH0 = -1262.34 +/- 1.5 kcal/mol *
# SOPrTr = 109.94 +/- 4.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 123.64 +/- 6.8 cal/mol/K
# mole vol. = 179.715 cm3/mol
# mole wt. = 349.2300 g/mol
# date: 24. Jan. 2019
#
C2AH8
Ca2Al2(OH)10 (H2O)3 + 10 H+ = + 2 Ca+2 + 2 Al+3 + 13 H2O
log_k 59.9233 # +/- 0.21
delta_h -107.09 kcal/mol # +/- 1.5
analytical_expression -1.756320E+3 -2.681470E-1 1.146269E+5 6.333314E+2 -4.925232E+6
#
# -Range: 0.01 - 50 deg C
#
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 323K
# data source: [1943WEL/CLA][1953DAN/EIC][1958BUT/TAY][1958CAR][1959PER/TAY]
# [1968ROB][1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][2012LOT/PEL]
# delfG0 = -1152.52 +/- 0.8 kcal/mol
# delfH0 = -1297.99 +/- 1.2 kcal/mol *
# SOPrTr = 114.10 +/- 3.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 128.42 +/- 6.8 cal/mol/K

```

```

# mole vol. = 187.522 cm3/mol
# mole wt. = 358.2376 g/mol
# date: 24. Jan. 2019

C2F
Ca2Fe2O5 + 8 H+ = + 2 Ca+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 4 H2O
log_k      39.8353 # +/- 1.0
delta_h    -67.12 kcal/mol # +/- 3.2
analytical_expression  -1.145656E+3    -1.753521E-1    7.417606E+4    4.142321E+2    -3.200401E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1961KEL/KIN][1978ROB/HEM]
# delfG0 = -478.41 +/- 0.2 kcal/mol *
# delfH0 = -511.30 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 45.10 +/- 0.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 46.101 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 67.180 cm3/mol
# mole wt. = 271.8470 g/mol
# date: 22. Jan. 2018

C2FH75
Ca2Fe2(OH)10(H2O)2.5 + 8 H+ = + 2 Ca+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 11.5 H2O
log_k      38.9337 # +/- 10
delta_h    -50.828 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.209508E+3    -1.824190E-1    7.325528E+4    4.415762E+2    -3.157429E+6
# -Range: 0.01 - 50 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 323K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][Unpublished]
# delfG0 = -904.8 +/- 14 kcal/mol
# delfH0 = -1039.965 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 120.180 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 141.929 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 189.590 cm3/mol
# mole wt. = 406.9610 g/mol
# date: 31. Jan. 2018

#C2FH8
Ca2Fe2(OH)10(H2O)3 + 8 H+ = + 2 Ca+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 12 H2O
log_k      37.4706 # +/- 1.5
delta_h    -47.504 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.218369E+3    -1.837090E-1    7.295332E+4    4.451791E+2    -3.168095E+6
# -Range: 0.01 - 50 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 323K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][2008LOT/MAT_a]
# delfG0 = -935.14 +/- 2.4 kcal/mol
# delfH0 = -1077.447 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 124.100 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 148.365 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 193.590 cm3/mol
# mole wt. = 415.9686 g/mol
# date: 15. Sep. 2016

C2S_beta # Belite
Ca2SiO4 + 4 H+ = + 2 Ca+2 + 1 Si(OH)4
log_k      38.9425 # +/- 0.7
delta_h    -57.32 kcal/mol # +/- 1.0
analytical_expression  -8.899356E+2    -1.285782E-1    6.227457E+4    3.198699E+2    -2.947032E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1951KIN][1951TOD][1960KEL]
# delfG0 = -524.02 +/- 0.8 kcal/mol
# delfH0 = -551.42 +/- 0.8 kcal/mol
# SOPrTr = 30.50 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 30.732 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 51.790 cm3/mol
# mole wt. = 172.2391 g/mol
# date: 9. Oct. 2015

C2SH_alpha
Ca2HSiO4(OH) + 4 H+ = + 2 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 1 H2O
log_k      35.4834 # +/- 999999
delta_h    -47.245 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -9.138086E+2    -1.255882E-1    6.171381E+4    3.286794E+2    -2.982182E+6
# -Range: not reported
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [2010BLA/BOU][2012ART/SAS]
# delfG0 = -585.427 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -629.812 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 29.232 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 26.740 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 71.120 cm3/mol
# mole wt. = 190.2544 g/mol
# date: 15. Jul. 2015

C3A # Aluminat, Celite
Ca3Al2O6 + 12 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Al+3 + 6 H2O
log_k      113.0619 # +/- 0.8
delta_h    -199.20 kcal/mol # +/- 1.2
analytical_expression  -1.917240E+3    -3.022467E-1    1.435703E+5    6.879649E+2    -5.639506E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1955KIN_b][1956COU][1960KEL]
# delfG0 = -815.33 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -857.46 +/- 0.7 kcal/mol
# SOPrTr = 49.10 +/- 0.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 50.135 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 89.217 cm3/mol
# mole wt. = 270.1935 g/mol
# date: 9. Oct. 2015

C3S # Alite
Ca3SiO5 + 6 H+ = + 3 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 1 H2O
log_k      73.8175 # +/- 0.7
delta_h    -106.86 kcal/mol # +/- 1.0
analytical_expression  -1.182846E+3    -1.744644E-1    8.854065E+4    4.261666E+2    -3.805179E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry

```

```

# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1951KIN][1951TOD][1960KEL]
# delfG0 = -665.25 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -700.00 +/- 0.7 kcal/mol
# SOPrTr = 40.30 +/- 0.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 41.002 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 73.180 cm3/mol
# mole wt. = 228.3165 g/mol
# date: 08. Oct. 2015

C4AF
Ca4Al2Fe2O10 + 18 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 9 H2O
log_k      123.8173 # +/- 0.17
delta_h    -222.763 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -2.798639E+3  -4.335434E-1  1.954184E+5  1.005733E+3  -8.207899E+6
#
# -Range: not reported
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [1985BAB/MAT]
# delfG0 = -1144.604 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1214.200 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 78.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 94.678 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 130.200 cm3/mol
# mole wt. = 485.9630 g/mol
# date: 24. Oct. 2013

C4AH11
(Ca2Al(OH)6)2((OH)2)(H2O)4 + 14 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 18 H2O
log_k      105.6703 # +/- 0.36
delta_h    -160.8 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression  -2.312991E+3  -3.614169E-1  1.551919E+5  8.400801E+2  -6.473216E+6
#
# -Range: 0.01 - 55 oC
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for C4AH11 = C4AH13 - 2 H2O
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 328K
# data source: [1979EDE/SAT_a][2015BAQ/MAT]
# delfG0 = -1637.79 +/- 1.1 kcal/mol
# delfH0 = -1845.5 +/- 4 kcal/mol
# SOPrTr = 141 +/- 15 cal/mol/K *
# CpPrTr = 201 +/- 10 cal/mol/K
# mole vol. = 253.651 cm3/mol
# mole wt. = 524.4380 g/mol
# date: 10. Jan. 2019

C4AH13
(Ca2Al(OH)6)2((OH)2)(H2O)6 + 14 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 20 H2O
log_k      103.9301 # +/- 0.18
delta_h    -152.9 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression  -2.315491E+3  -3.573937E-1  1.538899E+5  8.415363E+2  -6.444191E+6
#
# -Range: 0.01 - 55 oC
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for C4AH13 = C4AH19 - 6 H2O
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 328K
# data source: [1979EDE/SAT_a][2015BAQ/MAT]
# delfG0 = -1753.54 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1990.0 +/- 4 kcal/mol
# SOPrTr = 157 +/- 15 cal/mol/K *
# CpPrTr = 220 +/- 10 cal/mol/K
# mole vol. = 273.983 cm3/mol
# mole wt. = 560.4684 g/mol
# date: 10. Jan. 2019

C4AH19
(Ca2Al(OH)6)2((OH)2)(H2O)12 + 14 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 26 H2O
log_k      103.7308 # +/- 0.11
delta_h    -144.0 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression  -2.302411E+3  -3.411943E-1  1.516392E+5  8.365384E+2  -6.283976E+6
#
# -Range: 0.01 - 55 oC
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Monosulfate_AIH09 = Monosulfate_AIH105 - 1.5 H2O
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 328K
# data source: [1948WEL/CLA][1953DAN/EIC][1954PEP/WEL][1958BUT/TAY][1958CAR][1959PER/TAY][1966FAU][1968ROB]
# [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][1991ATK/MAC][2001HOB][2007MAT/LOT][2014DIL/LOT]
# delfG0 = -2093.94 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -2408.80 +/- 4.3 kcal/mol *
# SOPrTr = 228 +/- 14 cal/mol/K
# CpPrTr = 278 +/- 10 cal/mol/K
# mole vol. = 370.881 cm3/mol
# mole wt. = 668.5596 g/mol
# date: 9. Jan. 2019

C4FH13
(Ca2Fe(OH)6)2((OH)2)(H2O)6 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 19 H2O
log_k      80.8617 # +/- 4
delta_h    -100 kcal/mol # +/- 30
analytical_expression  -1.869012E+3  -2.831296E-1  1.183178E+5  6.842085E+2  -4.940554E+6
#
# -Range: 0.01 - 55 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 328K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][2011DIL]
# delfG0 = -1537.0 +/- 5 kcal/mol
# delfH0 = -1763 +/- 30 kcal/mol *
# SOPrTr = 190 +/- 100 cal/mol/K
# CpPrTr = 233.047 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 286.000 cm3/mol
# mole wt. = 618.1994 g/mol
# date: 26. Jan. 2018

Ca(N03)2(s)
Ca(N03)2 + 4 H+ + 2 H2O = 1 Ca+2 + 2 NH4+ + 4 O2
log_k      -100.1815 # +/- 2
delta_h    155.81 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression  6.327774E+2  9.739956E-2  -7.665660E+4  -2.195328E+2  3.407061E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -177.58 +/- 0.2 kcal/mol *
# delfH0 = -224.28 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 46.2 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 35.696 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 65.635 cm3/mol
# mole wt. = 164.0878 g/mol
# date: 18. Dec. 2017

```

CA
CaAl₂O₄ + 8 H₂ = 1 Ca⁺² + 2 Al⁺³ + 4 H₂O
log_k 46.9550 # +/- 0.6
delta_h -104.43 kcal/mol # +/- 0.9
analytical_expression -1.319886E+3 -2.095311E-1 9.120143E+4 4.715941E+2 -3.867418E+6

-Range: 0.01 - 300 deg C

gflag: 1 [reported delfG0 used] Phase relations

extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]

data source: [1960KEL][1981ELI/ELI]

delfG0 = -527.90 +/- 0.5 kcal/mol *

delfH0 = -556.00 +/- 0.5 kcal/mol

SOPrTr = 27.30 +/- 0.2 cal/mol/K

CpPrTr = 28.822 +/- 999999 cal/mol/K

mole vol. = 53.829 cm³/mol

mole wt. = 158.0386 g/mol

date: 1. Dec. 2017

CA2
CaAl₄O₇ + 14 H₂ = 1 Ca⁺² + 4 Al⁺³ + 7 H₂O
log_k 68.2928 # +/- 1.1
delta_h -172.04 kcal/mol # +/- 1.6
analytical_expression -2.352588E+3 -3.754397E-1 1.589761E+5 8.393333E+2 -6.868340E+6

-Range: 0.01 - 300 deg C

gflag: 1 [reported delfG0 used] Phase relations

extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]

data source: [1981ELI/ELI]

delfG0 = -901.94 +/- 0.7 kcal/mol *

delfH0 = -950.70 +/- 0.7 kcal/mol

SOPrTr = 45.11 +/- 0.4 cal/mol/K

CpPrTr = 47.700 +/- 999999 cal/mol/K

mole vol. = 59.372 cm³/mol

mole wt. = 259.9998 g/mol

date: 1. Dec. 2017

CaBr₂(s)
CaBr₂ = 1 Ca⁺² + 2 Br⁻
log_k 24.8929 # +/- 1
delta_h -24.59 kcal/mol # +/- 1.0
analytical_expression -1.540689E+3 -2.434709E-1 9.422697E+4 5.585917E+2 -5.338632E+6

-Range: 0.01 - 300 deg C

gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & estimation

extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]

data source: [1998CHA]

delfG0 = -147.9 +/- 1 kcal/mol *

delfH0 = -163.29 +/- 1.0 kcal/mol

SOPrTr = 31.0 +/- 1 cal/mol/K

CpPrTr = 17.94 +/- 1.6 cal/mol/K

mole vol. = 106.418 cm³/mol

mole wt. = 199.8860 g/mol

date: 25. Oct. 2016

CaCl₂(H₂O)₂(s)
CaCl₂(H₂O)₂ = 1 Ca⁺² + 2 Cl⁻ + 2 H₂O
log_k 8.0001 # +/- 0.4
delta_h -10.74 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression -1.602310E+3 -2.550343E-1 9.104922E+4 5.824674E+2 -5.360298E+6

-Range: 0.01 - 117 deg C

gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry

extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 390K

data source: [1986MEI/GRO][1987GAR/PAR]

delfG0 = -297.34 +/- 0.5 kcal/mol *

delfH0 = -335.56 +/- 0.4 kcal/mol

SOPrTr = 46.58 +/- 0.8 cal/mol/K

CpPrTr = 40.920 +/- 999999 cal/mol/K

mole vol. = 79.467 cm³/mol

mole wt. = 147.0138 g/mol

date: 4. Sep. 2017

CaCl₂(s)
CaCl₂ = 1 Ca⁺² + 2 Cl⁻
log_k 11.7853 # +/- 0.5
delta_h -19.47 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression -1.581081E+3 -2.512908E-1 9.239937E+4 5.733391E+2 -5.404824E+6

-Range: 0.01 - 300 deg C

gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry

extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]

data source: [1971STU/PRO]

delfG0 = -178.80 +/- 0.4 kcal/mol

delfH0 = -190.20 +/- 0.3 kcal/mol

SOPrTr = 25.00 +/- 1.0 cal/mol/K

CpPrTr = 17.38 +/- 0.1 cal/mol/K

mole vol. = 52.338 cm³/mol

mole wt. = 110.9840 g/mol

date: 6. Jul. 2015

CAH10
CaAl₂(OH)₈(H₂O)₆ + 8 H₂ = 1 Ca⁺² + 2 Al⁺³ + 14 H₂O
log_k 38.3275 # +/- 0.2
delta_h -73.4 kcal/mol # +/- 15
analytical_expression -1.436312E+3 -2.189727E-1 8.857137E+4 5.190702E+2 -3.693499E+6

-Range: 0.01 - 30 deg C

gflag: 3 [delfG0 from log K data]

extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 303K

data source: [1958BUT/TAY][1958GAR][1959PER/TAY][1966FAU][1978HEL/DEL_a]

[1979EDE/SAT_a][2012LOT/PEL]

delfG0 = -1106.55 +/- 0.8 kcal/mol

delfH0 = -1270.2 +/- 15 kcal/mol *

SOPrTr = 130 +/- 50 cal/mol/K

CpPrTr = 122.594 +/- 999999 cal/mol/K

mole vol. = 193.000 cm³/mol

mole wt. = 338.1906 g/mol

date: 30. Jan. 2018

CaI₂(s)
CaI₂ = 1 Ca⁺² + 2 I⁻
log_k 21.6457 # +/- 0.5
delta_h -28.70 kcal/mol # +/- 0.7
analytical_expression -1.491217E+3 -2.385860E-1 8.955882E+4 5.420163E+2 -5.116634E+6

-Range: 0.01 - 300 deg C

gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry

extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]

data source: [1998CHA]

delfG0 = -127.41 +/- 0.5 kcal/mol *

```

# delfH0 = -128.30 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 34.725 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = 18.35 +/- 0.1 cal/mol/K
# mole vol. = 74.214 cm3/mol
# mole wt. = 293.8870 g/mol
# date: 17. Jun. 2016

Calcite
CaCO3 + 1 H+ = 1 Ca+2 + 1 HCO3-
log_k 1.8487 # +/- 0.21
delta_h -6.146 kcal/mol # +/- 0.42
analytical_expression -8.883059E+2 -1.414422E-1 5.005663E+4 3.222023E+2 -2.918263E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [192JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1961KEL/KIN][1978HEL/DEL][1982PLU/BUS]
# delfG0 = -269.880 +/- 0.21 kcal/mol
# delfH0 = -288.552 +/- 0.37 kcal/mol
# SOPrTr = 22.150 +/- 2.03 cal/mol/K
# CpPrTr = 19.57 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 36.934 cm3/mol
# mole wt. = 100.0872 g/mol
# date: 9. Mar. 1990

Calcium
Ca + 2 H+ + 0.5 O2 = 1 Ca+2 + 1 H2O
log_k 139.8467 # +/- 0.25
delta_h -196.7 kcal/mol # +/- 0.20
analytical_expression -4.249259E+2 -6.602985E-2 6.663444E+4 1.525067E+2 -1.457858E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 9.94 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 6.276 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 26.195 cm3/mol
# mole wt. = 40.0780 g/mol
# date: 29. Oct. 2015

Cassiterite
SnO2 + 2 H+ = 1 Sn+2 + 0.5 O2 + 1 H2O
log_k -46.1721 # +/- 0.35
delta_h 66.943 kcal/mol # +/- 0.23
analytical_expression -1.876914E+2 -2.750390E-2 -5.080449E+3 6.942911E+1 -4.478648E+5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1929HUT/MAG][1936KAP/ZIL][1978COX][2004GUR/GAV]
# delfG0 = -124.271 +/- 0.13 kcal/mol *
# delfH0 = -138.810 +/- 0.10 kcal/mol
# SOPrTr = 12.50 +/- 0.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 13.043 +/- 0.21 cal/mol/K
# mole vol. = 21.534 cm3/mol
# mole wt. = 150.7088 g/mol
# date: 11. Jun. 2018

Celadonite
K(MgAl)(Si4O10(OH)2 + 6 H+ + 4 H2O = 1 K+ + 1 Mg+2 + 1 Al+3 + 4 Si(OH)4
log_k 8.4545 # +/- 2
delta_h -28.701 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.109570E+3 -2.835175E-1 1.280616E+5 7.503313E+2 -7.432854E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][Unpublished]
# delfG0 = -1305.9 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -1394.912 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 74.900 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 66.937 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 157.100 cm3/mol
# mole wt. = 396.7355 g/mol
# date: 21. Jul. 2016

Celestite
SrSO4 = 1 Sr+2 + 1 SO4-2
log_k -6.5450 # +/- 0.09
delta_h -0.31 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression -1.702765E+3 -2.654291E-1 9.599745E+4 6.144547E+2 -5.959333E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1908KOH][1935CAM/COO][1940BEL][1960KEL][1966STR][1971DAV/COL]
# [1974NOR][1978CUL/LAT][1978HEL/DEL][1982WAG/EVA][1987REA/ARM]
# delfG0 = -321.619 +/- 0.25 kcal/mol
# delfH0 = -348.76 +/- 0.6 kcal/mol
# SOPrTr = 28.0 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 25.765 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 46.250 cm3/mol
# mole wt. = 183.6836 g/mol
# date: 2. Feb. 2017

Cerussite
PbCO3 + 1 H+ = + 1 Pb+2 + 1 HCO3-
log_k -2.8404 # +/- 0.08
delta_h 3.22 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression -9.138839E+2 -1.434129E-1 5.024385E+4 3.314468E+2 -3.098416E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Pb+2 + CO3-2 = PbCO3
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1934AND][1959UGG][1961NAS/MER][1976HEM][1979PAT/OBR][1982BIL/SCH][1984TAY/LOP]
# [1989DOR/MAR][1992CHE/GIE][1999LOT/OCH][2012BIS/GOG]
# delfG0 = -149.893 +/- 0.12 kcal/mol
# delfH0 = -167.90 +/- 0.3 kcal/mol *
# SOPrTr = 30.0 +/- 1 cal/mol/K
# CpPrTr = 20.84 +/- 0.3 cal/mol/K
# mole vol. = 40.662 cm3/mol
# mole wt. = 267.2092 g/mol
# date: 23. Oct. 2019

Cesium
Cs + 1 H+ + 0.25 O2 = + 1 Cs+ + 0.5 H2O

```

```

log_k      72.5988 # +/- 0.11
delta_h    -95.103 kcal/mol # +/- 0.03
analytical_expression  -1.264034E+2   -1.656046E-2   2.933691E+4   4.546115E+1   -6.176278E+5
#
-Range: 0.01 - 29 deg C
#
gflag: 1 [reported delfG0 used]
#
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 301.55K
#
data source: [1978COX] [1998CHA]
#
delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
#
delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
#
SOPrTr = 20.37 +/- 0.1 cal/mol/K
#
CpPrTr = 7.75 +/- 0.4 cal/mol/K
#
mole vol. = 68.863 cm3/mol
#
mole wt. = 132.9055 g/mol
#
date: 08. Apr. 2019

Chabazite_alk
K0.3Na1.6333Ca0.2667(Al2.4667Si9.5333O24)(H2O)12 + 9.8668 H+ + 2.1332 H2O = + 0.3 K+ + 1.6333 Na+ + 0.2667 Ca+2 + 2.4667 Al+3 + 9.5333 Si(OH)4
log_k      3.1560 # +/- 4
delta_h    -45.2 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression  -4.457694E+3   -5.935764E-1   2.663052E+5   1.583892E+3   -1.552207E+7
#
-Range: 0.01 - 227 deg C
#
gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
#
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
#
data source: [2001CHI/APP] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
#
delfG0 = -3303.0 +/- 4 kcal/mol
#
delfH0 = -3601.4 +/- 9 kcal/mol
#
SOPrTr = 343.4 +/- 35 cal/mol/K
#
CpPrTr = 270.753 +/- 999999 cal/mol/K
#
mole vol. = 499.333 cm3/mol
#
mole wt. = 994.4395 g/mol
#
date: 10. Aug. 2016

Chabazite_dia
K0.6667Na1.2333Ca0.4(Al2.7Si9.3024)(H2O)12 + 10.8 H+ + 1.2 H2O = + 0.6667 K+ + 1.2333 Na+ + 0.4 Ca+2 + 2.7 Al+3 + 9.3 Si(OH)4
log_k      5.5900 # +/- 4
delta_h    -52.5 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression  -4.525508E+3   -6.085230E-1   2.707058E+5   1.608744E+3   -1.565987E+7
#
-Range: 0.01 - 227 deg C
#
gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
#
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
#
data source: [2001CHI/APP] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
#
delfG0 = -3324.1 +/- 4 kcal/mol
#
delfH0 = -3622.9 +/- 9 kcal/mol
#
SOPrTr = 344.7 +/- 34 cal/mol/K
#
CpPrTr = 273.713 +/- 999999 cal/mol/K
#
mole vol. = 499.333 cm3/mol
#
mole wt. = 1004.6658 g/mol
#
date: 10. Aug. 2016

Chabazite_Ca
Ca2(Al4Si8O24)(H2O)12 + 16 H+ = + 2 Ca+2 + 4 Al+3 + 8 Si(OH)4 + 4 H2O
log_k      22.7380 # +/- 4
delta_h    -100.4 kcal/mol # +/- 9
analytical_expression  -5.045258E+3   -7.062983E-1   3.049208E+5   1.796647E+3   -1.687419E+7
#
-Range: 0.01 - 227 deg C
#
gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
#
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
#
data source: [2001ARM/GUN] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
#
delfG0 = -3429.4 +/- 4 kcal/mol
#
delfH0 = -3740.3 +/- 8 kcal/mol
#
SOPrTr = 296.8 +/- 29 cal/mol/K
#
CpPrTr = 273.234 +/- 999999 cal/mol/K
#
mole vol. = 483.498 cm3/mol
#
mole wt. = 1012.9354 g/mol
#
date: 26. Jul. 2016

#Chabazite_CaII
Ca2(Al4Si8O24)(H2O)12 + 16 H+ = + 4 H2O + 2 Ca+2 + 4 Al+3 + 8 Si(OH)4
log_k      22.7380 # +/- 4
delta_h    -102.876 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -4.912113E+3   -6.787140E-1   3.000890E+5   1.745242E+3   -1.669319E+7
#
-Range: 0.01 - 300 deg C
#
gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
#
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
#
data source: [1978HEL/DEL_b] [2011ART/SAS_a]
#
delfG0 = -3429.4 +/- 4 kcal/mol
#
delfH0 = -3737.839 +/- 999999 kcal/mol
#
SOPrTr = 305.800 +/- 999999 cal/mol/K
#
CpPrTr = 281.552 +/- 999999 cal/mol/K
#
mole vol. = 495.520 cm3/mol
#
mole wt. = 1012.9354 g/mol
#
date: 3. Aug. 2016

Chabazite_K
K4(Al4Si8O24)(H2O)12 + 16 H+ = + 4 K+ + 4 Al+3 + 8 Si(OH)4 + 4 H2O
log_k      18.9996 # +/- 4
delta_h    -90.0 kcal/mol # +/- 9
analytical_expression  -4.852840E+3   -6.813727E-1   2.919831E+5   1.729077E+3   -1.625175E+7
#
-Range: 0.01 - 227 deg C
#
gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
#
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
#
data source: [2001ARM/GUN] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
#
delfG0 = -3440.3 +/- 4 kcal/mol
#
delfH0 = -3732.2 +/- 8 kcal/mol
#
SOPrTr = 403.3 +/- 31 cal/mol/K
#
CpPrTr = 301.481 +/- 999999 cal/mol/K
#
mole vol. = 483.498 cm3/mol
#
mole wt. = 1089.1726 g/mol
#
date: 3. Aug. 2016

Chabazite_Na
Na4(Al4Si8O24)(H2O)12 + 16 H+ = + 4 Na+ + 4 Al+3 + 8 Si(OH)4 + 4 H2O
log_k      27.1536 # +/- 4
delta_h    -100.4 kcal/mol # +/- 9
analytical_expression  -5.045156E+3   -6.893563E-1   3.060363E+5   1.794701E+3   -1.684443E+7
#
-Range: 0.01 - 227 deg C
#
gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
#
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
#
data source: [2001ARM/GUN] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
#
delfG0 = -3409.5 +/- 4 kcal/mol
#
delfH0 = -3710.4 +/- 8 kcal/mol
#
SOPrTr = 360.4 +/- 31 cal/mol/K
#
CpPrTr = 281.933 +/- 999999 cal/mol/K

```

```

# mole vol. = 483.498 cm3/mol
# mole wt. = 1024.7384 g/mol
# date: 3. Aug. 2016

Chalcanthite
CuSO4(H2O)5 = + 1 Cu+2 + 1 SO4-2 + 5 H2O
log_k -2.6205 # +/- 0.2
delta_h 1.57 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression -1.757257E+3 -2.674311E-1 9.697468E+4 6.361308E+2 -5.772748E+6
# -Range: 0.01 - 96 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 369K
# data source: [1960KEL] [1975BAC/TIT] [1982WAG/EVA]
# delfG0 = -449.270 +/- 0.02 kcal/mol
# delfH0 = -544.85 +/- 0.6 kcal/mol *
# SOPrTr = 71.8 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 66.922 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 110.314 cm3/mol
# mole wt. = 249.6856 g/mol
# date: 25. Jun. 2019

Chalcedony
SiO2 + 2 H2O = 1 Si(OH)4
log_k -3.5214 # +/- 0.23
delta_h 4.8 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression -2.846794E+2 -3.482158E-2 1.662977E+4 1.005385E+2 -1.156809E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1966FOU/ROW] [1978HEL/DEL] [1983ARN/GUN]
# delfG0 = -204.335 +/- 0.53 kcal/mol
# delfH0 = -217.3 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 10.04 +/- 4.0 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.627 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 22.688 cm3/mol
# mole wt. = 60.0843 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Chalcocite
Cu2S + 2.5 O2 + 2 H+ = + 2 Cu+2 + 1 SO4-2 + 1 H2O
log_k 141.1234 # +/- 1.1
delta_h -228.07 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression -4.128680E+03 -6.106081E-01 2.883419E+05 1.477182E+03 -1.514689E+07
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1974MIL] [1978HEL/DEL]
# delfG0 = -20.61 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -19.00 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 28.9 +/- 1 cal/mol/K
# CpPrTr = 18.241 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 27.480 cm3/mol
# mole wt. = 159.1520 g/mol
# date: 3. Jun. 2016

Chalcopyrite
CuFeS2 + 4 O2 = 1 Cu+2 + 1 Fe+2 + 2 SO4-2
log_k 244.0700 # +/- 1.8
delta_h -385.096 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -4.492527E+3 -7.051206E-1 3.412790E+5 1.611909E+3 -1.656709E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1970PAN/KIN] [1978HEL/DEL]
# delfG0 = -44.90 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -44.453 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 31.150 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 23.10 +/- 0.1 cal/mol/K
# mole vol. = 42.830 cm3/mol
# mole wt. = 183.5110 g/mol
# date: 5. May. 1978

Chlorapatite
Ca10(PO4)6Cl2 + 6 H+ = + 10 Ca+2 + 6 HP04-2 + 2 Cl-
log_k -20.6575 # +/- 14
delta_h -76 kcal/mol # +/- 20
analytical_expression -1.242949E+4 -1.977670E+0 7.040315E+5 4.489994E+3 -4.204574E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1958GOT] [1989TAC/STO] [1991BEN/SOM] [1991ZHU/SVE] [2005CRU/MIN] [2008KRI/JEN]
# [2010DAC/HAR] [2011BAB/JEN]
# delfG0 = -2974 +/- 20 kcal/mol *
# delfH0 = -3155 +/- 20 kcal/mol
# SOPrTr = 191.98 +/- 1.5 cal/mol/K
# CpPrTr = 180.43 +/- 2.1 cal/mol/K
# mole vol. = 324.569 cm3/mol
# mole wt. = 1041.5138 g/mol
# date: 27. Jun. 2016

Chrysotile
Mg3Si2O5(OH)4 + 6 H+ = + 3 Mg+2 + 2 Si(OH)4 + 1 H2O
log_k 31.5025 # +/- 1.7
delta_h -57.4 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -1.683270E+3 -2.317724E-1 1.066348E+5 6.013576E+2 -5.493686E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1967KIN/BAR] [1978HEL/DEL] [1997RIM_a]
# delfG0 = -965.04 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1043.3 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 52.90 +/- 0.8 cal/mol/K
# CpPrTr = 65.5 +/- 1 cal/mol/K
# mole vol. = 108.500 cm3/mol
# mole wt. = 277.1124 g/mol
# date: 5. Sep. 2016

Clinocllore_14A
Mg5Al(AlSi3)O10(OH)8 + 16 H+ = + 5 Mg+2 + 2 Al+3 + 3 Si(OH)4 + 6 H2O
log_k 67.9937 # +/- 2.6
delta_h -154.555 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.721785E+3 -5.367307E-1 2.367239E+5 1.328683E+3 -1.172635E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C

```

```

# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL]
# delfG0 = -1961.70 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -2116.964 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 111.200 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 136.901 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 207.110 cm3/mol
# mole wt. = 555.7974 g/mol
# date: 5. May. 1978

Clinochlore_7A
Mg2.5Al0.5(A10.5Si1.5)O5(OH)4 + 8 H+ = + 2.5 Mg+2 + 1 Al+3 + 1.5 Si(OH)4 + 3 H2O
log_k 35.6821 # +/- 999999
delta_h -79.161 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.861024E+03 -2.685789E-01 1.185837E+05 6.646963E+02 -5.840087E+06
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility & stability relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL]
# delfG0 = -978.55 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1056.599 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 53.250 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 65.962 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 105.750 cm3/mol
# mole wt. = 277.8987 g/mol
# date: 21. Jul. 2016

Clinoptilolite_alk
K2.3Na1.7Ca1.4(A16.8Si29.2O72)(H2O)26 + 27.2 H+ + 18.8 H2O = + 2.3 K+ + 1.7 Na+ + 1.4 Ca+2 + 6.8 Al+3 + 29.2 Si(OH)4
log_k -3.7468 # +/- 13
delta_h -110.5 kcal/mol # +/- 32
analytical_expression -1.306374E+04 -1.752201E+00 7.798875E+05 4.642482E+03 -4.630407E+07
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001CHI/APP] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -9315.4 +/- 13 kcal/mol
# delfH0 = -10093.1 +/- 29 kcal/mol
# SOPrTr = 852 +/- 110 cal/mol/K
# CpPrTr = 708.457 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1264.100 cm3/mol
# mole wt. = 2809.0436 g/mol
# date: 4. Apr. 2016

Clinoptilolite_dia
K0.8Na0.4Ca2.8(A16.8Si29.2O72)(H2O)26 + 27.2 H+ + 18.8 H2O = + 0.8 K+ + 0.4 Na+ + 2.8 Ca+2 + 6.8 Al+3 + 29.2 Si(OH)4
log_k -3.7946 # +/- 13
delta_h -114.1 kcal/mol # +/- 32
analytical_expression -1.313584E+4 -1.767054E+0 7.843466E+5 4.668453E+3 -4.654715E+7
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001CHI/APP] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -9317.8 +/- 13 kcal/mol
# delfH0 = -10106.1 +/- 29 kcal/mol
# SOPrTr = 791 +/- 110 cal/mol/K
# CpPrTr = 695.037 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1264.100 cm3/mol
# mole wt. = 2776.6186 g/mol
# date: 4. Apr. 2016

Clinoptilolite_Ca
Ca3(A16Si30O72)(H2O)20 + 24 H+ + 28 H2O = + 3 Ca+2 + 6 Al+3 + 30 Si(OH)4
log_k -14.4663 # +/- 13
delta_h -87.6 kcal/mol # +/- 33
analytical_expression -1.277276E+4 -1.709043E+0 7.630035E+5 4.536859E+3 -4.599971E+7
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -8915.3 +/- 13 kcal/mol
# delfH0 = -9635.2 +/- 29 kcal/mol
# SOPrTr = 669 +/- 110 cal/mol/K
# CpPrTr = 622.140 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1257.605 cm3/mol
# mole wt. = 2636.9510 g/mol
# date: 25. Jul. 2016

Clinoptilolite_K
K6(A16Si30O72)(H2O)20 + 24 H+ + 28 H2O = + 6 K+ + 6 Al+3 + 30 Si(OH)4
log_k -20.1105 # +/- 13
delta_h -72.4 kcal/mol # +/- 33
analytical_expression -1.248419E+4 -1.671655E+0 7.436023E+5 4.435504E+3 -4.506605E+7
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -8931.7 +/- 13 kcal/mol
# delfH0 = -9622.7 +/- 29 kcal/mol
# SOPrTr = 829 +/- 110 cal/mol/K
# CpPrTr = 664.512 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1257.605 cm3/mol
# mole wt. = 2751.3068 g/mol
# date: 25. Jul. 2016

Clinoptilolite_Na
Na6(A16Si30O72)(H2O)20 + 24 H+ + 28 H2O = + 6 Na+ + 6 Al+3 + 30 Si(OH)4
log_k -7.8062 # +/- 14
delta_h -88.1 kcal/mol # +/- 33
analytical_expression -1.277274E+4 -1.683630E+0 7.647268E+5 4.533940E+3 -4.595507E+7
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -8885.4 +/- 14 kcal/mol
# delfH0 = -9589.9 +/- 29 kcal/mol
# SOPrTr = 765 +/- 110 cal/mol/K
# CpPrTr = 635.190 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1257.605 cm3/mol
# mole wt. = 2654.6557 g/mol
# date: 25. Jul. 2016

```

```

Clinozoisite
Ca2Al3Si3O12(OH) + 13 H+ = + 2 Ca+2 + 3 Al+3 + 3 Si(OH)4 + 1 H2O
log_k      44.0083 # +/- 1.4
delta_h    -117.600 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -2.991872E+3   -4.436802E-1   1.894920E+5   1.067582E+3   -9.694662E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], stability & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -1549.24 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1643.781 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 70.640 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 83.099 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 136.200 cm3/mol
# mole wt. = 454.3571 g/mol
# date: 6. Jul. 2015

Coesite
SiO2 + 2 H2O = 1 Si(OH)4
log_k      -2.9386 # +/- 0.8
delta_h     4.107 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -2.863734E+2   -3.505669E-2   1.686826E+4   1.011823E+2   -1.160971E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1967HOL/KLE][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -203.54 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -216.614 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 9.650 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.407 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 20.641 cm3/mol
# mole wt. = 60.0843 g/mol
# date: 6. Jul. 2015

Copper
Cu + 0.5 O2 + 2 H+ = 1 Cu+2 + 1 H2O
log_k      31.5120 # +/- 0.25
delta_h    -51.17 kcal/mol # +/- 0.20
analytical_expression  -4.814136E+2   -7.248799E-2   3.777175E+4   1.721133E+2   -1.602859E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 7.923 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 5.857 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 7.113 cm3/mol
# mole wt. = 63.5460 g/mol
# date: 27. May. 2016

Cordierite
Mg2Al3(AlSi5)O18 + 16 H+ + 2 H2O = + 2 Mg+2 + 4 Al+3 + 5 Si(OH)4
log_k      53.5543 # +/- 2.1
delta_h    -163.3 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression  -4.162580E+3   -6.033022E-1   2.660031E+5   1.478712E+3   -1.379187E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -2061.28 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -2183.2 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 97.33 +/- 0.9 cal/mol/K
# CpPrTr = 108.099 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 233.220 cm3/mol
# mole wt. = 584.9529 g/mol
# date: 6. Jul. 2015

Cordierite(hyd)
Mg2Al3(AlSi5)O18(H2O) + 16 H+ + 1 H2O = + 2 Mg+2 + 4 Al+3 + 5 Si(OH)4
log_k      51.0752 # +/- 2.14
delta_h    -159.168 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -4.167887E+3   -6.026779E-1   2.653305E+5   1.480645E+3   -1.378166E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL]
# delfG0 = -2121.35 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -2255.676 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 111.430 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 119.499 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 241.220 cm3/mol
# mole wt. = 602.9682 g/mol
# date: 6. Jul. 2015

Corundum
Al2O3 + 6 H+ = + 2 Al+3 + 3 H2O
log_k      18.3127 # +/- 0.51
delta_h    -61.812 kcal/mol # +/- 0.78
analytical_expression  -1.017926E+3   -1.638394E-1   6.563151E+4   3.629080E+2   -2.936500E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995POK/HEL]
# delfG0 = -378.167 +/- 0.31 kcal/mol *
# delfH0 = -400.500 +/- 0.31 kcal/mol
# SOPrTr = 12.170 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 16.304 +/- 0.05 cal/mol/K
# mole vol. = 25.575 cm3/mol
# mole wt. = 101.9612 g/mol
# date: 6. Jul. 2015

Cotunnite
PbCl2 = + 1 Pb+2 + 2 Cl-
log_k      -4.8276 # +/- 0.2
delta_h     6.25 kcal/mol # +/- 0.2
analytical_expression  -1.593187E+3   -2.517449E-1   8.817982E+4   5.778710E+2   -5.532279E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -75.08 +/- 0.3 kcal/mol *
# delfH0 = -85.90 +/- 0.2 kcal/mol

```

```

# SOPrTr = 32.50 +/- 0.5 cal/mol/K
# CpPrTr = 18.42 +/- 0.4 cal/mol/K
# mole vol. = 47.068 cm3/mol
# mole wt. = 278.1054 g/mol
# date: 23. Oct. 2019

Covellite
CuS + 2 O2 = 1 Cu+2 + 1 SO4-2
log_k      115.4947 # +/- 1.10
delta_h    -183.4 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  -2.248936E+3   -3.521519E-1   1.687858E+5   8.068486E+2   -8.282232E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1974MIL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -12.6 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -12.5 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 15.90 +/- 0.4 cal/mol/K
# CpPrTr = 11.387 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 20.420 cm3/mol
# mole wt. = 95.6060 g/mol
# date: 5. May. 1978

Cristobalite
SiO2 + 2 H2O = + 1 Si(OH)4
log_k      -3.3051 # +/- 0.4
delta_h    4.40 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression  -3.477876E+2   -4.311823E-2   2.046139E+4   1.230055E+2   -1.391855E+6
# -Range: 0.01 - 270 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 543K
# data source: [1971STU/PRO][1977WAL/HEL][1978HEL/DEL][Unpublished]
# delfG0 = -204.04 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -216.91 +/- 0.4 kcal/mol *
# SOPrTr = 10.372 +/- 0.03 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.79 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 25.740 cm3/mol
# mole wt. = 60.0843 g/mol
# date: 20. Mar. 2019

Cristobalite_alpha
SiO2 + 2 H2O = + 1 Si(OH)4
log_k      -3.2758 # +/- 0.8
delta_h    4.4 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  -4.239420E+2   -5.290986E-2   2.507417E+4   1.500591E+2   -1.686040E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1977WAL/HEL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -204.0 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -216.9 +/- 1 kcal/mol *
# SOPrTr = 10.372 +/- 0.03 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.690 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 25.740 cm3/mol
# mole wt. = 60.0843 g/mol
# date: 20. Mar. 2019

Cristobalite_beta
SiO2 + 2 H2O = + 1 Si(OH)4
log_k      -2.8360 # +/- 0.8
delta_h    3.285 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -4.172435E+2   -5.234554E-2   2.458971E+4   1.477956E+2   -1.615031E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1977WAL/HEL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -203.4 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -215.792 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 11.963 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 6.357 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 27.380 cm3/mol
# mole wt. = 60.0843 g/mol
# date: 20. Mar. 2019

Cronstedtite_7A
Fe2Fe(FeSi)O5(OH)4 + 8 H+ = + 4 Fe+2 + 0.5 O2 + 1 Si(OH)4 + 4 H2O
log_k      -1.7137 # +/- 2
delta_h    -13.003 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.525095E+03   -2.214266E-01   8.497760E+04   5.480676E+02   -4.602355E+06
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][Unpublished]
# delfG0 = -627.5 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -699.055 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 73.500 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 83.230 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 110.900 cm3/mol
# mole wt. = 399.4919 g/mol
# date: 21. Jul. 2016

Cs20(s)
Cs20 + 2 H+ = + 2 Cs+ + 1 H2O
log_k      89.7259 # +/- 0.2
delta_h    -108.967 kcal/mol # +/- 0.29
analytical_expression  -1.699730E+2   -2.124463E-2   3.539202E+4   6.313111E+1   -7.900378E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1974SET/JOH][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -73.70 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -82.690 +/- 0.29 kcal/mol
# SOPrTr = 35.10 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 20.971 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 60.604 cm3/mol
# mole wt. = 281.8103 g/mol
# date: 24. Mar. 2016

CsCl(s)
CsCl = 1 Cs+ + 1 Cl-
log_k      1.5093 # +/- 0.2
delta_h    4.24 kcal/mol # +/- 0.2
analytical_expression  -7.355395E+2   -1.144882E-1   4.146160E+4   2.676084E+2   -2.671739E+6

```

```

# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -99.03 +/- 0.2 kcal/mol *
# delfH0 = -105.84 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 24.183 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = 12.534 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 42.195 cm3/mol
# mole wt. = 168.3585 g/mol
# date: 22. Jun. 2016

CSH165
(CaO)1.65(SiO2)(H2O)2.1167 + 3.3 H+ = 1.65 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 1.7667 H2O
log_k 29.0129 # +/- 0.5
delta_h -39.446 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -7.952197E+2 -1.084834E-1 5.343236E+4 2.855904E+2 -2.605524E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000POI] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT]
#
# delfG0 = -591.475 +/- 0.50 kcal/mol
# delfH0 = -644.560 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 50.339 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 44.255 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 77.406 cm3/mol
# mole wt. = 190.7448 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

CSH155
(CaO)1.55(SiO2)(H2O)2.0167 + 3.1 H+ = 1.55 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 1.5667 H2O
log_k 26.7365 # +/- 0.5
delta_h -36.298 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -7.651133E+2 -1.038822E-1 5.116669E+4 2.746350E+2 -2.520831E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000POI] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfG0 = -570.031 +/- 0.50 kcal/mol
# delfH0 = -621.064 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 48.200 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 42.158 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 74.746 cm3/mol
# mole wt. = 183.3355 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

CSH145
(CaO)1.45(SiO2)(H2O)1.9167 + 2.9 H+ = 1.45 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 1.3667 H2O
log_k 24.4681 # +/- 0.5
delta_h -33.157 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -7.349697E+2 -9.927531E-2 4.890066E+4 2.636672E+2 -2.436037E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000POI] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfG0 = -548.576 +/- 0.50 kcal/mol
# delfH0 = -597.562 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 46.046 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 40.061 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 72.135 cm3/mol
# mole wt. = 175.9263 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

CSH135
(CaO)1.35(SiO2)(H2O)1.8167 + 2.7 H+ = 1.35 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 1.1667 H2O
log_k 22.2137 # +/- 0.5
delta_h -30.030 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -7.047864E+2 -9.466280E-2 4.663575E+4 2.526863E+2 -2.351151E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000POI] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfG0 = -527.102 +/- 0.50 kcal/mol
# delfH0 = -574.046 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 43.873 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 37.965 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 69.573 cm3/mol
# mole wt. = 168.5170 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

CSH125
(CaO)1.25(SiO2)(H2O)1.7167 + 2.5 H+ = 1.25 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 0.9667 H2O
log_k 19.9783 # +/- 0.5
delta_h -26.921 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -6.745643E+2 -9.004481E-2 4.437318E+4 2.416932E+2 -2.266163E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000POI] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfG0 = -505.602 +/- 0.50 kcal/mol
# delfH0 = -550.511 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 41.676 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 35.867 +/- 999999 cal/mol/K

```

```

# mole vol. = 67.059 cm3/mol
# mole wt. = 161.1077 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

CSH115
(CaO)1.15(SiO2)(H2O)1.6167 + 2.3 H+ = 1.15 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 0.7667 H2O
log_k 17.7737 # +/- 0.5
delta_h -23.844 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -6.443056E+2 -8.542215E-2 4.211614E+4 2.306893E+2 -2.181091E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfg0 from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfg0 = -484.060 +/- 0.50 kcal/mol
# delfh0 = -526.945 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 39.447 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 33.770 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 64.585 cm3/mol
# mole wt. = 153.6985 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

CSH105
(CaO)1.05(SiO2)(H2O)1.5167 + 2.1 H+ = 1.05 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 0.5667 H2O
log_k 15.6153 # +/- 0.5
delta_h -20.817 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -6.140223E+2 -8.079728E-2 3.986906E+4 2.196801E+2 -2.095978E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfg0 from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfg0 = -462.455 +/- 0.50 kcal/mol
# delfh0 = -503.329 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 37.171 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 31.674 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 62.131 cm3/mol
# mole wt. = 146.2892 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

CSH100
(CaO)1.00(SiO2)(H2O)1.4667 + 2 H+ = 1 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 0.4667 H2O
log_k 14.5621 # +/- 0.5
delta_h -19.331 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -5.988782E+2 -7.848517E-2 3.875180E+4 2.141767E+2 -2.053428E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfg0 from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfg0 = -451.617 +/- 0.50 kcal/mol
# delfh0 = -491.493 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 36.008 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 30.625 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 60.901 cm3/mol
# mole wt. = 142.5846 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

CSH095
(CaO)0.95(SiO2)(H2O)1.4167 + 1.9 H+ = + 0.95 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 0.3667 H2O
log_k 13.5331 # +/- 0.5
delta_h -17.871 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -5.837385E+2 -7.617465E-2 3.764066E+4 2.086768E+2 -2.010917E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfg0 from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfg0 = -440.746 +/- 0.50 kcal/mol
# delfh0 = -479.631 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 34.819 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 29.577 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 59.657 cm3/mol
# mole wt. = 138.8800 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

CSH090
(CaO)0.90(SiO2)(H2O)1.3667 + 1.8 H+ = + 0.9 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 0.2667 H2O
log_k 12.5371 # +/- 0.5
delta_h -16.445 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -5.686077E+2 -7.386706E-2 3.653769E+4 2.031833E+2 -1.968445E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfg0 from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfg0 = -429.830 +/- 0.50 kcal/mol
# delfh0 = -467.736 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 33.592 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 28.529 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 58.388 cm3/mol
# mole wt. = 135.1753 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

CSH085
(CaO)0.85(SiO2)(H2O)1.3167 + 1.7 H+ = + 0.85 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 0.1667 H2O
log_k 11.5902 # +/- 0.5
delta_h -15.061 kcal/mol # +/- 999999

```

```

analytical_expression -5.534899E+2 -7.156446E-2 3.544582E+4 1.977009E+2 -1.926064E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfG0 = -418.847 +/- 0.50 kcal/mol
# delfH0 = -455.798 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 32.286 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 27.481 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 57.075 cm3/mol
# mole wt. = 131.4707 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

#CSH08333 # [SSAS end-member component]
# (CaO)0.8333(SiO2)(H2O)1.3 + 1.6666 H+ = + 0.8333 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 0.1333 H2O
# log_k 11.2957 # +/- 0.09
# delta_h -14.61 kcal/mol # +/- 2.0
# analytical_expression -5.483952E+2 -7.079693E-2 3.508235E+4 1.958589E+2 -1.911933E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfG0 = -415.149 +/- 0.47 kcal/mol
# delfH0 = -451.80 +/- 2.0 kcal/mol
# SOPrTr = 31.79 +/- 7.0 cal/mol/K *
# CpPrTr = 27.16 +/- 6.5 cal/mol/K
# mole vol. = 56.623 cm3/mol
# mole wt. = 130.2334 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

CSH080
# (CaO)0.80(SiO2)(H2O)1.248 + 1.6 H+ = + 0.8 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 0.048 H2O
# log_k 10.6843 # +/- 0.5
# delta_h -13.915 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -5.368327E+2 -6.932925E-2 3.427007E+4 1.916929E+2 -1.874483E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data], SSAS between SiO2(am) & CSH08333
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfG0 = -406.748 +/- 0.50 kcal/mol
# delfH0 = -442.345 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 31.276 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 26.378 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 55.625 cm3/mol
# mole wt. = 127.4292 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

CSH075
# (CaO)0.75(SiO2)(H2O)1.17 + 1.5 H+ + 0.08 H2O = + 0.75 Ca+2 + 1 Si(OH)4
# log_k 9.8091 # +/- 0.5
# delta_h -12.873 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -5.193782E+2 -6.712725E-2 3.304857E+4 1.854200E+2 -1.818266E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data], SSAS between SiO2(am) & CSH08333
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfG0 = -394.080 +/- 0.50 kcal/mol
# delfH0 = -428.152 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 30.317 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 25.247 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 54.111 cm3/mol
# mole wt. = 123.2201 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

CSH065
# (CaO)0.65(SiO2)(H2O)1.014 + 1.3 H+ + 0.336 H2O = + 0.65 Ca+2 + 1 Si(OH)4
# log_k 8.1077 # +/- 0.5
# delta_h -10.788 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -4.844599E+2 -6.272976E-2 3.060774E+4 1.728889E+2 -1.705966E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data], SSAS between SiO2(am) & CSH08333
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfG0 = -368.677 +/- 0.50 kcal/mol
# delfH0 = -399.768 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 28.174 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 22.988 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 51.027 cm3/mol
# mole wt. = 114.8020 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

CSH055
# (CaO)0.55(SiO2)(H2O)0.858 + 1.1 H+ + 0.592 H2O = + 0.55 Ca+2 + 1 Si(OH)4
# log_k 6.4371 # +/- 0.5
# delta_h -8.693 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -4.495584E+2 -5.834099E-2 2.816757E+4 1.603778E+2 -1.593825E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data], SSAS between SiO2(am) & CSH08333
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FAI] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
# [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]

```

```

# [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
# delfG0 = -343.232 +/- 0.50 kcal/mol
# delfH0 = -371.394 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 25.856 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 20.728 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 47.867 cm3/mol
# mole wt. = 106.3839 g/mol
# date: 28. Dec. 2017

CsOH(s)
CsOH + 1 H+ = 1 Cs+ + 1 H2O
log_k 27.7062 # +/- 0.3
delta_h -30.39 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression -3.355869E+02 -4.895875E-02 2.579288E+04 1.229015E+02 -1.131697E+06
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -88.60 +/- 0.4 kcal/mol *
# delfH0 = -99.60 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 23.60 +/- 1.0 cal/mol/K
# CpPrTr = 16.227 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 40.737 cm3/mol
# mole wt. = 149.9128 g/mol
# date: 04. Apr. 2016

Cuprite
Cu2O + 0.5 O2 + 4 H+ = + 2 Cu+2 + 2 H2O
log_k 35.6410 # +/- 0.2
delta_h -62.95 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression -8.315961E+2 -1.240352E-1 5.878170E+4 2.976216E+2 -2.611706E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1967MAH/PAN] [1978HEL/DEL]
# delfG0 = -35.38 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -40.83 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 22.08 +/- 1.0 cal/mol/K
# CpPrTr = 14.978 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 23.437 cm3/mol
# mole wt. = 143.0914 g/mol
# date: 5. May. 1978

CuSO4(s)
CuSO4 = + 1 Cu+2 + 1 SO4-2
log_k 2.9724 # +/- 0.3
delta_h -17.40 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression -1.721573E+3 -2.694132E-1 9.971351E+4 6.209976E+2 -5.882946E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978COX] [1998CHA]
# delfG0 = -158.20 +/- 0.3 kcal/mol *
# delfH0 = -184.30 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 26.10 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 23.630 +/- 0.21 cal/mol/K
# mole vol. = 40.821 cm3/mol
# mole wt. = 159.6096 g/mol
# date: 18. Jun. 2019

Dachiardite_Ca
Ca2Al4Si20O48(H2O)18 + 16 H+ + 14 H2O = + 2 Ca+2 + 4 Al+3 + 20 Si(OH)4
log_k -9.6608 # +/- 9
delta_h -58.4 kcal/mol # +/- 22
analytical_expression -8.612897E+3 -1.150409E+0 5.126512E+5 3.060226E+3 -3.071810E+7
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -6208.1 +/- 9 kcal/mol
# delfH0 = -6742.3 +/- 19 kcal/mol
# SOPrTr = 524.1 +/- 72 cal/mol/K
# CpPrTr = 463.078 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 824.550 cm3/mol
# mole wt. = 1842.0388 g/mol
# date: 7. Jul. 2015

Daphnite_14A # Chamosite_14A
Fe5Al(AlSi3)O10(OH)8 + 16 H+ = + 5 Fe+2 + 2 Al+3 + 3 Si(OH)4 + 6 H2O
log_k 51.1383 # +/- 3
delta_h -128.37 kcal/mol # +/- 8.4
analytical_expression -3.577978E+03 -5.234753E-01 2.234930E+05 1.278591E+03 -1.139599E+07
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL] [1993SAG/SEY]
# delfG0 = -1551.52 +/- 1.7 kcal/mol
# delfH0 = -1696.56 +/- 1.7 kcal/mol
# SOPrTr = 139.2 +/- 8 cal/mol/K
# CpPrTr = 151.211 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 213.420 cm3/mol
# mole wt. = 713.4974 g/mol
# date: 20. Jul. 2016

Daphnite_7A # Chamosite_7A
Fe2.5Al0.5(Al0.5Si1.5)O5(OH)4 + 8 H+ = + 2.5 Fe+2 + 1 Al+3 + 1.5 Si(OH)4 + 3 H2O
log_k 27.2550 # +/- 1
delta_h -66.450 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.788393E+03 -2.617563E-01 1.120486E+05 6.392081E+02 -5.671454E+06
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], stability relation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL] [1993SAG/SEY]
# delfG0 = -773.46 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -846.016 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 69.450 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 73.118 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 110.600 cm3/mol
# mole wt. = 356.7487 g/mol
# date: 21. Jul. 2016

Dawsonite
NaAlCO3(OH)2 + 3 H+ = 1 Na+ + 1 Al+3 + 1 HCO3- + 2 H2O

```

```

log_k      4.3482 # +/- 0.6
delta_h    -18.28 kcal/mol # +/- 0.8
analytical_expression  -1.262184E+3    -1.937018E-1    7.268707E+4    4.549683E+2    -4.026393E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978ROB/HEM][2007BEN/PAL]
# delfG0 = -426.86 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -469.37 +/- 0.7 kcal/mol
# SOPrTr = 31.55 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 34.082 +/- 0.07 cal/mol/K
# mole vol. = 59.300 cm3/mol
# mole wt. = 143.9952 g/mol
# date: 1. Dec. 2015

Diaspore
AlO(OH) + 3 H+ = 1 Al+3 + 2 H2O
log_k      7.1607 # +/- 0.3
delta_h    -26.391 kcal/mol # +/- 0.47
analytical_expression  -5.213205E+2    -8.283424E-2    3.254778E+4    1.862368E+2    -1.495045E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995POK/HEL]
# delfG0 = -220.150 +/- 0.30 kcal/mol
# delfH0 = -238.924 +/- 0.30 kcal/mol
# SOPrTr = 8.446 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 12.904 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 17.760 cm3/mol
# mole wt. = 59.9883 g/mol
# date: 4. Jul. 2015

Diopside
CaMg(SiO3)2 + 4 H+ + 2 H2O = 1 Ca+2 + 1 Mg+2 + 2 Si(OH)4
log_k      21.4646 # +/- 1.1
delta_h    -37.4 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  -1.235135E+3    -1.705040E-1    7.860392E+4    4.411345E+2    -4.245800E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -723.78 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -765.4 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 34.20 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 37.501 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 66.090 cm3/mol
# mole wt. = 216.5504 g/mol
# date: 7. Jul. 2015

Dolomite
CaMg(CO3)2 + 2 H+ = 1 Ca+2 + 1 Mg+2 + 2 HCO3-
log_k      2.5135 # +/- 0.9
delta_h    -14.4 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  -1.859566E+3    -2.926924E-1    1.050475E+5    6.730615E+2    -6.082333E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -517.76 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -556.6 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 37.090 +/- 0.07 cal/mol/K
# CpPrTr = 37.579 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 64.365 cm3/mol
# mole wt. = 184.4014 g/mol
# date: 7. Jul. 2015

Dolomite_dis
CaMg(CO3)2 + 2 H+ = 1 Ca+2 + 1 Mg+2 + 2 HCO3-
log_k      4.0601 # +/- 0.9
delta_h    -17.222 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.855803E+3    -2.920150E-1    1.054627E+5    6.714676E+2    -6.070653E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], stability relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -515.65 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -553.741 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 39.840 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 37.696 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 64.390 cm3/mol
# mole wt. = 184.4014 g/mol
# date: 7. Jul. 2015

Dolomite_ord
CaMg(CO3)2 + 2 H+ = 1 Ca+2 + 1 Mg+2 + 2 HCO3-
log_k      2.5135 # +/- 0.9
delta_h    -14.3 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  -1.855238E+3    -2.920208E-1    1.048249E+5    6.714808E+2    -6.070757E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -517.76 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -556.7 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 37.090 +/- 0.07 cal/mol/K
# CpPrTr = 37.696 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 64.340 cm3/mol
# mole wt. = 184.4014 g/mol
# date: 7. Jul. 2015

Enstatite
MgSiO3 + 2 H+ + 1 H2O = 1 Mg+2 + 1 Si(OH)4
log_k      11.5771 # +/- 0.9
delta_h    -22.5 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  -6.545470E+2    -8.916694E-2    4.219370E+4    2.329530E+2    -2.243365E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -348.93 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -369.7 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 16.20 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 18.899 +/- 999999 cal/mol/K

```

```

# mole vol.= 31.276 cm3/mol
# mole wt.= 100.3887 g/mol
# date: 7. Jul. 2015

Epidote
Ca2FeAl2Si3O12(OH) + 12 H+ = + 2 Ca+2 + 1 Fe+2 + 2 Al+3 + 0.25 O2 + 3 Si(OH)4 + 0.5 H2O
log_k      25.1880 # +/- 1.4
delta_h    -77.254 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -2.742708E+3   -4.017507E-1   1.675413E+5   9.802131E+2   -8.865301E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -1450.91 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1544.063 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 75.280 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 85.598 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol.= 139.200 cm3/mol
# mole wt.= 483.2207 g/mol
# date: 7. Jul. 2015

Epidote_ord
Ca2FeAl2Si3O12(OH) + 12 H+ = + 2 Ca+2 + 1 Fe+2 + 2 Al+3 + 0.25 O2 + 3 Si(OH)4 + 0.5 H2O
log_k      25.1880 # +/- 1.4
delta_h    -77.230 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -2.748556E+3   -4.019557E-1   1.679833E+5   9.821472E+2   -8.897480E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], stability relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -1450.91 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1544.087 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 75.200 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 85.626 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol.= 139.200 cm3/mol
# mole wt.= 483.2207 g/mol
# date: 7. Jul. 2015

Epistilbite
Ca3(Al6Si18O48)(H2O)16 + 24 H+ + 8 H2O = + 3 Ca+2 + 6 Al+3 + 18 Si(OH)4
log_k      17.9882 # +/- 8
delta_h    -129 kcal/mol # +/- 20
analytical_expression  -9.318286E+3   -1.281173E+0   5.607091E+5   3.314650E+3   -3.238164E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -6249.9 +/- 8 kcal/mol
# delfH0 = -6770 +/- 20 kcal/mol
# SOPrTr = 475 +/- 70 cal/mol/K
# CpPrTr = 453.003 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol.= 810.454 cm3/mol
# mole wt.= 1843.8782 g/mol
# date: 25. Jul. 2016

#Epistilbite_II
Ca3(Al6Si18O48)(H2O)15 + 24 H+ + 9 H2O = + 3 Ca+2 + 6 Al+3 + 18 Si(OH)4
log_k      17.9970 # +/- 9
delta_h    -129.416 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -9.093949E+3   -1.234931E+0   5.519981E+5   3.229031E+3   -3.211853E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_b][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -6193.3 +/- 8 kcal/mol
# delfH0 = -6701.848 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 458.700 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 451.893 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol.= 802.680 cm3/mol
# mole wt.= 1825.8629 g/mol
# date: 25. Jul. 2016

Erionite_alk
K2.8Na3.4Ca0.8(Al7.8Si28.2O72)(H2O)30 + 31.2 H+ + 10.8 H2O = + 2.8 K+ + 3.4 Na+ + 0.8 Ca+2 + 7.8 Al+3 + 28.2 Si(OH)4
log_k      11.2269 # +/- 13
delta_h    -145 kcal/mol # +/- 30
analytical_expression  -1.342424E+4   -1.807409E+0   8.030896E+5   4.772106E+3   -4.689367E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001CHI/APP][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -9613 +/- 10 kcal/mol
# delfH0 = -10435 +/- 30 kcal/mol
# SOPrTr = 950 +/- 100 cal/mol/K
# CpPrTr = 762.417 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol.= 1344.000 cm3/mol
# mole wt.= 2914.5858 g/mol
# date: 25. Jul. 2016

Erionite_dia
K3Na1.2Ca2(Al8.2Si27.8O72)(H2O)30 + 32.8 H+ + 9.2 H2O = + 3 K+ + 1.2 Na+ + 2 Ca+2 + 8.2 Al+3 + 27.8 Si(OH)4
log_k      14.5262 # +/- 13
delta_h    -158 kcal/mol # +/- 30
analytical_expression  -1.356188E+4   -1.842120E+0   8.119296E+5   4.822695E+3   -4.720790E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001CHI/APP][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -9655 +/- 10 kcal/mol
# delfH0 = -10484 +/- 30 kcal/mol
# SOPrTr = 920 +/- 100 cal/mol/K
# CpPrTr = 761.171 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol.= 1344.000 cm3/mol
# mole wt.= 2919.4800 g/mol
# date: 25. Jul. 2016

Erionite_K
K10(Al10Si26O72)(H2O)28 + 40 H+ + 4 H2O = 10 K+ + 10 Al+3 + 26 Si(OH)4
log_k      31.0505 # +/- 13
delta_h    -204 kcal/mol # +/- 30
analytical_expression  -1.381659E+4   -1.914526E+0   8.297450E+5   4.918264E+3   -4.751149E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]

```

```

# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -9707 +/- 10 kcal/mol
# delfH0 = -10490 +/- 30 kcal/mol
# SOPrTr = 1038 +/- 100 cal/mol/K
# CpPrTr = 796.856 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1386.502 cm3/mol
# mole wt. = 3047.4066 g/mol
# date: 3. Aug. 2016

Ettringite_Al
Ca6(Al(OH)6)2(SO4)3(H2O)26 + 12 H+ = + 6 Ca+2 + 2 Al+3 + 3 SO4-2 + 38 H2O
log_k      56.8815 # +/- 0.23
delta_h    -78.3 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression  -6.991242E+3   -1.067559E+0   4.017986E+5   2.534938E+3   -2.255632E+7
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown. Same entry as "Ettringite_AlH32".
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1939JON][1979EDE/SAT][1991ATK/MAC][1992DAM/ATK][1994WAR/REA]
# [1999GLA/TYR][1999PER/PAL][2004BAU/KEL][2004MAC/BAR]
# delfG0 = -3636.14 +/- 1.7 kcal/mol
# delfH0 = -4206.1 +/- 6 kcal/mol
# SOPrTr = 410 +/- 21 cal/mol/K *
# CpPrTr = 519 +/- 10 cal/mol/K
# mole vol. = 706.200 cm3/mol
# mole wt. = 1255.1046 g/mol
# date: 23. Jan. 2019

Ettringite_AlH13
Ca6(Al(OH)6)2(SO4)3(H2O)7 + 12 H+ = + 6 Ca+2 + 2 Al+3 + 3 SO4-2 + 19 H2O
log_k      71.0123 # +/- 4.7
delta_h    -137 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression  -4.611625E+3   -7.821551E-1   2.757808E+5   1.679156E+3   -1.458770E+7
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Ettringite_AlH13 = Ettringite_AlH32 - 19 H2O
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1979EDE/SAT_a][2016BAQ/MAT]
# delfG0 = -2539.79 +/- 6.5 kcal/mol
# delfH0 = -2849 +/- 12 kcal/mol
# SOPrTr = 225 +/- 46 cal/mol/K *
# CpPrTr = 337 +/- 30 cal/mol/K
# mole vol. = 410.600 cm3/mol
# mole wt. = 912.8158 g/mol
# date: 23. Jan. 2019

Ettringite_AlH30
Ca6(Al(OH)6)2(SO4)3(H2O)24 + 12 H+ = + 6 Ca+2 + 2 Al+3 + 3 SO4-2 + 36 H2O
log_k      57.4855 # +/- 0.8
delta_h    -79.8 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression  -4.658429E+3   -7.491874E-1   2.678602E+5   1.698813E+3   -1.446582E+7
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Ettringite_AlH30 = Ettringite_AlH32 - 2 H2O
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1979EDE/SAT_a][2016BAQ/MAT]
# delfG0 = -3521.94 +/- 1.8 kcal/mol
# delfH0 = -4068.0 +/- 6 kcal/mol
# SOPrTr = 378 +/- 21 cal/mol/K *
# CpPrTr = 500 +/- 16 cal/mol/K
# mole vol. = 706.200 cm3/mol
# mole wt. = 1219.0742 g/mol
# date: 23. Jan. 2019

Ettringite_AlH32
Ca6(Al(OH)6)2(SO4)3(H2O)26 + 12 H+ = + 6 Ca+2 + 2 Al+3 + 3 SO4-2 + 38 H2O
log_k      56.8815 # +/- 0.23
delta_h    -78.3 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression  -6.991242E+3   -1.067559E+0   4.017986E+5   2.534938E+3   -2.255632E+7
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown. Same entry as "Ettringite_AlH32"
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1939JON][1979EDE/SAT][1991ATK/MAC][1992DAM/ATK][1994WAR/REA]
# [1999GLA/TYR][1999PER/PAL][2004BAU/KEL][2004MAC/BAR]
# delfG0 = -3636.14 +/- 1.7 kcal/mol
# delfH0 = -4206.1 +/- 6 kcal/mol
# SOPrTr = 410 +/- 21 cal/mol/K *
# CpPrTr = 519 +/- 10 cal/mol/K
# mole vol. = 706.200 cm3/mol
# mole wt. = 1255.1046 g/mol
# date: 23. Jan. 2019

Ettringite_C03 # Tricarbaluminate
Ca6(Al(OH)6)2(CO3)3(H2O)26 + 15 H+ = + 6 Ca+2 + 2 Al+3 + 3 HCO3- + 38 H2O
log_k      86.0889 # +/- 0.6
delta_h    -114.95 kcal/mol # +/- 2.2
analytical_expression  -4.602169E+3   -6.962130E-1   2.723466E+5   1.672137E+3   -1.379655E+7
#
# -Range: 0.01 - 60 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 333K
# data source: [1965BER][1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][2007MAT/LOT]
# delfG0 = -3483.35 +/- 1.3 kcal/mol
# delfH0 = -4011.94 +/- 1.4 kcal/mol *
# SOPrTr = 456.10 +/- 2.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 506.44 +/- 6.8 cal/mol/K
# mole vol. = 652.641 cm3/mol
# mole wt. = 1146.9414 g/mol
# date: 24. Jan. 2019

Ettringite_Fe
Ca6(Fe(OH)6)2(SO4)3(H2O)26 + 10 H+ = + 6 Ca+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 3 SO4-2 + 37 H2O
log_k      38.8708 # +/- 0.4
delta_h    -24.9 kcal/mol # +/- 7
analytical_expression  -6.530937E+3   -9.876447E-1   3.663828E+5   2.373312E+3   -2.108221E+7
#
# -Range: 0.01 - 60 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 333K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][2008MOS/LOT]
# delfG0 = -3412.7 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -3979.4 +/- 6 kcal/mol *
# SOPrTr = 420 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = 528 +/- 16 cal/mol/K
# mole vol. = 716.594 cm3/mol
# mole wt. = 1312.8356 g/mol
# date: 25. Jan. 2019

```

```

Ettringite_hiB04
Ca6(Al(OH)6)2((B(OH)4)2(OH)2)(H2O)18 + 18 H+ = + 6 Ca+2 + 2 Al+3 + 4 B(OH)3 + 36 H2O
log_k      125.6038 # +/- 1.3
delta_h    -128.0 kcal/mol # +/- 8
analytical_expression  -3.295391E+3    -4.748339E-1    2.064604E+5    1.203806E+3    -9.658020E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
#
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2000ZHA]
# delfG0 = -3821.38 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -4392.7 +/- 7 kcal/mol *
# SOPrTr = 370 +/- 24 cal/mol/K
# CpPrTr = 527 +/- 18 cal/mol/K
# mole vol. = 678.817 cm3/mol
# mole wt. = 1172.1676 g/mol
# date: 21. May. 2019

Ettringite_loB04
Ca6(Al(OH)6)2((B(OH)4)2(OH)4)(H2O)27 + 18 H+ = + 6 Ca+2 + 2 Al+3 + 2 B(OH)3 + 45 H2O
log_k      999999 # +/- 999999
delta_h    999999 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  9.999990E+5    0.000000E+0    0.000000E+0    0.000000E+0    0.000000E+0
#
# -Range: Not given
# gflag: Not used
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978HEL/DEL_a]
# delfG0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 389 +/- 27 cal/mol/K
# CpPrTr = 588 +/- 21 cal/mol/K
# mole vol. = 672.303 cm3/mol
# mole wt. = 1210.6386 g/mol
# date: 21. May. 2019

FA_glass
(K2O)0.0765(Na2O)0.1612(CaO)1.3108(MgO)0.5568(Al2O3)1.3872(Fe2O3)0.1830(SiO2)11.9195 + 13.2658 H+ + 17.2061 H2O = 0.1530 K+ + 0.3224 Na+ + 1.3108
Ca+2 + 0.5568 Mg+2 + 2.7744 Al+3 + 0.3660 Fe+2 + 0.0915 O2 + 11.9195 Si(OH)4
log_k      999999 # +/- 999999
delta_h    999999 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  9.999990E+5    0.000000E+0    0.000000E+0    0.000000E+0    0.000000E+0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: Not used
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [Unpublished]
# delfG0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 999999 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 999999 +/- 999999 cal/mol/K
# mol vol. = 478.5 cm3/mol
# mol wt. = 999.9838 g/mol
# date: 06. Feb. 2018

Faujasite_Ca
Ca(Al2Si4O12)(H2O)8 + 8 H+ = 1 Ca+2 + 2 Al+3 + 4 Si(OH)4 + 4 H2O
log_k      11.3514 # +/- 1.9
delta_h    -50.2 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.532916E+3    -3.527889E-1    1.525114E+5    9.020517E+2    -8.369021E+6
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [1966DEE/HOW][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -1828.1 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -2006.8 +/- 4 kcal/mol
# SOPrTr = 181.8 +/- 15 cal/mol/K
# CpPrTr = 157.324 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 280.160 cm3/mol
# mole wt. = 542.4983 g/mol
# date: 4. Apr. 2016

Faujasite_Na
Na2(Al2Si4O12)(H2O)8 + 8 H+ = + 2 Na+ + 2 Al+3 + 4 Si(OH)4 + 4 H2O
log_k      13.5959 # +/- 1.9
delta_h    -50.4 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.532952E+3    -3.443180E-1    1.531062E+5    9.010787E+2    -8.354146E+6
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [1966DEE/HOW][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -1818.1 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -1991.7 +/- 4 kcal/mol
# SOPrTr = 214.0 +/- 16 cal/mol/K
# CpPrTr = 161.675 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 280.160 cm3/mol
# mole wt. = 548.3998 g/mol
# date: 4. Apr. 2016

Fayalite
Fe2SiO4 + 4 H+ = + 2 Fe+2 + 1 Si(OH)4
log_k      19.3638 # +/- 1.2
delta_h    -39.1 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression  -9.718717E+2    -1.385607E-1    6.266456E+4    3.469319E+2    -3.208215E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -330.23 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -354.1 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 35.45 +/- 0.4 cal/mol/K
# CpPrTr = 31.764 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 46.390 cm3/mol
# mole wt. = 203.7731 g/mol
# date: 7. Jul. 2015

Fe(OH)2(am)
Fe(OH)2 + 2 H+ = 1 Fe+2 + 2 H2O
log_k      14.1001 # +/- 0.6
delta_h    -23.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -3.430848E+2    -5.121874E-2    2.311575E+4    1.236727E+2    -9.862196E+5
#
# -Range: 0.01 - 288 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 561K
# data source: [1908MUL][1909KRA][1924SHI/MCH][1925WHI/RUS][1950ARD]

```

```

# [1978JOH/BAU] [1978HEL/DEL_a]
# delfG0 = -116.01 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -135.6 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 21 +/- 10 cal/mol/K
# CpPrTr = 21.811 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 26.430 cm3/mol
# mole wt. = 89.8616 g/mol
# date: 3.Oct.2017

Fe(OH)2(mic)
Fe(OH)2 + 2 H+ = 1 Fe+2 + 2 H2O
log_k 12.7001 # +/- 0.8
delta_h -21.2 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -3.431065E+2 -5.121872E-2 2.270484E+4 1.236726E+2 -9.862189E+5
# -Range: 0.01 - 288 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 561K
# data source: [1910LAM] [1930ELD] [1932MUR] [1932RAN/FRA] [1943VON/RIH] [1953LEU/KOL]
# [1964DAU/DAU] [1978HEL/DEL_a] [1995ZIE/JON] [1999REF/BON]
# delfG0 = -117.92 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -137.50 +/- 2.9 kcal/mol
# SOPrTr = 21.1 +/- 11 cal/mol/K *
# CpPrTr = 21.811 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 26.430 cm3/mol
# mole wt. = 89.8616 g/mol
# date: 3.Oct.2017

#Fe(OH)2(s)
Fe(OH)2 + 2 H+ = 1 Fe+2 + 2 H2O
log_k 11.1021 # +/- 1.3
delta_h -18.7 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -3.676658E+02 -5.178662E-02 2.345959E+04 1.321691E+02 -1.023962E+06
# -Range: 0.01 - 288 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 561K
# data source: [1995ZIE/JON] [2013LEM/BER]
# delfG0 = -120.1 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -140.0 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 20.0 +/- 7 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.362 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 26.430 cm3/mol
# mole wt. = 89.8597 g/mol
# date: 5.Apr.2016

Fe(OH)3(am) # Ferrihydrite (2 line)
Fe(OH)3 + 2 H+ = 1 Fe+2 + 0.25 O2 + 2.5 H2O
log_k -4.5509 # +/- 0.8
delta_h 3.78 kcal/mol # +/- 1.7
analytical_expression -3.206387E+2 -4.631746E-2 1.537314E+4 1.160724E+2 -7.885270E+5
# -Range: 0.01 - 150 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], stability relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 423K
# data source: [2013LEM/BER]
# delfG0 = -168.81 +/- 0.9 kcal/mol
# delfH0 = -197.35 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 31.07 +/- 2.4 cal/mol/K
# CpPrTr = 26.615 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 26.987 cm3/mol
# mole wt. = 106.8671 g/mol
# date: 23.Mar.2016

Fe(OH)3(mic) # Ferrihydrite (6 line)
Fe(OH)3 + 2 H+ = 1 Fe+2 + 0.25 O2 + 2.5 H2O
log_k -5.2912 # +/- 0.8
delta_h 4.79 kcal/mol # +/- 1.7
analytical_expression -3.141326E+2 -4.578369E-2 1.469436E+4 1.138518E+2 -7.566530E+5
# -Range: 0.01 - 150 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 423K
# data source: [2013LEM/BER]
# delfG0 = -169.82 +/- 0.9 kcal/mol
# delfH0 = -198.36 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 31.07 +/- 2.4 cal/mol/K
# CpPrTr = 26.290 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 26.987 cm3/mol
# mole wt. = 106.8671 g/mol
# date: 23.Mar.2016

FeCl2(s)
FeCl2(s) = 1 Fe+2 + 2 Cl-
log_k 9.0915 # +/- 0.45
delta_h -20.288 kcal/mol # +/- 1.61
analytical_expression -1.625250E+3 -2.569502E-1 9.491090E+4 5.880138E+2 -5.544634E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [2013LEM/BER]
# delfG0 = -72.225 +/- 0.13 kcal/mol *
# delfH0 = -81.628 +/- 0.12 kcal/mol
# SOPrTr = 28.25 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 18.35 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 40.112 cm3/mol
# mole wt. = 126.7524 g/mol
# date: 5.Sep.2017

FeCl3(s)
FeCl3(s) + 0.5 H2O = 1 Fe+2 + 0.25 O2 + 1 H+ + 3 Cl-
log_k 5.4539 # +/- 0.5
delta_h -13.774 kcal/mol # +/- 1.61
analytical_expression -2.210793E+3 -3.513136E-1 1.259906E+5 8.014135E+2 -7.521755E+6
# -Range: 0.01 - 277 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 550K
# data source: [2013LEM/BER]
# delfG0 = -79.234 +/- 0.06 kcal/mol *
# delfH0 = -94.642 +/- 0.02 kcal/mol
# SOPrTr = 34.77 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 23.09 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 55.933 cm3/mol
# mole wt. = 162.2051 g/mol
# date: 15.Sep.2017

Fe0(s)

```

$\text{FeO} + 2 \text{H}^+ = 1 \text{Fe}^{+2} + 1 \text{H}_2\text{O}$
 log_k 13.5298 # +/- 0.6
 delta_h -25.35 kcal/mol # +/- 1.7
 analytical_expression -3.447087E+2 -5.201550E-2 2.386364E+4 1.234211E+2 -1.039059E+6
 -Range: 0.01 - 300 deg C
 gflag: 1 [reported delfG0 used]
 extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
 data source: [1968ROB/WAL][1971STU/PRO][1978HEL/DEL]
 delfG0 = -60.10 +/- 0.6 kcal/mol
 delfH0 = -65.02 +/- 0.5 kcal/mol
 SOPrTr = 14.52 +/- 0.4 cal/mol/K
 CpPrTr = 11.931 +/- 0.13 cal/mol/K
 mole vol. = 12.000 cm3/mol
 mole wt. = 71.8444 g/mol
 date: 22. Aug. 2016

Ferrosilite
 $\text{FeSiO}_3 + 2 \text{H}^+ + 1 \text{H}_2\text{O} = 1 \text{Fe}^{+2} + 1 \text{Si}(\text{OH})_4$
 log_k 7.6973 # +/- 0.9
 delta_h -17.216 kcal/mol # +/- 999999
 analytical_expression -5.273903E+2 -7.361416E-2 3.351428E+4 1.879026E+2 -1.807064E+6
 -Range: 0.01 - 300 deg C
 gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
 extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
 data source: [1978HEL/DEL][1985HEL]
 delfG0 = -267.59 +/- 1.0 kcal/mol
 delfH0 = -285.658 +/- 999999 kcal/mol
 SOPrTr = 21.630 +/- 999999 cal/mol/K
 CpPrTr = 21.758 +/- 999999 cal/mol/K
 mole vol. = 32.952 cm3/mol
 mole wt. = 131.9287 g/mol
 date: 22. Aug. 2016

FeSO4(s)
 $\text{FeSO}_4 = 1 \text{Fe}^{+2} + 1 \text{SO}_4^{2-}$
 log_k 1.9058 # +/- 1.5
 delta_h -17.4 kcal/mol # +/- 3
 analytical_expression -1.713799E+3 -2.692998E-1 9.932312E+4 6.179366E+2 -5.882106E+6
 -Range: 0.01 - 300 deg C
 gflag: 1 [reported delfG0 used]
 extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
 data source: [1998CHA]
 delfG0 = -197.2 +/- 2 kcal/mol *
 delfH0 = -222.0 +/- 2 kcal/mol
 SOPrTr = 28.91 +/- 0.3 cal/mol/K
 CpPrTr = 23.582 +/- 999999 cal/mol/K
 mole vol. = 41.619 cm3/mol
 mole wt. = 151.9106 g/mol
 date: 11. Sep. 2017

Fluorapatite
 $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{F}_2 + 6 \text{H}^+ = 10 \text{Ca}^{+2} + 6 \text{HPO}_4^{2-} + 2 \text{F}^-$
 log_k -49.9910 # +/- 2
 delta_h -43.44 kcal/mol # +/- 4.4
 analytical_expression -1.254852E+4 -1.993423E+0 7.030408E+5 4.530916E+3 -4.236016E+7
 -Range: 0.01 - 300 deg C
 gflag: 1 [reported delfG0 used]
 extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
 data source: [1960KEL][1978ROB/HEM]
 delfG0 = -3085.94 +/- 1.2 kcal/mol
 delfH0 = -3267.75 +/- 1.3 kcal/mol
 SOPrTr = 185.40 +/- 0.9 cal/mol/K
 CpPrTr = 179.632 +/- 999999 cal/mol/K
 mole vol. = 315.120 cm3/mol
 mole wt. = 1008.6052 g/mol
 date: 13. Dec. 2016

Fluorite
 $\text{CaF}_2 = 1 \text{Ca}^{+2} + 2 \text{F}^-$
 log_k -10.0349 # +/- 1.1
 delta_h 2.90 kcal/mol # +/- 1.5
 analytical_expression -1.718305E+3 -2.694246E-1 9.462793E+4 6.208850E+2 -5.788942E+6
 -Range: 0.01 - 300 deg C
 gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
 extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
 data source: [1971STU/PRO][1978HEL/DEL]
 delfG0 = -280.49 +/- 1.5 kcal/mol *
 delfH0 = -293.00 +/- 1.5 kcal/mol
 SOPrTr = 16.390 +/- 0.08 cal/mol/K
 CpPrTr = 16.999 +/- 999999 cal/mol/K
 mole vol. = 24.542 cm3/mol
 mole wt. = 78.0748 g/mol
 date: 21. Jul. 2015

Forsterite
 $\text{Mg}_2\text{SiO}_4 + 4 \text{H}^+ = 2 \text{Mg}^{+2} + 1 \text{Si}(\text{OH})_4$
 log_k 28.1159 # +/- 1.2
 delta_h -51.9 kcal/mol # +/- 1
 analytical_expression -1.024558E+3 -1.436362E-1 6.824871E+4 3.653870E+2 -3.336585E+6
 -Range: 0.01 - 300 deg C
 gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
 extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
 data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
 delfG0 = -491.56 +/- 1.0 kcal/mol
 delfH0 = -520.0 +/- 1 kcal/mol
 SOPrTr = 22.75 +/- 0.2 cal/mol/K
 CpPrTr = 28.175 +/- 999999 cal/mol/K
 mole vol. = 43.790 cm3/mol
 mole wt. = 140.6931 g/mol
 date: 9. Jul. 2015

Foshagite
 $\text{Ca}_4\text{Si}_3\text{O}_9(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_0.5 + 8 \text{H}^+ + 0.5 \text{H}_2\text{O} = 4 \text{Ca}^{+2} + 3 \text{Si}(\text{OH})_4$
 log_k 65.8218 # +/- 999999
 delta_h -90.517 kcal/mol # +/- 999999
 analytical_expression -2.112940E+3 -2.890165E-1 1.405980E+5 7.575794E+2 -7.219559E+6
 -Range: not reported
 gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model
 extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
 data source: [2010BLA/BOU][2012ART/SAS]
 delfG0 = -1349.060 +/- 999999 kcal/mol
 delfH0 = -1441.946 +/- 999999 kcal/mol
 SOPrTr = 70.495 +/- 999999 cal/mol/K

```

# CpPrTr = 73.944 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 129.567 cm3/mol
# mole wt. = 431.5855 g/mol
# date: 9. Jul. 2015

#Friedel_Salt # Superseded by Friedel_Salt_Al
# (Ca2Al(OH)6)2(Cl)2(H2O)4 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 2 Cl- + 16 H2O
# log_k 70.0990 # +/- 4
# delta_h -115.1 kcal/mol # +/- 6
# analytical_expression -3.653640E+3 -5.678047E-1 2.202452E+5 1.324922E+3 -1.103148E+7
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1980ZHA/ZHO][2019BEL/MAJ_a], as used in JNC 050700.tdb [2005ART/SAS]
# delfG0 = -1635.7 +/- 6 kcal/mol
# delfH0 = -1834.4 +/- 6 kcal/mol *
# SOPrTr = 144.8 +/- 3 cal/mol/K
# CpPrTr = 158.92 +/- 1.1 cal/mol/K
# mole vol. = 272.995 cm3/mol
# mole wt. = 561.3288 g/mol
# date: 24. Jan. 2019

Friedel_Salt_Al
# (Ca2Al(OH)6)2(Cl)2(H2O)4 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 2 Cl- + 16 H2O
# log_k 74.0132 # +/- 0.38
# delta_h -120.45 kcal/mol # +/- 2.1
# analytical_expression -3.653641E+3 -5.678048E-1 2.214122E+5 1.324922E+3 -1.103148E+7
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1936NAC/MOS][1978HEL/DEL_a][1998BIR/GLA][1999GLA/TYR][2001HOB][2004BOT/BRO]
# [2009HON/MAS][2010BAL/LOT][2017ZHO/ZHO][2019BEL/MAJ_a]
# delfG0 = -1630.36 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -1829.05 +/- 1.8 kcal/mol *
# SOPrTr = 144.8 +/- 3 cal/mol/K
# CpPrTr = 158.92 +/- 1.1 cal/mol/K
# mole vol. = 272.995 cm3/mol
# mole wt. = 561.3288 g/mol
# date: 24. Jan. 2019

Friedel_Salt_Fe
# (Ca2Fe(OH)6)2(Cl)2(H2O)4 + 10 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 2 Cl- + 15 H2O
# log_k 53.4516 # +/- 1
# delta_h -63 kcal/mol # +/- 12
# analytical_expression -3.194058E+3 -4.872175E-1 1.856522E+5 1.163225E+3 -9.619992E+6
# -Range: 0.01 - 55 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 328K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2011DIL/LOT][2019BEL/MAJ_a]
# delfG0 = -1410.4 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -1606 +/- 11 kcal/mol *
# SOPrTr = 154 +/- 37 cal/mol/K
# CpPrTr = 172.4 +/- 1 cal/mol/K
# mole vol. = 277.486 cm3/mol
# mole wt. = 619.0598 g/mol
# date: 11. Jul. 2019

Galena
# PbS + 2 O2 = + 1 Pb+2 + 1 SO4-2
# log_k 123.5219 # +/- 1.1
# delta_h -187.92 kcal/mol # +/- 1.1
# analytical_expression -2.207140E+3 -3.462746E-1 1.684402E+5 7.929249E+2 -8.274082E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1953HEM][1971THO/FLE][1974MIL][1978HEL/DEL][1979GIO/BAR][1987NOD/MAS][1999LOT/OCH]
# delfG0 = -23.06 +/- 1.1 kcal/mol *
# delfH0 = -23.46 +/- 1.1 kcal/mol
# SOPrTr = 21.80 +/- 0.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 11.833 +/- 0.28 cal/mol/K
# mole vol. = 31.418 cm3/mol
# mole wt. = 239.2660 g/mol
# date: 23. Oct. 2019

Gehlenite
# Ca2(Al2Si)O7 + 10 H+ = + 2 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 Si(OH)4 + 3 H2O
# log_k 56.5493 # +/- 1.0
# delta_h -119.769 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -1.901148E+3 -2.905688E-1 1.278644E+5 6.796511E+2 -5.891734E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -903.15 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -951.284 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 48.100 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 49.116 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 90.240 cm3/mol
# mole wt. = 274.2004 g/mol
# date: 10. Jul. 2015

Gibbsite
# Al(OH)3 + 3 H+ = + 1 Al+3 + 3 H2O
# log_k 7.7567 # +/- 0.3
# delta_h -24.567 kcal/mol # +/- 0.47
# analytical_expression -5.345772E+2 -8.451695E-2 3.258006E+4 1.918894E+2 -1.472041E+6
# -Range: 0.01 - 300 oC
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995POK/HEL]
# delfG0 = -276.025 +/- 0.29 kcal/mol
# delfH0 = -309.064 +/- 0.29 kcal/mol *
# SOPrTr = 16.360 +/- 0.03 cal/mol/K
# CpPrTr = 21.92 +/- 1.5 cal/mol/K
# mole vol. = 31.956 cm3/mol
# mole wt. = 78.0034 g/mol
# date: 25. Jan. 2018

Gismondine
# Ca4(Al8Si8O32)(H2O)16 + 32 H+ = + 4 Ca+2 + 8 Al+3 + 8 Si(OH)4 + 16 H2O
# log_k 67.1348 # +/- 4.8
# delta_h -228.9 kcal/mol # +/- 9
# analytical_expression -7.714876E+3 -1.121014E+0 4.724755E+5 2.752003E+3 -2.472202E+7

```

```

# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -4779.5 +/- 5 kcal/mol
# delfH0 = -5205.9 +/- 8 kcal/mol
# SOPrTr = 375.2 +/- 32 cal/mol/K
# CpPrTr = 378.488 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 629.977 cm3/mol
# mole wt. = 1401.0739 g/mol
# date: 4. Apr. 2016

Goethite
FeOOH + 2 H+ = 1 Fe+2 + 1.5 H2O + 0.25 O2
log_k      -8.2291 # +/- 0.6
delta_h     8.83 kcal/mol # +/- 1.7
analytical_expression  -2.983894E+2   -4.619693E-2   1.301232E+4   1.085759E+2   -7.443344E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [2013LEM/BER]
# delfG0 = -117.14 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -134.08 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 14.30 +/- 0.5 cal/mol/K
# CpPrTr = 18.65 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 20.820 cm3/mol
# mole wt. = 88.8518 g/mol
# date: 10. Jul. 2015

Graphite # Element C in reference state. Carbon
C + 1 O2 + 1 H2O = 1 H+ + 1 HCO3-
log_k      64.1733 # +/- 0.40
delta_h    -93.681 kcal/mol # +/- 0.11
analytical_expression  -8.513675E+2   -1.365573E-1   6.962622E+4   3.067091E+2   -3.217855E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978COX] [1978HEL/DEL]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 1.372 +/- 0.03 cal/mol/K
# CpPrTr = 2.075 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 5.298 cm3/mol
# mole wt. = 12.0110 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Greenalite_7A
Fe3Si205(OH)4 + 6 H+ = + 3 Fe+2 + 2 Si(OH)4 + 1 H2O
log_k      21.7058 # +/- 2
delta_h    -43.015 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.595679E+3   -2.235075E-1   9.887800E+4   5.705925E+2   -5.289944E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL] [Unpublished]
# delfG0 = -718.5 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -789.733 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 72.600 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 74.057 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 115.000 cm3/mol
# mole wt. = 371.7324 g/mol
# date: 21. Jul. 2016

Grossular
Ca3Al2(SiO4)3 + 12 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k      51.8287 # +/- 2.9
delta_h    -110.40 kcal/mol # +/- 3.9
analytical_expression  -2.780582E+3   -4.092787E-1   1.776276E+5   9.946340E+2   -9.110259E+6
# -Range: 0.01 - 300 oC
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1966HAY] [1977PER/ESS] [1978CHA/NEW] [1978HEL/DEL] [1979KOL/NOG] [1979KRU/ROB] [1979WES/ESS]
# [1980HAS/WES] [1994ZHU/NEW] [1995ROB/HEM] [1996BOS/GEI] [2006DAC/GEI] [2012DAC/GEI]
# delfG0 = -1497.46 +/- 3.6 kcal/mol *
# delfH0 = -1583.78 +/- 3.5 kcal/mol
# SOPrTr = 61.52 +/- 2.7 cal/mol/K
# CpPrTr = 78.85 +/- 0.4 cal/mol/K
# mole vol. = 125.220 cm3/mol
# mole wt. = 450.4463 g/mol
# date: 10. Feb. 2019

Gypsum
CaSO4(H2O)2 = 1 Ca+2 + 1 SO4-2 + 2 H2O
log_k      -4.4743 # +/- 0.8
delta_h    -0.41 kcal/mol # +/- 1.0
analytical_expression  -1.689917E+3   -2.648536E-1   9.417686E+4   6.114718E+2   -5.733691E+6
# -Range: 0.01 - 60 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 333K
# data source: [1971PAR/WAG] [1989ROB/RUS] [1995ROB/HEM]
# delfG0 = -429.53 +/- 1.1 kcal/mol
# delfH0 = -483.42 +/- 1.0 kcal/mol
# SOPrTr = 46.400 +/- 0.07 cal/mol/K
# CpPrTr = 44.742 +/- 0.18 cal/mol/K
# mole vol. = 74.509 cm3/mol
# mole wt. = 172.1662 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Gyrolite
Ca2Si307.5(OH)(H2O)2 + 4 H+ + 1.5 H2O = + 2 Ca+2 + 3 Si(OH)4
log_k      22.2482 # +/- 999999
delta_h    -29.063 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.470286E+3   -1.914867E-1   9.291550E+4   5.245027E+2   -5.321489E+6
# -Range: not reported
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [2010BLA/BOU] [2012ART/SAS]
# delfG0 = -1087.577 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1175.483 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 73.824 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 77.902 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 137.340 cm3/mol
# mole wt. = 337.4459 g/mol

```

```

# date: 10. Jul. 2015
H2O(st) # Mineral component, structural water
H2O = 1 H2O
log_k      999999 # +/- 999999
delta_h    999999 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  9.999990E+5      0.000000E+0      0.000000E+0      0.000000E+0      0.000000E+0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978HEL/DEL]
# delfG0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 9.600 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 9.567 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 13.700 cm3/mol
# mole wt. = 18.0152 g/mol
# date: 18. Aug. 2017

H2O(z) # Mineral component, zeolitic water
H2O = 1 H2O
log_k      999999 # +/- 999999
delta_h    999999 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  9.999990E+5      0.000000E+0      0.000000E+0      0.000000E+0      0.000000E+0
#
# -Range: Not given
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: Not used, Tmax for Cp not given
# data source: [1978HEL/DEL]
# delfG0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 14.100 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 11.400 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 8.000 cm3/mol
# mole wt. = 18.0152 g/mol
# date: 18. Aug. 2017

H3B03(s) # Boric acid
H3B03 = 1 B(OH)3
log_k      0.0440 # +/- 0.2
delta_h    5.18 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression  -1.413605E+2      -1.694648E-2      7.224183E+3      5.155820E+1      -4.756740E+5
#
# -Range: 0.01 - 168 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 441K
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -231.48 +/- 0.2 kcal/mol *
# delfH0 = -261.47 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 21.21 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 19.449 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 41.222 cm3/mol
# mole wt. = 61.8329 g/mol
# date: 31. Aug. 2017

Halite
NaCl = 1 Na+ + 1 Cl-
log_k      1.5855 # +/- 0.1
delta_h    0.894 kcal/mol # +/- 0.08
analytical_expression  -7.831544E+2      -1.206518E-1      4.394776E+4      2.843472E+2      -2.691993E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -91.807 +/- 0.08 kcal/mol
# delfH0 = -98.260 +/- 0.08 kcal/mol
# SOPrTr = 17.240 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = 12.143 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 27.015 cm3/mol
# mole wt. = 58.4428 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Halloysite
Al2Si205(OH)4 + 6 H+ = + 2 Al+3 + 2 Si(OH)4 + 1 H2O
log_k      8.7653 # +/- 0.9
delta_h    -43.67 kcal/mol # +/- 1.4
analytical_expression  -1.587887E+3      -2.320343E-1      9.674849E+4      5.655344E+2      -5.159622E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978ROB/HEM][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -903.63 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -980.29 +/- 0.7 kcal/mol
# SOPrTr = 48.52 +/- 0.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 57.267 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 99.300 cm3/mol
# mole wt. = 258.1605 g/mol
# date: 9. Jan. 1998

Hedenbergite
CaFe(SiO3)2 + 4 H+ + 2 H2O = 1 Ca+2 + 1 Fe+2 + 2 Si(OH)4
log_k      20.1049 # +/- 1.1
delta_h    -35.222 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.205918E+3      -1.677471E-1      7.658236E+4      4.308776E+2      -4.177858E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -639.00 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -678.276 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 40.700 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 40.360 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 68.270 cm3/mol
# mole wt. = 248.0904 g/mol
# date: 5. Mar. 1990

Hematite
Fe2O3 + 4 H+ = + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 2 H2O
log_k      -16.8892 # +/- 0.9
delta_h    15.54 kcal/mol # +/- 3.2
analytical_expression  -5.621073E+2      -8.469256E-2      2.526041E+4      2.030221E+2      -1.475982E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1973HAA/ROB][1978HEL/DEL]

```

```

# delfG0 = -178.18 +/- 0.3 kcal/mol *
# delfH0 = -197.72 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 20.94 +/- 0.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 25.04 +/- 0.4 cal/mol/K
# mole vol. = 30.274 cm3/mol
# mole wt. = 159.6922 g/mol
# date: 5. May. 1978

Hemicarbonate_Al
(Ca2Al(OH)6)2((CO3)0.5(OH))(H2O)5.5 + 13.5 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 0.5 HCO3- + 18.5 H2O
log_k 91.7835 # +/- 0.4
delta_h -150.07 kcal/mol # +/- 2.4
analytical_expression -2.662785E+3 -4.073780E-1 1.711570E+5 9.640068E+2 -7.413991E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2001HOB][2007MAT/LOT][2019BEL/MAJ_a]
# delfG0 = -1755.22 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -1972.80 +/- 2.1 kcal/mol
# SOPrTr = 189.3 +/- 8 cal/mol/K *
# CpPrTr = 178.15 +/- 1.0 cal/mol/K
# mole vol. = 284.527 cm3/mol
# mole wt. = 564.4581 g/mol
# date: 23. Jan. 2019

Hemicarbonate_AlH09
(Ca2Al(OH)6)2((CO3)0.5(OH))(H2O)2.5 + 13.5 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 0.5 HCO3- + 15.5 H2O
log_k 96.5158 # +/- 0.8
delta_h -164.51 kcal/mol # +/- 2.7
analytical_expression -2.662540E+3 -4.139568E-1 1.739593E+5 9.630564E+2 -7.467163E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Hemicarbonate_AlH09 = Hemicarbonate_AlH105 - 1.5 H2O
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2015BAQ/MAT]
# delfG0 = -1578.70 +/- 1.5 kcal/mol
# delfH0 = -1753.41 +/- 2.5 kcal/mol
# SOPrTr = 165.9 +/- 10 cal/mol/K *
# CpPrTr = 149.42 +/- 3.3 cal/mol/K
# mole vol. = 249.300 cm3/mol
# mole wt. = 510.4125 g/mol
# date: 24. Jan. 2019

Hemicarbonate_AlH105
(Ca2Al(OH)6)2((CO3)0.5(OH))(H2O)4 + 13.5 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 0.5 HCO3- + 17 H2O
log_k 93.5192 # +/- 0.5
delta_h -156.58 kcal/mol # +/- 2.5
analytical_expression -2.666775E+3 -4.113132E-1 1.726117E+5 9.649960E+2 -7.452018E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Hemicarbonate_AlH105 = Hemicarbonate_AlH12 - 1.5 H2O
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2015BAQ/MAT]
# delfG0 = -1667.82 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -1863.82 +/- 2.3 kcal/mol
# SOPrTr = 178.1 +/- 9 cal/mol/K *
# CpPrTr = 163.79 +/- 2.5 cal/mol/K
# mole vol. = 261.300 cm3/mol
# mole wt. = 537.4353 g/mol
# date: 23. Jan. 2019

Hemicarbonate_AlH12
(Ca2Al(OH)6)2((CO3)0.5(OH))(H2O)5.5 + 13.5 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 0.5 HCO3- + 18.5 H2O
log_k 91.7835 # +/- 0.4
delta_h -150.07 kcal/mol # +/- 2.4
analytical_expression -2.662785E+3 -4.073780E-1 1.711570E+5 9.640068E+2 -7.413991E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2001HOB][2007MAT/LOT][2019BEL/MAJ_a]
# delfG0 = -1755.22 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -1972.80 +/- 2.1 kcal/mol
# SOPrTr = 189.3 +/- 8 cal/mol/K *
# CpPrTr = 178.15 +/- 1.0 cal/mol/K
# mole vol. = 284.527 cm3/mol
# mole wt. = 564.4581 g/mol
# date: 23. Jan. 2019

Hemicarbonate_Fe
(Ca2Fe(OH)6)2((CO3)0.5(OH))(H2O)3.5 + 11.5 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 0.5 HCO3- + 15.5 H2O
log_k 70.4772 # +/- 1
delta_h -96.4 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.190645E+3 -3.292717E-1 1.350166E+5 7.975326E+2 -5.955084E+6
#
# -Range: 0.01 - 55 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 328K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2011DIL/LOT][2019BEL/MAJ_a]
# delfG0 = -1422.9 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -1609.7 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 180.4 +/- 9 cal/mol/K
# CpPrTr = 167.1 +/- 2 cal/mol/K
# mole vol. = 270.672 cm3/mol
# mole wt. = 586.1587 g/mol
# date: 25. Jan. 2019

Hemihydrate_beta_Bassanite
CaSO4(H2O)0.5 = 1 Ca+2 + 1 SO4-2 + 0.5 H2O
log_k -3.5082 # +/- 0.3
delta_h -4.95 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression -1.702897E+3 -2.686635E-1 9.598244E+4 6.155446E+2 -5.827152E+6
#
# -Range: not reported
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [1941KEL/SOU][1987GAR/PAR]
# delfG0 = -343.18 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -376.41 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 32.10 +/- 0.4 cal/mol/K
# CpPrTr = 29.67 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 61.730 cm3/mol
# mole wt. = 145.1433 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Hemihydrate_alpha
CaSO4(H2O)0.5 = 1 Ca+2 + 1 SO4-2 + 0.5 H2O
log_k -3.6767 # +/- 0.3

```

```

delta_h -4.45 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression -1.696125E+3 -2.662595E-1 9.573017E+4 6.127920E+2 -5.827153E+6
#
# -Range: not reported
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [1941KEL/SOU][1987GAR/PAR]
# delfG0 = -343.41 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -376.91 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 31.19 +/- 0.4 cal/mol/K
# CpPrTr = 28.58 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 61.730 cm3/mol
# mole wt. = 145.1433 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Hemihydrate_beta
CaSO4(H2O)0.5 = 1 Ca+2 + 1 SO4-2 + 0.5 H2O
log_k -3.5082 # +/- 0.3
delta_h -4.95 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression -1.702897E+3 -2.686635E-1 9.598244E+4 6.155446E+2 -5.827152E+6
#
# -Range: not reported
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [1941KEL/SOU][1987GAR/PAR]
# delfG0 = -343.18 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -376.41 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 32.10 +/- 0.4 cal/mol/K
# CpPrTr = 29.67 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 61.730 cm3/mol
# mole wt. = 145.1433 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Herzenbergite
SnS + 2 O2 = 1 Sn+2 + 1 SO4-2
log_k 122.4546 # +/- 0.9
delta_h -187.90 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression -2.22240E+3 -3.486932E-1 1.692820E+5 7.980179E+2 -8.333840E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1974MIL][1985JAC/HEL_b]
# delfG0 = -25.35 +/- 0.5 kcal/mol *
# delfH0 = -25.80 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 18.40 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 11.773 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 29.010 cm3/mol
# mole wt. = 150.7760 g/mol
# date: 05. Jul. 2018

Heulandite_dia
K0.4NaCa3.3(Al8Si28O72)(H2O)26 + 32 H+ + 14 H2O = + 0.4 K+ + 1 Na+ + 3.3 Ca+2 + 8 Al+3 + 28 Si(OH)4
log_k 13.8534 # +/- 13
delta_h -157.9 kcal/mol # +/- 30
analytical_expression -1.359334E+4 -1.846693E+0 8.151202E+5 4.833089E+3 -4.758782E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001CHI/APP][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -9406.8 +/- 13 kcal/mol
# delfH0 = -10200.9 +/- 27 kcal/mol
# SOPrTr = 780 +/- 100 cal/mol/K
# CpPrTr = 699.897 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1266.100 cm3/mol
# mole wt. = 2793.4874 g/mol
# date: 4. Apr. 2016

Heulandite_Ca
Ca4.5(Al9Si27O72)(H2O)24 + 36 H+ + 12 H2O = + 4.5 Ca+2 + 9 Al+3 + 27 Si(OH)4
log_k 26.9456 # +/- 12
delta_h -194.0 kcal/mol # +/- 30
analytical_expression -1.394769E+4 -1.916943E+0 8.395275E+5 4.961055E+3 -4.848719E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -9374.9 +/- 12 kcal/mol
# delfH0 = -10155.2 +/- 26 kcal/mol
# SOPrTr = 713.0 +/- 98 cal/mol/K
# CpPrTr = 679.504 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1257.605 cm3/mol
# mole wt. = 2765.8174 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

#Heulandite_CaII
Ca4(Al8Si28O72)(H2O)24 + 32 H+ + 16 H2O = + 4 Ca+2 + 8 Al+3 + 28 Si(OH)4
log_k 13.2032 # +/- 12
delta_h -161.109 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.323828E+4 -1.775036E+0 8.024691E+5 4.696377E+3 -4.726365E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_b][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -9297.2 +/- 12 kcal/mol
# delfH0 = -10070.405 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 729.600 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 690.634 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1265.480 cm3/mol
# mole wt. = 2746.8823 g/mol
# date: 3. Aug. 2016

Heulandite_Na
Na9(Al9Si27O72)(H2O)24 + 36 H+ + 12 H2O = + 9 Na+ + 9 Al+3 + 27 Si(OH)4
log_k 36.8991 # +/- 13
delta_h -194.7 kcal/mol # +/- 30
analytical_expression -1.394744E+4 -1.878824E+0 8.420364E+5 4.956677E+3 -4.842024E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -9330.1 +/- 13 kcal/mol
# delfH0 = -10087.3 +/- 27 kcal/mol
# SOPrTr = 856 +/- 100 cal/mol/K
# CpPrTr = 699.080 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1257.605 cm3/mol

```

```

# mole wt. = 2792.3743 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

Hillebrandite
Ca2SiO3(OH)2(H2O)0.17 + 4 H+ = + 2 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 1.17 H2O
log_k 36.7962 # +/- 999999
delta_h -52.273 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -8.985055E+2 -1.257130E-1 6.203240E+4 3.226193E+2 -2.984533E+6
# -Range: not reported
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [2010BLA/BOU][2012ART/SAS]
# delfG0 = -593.273 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -636.398 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 42.927 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 42.414 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 70.469 cm3/mol
# mole wt. = 193.3170 g/mol
# date: 10. Jul. 2015

Huntite
CaMg3(CO3)4 + 4 H+ = 1 Ca+2 + 3 Mg+2 + 4 HCO3-
log_k 10.3450 # +/- 1.4
delta_h -40.89 kcal/mol # +/- 0.9
analytical_expression -3.787450E+3 -5.927479E-1 2.164622E+5 1.369064E+3 -1.236817E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1972HEM/ROB][1973HEM/ROB][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -1004.65 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -1082.60 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 71.590 +/- 0.21 cal/mol/K
# CpPrTr = 73.955 +/- 0.22 cal/mol/K
# mole vol. = 122.900 cm3/mol
# mole wt. = 353.0298 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Hydrocerussite
Pb3(CO3)2(OH)2 + 4 H+ = + 3 Pb+2 + 2 HCO3- + 2 H2O
log_k 3.5023 # +/- 0.2
delta_h -0.732 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.147251E+3 -3.339914E-1 1.196574E+5 7.799174E+2 -7.186622E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1957GAR][1978HEL/DEL_a][1995MAR/MAC][1998MER/ROC]
# delfG0 = -406.37 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -465.038 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 79.791 +/- 999999
# CpPrTr = 61.383 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 113.455 cm3/mol
# mole wt. = 775.6330 g/mol
# date: 23. Oct. 2019

Hydromagnesite
Mg5(OH)2(CO3)4(H2O)4 + 6 H+ = + 5 Mg+2 + 4 HCO3- + 6 H2O
log_k 30.9388 # +/- 2.3
delta_h -69.238 kcal/mol # +/- 1.32
analytical_expression -4.234918E+3 -6.497581E-1 2.463697E+5 1.529937E+3 -1.355244E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1973ROB/HEM][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -1401.573 +/- 0.25 kcal/mol
# delfH0 = -1557.090 +/- 0.25 kcal/mol
# SOPrTr = 120.380 +/- 0.37 cal/mol/K
# CpPrTr = 136.546 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 208.800 cm3/mol
# mole wt. = 467.6377 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Hydrotalcite_M4A
Mg4Al2(OH)14(H2O)3 + 14 H+ = + 4 Mg+2 + 2 Al+3 + 17 H2O
log_k 81.1160 # +/- 2.5
delta_h -149.1 kcal/mol # +/- 13
analytical_expression -2.546163E+3 -3.671979E-1 1.671472E+5 9.126704E+2 -7.306921E+6
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1992BEN/REA][1994ATK/GLA][2005ALL/NAV_a][2012GAO/LI]
# delfG0 = -1520.14 +/- 4.3 kcal/mol
# delfH0 = -1715.1 +/- 13 kcal/mol
# SOPrTr = 120 +/- 40 cal/mol/K
# CpPrTr = 154.030 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 219.260 cm3/mol
# mole wt. = 443.3308 g/mol
# date: 12. Jan. 2017

Hydrotalcite_M6A
Mg6Al2(OH)18(H2O)5 + 18 H+ = + 6 Mg+2 + 2 Al+3 + 23 H2O
log_k 98.6921 # +/- 11
delta_h -169.767 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.346319E+3 -4.787933E-1 2.146824E+5 1.202580E+3 -9.599662E+6
# -Range: 0.01 - 80 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1992ATK/GLA][2005ALL/NAV_a]
# delfG0 = -2053.3 +/- 16 kcal/mol
# delfH0 = -2327.082 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 143.600 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 212.744 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 228.000 cm3/mol
# mole wt. = 596.0004 g/mol
# date: 12. Jan. 2017

Hydrotalcite_M4Ac
Mg4Al2(OH)12(CO3)(H2O)3 + 13 H+ = + 4 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 15 H2O
log_k 60.9921 # +/- 1
delta_h -126.662 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.139908E+3 -4.633902E-1 1.954978E+5 1.127168E+3 -9.399903E+6
# -Range: 0.01 - 80 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K

```

```

# data source: [1978HEL/DEL_a][2003JOH/GLA][2005ALL/NAV_a][Unpublished]
# delfG0 = -1574.5 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1765.817 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 126.864 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 153.216 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 220.214 cm3/mol
# mole wt. = 469.3254 g/mol
# date: 6. Apr. 2018

Hydrotalcite_M42Ac
Mg4.2Al2(OH)12.4(CO3)(H2O)3.2 + 13.4 H+ = + 4.2 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HC03- + 15.6 H2O
log_k 64.7823 # +/- 999999
delta_h -131.430 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.220577E+3 -4.744698E-1 2.009140E+5 1.156364E+3 -9.635238E+6
# -Range: 0.01 - 80 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2003JOH/GLA][2005ALL/NAV_a][2010ROZ/BER][2011ROZ/BER][Unpublished]
# delfG0 = -1625.043 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1824.313 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 128.952 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 159.087 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 221.556 cm3/mol
# mole wt. = 484.5924 g/mol
# date: 6. Apr. 2018

Hydrotalcite_M44Ac
Mg4.4Al2(OH)12.8(CO3)(H2O)3.4 + 13.8 H+ = + 4.4 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HC03- + 16.2 H2O
log_k 68.6378 # +/- 999999
delta_h -136.374 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.301395E+3 -4.855628E-1 2.063735E+5 1.185591E+3 -9.870812E+6
# -Range: 0.01 - 80 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2003JOH/GLA][2005ALL/NAV_a][2010ROZ/BER][2011ROZ/BER][Unpublished]
# delfG0 = -1675.497 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1882.632 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 131.338 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 164.958 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 222.781 cm3/mol
# mole wt. = 499.8593 g/mol
# date: 6. Apr. 2018

Hydrotalcite_M46Ac
Mg4.6Al2(OH)13.2(CO3)(H2O)3.6 + 14.2 H+ = + 4.6 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HC03- + 16.8 H2O
log_k 72.5218 # +/- 999999
delta_h -141.396 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.382314E+3 -4.966676E-1 2.118536E+5 1.214845E+3 -1.010659E+7
# -Range: 0.01 - 80 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2003JOH/GLA][2005ALL/NAV_a][2010ROZ/BER][2011ROZ/BER][Unpublished]
# delfG0 = -1725.912 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1940.874 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 133.852 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 170.830 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 223.903 cm3/mol
# mole wt. = 515.1263 g/mol
# date: 6. Apr. 2018

Hydrotalcite_M48Ac
Mg4.8Al2(OH)13.6(CO3)(H2O)3.8 + 14.6 H+ = + 4.8 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HC03- + 17.4 H2O
log_k 76.4264 # +/- 999999
delta_h -146.475 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.463320E+3 -5.077830E-1 2.173495E+5 1.244123E+3 -1.034257E+7
# -Range: 0.01 - 80 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2003JOH/GLA][2005ALL/NAV_a][2010ROZ/BER][2011ROZ/BER][Unpublished]
# delfG0 = -1776.299 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1999.058 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 136.463 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 176.701 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 224.933 cm3/mol
# mole wt. = 530.3932 g/mol
# date: 6. Apr. 2018

Hydrotalcite_M50Ac
Mg5Al2(OH)14(CO3)(H2O)4 + 15 H+ = + 5 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HC03- + 18 H2O
log_k 80.3493 # +/- 999999
delta_h -151.604 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.544401E+3 -5.189075E-1 2.228593E+5 1.273421E+3 -1.057870E+7
# -Range: 0.01 - 80 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2003JOH/GLA][2005ALL/NAV_a][2010ROZ/BER][2011ROZ/BER][Unpublished]
# delfG0 = -1826.661 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -2057.193 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 139.157 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 182.573 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 225.884 cm3/mol
# mole wt. = 545.6602 g/mol
# date: 6. Apr. 2018

Hydrotalcite_M52Ac
Mg5.2Al2(OH)14.4(CO3)(H2O)4.2 + 15.4 H+ = + 5.2 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HC03- + 18.6 H2O
log_k 84.2898 # +/- 999999
delta_h -156.779 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.625548E+3 -5.300400E-1 2.283821E+5 1.302737E+3 -1.081497E+7
# -Range: 0.01 - 80 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2003JOH/GLA][2005ALL/NAV_a][2010ROZ/BER][2011ROZ/BER][Unpublished]
# delfG0 = -1876.999 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -2115.281 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 141.931 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 188.444 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 226.766 cm3/mol
# mole wt. = 560.9272 g/mol
# date: 6. Apr. 2018

Hydrotalcite_M54Ac
Mg5.4Al2(OH)14.8(CO3)(H2O)4.4 + 15.8 H+ = + 5.4 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HC03- + 19.2 H2O

```

```

log_k      88.2486 # +/- 999999
delta_h    -162.005 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -3.706752E+3      -5.411786E-1      2.339178E+5      1.332068E+3      -1.105135E+7
#
# -Range: 0.01 - 80 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2003JOH/GLA] [2005ALL/NAV_a] [2010ROZ/BER] [2011ROZ/BER] [Unpublished]
#
# delfG0 = -1927.312 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -2173.318 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 144.788 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 194.316 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 227.594 cm3/mol
# mole wt. = 576.1941 g/mol
#
# date: 6. Apr. 2018

```

Hydrotalcite_M56Ac

```

Mg5.6Al2(OH)15.2(CO3)(H2O)4.6 + 16.2 H+ = + 5.6 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 19.8 H2O
log_k      92.2280 # +/- 999999
delta_h    -167.289 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -3.788009E+3      -5.523224E-1      2.394676E+5      1.361410E+3      -1.128783E+7
#
# -Range: 0.01 - 80 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2003JOH/GLA] [2005ALL/NAV_a] [2010ROZ/BER] [2011ROZ/BER] [Unpublished]
#
# delfG0 = -1977.597 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -2231.298 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 147.742 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 200.187 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 228.377 cm3/mol
# mole wt. = 591.4611 g/mol
#
# date: 6. Apr. 2018

```

Hydrotalcite_M58Ac

```

Mg5.8Al2(OH)15.6(CO3)(H2O)4.8 + 16.6 H+ = + 5.8 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 20.4 H2O
log_k      96.2359 # +/- 999999
delta_h    -172.648 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -3.869316E+3      -5.634697E-1      2.450354E+5      1.390760E+3      -1.152436E+7
#
# -Range: 0.01 - 80 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2003JOH/GLA] [2005ALL/NAV_a] [2010ROZ/BER] [2011ROZ/BER] [Unpublished]
#
# delfG0 = -2027.843 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -2289.202 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 150.824 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 206.058 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 229.129 cm3/mol
# mole wt. = 606.7280 g/mol
#
# date: 6. Apr. 2018

```

Hydrotalcite_M6Ac

```

Mg6Al2(OH)16(CO3)(H2O)5 + 17 H+ = + 6 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 21 H2O
log_k      100.3091 # +/- 8
delta_h    -178.187 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -3.951002E+3      -5.746678E-1      2.506585E+5      1.420225E+3      -1.176179E+7
#
# -Range: 0.01 - 80 deg C
#
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2003JOH/GLA] [2005ALL/NAV_a] [2010ROZ/BER] [2011ROZ/BER] [Unpublished]
#
# delfG0 = -2078.0 +/- 10 kcal/mol
# delfH0 = -2346.927 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 154.204 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 211.930 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 229.862 cm3/mol
# mole wt. = 621.9950 g/mol
#
# date: 6. Apr. 2018

```

Hydrotalcite_M6AC1

```

Mg6Al2(OH)16Cl2(H2O)5 + 16 H+ = + 6 Mg+2 + 2 Al+3 + 2 Cl- + 21 H2O
log_k      87.3173 # +/- 13
delta_h    -161 kcal/mol # +/- 30
analytical_expression  -4.631030E+3      -6.856605E-1      2.850279E+5      1.667405E+3      -1.414177E+7
#
# -Range: 0.01 - 65 deg C
#
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 338K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2005ALL/NAV_a] [2013ROZ/CUR]
#
# delfG0 = -2018.2 +/- 18 kcal/mol
# delfH0 = -2279 +/- 30 kcal/mol
# SOPrTr = 160 +/- 80 cal/mol/K
# CpPrTr = 209.712 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 236.600 cm3/mol
# mole wt. = 632.8912 g/mol
#
# date: 12. Jan. 2017

```

Hydrotalcite_M6Fc

```

Mg6Fe2(OH)16(CO3)(H2O)5 + 15 H+ = + 6 Mg+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 1 HCO3- + 20 H2O
log_k      81.2428 # +/- 4.0
delta_h    -122.882 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -3.463862E+3      -4.935963E-1      2.128712E+5      1.249762E+3      -1.014793E+7
#
# -Range: 0.01 - 80 deg C
#
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2005ALL/NAV_a] [2010ROZ/BER] [2011ROZ/BER]
#
# delfG0 = -1856.0 +/- 7 kcal/mol
# delfH0 = -2122.103 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 163.073 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 220.665 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 237.480 cm3/mol
# mole wt. = 679.7260 g/mol
#
# date: 30. Jan. 2018

```

Hydrotalcite # synthetic. Parent mineral for other hydrotalcites

```

Mg0.74Al0.26(OH)2(CO3)0.13(H2O)0.39 + 2.13 H+ = + 0.74 Mg+2 + 0.26 Al+3 + 0.13 HCO3- + 2.39 H2O
log_k      11.0742 # +/- 0.5
delta_h    -21.906 kcal/mol # +/- 0.54
analytical_expression  -4.897315E+2      -7.165334E-2      3.096594E+4      1.756931E+2      -1.460671E+6
#
# -Range: 0.01 - 25 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 298.15K, Cp = constant
# data source: [2005ALL/NAV]
#
# delfG0 = -249.208 +/- 0.49 kcal/mol *
# delfH0 = -278.676 +/- 0.49 kcal/mol
# SOPrTr = 20.450 +/- 0.04 cal/mol/K
# CpPrTr = 24.140 +/- 999999 cal/mol/K

```

```

# mole vol. = 36.542 cm3/mol
# mole wt. = 73.8426 g/mol
# date: 22. Mar. 2019

#Hydrotalcite_Al
# Mg4Al2(OH)14(H2O)3 + 14 H+ = + 4 Mg+2 + 2 Al+3 + 17 H2O
# log_k 73.7193 # +/- 999999
# delta_h -142.498 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -2.631738E+3 -4.026813E-1 1.658006E+5 9.493715E+2 -7.088320E+6
# -Range: 0.01 - 100 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
# data source: [2006LOT/WIN][2008LOT/MAT][2012ART/SAS]
# delfG0 = -1530.231 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1721.717 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 131.160 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 155.414 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 220.200 cm3/mol
# mole wt. = 443.3308 g/mol
# date: 13. Jul. 2015

#Hydrotalcite_C03
# Mg3Al(OH)8(CO3)0.5(H2O)2.5 + 8.5 H+ = + 3 Mg+2 + 1 Al+3 + 0.5 HCO3- + 10.5 H2O
# log_k 50.7387 # +/- 999999
# delta_h -96.302 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -1.951851E+03 -2.874575E-01 1.254458E+05 7.005228E+02 -5.853249E+06
# -Range: 0.01 - 30 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 343K
# data source: [2011ROZ/BER][2012ART/SAS]
# delfG0 = -1038.203 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1166.255 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 98.281 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 122.514 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 115.000 cm3/mol
# mole wt. = 310.9982 g/mol
# date: 13. Jul. 2015

#Hydrotalcite_C03I1
# Mg4Al2CO3O6(H2O)9 + 13 H+ = + 4 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 15 H2O
# log_k 60.9364 # +/- 999999
# delta_h -128.206 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -3.232411E+3 -4.999430E-1 1.964649E+5 1.166776E+3 -9.213725E+6
# -Range: 0.01 - 30 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 303K
# data source: [2008LOT/MAT][2012ART/SAS]
# delfG0 = -1574.576 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1764.273 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 132.285 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 155.074 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 220.400 cm3/mol
# mole wt. = 469.3264 g/mol
# date: 13. Jul. 2015

#Hydrotalcite_Fe
# Mg3Fe(OH)8(CO3)0.5(H2O)2.5 + 7.5 H+ = + 3 Mg+2 + 1 Fe+2 + 0.25 O2 + 0.5 HCO3- + 10 H2O
# log_k 40.6405 # +/- 999999
# delta_h -67.276 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -1.715066E+3 -2.467681E-1 1.067518E+5 6.176395E+2 -5.073427E+6
# -Range: 0.01 - 70 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 343K
# data source: [2011ROZ/BER][2012ART/SAS]
# delfG0 = -927.974 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1055.217 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 100.692 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 124.587 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 119.000 cm3/mol
# mole wt. = 339.8617 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

#Hydrotalcite_FeI1
# Mg4Fe2(OH)14(H2O)3 + 12 H+ = + 4 Mg+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 16 H2O
# log_k 50.2323 # +/- 999999
# delta_h -80.964 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -2.167532E+3 -3.225462E-1 1.282666E+5 7.866103E+2 -5.572902E+6
# -Range: 0.01 - 100 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
# data source: [2008LOT/MAT][2012ART/SAS]
# delfG0 = -1314.262 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1503.122 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 139.950 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 161.557 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 232.400 cm3/mol
# mole wt. = 501.0588 g/mol
# date: 13. Jul. 2015

Hydroxyapatite
Ca10(P04)6(OH)2 + 8 H+ = 10 Ca+2 + 6 HP04-2 + 2 H2O
log_k -6.1528 # +/- 2
delta_h -91.76 kcal/mol # +/- 4.4
analytical_expression -1.114172E+4 -1.771619E+0 6.347601E+5 4.023633E+3 -3.745808E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978ROB/HEM]
# delfG0 = -3004.83 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -3195.76 +/- 1.3 kcal/mol
# SOPrTr = 186.60 +/- 0.9 cal/mol/K
# CpPrTr = 184.066 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 319.200 cm3/mol
# mole wt. = 1004.6230 g/mol
# date: 13. Dec. 2016

Illite
K0.6(Mg0.25Al1.8)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 0.6 K+ + 0.25 Mg+2 + 2.3 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 7.6084 # +/- 3
delta_h -49.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.332437E+3 -3.327038E-1 1.418366E+5 8.295196E+2 -7.918309E+6
# -Range: 0.01 - 207 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model

```

```

# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 483K
# data source: [1970HEL/MaC][1978HEL/DEL_a][2012GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1307.1 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1395.4 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 71.7 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 75.173 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 139.304 cm3/mol
# mole wt. = 383.9007 g/mol
# date: 23. May. 2016

Illite(avg)
K0.65(Mg0.25Fe0.2Al1.6)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 7.85 H+ + 2.075 H2O = + 0.65 K+ + 0.25 Mg+2 + 2.1 Al+3 + 0.2 Fe+2 + 0.0375 O2 + 3.5 Si(OH)4
log_k 5.7326 # +/- 3
delta_h -44.6 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.295203E+3 -3.260005E-1 1.388194E+5 8.164742E+2 -7.803501E+6
# -Range: 0.01 - 207 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 483K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1289.7 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1377.4 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 74.6 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.517 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 139.304 cm3/mol
# mole wt. = 391.6283 g/mol
# date: 23. May. 2016

Illite_IMt-2 # from Silver Hill. Parent mineral for other illites.
K0.762Na0.044(Mg0.241Fe0.376Al1.427)(Al0.613Si3.387)O10(OH)2 + 8.16 H+ + 1.694 H2O = + 0.762 K+ + 0.044 Na+ + 0.241 Mg+2 + 0.376 Fe+2 + 0.073 O2
+ 2.04 Al+3 + 3.387 Si(OH)4
log_k 9.0051 # +/- 1.9
delta_h -48.09 kcal/mol # +/- 2.7
analytical_expression -2.297324E+3 -3.267399E-1 1.394346E+5 8.177448E+2 -7.767416E+6
# -Range: 0.01 - 210 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 483K
# data source: [2012GA1/BLA]
# delfG0 = -1277.53 +/- 2.0 kcal/mol *
# delfH0 = -1365.02 +/- 2.0 kcal/mol
# SOPrTr = 77.658 +/- 0.04 cal/mol/K
# CpPrTr = 78.416 +/- 0.02 cal/mol/K
# mole vol. = 139.180 cm3/mol
# mole wt. = 401.8369 g/mol
# date: 22. Mar. 2019

Iodine
I2 + 1 H2O = + 0.5 O2 + 2 I- + 2 H+
log_k -24.8086 # +/- 0.36
delta_h 39.67 kcal/mol # +/- 0.41
analytical_expression -5.045127E+2 -1.339208E-1 1.090210E+4 1.991195E+2 -8.568313E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 27.758 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 13.138 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 51.483 cm3/mol
# mole wt. = 253.8090 g/mol
# date: 29. Oct. 2015

Iron
Fe + 2 H+ + 0.5 O2 = + 1 Fe+2 + 1 H2O
log_k 59.0327 # +/- 0.48
delta_h -88.92 kcal/mol # +/- 1.6
analytical_expression -4.806475E+2 -7.339113E-2 4.610129E+4 1.718733E+2 -1.631280E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978ROB/HEM]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 6.520 +/- 0.03 cal/mol/K
# CpPrTr = 5.97 +/- 0.1 cal/mol/K
# mole vol. = 7.092 cm3/mol
# mole wt. = 55.8470 g/mol
# date: 5. May. 1978

Jadeite
NaAl(SiO3)2 + 4 H+ + 2 H2O = 1 Na+ + 1 Al+3 + 2 Si(OH)4
log_k 8.8855 # +/- 1
delta_h -25.7 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression -1.223353E+3 -1.699259E-1 7.530606E+4 4.356465E+2 -4.236332E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -679.45 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -722.1 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 31.90 +/- 0.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 38.212 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 60.400 cm3/mol
# mole wt. = 202.1387 g/mol
# date: 13. Jul. 2015

Jaffeite
Ca6Si207(OH)6 + 12 H+ = + 6 Ca+2 + 2 Si(OH)4 + 5 H2O
log_k 113.9159 # +/- 999999
delta_h -151.983 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.447876E+3 -3.447105E-1 1.691578E+5 8.829830E+2 -7.793362E+6
# -Range: not reported
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [2010BLA/BOU][2012ART/SAS]
# delfG0 = -1546.565 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1666.682 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 77.928 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 82.433 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 174.380 cm3/mol
# mole wt. = 510.6789 g/mol
# date: 15. Jul. 2015

```

```

Jennite
Ca9Si6O18(OH)6(H2O)8 + 18 H+ = + 9 Ca+2 + 6 Si(OH)4 + 8 H2O
log_k      151.7442 # +/- 0.2
delta_h    -218.0 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression  -4.307097E+3    -6.060812E-1    2.944904E+5    1.544143E+3    -1.502850E+7
#
# -Range: 0.01 - 100 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K, Cp = constant
# data source: [1991ATK/HEA][1994ATK/GLA][1999GLA/TYR][2000COU][Unpublished]
# delfG0 = -3313.01 +/- 3.1 kcal/mol
# delfH0 = -3591.6 +/- 9 kcal/mol *
# SOPrTr = 310 +/- 30 cal/mol/K
# CpPrTr = 380 +/- 70 cal/mol/K
# mole vol. = 457.400 cm3/mol
# mole wt. = 1063.3696 g/mol
# date: 25. Jul. 2015

#Jennite(gel) # Superseded by CSH165
# Ca1.6667Si03.6667(H2O)2.1 + 3.3334 H+ = 1.6667 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 1.7667 H2O
# log_k      29.2676 # +/- 999999
# delta_h    -34.910 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression  -7.902856E+2    -1.120582E-1    5.198786E+4    2.859683E+2    -2.579194E+6
#
# -Range: 0.01 - 100 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
# data source: [2008LOT/MAT][2012ART/SAS]
# delfG0 = -593.334 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -651.263 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 33.617 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 50.384 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 78.400 cm3/mol
# mole wt. = 191.3806 g/mol
# date: 13. Jul. 2015

K2CO3(s)
K2CO3 + 1 H+ = + 2 K+ + 1 HCO3-
log_k      15.2993 # +/- 0.4
delta_h    -10.54 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression  -7.782037E+2    -1.221417E-1    4.616666E+4    2.849105E+2    -2.659006E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -254.43 +/- 0.5 kcal/mol *
# delfH0 = -274.90 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 37.17 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 27.326 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 31.765 cm3/mol
# mole wt. = 138.2058 g/mol
# date: 30. Aug. 2017

K2O(s)
K2O + 2 H+ = + 2 K+ + 1 H2O
log_k      84.0964 # +/- 0.5
delta_h    -102.06 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression  -1.579524E+2    -2.304421E-2    3.166391E+4    6.013396E+1    -5.404124E+5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -76.98 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -86.80 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 22.50 +/- 1.5 cal/mol/K
# CpPrTr = 20.099 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 40.380 cm3/mol
# mole wt. = 94.1960 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

K2SO4(s) # Arcanite
K2SO4 = + 2 K+ + 1 SO4-2
log_k      -1.7885 # +/- 0.13
delta_h    5.679 kcal/mol # +/- 0.17
analytical_expression  -1.547879E+3    -2.422900E-1    8.653087E+4    5.615461E+2    -5.457904E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978ROB/HEM]
# delfG0 = -315.390 +/- 0.13 kcal/mol
# delfH0 = -343.619 +/- 0.13 kcal/mol
# SOPrTr = 41.960 +/- 0.08 cal/mol/K
# CpPrTr = 31.073 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 65.500 cm3/mol
# mole wt. = 174.2542 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

K_Feldspar # Orthoclase
KAlSi3O8 + 4 H+ + 4 H2O = 1 K+ + 1 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k      0.3020 # +/- 1.2
delta_h    -13.647 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.409097E+3    -1.942276E-1    8.433597E+4    5.015149E+2    -5.024657E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1991SVE/HEM]
# delfG0 = -895.61 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -949.459 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 51.130 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 44.216 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 108.870 cm3/mol
# mole wt. = 278.3315 g/mol
# date: 13. Jul. 2015

K_in_CSH_gel
K00.5 + H+ = 1 K+ + 0.5 H2O
log_k      999999 # +/- 999999
delta_h    999999 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  9.99999E+05    9.99999E+05    9.99999E+05    9.99999E+05
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used] Modeling phase
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [Unpublished]
# delfG0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol

```

```

# SOPrTr = 999999 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 999999 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 47.0980 g/mol
# date: 6. Feb. 2019

Kalsilite
KAISiO4 + 4 H+ = 1 K+ + 1 Al+3 + 1 Si(OH)4
log_k      10.3427 # +/- 0.8
delta_h    -27.5 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  -8.791482E+2   -1.282166E-1   5.489207E+4   3.138302E+2   -2.928453E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL_a][1997RIM_a]
# delfG0 = -482.85 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -510.6 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 31.850 +/- 0.30 cal/mol/K
# CpPrTr = 28.621 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 59.890 cm3/mol
# mole wt. = 158.1629 g/mol
# date: 8. Sep. 2016

Kaolinite
Al2Si2O5(OH)4 + 6 H+ = + 2 Al+3 + 2 Si(OH)4 + 1 H2O
log_k      5.2909 # +/- 1.1
delta_h    -38.8 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression  -1.582016E+3   -2.301977E-1   9.560248E+4   5.631416E+2   -5.171080E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][1995ROB/HEM][1997RIM_a]
# delfG0 = -908.37 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -985.2 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 47.90 +/- 0.5 cal/mol/K
# CpPrTr = 58.19 +/- 0.6 cal/mol/K
# mole vol. = 99.520 cm3/mol
# mole wt. = 258.1605 g/mol
# date: 7. Sep. 2016

Katoite_Al # Hydrogarnet, C3AH6
Ca3Al2(OH)12 + 12 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Al+3 + 12 H2O
log_k      81.0427 # +/- 0.10
delta_h    -140.51 kcal/mol # +/- 1.3
analytical_expression  -2.004013E+3   -3.117258E-1   1.341355E+5   7.237415E+2   -5.577621E+6
#
# -Range: 0.01 - 200 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 473K
# data source: [1936VON/MOS][1943WEL/GLA][1954PEP/WEL][1958GAR][1966FAU][1968ROB][1979EDE/SAT][1992ATK/BEN][1992BEN/REA]
# [1994QUI/MAJ][1999GLA/TYR][2000COU][2000ZHA][2007MAT/LOT][2010BAL/LOT][2012GEL/DAC][2014DIL/LOT][Unpublished]
# delfG0 = -1199.14 +/- 0.9 kcal/mol
# delfH0 = -1326.05 +/- 0.9 kcal/mol *
# SOPrTr = 99.31 +/- 0.9 cal/mol/K
# CpPrTr = 107 +/- 11 cal/mol/K
# mole vol. = 149.619 cm3/mol
# mole wt. = 378.2846 g/mol
# date: 10. Feb. 2019

Katoite_AlSiO1
Ca3Al2(SiO4)0.1(OH)11.6 + 12 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Al+3 + 0.1 Si(OH)4 + 11.6 H2O
log_k      79.9377 # +/- 999999
delta_h    -139.513 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -2.030116E+3   -3.149912E-1   1.355904E+5   7.328028E+2   -5.695622E+6
#
# -Range: 0.01 - 100 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] SSAS between Grossular & Katoite_Al
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
# data source: [1992BEN/REA][1992JAP/GLA][1994ATK/GLA][1994QUI/MAJ][2007MAT/LOT][2014DIL/LOT][Unpublished]
# delfG0 = -1209.263 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1334.637 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 98.652 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 105.646 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 148.686 cm3/mol
# mole wt. = 380.6900 g/mol
# date: 11. Feb. 2019

Katoite_AlSiO2
Ca3Al2(SiO4)0.2(OH)11.2 + 12 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Al+3 + 0.2 Si(OH)4 + 11.2 H2O
log_k      78.8781 # +/- 999999
delta_h    -138.509 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -2.056174E+3   -3.182565E-1   1.370441E+5   7.418640E+2   -5.813633E+6
#
# -Range: 0.01 - 100 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data], SSAS between Grossular & Katoite_Al
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
# data source: [1992BEN/REA][1992JAP/GLA][1994ATK/GLA][1994QUI/MAJ][2007MAT/LOT][2014DIL/LOT][Unpublished]
# delfG0 = -1219.324 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1343.229 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 97.783 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 104.722 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 147.754 cm3/mol
# mole wt. = 383.0954 g/mol
# date: 11. Feb. 2019

Katoite_AlSiO3
Ca3Al2(SiO4)0.3(OH)10.8 + 12 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Al+3 + 0.3 Si(OH)4 + 10.8 H2O
log_k      77.8296 # +/- 999999
delta_h    -137.505 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -2.082219E+3   -3.215215E-1   1.384983E+5   7.509245E+2   -5.931627E+6
#
# -Range: 0.01 - 100 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] SSAS between Grossular & Katoite_Al
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
# data source: [1992BEN/REA][1992JAP/GLA][1994ATK/GLA][1994QUI/MAJ][2007MAT/LOT][2014DIL/LOT][Unpublished]
# delfG0 = -1229.370 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1351.820 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 96.867 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 103.797 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 146.824 cm3/mol
# mole wt. = 385.5008 g/mol
# date: 11. Feb. 2019

Katoite_AlSiO4
Ca3Al2(SiO4)0.4(OH)10.4 + 12 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Al+3 + 0.4 Si(OH)4 + 10.4 H2O
log_k      76.7839 # +/- 999999
delta_h    -136.501 kcal/mol # +/- 999999

```

analytical_expression -2.108259E+3 -3.247863E-1 1.399524E+5 7.599844E+2 -6.049628E+6
 # -Range: 0.01 - 100 deg C
 # gflag: 3 [delfG0 from log K data] SSAS between Grossular & Katoite_Al
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
 # data source: [1992BEN/REA] [1992JAP/GLA] [1994ATK/GLA] [1994QUI/MAJ] [2007MAT/LOT] [2014DIL/LOT] [Unpublished]
 # delfG0 = -1239.412 +/- 999999 kcal/mol
 # delfH0 = -1360.411 +/- 999999 kcal/mol *
 # SOPrTr = 95.936 +/- 999999 cal/mol/K
 # CpPrTr = 102.873 +/- 999999 cal/mol/K
 # mole vol. = 145.897 cm3/mol
 # mole wt. = 387.9062 g/mol
 # date: 11. Feb. 2019

Katoite_AlSi08
 Ca3Al2(Si04)0.8(OH)8.8 + 12 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Al+3 + 0.8 Si(OH)4 + 8.8 H2O
 log_k 72.6043 # +/- 999999
 delta_h -132.487 kcal/mol # +/- 999999
 analytical_expression -2.212382E+3 -3.378397E-1 1.457671E+5 7.962114E+2 -6.521512E+6
 # -Range: 0.01 - 100 deg C
 # gflag: 3 [delfG0 from log K data] SSAS between Grossular & Katoite_Al
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
 # data source: [1992BEN/REA] [1992JAP/GLA] [1994ATK/GLA] [1994QUI/MAJ] [2007MAT/LOT] [2014DIL/LOT] [Unpublished]
 # delfG0 = -1279.576 +/- 999999 kcal/mol
 # delfH0 = -1394.775 +/- 999999 kcal/mol *
 # SOPrTr = 92.199 +/- 999999 cal/mol/K
 # CpPrTr = 99.176 +/- 999999 cal/mol/K
 # mole vol. = 142.236 cm3/mol
 # mole wt. = 397.5277 g/mol
 # date: 11. Feb. 2019

Katoite_AlSi09
 Ca3Al2(Si04)0.9(OH)8.4 + 12 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Al+3 + 0.9 Si(OH)4 + 8.4 H2O
 log_k 71.5594 # +/- 999999
 delta_h -131.482 kcal/mol # +/- 999999
 analytical_expression -2.238402E+3 -3.411014E-1 1.472200E+5 8.052643E+2 -6.639447E+6
 # -Range: 0.01 - 100 deg C
 # gflag: 3 [delfG0 from log K data] SSAS between Grossular & Katoite_Al
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
 # data source: [1992BEN/REA] [1992JAP/GLA] [1994ATK/GLA] [1994QUI/MAJ] [2007MAT/LOT] [2014DIL/LOT] [Unpublished]
 # delfG0 = -1289.617 +/- 999999 kcal/mol
 # delfH0 = -1403.367 +/- 999999 kcal/mol *
 # SOPrTr = 91.263 +/- 999999 cal/mol/K
 # CpPrTr = 98.251 +/- 999999 cal/mol/K
 # mole vol. = 141.336 cm3/mol
 # mole wt. = 399.9331 g/mol
 # date: 11. Feb. 2019

Katoite_AlSi10
 Ca3Al2(Si04)(OH)8 + 12 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 Si(OH)4 + 8 H2O
 log_k 70.5160 # +/- 999999
 delta_h -130.479 kcal/mol # +/- 999999
 analytical_expression -2.264415E+3 -3.443621E-1 1.486729E+5 8.143151E+2 -6.757376E+6
 # -Range: 0.01 - 100 deg C
 # gflag: 3 [delfG0 from log K data] SSAS between Grossular & Katoite_Al
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
 # data source: [1992BEN/REA] [1992JAP/GLA] [1994ATK/GLA] [1994QUI/MAJ] [2007MAT/LOT] [2014DIL/LOT] [Unpublished]
 # delfG0 = -1299.656 +/- 999999 kcal/mol
 # delfH0 = -1411.958 +/- 999999 kcal/mol *
 # SOPrTr = 90.322 +/- 999999 cal/mol/K
 # CpPrTr = 97.327 +/- 999999 cal/mol/K
 # mole vol. = 140.443 cm3/mol
 # mole wt. = 402.3385 g/mol
 # date: 11. Feb. 2019

Katoite_Fe
 Ca3Fe2(OH)12 + 10 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 11 H2O
 log_k 58.6340 # +/- 3
 delta_h -81.2 kcal/mol # +/- 16
 analytical_expression -1.545807E+3 -2.320014E-1 9.757684E+4 5.627931E+2 -4.111687E+6
 # -Range: 0.01 - 85 deg C
 # gflag: 3 [delfG0 from log K data]
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 358K
 # data source: [1978HEL/DEL_a] [1979EDE/SAT_a] [2014DIL/LOT]
 # delfG0 = -981.7 +/- 4 kcal/mol
 # delfH0 = -1105.2 +/- 15 kcal/mol *
 # SOPrTr = 110 +/- 50 cal/mol/K
 # CpPrTr = 115.288 +/- 999999 cal/mol/K
 # mole vol. = 155.000 cm3/mol
 # mole wt. = 436.0156 g/mol
 # date: 31. Jan. 2018

Katoite_FeSi084
 Ca3Fe2(Si04)0.84(OH)8.64 + 10 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 0.84 Si(OH)4 + 7.64 H2O
 log_k 46.8107 # +/- 3
 delta_h -68.705 kcal/mol # +/- 999999
 analytical_expression -1.757300E+3 -2.588120E-1 1.083582E+5 6.364188E+2 -5.061049E+6
 # -Range: 0.01 - 50 deg C
 # gflag: 3 [delfG0 from log K data]
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 323K
 # data source: [1978HEL/DEL_a] [1979EDE/SAT_a] [2014DIL/LOT]
 # delfG0 = -1070.2 +/- 4 kcal/mol
 # delfH0 = -1181.463 +/- 999999 kcal/mol *
 # SOPrTr = 102.485 +/- 999999 cal/mol/K
 # CpPrTr = 106.478 +/- 999999 cal/mol/K
 # mole vol. = 148.800 cm3/mol
 # mole wt. = 456.2209 g/mol
 # date: 31. Jan. 2018

Katoite_FeSi134
 Ca3Fe2(Si04)1.34(OH)6.64 + 10 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 1.34 Si(OH)4 + 5.64 H2O
 log_k 39.8307 # +/- 3
 delta_h -59.614 kcal/mol # +/- 999999
 analytical_expression -1.881913E+3 -2.747390E-1 1.144099E+5 6.802393E+2 -5.625275E+6
 # -Range: 0.01 - 50 deg C
 # gflag: 3 [delfG0 from log K data]
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 323K
 # data source: [1978HEL/DEL_a] [1979EDE/SAT_a] [2014DIL/LOT]
 # delfG0 = -1122.8 +/- 4 kcal/mol
 # delfH0 = -1228.491 +/- 999999 kcal/mol *
 # SOPrTr = 92.191 +/- 999999 cal/mol/K
 # CpPrTr = 101.065 +/- 999999 cal/mol/K
 # mole vol. = 144.700 cm3/mol
 # mole wt. = 468.2478 g/mol

```

# date: 31. Jan. 2018
KBr (s)
KBr = 1 K+ + 1 Br-
log_k 5.0431 # +/- 0.3
delta_h 4.81 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression -7.182303E+2 -1.124870E-1 4.110513E+4 2.617183E+2 -2.547397E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -85.50 +/- 0.4 kcal/mol *
# delfH0 = -94.12 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 22.930 +/- 0.01 cal/mol/K
# CpPrTr = 12.576 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 43.431 cm3/mol
# mole wt. = 119.0023 g/mol
# date: 31. Aug. 2017

Kerolite
Mg3Si4O10(OH)2(H2O) + 6 H+ + 3 H2O = + 3 Mg+2 + 4 Si(OH)4
log_k 25.9111 # +/- 0.3
delta_h -50.8 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.268240E+3 -3.018235E-1 1.419614E+5 8.071452E+2 -7.932199E+6
#
# -Range: Not given
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not given
# data source: [1978HEL/DEL_a][1988STO]
# delfG0 = -1371.73 +/- 2.5 kcal/mol
# delfH0 = -1474.9 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 76.4 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 91.280 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 144.250 cm3/mol
# mole wt. = 397.2808 g/mol
# date: 4. Dec. 2017

KI (s)
KI = 1 K+ + 1 I-
log_k 1.9938 # +/- 0.3
delta_h 4.50 kcal/mol # +/- 0.2
analytical_expression -6.726543E+2 -1.068642E-1 3.724325E+4 2.458217E+2 -2.370831E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -77.20 +/- 0.3 kcal/mol *
# delfH0 = -78.37 +/- 0.1 kcal/mol
# SOPrTr = 25.4 +/- 1 cal/mol/K
# CpPrTr = 12.609 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 53.206 cm3/mol
# mole wt. = 166.0028 g/mol
# date: 20. May. 2016

KN02 (s)
KN02 + 2 H+ + 1 H2O = 1 K+ + 1 NH4+ + 1.5 O2
log_k -36.2025 # +/- 1
delta_h 60.34 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression 2.747920E+2 4.271240E-2 -3.042501E+4 -9.547675E+1 1.293633E+6
#
# -Range: 0.01 - 77 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 350K, Cp = constant
# data source: [1982WAG/EVA]
# delfG0 = -73.27 +/- 0.2 kcal/mol *
# delfH0 = -88.49 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 36.35 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 25.67 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 44.441 cm3/mol
# mole wt. = 85.1038 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

KN03 (s)
KN03 + 2 H+ + 1 H2O = 1 K+ + 1 NH4+ + 2 O2
log_k -53.1180 # +/- 0.9
delta_h 88.65 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression 8.835293E+2 1.216224E-1 -7.411367E+4 -3.099549E+2 3.789084E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -94.37 +/- 0.6 kcal/mol *
# delfH0 = -118.25 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 31.8 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 23.017 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 48.144 cm3/mol
# mole wt. = 101.1032 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

KOH (s)
KOH + 1 H+ = 1 K+ + 1 H2O
log_k 24.6496 # +/- 0.3
delta_h -27.08 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression -8.334449E+1 -1.200995E-2 1.067335E+4 3.178335E+1 -2.550923E+5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -90.57 +/- 0.4 kcal/mol *
# delfH0 = -101.51 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 18.86 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 15.428 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 27.450 cm3/mol
# mole wt. = 56.1057 g/mol
# date: 9. Mar. 2016

#Kuzel_Salt # Superseded by Kuzel_Salt_Al
Ca4Al2(SO4)0.5Cl(OH)12(H2O)6 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 Cl- + 0.5 SO4-2 + 18 H2O
log_k 73.0031 # +/- 0.7
delta_h -121.8 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression -3.659360E+3 -5.747582E-1 2.222904E+5 1.327099E+3 -1.116941E+7
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 358K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][1996STR][1999GLA/TYR][2010BAL/LOT]

```

```

# delfG0 = -1802.70 +/- 1.4 kcal/mol
# delfH0 = -2033.1 +/- 6 kcal/mol
# S0PrTr = 176 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = 221.874 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 287.734 cm3/mol
# mole wt. = 609.9383 g/mol
# date: 4. Oct. 2016

Kuzel_Salt_Al
(Ca2Al(OH)6)2((SO4)0.5Cl)(H2O)6 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 Cl- + 0.5 SO4-2 + 18 H2O
log_k 72.7026 # +/- 0.6
delta_h -116.80 kcal/mol # +/- 1.8
analytical_expression -3.654174E+3 -5.744632E-1 2.211090E+5 1.326423E+3 -1.116403E+7
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][1996STR][1999GLA/TYR][2010BAL/LOT]
# delfG0 = -1803.11 +/- 1.3 kcal/mol
# delfH0 = -2038.10 +/- 1.4 kcal/mol *
# S0PrTr = 160.74 +/- 2.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 221.87 +/- 6.8 cal/mol/K
# mole vol. = 289.895 cm3/mol
# mole wt. = 609.9383 g/mol
# date: 24. Jan. 2019

Kyanite
Al2SiO5 + 6 H+ = + 2 Al+3 + 1 Si(OH)4 + 1 H2O
log_k 13.7666 # +/- 0.7
delta_h -54.89 kcal/mol # +/- 1.0
analytical_expression -1.300841E+3 -1.985487E-1 8.183875E+4 4.629435E+2 -4.107598E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995ROB/HEM]
# delfG0 = -583.90 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -619.93 +/- 0.5 kcal/mol
# S0PrTr = 19.79 +/- 0.5 cal/mol/K
# CpPrTr = 29.07 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 44.150 cm3/mol
# mole wt. = 162.0456 g/mol
# date: 7. Sep. 2016

Larnite
Ca2SiO4 + 4 H+ = + 2 Ca+2 + 1 Si(OH)4
log_k 38.9498 # +/- 0.6
delta_h -57.32 kcal/mol # +/- 0.9
analytical_expression -8.900166E+2 -1.285920E-1 6.228084E+4 3.198997E+2 -2.947247E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1951KIN][1951TOD][1960KEL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -524.01 +/- 0.6 kcal/mol *
# delfH0 = -551.42 +/- 0.6 kcal/mol
# S0PrTr = 30.50 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 30.732 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 51.600 cm3/mol
# mole wt. = 172.2391 g/mol
# date: 22. Mar. 2019

Laumontite_dia
K0.4Na0.4Ca3.6(Al8Si16O48)(H2O)16 + 32 H+ = + 0.4 K+ + 0.4 Na+ + 3.6 Ca+2 + 8 Al+3 + 16 Si(OH)4
log_k 45.6140 # +/- 7.7
delta_h -200.0 kcal/mol # +/- 18
analytical_expression -1.003077E+4 -1.409914E+0 6.085535E+5 3.571574E+3 -3.395657E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001CHI/APP][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -6404.3 +/- 8 kcal/mol
# delfH0 = -6930.1 +/- 16 kcal/mol
# S0PrTr = 478.2 +/- 59 cal/mol/K
# CpPrTr = 467.331 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 812.800 cm3/mol
# mole wt. = 1890.5504 g/mol
# date: 23. Aug. 2016

Laumontite_Ca
Ca4(Al8Si16O48)(H2O)16 + 32 H+ = + 4 Ca+2 + 8 Al+3 + 16 Si(OH)4
log_k 46.2566 # +/- 999999
delta_h -202.80 kcal/mol # +/- 8.4
analytical_expression -1.007137E+4 -1.421760E+0 6.107567E+5 3.587107E+3 -3.404951E+7
#
# -Range: 0.01 - 130 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 403K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1996KIS/NAV]
# delfG0 = -6404.231 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -6932.10 +/- 2.0 kcal/mol
# S0PrTr = 464.150 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 470.393 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 824.000 cm3/mol
# mole wt. = 1881.7483 g/mol
# date: 23. Aug. 2016

Laumontite_CaII
Ca4(Al8Si16O48)(H2O)18 + 32 H+ = + 4 Ca+2 + 8 Al+3 + 16 Si(OH)4 + 2 H2O
log_k 45.5287 # +/- 8
delta_h -200.5 kcal/mol # +/- 18
analytical_expression -1.007238E+4 -1.415733E+0 6.103472E+5 3.586772E+3 -3.398900E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -6518.6 +/- 8 kcal/mol
# delfH0 = -7071.0 +/- 16 kcal/mol
# S0PrTr = 493.3 +/- 59 cal/mol/K
# CpPrTr = 484.344 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 833.865 cm3/mol
# mole wt. = 1917.7789 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

#Laumontite_CaIII
Ca4(Al8Si16O48)(H2O)16 + 32 H+ = + 4 Ca+2 + 8 Al+3 + 16 Si(OH)4
log_k 58.6671 # +/- 5.3

```

```

# delta_h -219.796 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -9.843205E+3 -1.373547E+0 6.049333E+5 3.500248E+3 -3.366507E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -6387.30 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -6915.100 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 464.400 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 471.904 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 830.200 cm3/mol
# mole wt. = 1881.7483 g/mol
# date: 23. Aug. 2016

```

```

Lawsonite
CaAl2Si207(OH)2(H2O) + 8 H+ = + 2 H2O + 1 Ca+2 + 2 Al+3 + 2 Si(OH)4
log_k 22.7130 # +/- 1.1
delta_h -63.973 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.904182E+3 -2.796301E-1 1.184350E+5 6.798713E+2 -6.157155E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -1073.41 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1158.104 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 55.800 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 70.473 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 101.320 cm3/mol
# mole wt. = 314.2379 g/mol
# date: 23. Aug. 2016

```

```

Lead # Element
Pb + 2 H+ + 0.5 O2 = + 1 Pb+2 + 1 H2O
log_k 47.2064 # +/- 0.20
delta_h -66.65 kcal/mol # +/- 0.08
analytical_expression -4.406207E+2 -6.671987E-2 3.985695E+4 1.584223E+2 -1.597052E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 15.490 +/- 0.07 cal/mol/K
# CpPrTr = 6.384 +/- 0.05 cal/mol/K
# mole vol. = 18.260 cm3/mol
# mole wt. = 207.2000 g/mol
# date: 23. Oct. 2019

```

```

Leonhardite # Laumontite_Ca(deh)
Ca4(Al8Si16O48)(H2O)14 + 32 H+ + 2 H2O = + 4 Ca+2 + 8 Al+3 + 16 Si(OH)4
log_k 44.6036 # +/- 6.7
delta_h -203.56 kcal/mol # +/- 9.8
analytical_expression -9.832513E+3 -1.374621E+0 6.008498E+5 3.495987E+3 -3.368241E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1996KIS/NAV]
# delfG0 = -6293.11 +/- 5.5 kcal/mol
# delfH0 = -6794.70 +/- 5.4 kcal/mol
# SOPrTr = 440.80 +/- 3.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 449.104 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 815.720 cm3/mol
# mole wt. = 1845.7177 g/mol
# date: 23. Aug. 2016

```

```

Leonhardite_II # Laumontite_Ca(deh)
Ca4(Al8Si16O48)(H2O)14 + 32 H+ + 2 H2O = + 4 Ca+2 + 8 Al+3 + 16 Si(OH)4
log_k 45.8571 # +/- 8
delta_h -201.0 kcal/mol # +/- 18
analytical_expression -1.001126E+4 -1.409912E+0 6.082168E+5 3.564483E+3 -3.400933E+7
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -6291.4 +/- 8 kcal/mol
# delfH0 = -6797.3 +/- 16 kcal/mol
# SOPrTr = 426.5 +/- 59 cal/mol/K
# CpPrTr = 442.928 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 813.985 cm3/mol
# mole wt. = 1845.7177 g/mol
# date: 28. Jul. 2016

```

```

Lepidocrocite # Fe00H_gamma
FeO(OH) + 2 H+ = 1 Fe+2 + 0.25 O2 + 1.5 H2O
log_k -6.4406 # +/- 0.6
delta_h 6.01 kcal/mol # +/- 1.7
analytical_expression -2.863177E+2 -4.239460E-2 1.321610E+4 1.036136E+2 -7.284378E+5
# -Range: 0.01 - 114 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 387K
# data source: [2013LEM/BER]
# delfG0 = -114.70 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -131.26 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 15.554 +/- 0.07 cal/mol/K
# CpPrTr = 16.506 +/- 0.13 cal/mol/K
# mole vol. = 22.393 cm3/mol
# mole wt. = 88.8518 g/mol
# date: 23. Aug. 2016

```

```

Leucite
KAlSi206 + 4 H+ + 2 H2O = 1 K+ + 1 Al+3 + 2 Si(OH)4
log_k 6.6975 # +/- 0.83
delta_h -24.344 kcal/mol # +/- 1.21
analytical_expression -1.168512E+3 -1.630850E-1 7.214167E+4 4.154657E+2 -4.104721E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978ROB/HEM]
# delfG0 = -687.354 +/- 0.68 kcal/mol
# delfH0 = -726.255 +/- 0.66 kcal/mol
# SOPrTr = 47.850 +/- 0.40 cal/mol/K
# CpPrTr = 39.230 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 88.390 cm3/mol

```

```

# mole wt. = 218.2472 g/mol
# date: 24. Aug. 2016

Li2O(s)
Li2O + 2 H+ = + 2 Li+ + 1 H2O
log_k      45.6135 # +/- 0.37
delta_h    -58.32 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression  -2.911173E+2   -4.015651E-2   2.764477E+4   1.066142E+2   -6.956885E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1968ROB/WAL]
# delfG0 = -134.33 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -143.10 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 8.980 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 12.950 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 14.760 cm3/mol
# mole wt. = 29.8814 g/mol
# date: 30. May. 2016

Lime
CaO + 2 H+ = 1 Ca+2 + 1 H2O
log_k      32.5858 # +/- 0.24
delta_h    -46.327 kcal/mol # +/- 0.29
analytical_expression  -3.011267E+2   -4.665799E-2   2.610100E+4   1.091673E+2   -8.930156E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1956HUB/HOL][1960KEL][1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -144.353 +/- 0.26 kcal/mol *
# delfH0 = -151.790 +/- 0.21 kcal/mol
# SOPrTr = 9.50 +/- 0.5 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.24 +/- 0.4 cal/mol/K
# mole vol. = 16.619 cm3/mol
# mole wt. = 56.0774 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

LiOH(s)
LiOH + 1 H+ = 1 Li+ + 1 H2O
log_k      15.9158 # +/- 0.08
delta_h    -18.97 kcal/mol # +/- 0.1
analytical_expression  -1.456410E+2   -1.975306E-2   1.151199E+4   5.354911E+1   -3.261075E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1998CHA]
# delfG0 = -104.91 +/- 0.1 kcal/mol *
# delfH0 = -115.90 +/- 0.1 kcal/mol
# SOPrTr = 10.234 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = 11.893 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 16.440 cm3/mol
# mole wt. = 23.9484 g/mol
# date: 11. Mar. 2016

Litharge # Pb0 red
PbO + 2 H+ = + 1 Pb+2 + 1 H2O
log_k      12.5960 # +/- 0.2
delta_h    -15.66 kcal/mol # +/- 0.2
analytical_expression  -3.048058E+2   -4.577649E-2   2.035676E+4   1.107159E+2   -9.943309E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -45.24 +/- 0.2 kcal/mol *
# delfH0 = -52.44 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 15.85 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.93 +/- 0.4 cal/mol/K
# mole vol. = 23.924 cm3/mol
# mole wt. = 223.1994 g/mol
# date: 23. Oct. 2019

Lithium
Li + 1 H+ + 0.25 O2 = 1 Li+ + 0.5 H2O
log_k      72.7637 # +/- 0.10
delta_h    -99.99 kcal/mol # +/- 0.04
analytical_expression  -2.109254E+2   -3.041499E-2   3.333986E+4   7.606621E+1   -6.475994E+5
# -Range: 0.01 - 181 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 453.7K
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 6.960 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = 5.894 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 12.974 cm3/mol
# mole wt. = 6.9410 g/mol
# date: 11. Mar. 2016

Lizardite
Mg3Si2O5(OH)4 + 6 H+ = + 3 Mg+2 + 2 Si(OH)4 + 1 H2O
log_k      31.1506 # +/- 999999
delta_h    -56.518 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.683723E+3   -2.318878E-1   1.064891E+5   6.016194E+2   -5.495730E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [2004EVA]
# delfG0 = -965.520 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1044.181 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 51.700 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 65.465 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 107.495 cm3/mol
# mole wt. = 277.1122 g/mol
# date: 24. Aug. 2017

Maghemite
Fe2O3 + 4 H+ = + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 2 H2O
log_k      -13.9718 # +/- 1.7
delta_h    11.17 kcal/mol # +/- 3.8
analytical_expression  -5.603065E+2   -8.449143E-2   2.607977E+4   2.022956E+2   -1.467844E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]

```

```

# data source: [2013LEM/BER]
# delfG0 = -174.2 +/- 2 kcal/mol *
# delfH0 = -193.35 +/- 2.0 kcal/mol
# SOPrTr = 22.24 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 25.09 +/- 0.4 cal/mol/K
# mole vol. = 29.130 cm3/mol
# mole wt. = 159.6922 g/mol
# date: 25. Jul. 2018

Magnesioferrite
MgFe2O4 + 6 H+ = 1 Mg+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 3 H2O
log_k 3.9304 # +/- 1.1
delta_h -20.147 kcal/mol # +/- 3.25
analytical_expression -9.468645E+2 -1.409263E-1 5.359326E+4 3.405359E+2 -2.628845E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1954BON][1961KOE/BAR][1968ROB/WAL][2005KLE/AHR]
# delfG0 = -314.97 +/- 0.7 kcal/mol *
# delfH0 = -341.720 +/- 0.44 kcal/mol
# SOPrTr = 29.1 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 35.19 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 44.570 cm3/mol
# mole wt. = 199.9966 g/mol
# date: 17. Oct. 2017

Magnesite
MgCO3 + 1 H+ = 1 Mg+2 + 1 HCO3-
log_k 2.2921 # +/- 0.9
delta_h -10.7 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression -9.666713E+2 -1.505083E-1 5.528270E+4 3.491192E+2 -3.151251E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -245.66 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -265.6 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 15.738 +/- 0.20 cal/mol/K
# CpPrTr = 18.128 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 28.018 cm3/mol
# mole wt. = 84.3142 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Magnesium
Mg + 2 H+ + 0.5 O2 = 1 H2O + 1 Mg+2
log_k 122.5367 # +/- 0.50
delta_h -178.23 kcal/mol # +/- 0.26
analytical_expression -4.996384E+2 -7.463497E-2 6.661670E+4 1.777853E+2 -1.682148E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 7.811 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 5.921 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 13.968 cm3/mol
# mole wt. = 24.3050 g/mol
# date: 30. Oct. 2015

Magnetite
Fe3O4 + 6 H+ = 3 Fe+2 + 0.5 O2 + 3 H2O
log_k -6.5040 # +/- 1.5
delta_h -5.300 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -9.239107E+2 -1.394576E-1 4.899913E+4 3.327672E+2 -2.557451E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1973HAA/ROB][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -242.57 +/- 0.8 kcal/mol
# delfH0 = -267.25 +/- 0.8 kcal/mol
# SOPrTr = 34.83 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 36.25 +/- 0.3 cal/mol/K
# mole vol. = 44.524 cm3/mol
# mole wt. = 231.5326 g/mol
# date: 5. May. 1978

Malachite
Cu2(OH)2(CO3) + 3 H+ = 2 Cu+2 + 1 HCO3- + 2 H2O
log_k 5.9579 # +/- 0.7
delta_h -18.23 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression -1.314284E+3 -2.013111E-1 7.503863E+4 4.747275E+2 -4.097515E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1974RIC/BRO][1978HEL/DEL][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -214.18 +/- 0.8 kcal/mol
# delfH0 = -251.90 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 44.5 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 39.306 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 54.860 cm3/mol
# mole wt. = 221.1159 g/mol
# date: 3. Jun. 2016

Manganese
Mn + 2 H+ + 0.5 O2 = 1 Mn+2 + 1 H2O
log_k 83.3905 # +/- 0.6
delta_h -119.8 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression -4.707696E+2 -7.200020E-2 5.225380E+4 1.689869E+2 -1.580429E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 7.651 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 6.314 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 7.526 cm3/mol
# mole wt. = 54.9380 g/mol
# date: 6. Apr. 2016

Manganosite
MnO + 2 H+ = 1 Mn+2 + 1 H2O

```

```

log_k      18.3604 # +/- 0.5
delta_h    -29.14 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression  -3.392729E+2    -5.099011E-2    2.434084E+4    1.222104E+2    -9.960049E+5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -86.74 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -92.08 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 14.27 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.70 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 13.221 cm3/mol
# mole wt. = 70.9374 g/mol
# date: 1. Jun. 2016

Margarite
Ca(Al2)(Al2Si2)O10(OH)2 + 14 H+ = 1 Ca+2 + 4 Al+3 + 2 Si(OH)4 + 4 H2O
log_k      41.5674 # +/- 1.3
delta_h    -130.269 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -2.908012E+3    -4.419412E-1    1.843366E+5    1.036711E+3    -9.084870E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -1394.15 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1485.803 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 63.800 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 75.820 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 129.400 cm3/mol
# mole wt. = 398.1839 g/mol
# date: 14. Jul. 2015

Massicot # Pb0 yellow
PbO + 2 H+ = + 1 Pb+2 + 1 H2O
log_k      12.7067 # +/- 0.12
delta_h    -15.98 kcal/mol # +/- 0.2
analytical_expression  -2.453506E+2    -3.788267E-2    1.687035E+4    8.948203E+1    -7.688992E+5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -45.086 +/- 0.15 kcal/mol *
# delfH0 = -52.117 +/- 0.15 kcal/mol
# SOPrTr = 16.420 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.940 +/- 0.10 cal/mol/K
# mole vol. = 23.152 cm3/mol
# mole wt. = 223.1994 g/mol
# date: 24. Oct. 2019

Maximum_Microcline
KAlSi3O8 + 4 H+ + 4 H2O = 1 K+ + 1 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k      0.3020 # +/- 1.2
delta_h    -13.617 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.428932E+3    -1.951810E-1    8.603576E+4    5.079832E+2    -5.165828E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][19740PE][1978HEL/DEL][1991SVE/HEM]
# delfG0 = -895.61 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -949.489 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 51.130 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 48.496 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 108.741 cm3/mol
# mole wt. = 278.3315 g/mol
# date: 14. Jul. 2015

Melanterite
FeSO4(H2O)7 = 1 Fe+2 + 1 SO4-2 + 7 H2O
log_k      -2.0106 # +/- 0.5
delta_h    2.340 kcal/mol # +/- 1.62
analytical_expression  -1.832985E+3    -2.864889E-1    9.934532E+4    6.662859E+2    -5.821528E+6
#
# -Range: 0.01 - 35 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 308K
# data source: [1949LYO/GIA][1968ROB/WAL][2013LEM/BER]
# delfG0 = -599.359 +/- 0.15 kcal/mol *
# delfH0 = -720.007 +/- 0.14 kcal/mol
# SOPrTr = 97.78 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 94.39 +/- 0.7 cal/mol/K
# mole vol. = 146.540 cm3/mol
# mole wt. = 278.0170 g/mol
# date: 11. Sep. 2017

Merwinite
Ca3Mg(SiO4)2 + 8 H+ = + 3 Ca+2 + 1 Mg+2 + 2 Si(OH)4
log_k      69.0119 # +/- 1.1
delta_h    -108.1 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression  -1.840738E+3    -2.634850E-1    1.263653E+5    6.598544E+2    -6.070410E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1963WEL/KEL][1964PAN/KEL][1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -1036.53 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1090.9 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 60.50 +/- 0.5 cal/mol/K
# CpPrTr = 60.292 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 104.400 cm3/mol
# mole wt. = 328.7052 g/mol
# date: 14. Jul. 2015

Mg3(P04)2(s)
Mg3(P04)2 + 2 H+ = + 3 Mg+2 + 2 HP04-2
log_k      6.4981 # +/- 2.3
delta_h    -56.63 kcal/mol # +/- 2.9
analytical_expression  -3.815127E+3    -5.975352E-1    2.227753E+5    1.372643E+3    -1.279258E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1963OET/MCD][1968NOR/KIE]
# delfG0 = -837.27 +/- 2.5 kcal/mol *
# delfH0 = -895.10 +/- 2.5 kcal/mol
# SOPrTr = 45.22 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 51.020 +/- 999999 cal/mol/K

```

```

# mole vol. = 95.341 cm3/mol
# mole wt. = 262.8578 g/mol
# date: 03. Jul. 2019

Mg(NO3)2(s)
Mg(NO3)2 + 4 H+ + 2 H2O = 1 Mg+2 + 2 NH4+ + 4 O2
log_k -90.5461 # +/- 1.7
delta_h 138.94 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression 5.416131E+2 8.626419E-2 -6.807680E+4 -1.878751E+2 3.141046E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -140.82 +/- 0.6 kcal/mol *
# delfH0 = -188.97 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 39.2 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 33.922 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 64.485 cm3/mol
# mole wt. = 148.3148 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

MgCl2(H2O)6(s)
MgCl2(H2O)6 = 1 Mg+2 + 2 Cl- + 6 H2O
log_k 4.3841 # +/- 0.5
delta_h -3.85 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression -1.822835E+3 -2.842936E-1 1.002956E+5 6.630893E+2 -5.793639E+6
# -Range: 0.01 - 98 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 371K
# data source: [1982WAG/EVA][2012PIL/SVO]
# delfG0 = -505.41 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -597.28 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 87.50 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 80.6 +/- 23 cal/mol/K
# mole vol. = 129.574 cm3/mol
# mole wt. = 203.3016 g/mol
# date: 4. Sep. 2017

MgCl2(s)
MgCl2 = 1 Mg+2 + 2 Cl-
log_k 21.8077 # +/- 999999
delta_h -37.883 kcal/mol # +/- 0.28
analytical_expression -1.653954E+3 -2.599683E-1 1.002994E+5 5.981491E+2 -5.618672E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -141.512 +/- 999999 kcal/mol *
# delfH0 = -153.350 +/- 0.11 kcal/mol
# SOPrTr = 21.422 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 17.060 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 36.210 cm3/mol
# mole wt. = 95.2104 g/mol
# date: 30. Aug. 2017

MgSO4(s)
MgSO4 = 1 Mg+2 + 1 SO4-2
log_k 8.8950 # +/- 3.7
delta_h -27.2 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -1.749358E+3 -2.722848E-1 1.036015E+5 6.302507E+2 -6.004951E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -274.3 +/- 5 kcal/mol *
# delfH0 = -301.6 +/- 5 kcal/mol
# SOPrTr = 21.85 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 22.939 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 45.251 cm3/mol
# mole wt. = 120.3686 g/mol
# date: 1. Sep. 2017

Minnesotaite
Fe3Si4O10(OH)2 + 6 H+ + 4 H2O = + 3 Fe+2 + 4 Si(OH)4
log_k 14.9431 # +/- 3
delta_h -36.0 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression -2.172034E+03 -2.935955E-01 1.336967E+05 7.731175E+02 -7.728300E+06
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][Unpublished]
# delfG0 = -1070.1 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1153.4 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 83.5 +/- 1 cal/mol/K
# CpPrTr = 88.471 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 147.860 cm3/mol
# mole wt. = 473.8857 g/mol
# date: 21. Jul. 2016

Mn(OH)2(s)
Mn(OH)2 + 2 H+ = 1 Mn+2 + 2 H2O
log_k 15.1557 # +/- 0.9
delta_h -22.4 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -3.341587E+2 -4.988969E-2 2.232023E+4 1.211111E+2 -9.204455E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1976BAE/MES][1978HEL/DEL_a][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -147.8 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -167.1 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 23.10 +/- 5.0 cal/mol/K
# CpPrTr = 20.127 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 27.088 cm3/mol
# mole wt. = 88.9527 g/mol
# date: 7. Apr. 2016

Monetite
CaHP04 = 1 Ca+2 + 1 HP04-2
log_k -6.8683 # +/- 0.2
delta_h -4.97 kcal/mol # +/- 0.7
analytical_expression -1.669917E+3 -2.632927E-1 9.405659E+4 6.023510E+2 -5.723592E+6
# -Range: Not given
# gflag: 1 [reported delfG0 used]

```

```

# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not given
# data source: [1982WAG/EVA]
# delfG0 = -401.80 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -433.65 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 26.60 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 26.30 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 44.872 cm3/mol
# mole wt. = 136.0573 g/mol
# date: 26. Oct. 2016

Monoborate_Al
(Ca2Al(OH)6)2(HB03)(H2O)6 + 14 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 B(OH)3 + 18 H2O
log_k 96.0166 # +/- 6
delta_h -151.0 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.502599E+3 -3.772695E-1 1.631528E+5 9.059324E+2 -6.914825E+6
#
# -Range: 0.01 - 100 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2000ZHA]
# delfG0 = -1882.5 +/- 8 kcal/mol
# delfH0 = -2111.6 +/- 9 kcal/mol *
# SOPrTr = 191.5 +/- 8 cal/mol/K
# CpPrTr = 185.8 +/- 2 cal/mol/K
# mole vol. = 285.180 cm3/mol
# mole wt. = 586.2709 g/mol
# date: 21. May. 2019

Monoborate_AlH12
(Ca2Al(OH)6)2(HB03)(H2O)6 + 14 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 B(OH)3 + 18 H2O
log_k 96.0166 # +/- 6
delta_h -151.0 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.502599E+3 -3.772695E-1 1.631528E+5 9.059324E+2 -6.914825E+6
#
# -Range: 0.01 - 100 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2000ZHA]
# delfG0 = -1882.5 +/- 8 kcal/mol
# delfH0 = -2111.6 +/- 9 kcal/mol *
# SOPrTr = 191.5 +/- 8 cal/mol/K
# CpPrTr = 185.8 +/- 2 cal/mol/K
# mole vol. = 285.180 cm3/mol
# mole wt. = 586.2709 g/mol
# date: 21. May. 2019

Monocarbonate_Al
(Ca2Al(OH)6)2(CO3)(H2O)5 + 13 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 17 H2O
log_k 80.6924 # +/- 0.06
delta_h -133.1 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.970234E+3 -4.581710E-1 1.848948E+5 1.076299E+3 -8.519030E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 oC
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown. Same entry as "Monocarbonate_AlH11".
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1943WEL/CLA][1953DAN/EIC][1954PEP/WEL][1958CAR][1960CAR/BER][1980ZHA/ZHO]
# [1994DAM/STR][1999GLA/TYR][2001HOB][2007MAT/LOT][2011DIL/LOT][2019BEL/MAJ]
# delfG0 = -1755.46 +/- 1.1 kcal/mol
# delfH0 = -1969.7 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 170 +/- 10 cal/mol/K
# CpPrTr = 172.0 +/- 1 cal/mol/K
# mole vol. = 260.774 cm3/mol
# mole wt. = 568.4478 g/mol
# date: 11. Jan. 2019

Monocarbonate_AlH09
(Ca2Al(OH)6)2(CO3)(H2O)3 + 13 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 15 H2O
log_k 84.7048 # +/- 0.9
delta_h -147.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.975049E+3 -4.629862E-1 1.878483E+5 1.076638E+3 -8.562081E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 oC
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Monocarbonate_AlH09 = Monocarbonate_AlH11 - 2 H2O
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [2015BAQ/MAT][2019BEL/MAJ_a]
# delfG0 = -1636.61 +/- 1.5 kcal/mol
# delfH0 = -1819.1 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 165 +/- 12 cal/mol/K *
# CpPrTr = 152.9 +/- 3 cal/mol/K
# mole vol. = 233.557 cm3/mol
# mole wt. = 532.4174 g/mol
# date: 11. Jan. 2019

Monocarbonate_AlH11
(Ca2Al(OH)6)2(CO3)(H2O)5 + 13 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 17 H2O
log_k 80.6924 # +/- 0.06
delta_h -133.1 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.970234E+3 -4.581710E-1 1.848948E+5 1.076299E+3 -8.519030E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 oC
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown. Same entry as "Monocarbonate_Al".
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1943WEL/CLA][1953DAN/EIC][1954PEP/WEL][1958CAR][1960CAR/BER][1980ZHA/ZHO]
# [1994DAM/STR][1999GLA/TYR][2001HOB][2007MAT/LOT][2011DIL/LOT][2019BEL/MAJ]
# delfG0 = -1755.46 +/- 1.1 kcal/mol
# delfH0 = -1969.7 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 170 +/- 10 cal/mol/K
# CpPrTr = 172.0 +/- 1 cal/mol/K
# mole vol. = 260.774 cm3/mol
# mole wt. = 568.4478 g/mol
# date: 11. Jan. 2019

Monocarbonate_Fe
(Ca2Fe(OH)6)2(CO3)(H2O)6 + 11 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 1 HCO3- + 17 H2O
log_k 58.1429 # +/- 2
delta_h -76.2 kcal/mol # +/- 9
analytical_expression -2.506667E+3 -3.765069E-1 1.482254E+5 9.127296E+2 -6.984223E+6
#
# -Range: 0.01 - 55 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 328K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2008MOS/LOT][2011DIL/LOT][2019BEL/MAJ_a]
# delfG0 = -1594.9 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -1814.8 +/- 9 kcal/mol *
# SOPrTr = 206 +/- 29 cal/mol/K
# CpPrTr = 191.6 +/- 1 cal/mol/K
# mole vol. = 291.661 cm3/mol
# mole wt. = 644.1940 g/mol
# date: 25. Jan. 2019

```

Moniodide_Al
 (Ca2Al(OH)6)2(1)2(H2O)4 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 2 I- + 16 H2O
 log_k 74.9236 # +/- 0.3
 delta_h -131.9 kcal/mol # +/- 2
 analytical_expression -3.508830E+3 -5.531885E-1 2.161784E+5 1.270724E+3 -1.072870E+7
 # -Range: 0.01 - 60 deg C
 # gflag: 3 [delfg0 from log K data] for reaction shown
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 333K
 # data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][2012A1M/KUL]
 # delfg0 = -1591.18 +/- 1.2 kcal/mol
 # delfh0 = -1764.9 +/- 2 kcal/mol *
 # SOPrTr = 203.1 +/- 5 cal/mol/K
 # CpPrTr = 198.7 +/- 7 cal/mol/K
 # mole vol. = 308.171 cm3/mol
 # mole wt. = 744.2324 g/mol
 # date: 25. Jan. 2019

Mononitrate_Al
 (Ca2Al(OH)6)2(NO3)2(H2O)4 + 16 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 2 NH4+ + 4 O2 + 14 H2O
 log_k -31.5031 # +/- 0.3
 delta_h 45.4 kcal/mol # +/- 2
 analytical_expression -1.376739E+3 -2.175387E-1 5.162855E+4 5.099364E+2 -2.210958E+6
 # -Range: 0.01 - 60 deg C
 # gflag: 3 [delfg0 from log K data] for reaction shown
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 333K
 # data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][2011BAL/MED]
 # delfg0 = -1620.34 +/- 1.2 kcal/mol
 # delfh0 = -1853.7 +/- 2 kcal/mol *
 # SOPrTr = 168.0 +/- 8 cal/mol/K
 # CpPrTr = 216.0 +/- 7 cal/mol/K
 # mole vol. = 296.685 cm3/mol
 # mole wt. = 614.4332 g/mol
 # date: 25. Jan. 2019

Mononitrite_Al
 (Ca2Al(OH)6)2(NO2)2(H2O)4 + 16 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 2 NH4+ + 3 O2 + 14 H2O
 log_k -0.0175 # +/- 0.3
 delta_h -1.7 kcal/mol # +/- 2
 analytical_expression -1.306899E+3 -2.124489E-1 6.008575E+4 4.831549E+2 -2.386140E+6
 # -Range: 0.01 - 60 deg C
 # gflag: 3 [delfg0 from log K data] for reaction shown
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 333K
 # data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][2011BAL/MED]
 # delfg0 = -1581.34 +/- 2.0 kcal/mol
 # delfh0 = -1803.7 +/- 2 kcal/mol *
 # SOPrTr = 156.0 +/- 5 cal/mol/K
 # CpPrTr = 221.7 +/- 7 cal/mol/K
 # mole vol. = 274.734 cm3/mol
 # mole wt. = 582.4344 g/mol
 # date: 25. Jan. 2019

Monosulfate_Al
 (Ca2Al(OH)6)2(SO4)(H2O)8 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 SO4-2 + 20 H2O
 log_k 71.9198 # +/- 0.39
 delta_h -120.2 kcal/mol # +/- 6
 analytical_expression -3.701722E+3 -5.752483E-1 2.247090E+5 1.341217E+3 -1.131346E+7
 # -Range: 0.01 - 90 deg C
 # gflag: 3 [delfg0 from log K data] for reaction shown. Same entry as "Monosulfate_AlH14"
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
 # data source: [1979EDE/SAT_a][1980ZHA/ZHO][1998GHO/KIS][2000ZHA][2007MAT/LOT]
 # [2010BAL/LOT][2012A1M/KUL][2012LEI/LOT][2015BAQ/MAT]
 # delfg0 = -1975.14 +/- 1.2 kcal/mol
 # delfh0 = -2240.1 +/- 6 kcal/mol *
 # SOPrTr = 198 +/- 20 cal/mol/K
 # CpPrTr = 244 +/- 10 cal/mol/K
 # mole vol. = 330.584 cm3/mol
 # mole wt. = 658.5478 g/mol
 # date: 23. Jan. 2019

Monosulfate_AlH09
 (Ca2Al(OH)6)2(SO4)(H2O)3 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 SO4-2 + 15 H2O
 log_k 75.8707 # +/- 0.5
 delta_h -130.8 kcal/mol # +/- 6
 analytical_expression -3.693467E+3 -5.858990E-1 2.263451E+5 1.338921E+3 -1.139652E+7
 # -Range: 0.01 - 90 deg C
 # gflag: 3 [delfg0 from log K data] for Monosulfate_AlH12 = Monosulfate_AlH14 - 2 H2O
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
 # data source: [1979EDE/SAT_a][2015BAQ/MAT]
 # delfg0 = -1686.31 +/- 1.5 kcal/mol
 # delfh0 = -1887.9 +/- 6 kcal/mol
 # SOPrTr = 132 +/- 22 cal/mol/K *
 # CpPrTr = 196.4 +/- 7 cal/mol/K
 # mole vol. = 274.600 cm3/mol
 # mole wt. = 568.4718 g/mol
 # date: 23. Jan. 2019

Monosulfate_AlH105
 (Ca2Al(OH)6)2(SO4)(H2O)4.5 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 SO4-2 + 16.5 H2O
 log_k 73.3213 # +/- 0.5
 delta_h -122.0 kcal/mol # +/- 6
 analytical_expression -3.700131E+3 -5.838306E-1 2.249780E+5 1.342165E+3 -1.139156E+7
 # -Range: 0.01 - 90 deg C
 # gflag: 3 [delfg0 from log K data] for Monosulfate_AlH12 = Monosulfate_AlH14 - 2 H2O
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
 # data source: [1979EDE/SAT_a][2015BAQ/MAT]
 # delfg0 = -1774.82 +/- 1.2 kcal/mol
 # delfh0 = -1999.2 +/- 6 kcal/mol
 # SOPrTr = 139 +/- 21 cal/mol/K *
 # CpPrTr = 210.7 +/- 7 cal/mol/K
 # mole vol. = 281.600 cm3/mol
 # mole wt. = 595.4946 g/mol
 # date: 23. Jan. 2019

Monosulfate_AlH12
 (Ca2Al(OH)6)2(SO4)(H2O)6 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 SO4-2 + 18 H2O
 log_k 71.9447 # +/- 0.4
 delta_h -117.9 kcal/mol # +/- 6
 analytical_expression -3.694477E+3 -5.794226E-1 2.238554E+5 1.340103E+3 -1.134516E+7
 # -Range: 0.01 - 55 deg C
 # gflag: 3 [delfg0 from log K data] for Monosulfate_AlH12 = Monosulfate_AlH14 - 2 H2O
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 328K
 # data source: [1979EDE/SAT][2015BAQ/MAT]

```

# delfG0 = -1861.73 +/- 1.1 kcal/mol
# delfH0 = -2105.8 +/- 6 kcal/mol
# S0PrTr = 156 +/- 21 cal/mol/K *
# CpPrTr = 225.1 +/- 7 cal/mol/K
# mole vol. = 308.938 cm3/mol
# mole wt. = 622.5174 g/mol
# date: 23. Jan. 2019

Monosulfate_AlH14
(Ca2Al(OH)6)2(SO4)(H2O)8 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 SO4-2 + 20 H2O
log_k 71.9198 # +/- 0.39
delta_h -120.2 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression -3.701722E+3 -5.752483E-1 2.247090E+5 1.341217E+3 -1.131346E+7
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown. Same entry as "Monosulfate_Al"
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1979EDE/SAT_a][1980ZHA/ZHO][1998GHO/KIS][2000ZHA][2007MAT/LOT]
# [2010BAL/LOT][2012AIM/KUL][2012LEI/LOT][2015BAQ/MAT]
# delfG0 = -1975.14 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -2240.1 +/- 6 kcal/mol *
# S0PrTr = 198 +/- 20 cal/mol/K
# CpPrTr = 244 +/- 10 cal/mol/K
# mole vol. = 330.584 cm3/mol
# mole wt. = 658.5478 g/mol
# date: 23. Jan. 2019

Monosulfate_AlH16
(Ca2Al(OH)6)2(SO4)(H2O)10 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 SO4-2 + 22 H2O
log_k 71.9901 # +/- 0.4
delta_h -111.6 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression -3.701894E+3 -5.712731E-1 2.231792E+5 1.342781E+3 -1.128528E+7
# -Range: 0.01 - 18 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Monosulfate_AlH16 = Monosulfate_AlH14 + 2 H2O
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 291K
# data source: [1979EDE/SAT_a][2015BAQ/MAT]
# delfG0 = -2088.42 +/- 1.1 kcal/mol
# delfH0 = -2385.3 +/- 6 kcal/mol
# S0PrTr = 202 +/- 21 cal/mol/K *
# CpPrTr = 263.4 +/- 8 cal/mol/K
# mole vol. = 350.500 cm3/mol
# mole wt. = 694.5782 g/mol
# date: 23. Jan. 2019

Monosulfate_Fe
(Ca2Fe(OH)6)2(SO4)(H2O)6 + 10 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 1 SO4-2 + 17 H2O
log_k 49.4920 # +/- 1.2
delta_h -84 kcal/mol # +/- 16
analytical_expression -3.252301E+3 -4.994718E-1 1.925744E+5 1.178394E+3 -9.870406E+6
# -Range: 0.01 - 60 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 333K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][2008MOS/LOT][2012DIL/LOT]
# delfG0 = -1644.35 +/- 0.6 kcal/mol
# delfH0 = -1860 +/- 16 kcal/mol *
# S0PrTr = 250 +/- 54 cal/mol/K
# CpPrTr = 233.8 +/- 7 cal/mol/K
# mole vol. = 320.619 cm3/mol
# mole wt. = 680.2484 g/mol
# date: 25. Jan. 2019

Monticellite
CaMgSiO4 + 4 H+ = 1 Ca+2 + 1 Mg+2 + 1 Si(OH)4
log_k 29.8422 # +/- 0.9
delta_h -49.508 kcal/mol # +/- 0.98
analytical_expression -9.525186E+2 -1.353786E-1 6.389702E+4 3.409252E+2 -3.127660E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -512.82 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -540.800 +/- 0.79 kcal/mol
# S0PrTr = 26.40 +/- 4.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 29.413 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 51.470 cm3/mol
# mole wt. = 156.4661 g/mol
# date: 14. Jul. 2015

Montmor_Ca
Ca0.165(Mg0.33Al1.67)(Si4)O10(OH)2 + 6 H+ + 4 H2O = + 0.165 Ca+2 + 0.33 Mg+2 + 1.67 Al+3 + 4 Si(OH)4
log_k 4.2583 # +/- 2
delta_h -38.0 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.177211E+3 -3.036296E-1 1.325022E+5 7.732154E+2 -7.617471E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1271.3 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1358.4 +/- 3 kcal/mol
# S0PrTr = 66.8 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 74.553 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 135.843 cm3/mol (a = 5.21 A, b = 9.02 A, c = 9.6 A, Beta = 90 deg [1980BRO/BR1])
# mole wt. = 366.0434 g/mol
# date: 18. May. 2016

Montmor_Ca(avg)
Ca0.2(Mg0.4Fe0.2Al1.45)(Al0.1Si3.9)O10(OH)2 + 6.25 H+ + 3.675 H2O = + 0.2 Ca+2 + 0.4 Mg+2 + 0.2 Fe+2 + 0.0375 O2 + 1.55 Al+3 + 3.9 Si(OH)4
log_k 4.6929 # +/- 2
delta_h -38.6 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.184451E+03 -3.047981E-01 1.327742E+05 7.760071E+02 -7.599469E+06
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1260.3 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1346.5 +/- 3 kcal/mol
# S0PrTr = 70.8 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.306 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 135.843 cm3/mol
# mole wt. = 374.2701 g/mol
# date: 18. May. 2016

Montmor_Cs
Cs0.33(Mg0.33Al1.67)(Si4)O10(OH)2 + 6 H+ + 4 H2O = + 0.33 Cs+ + 0.33 Mg+2 + 1.67 Al+3 + 4 Si(OH)4

```

```

log_k      2.2824 # +/- 2
delta_h    -34.3 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -7.612195E+2    -1.238105E-1    4.520363E+4    2.712960E+2    -2.003776E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1275.2 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1361.0 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 76.2 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.323 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 162.728 cm3/mol (a = 5.21 A, b = 9.02 A, c = 11.5 A, Beta = 90 deg [1980BRO/BR1])
# mole wt. = 403.2892 g/mol
# date: 10. Feb. 2017

Montmor_Cs (avg)
Cs0.4(Mg0.4Fe0.2Al1.45)(Al0.1Si3.9)O10(OH)2 + 6.25 H+ + 3.675 H2O = + 0.4 Cs+ + 0.4 Mg+2 + 0.2 Fe+2 + 0.0375 O2 + 1.55 Al+3 + 3.9 Si(OH)4
log_k      2.2447 # +/- 2
delta_h    -33.6 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -7.609390E+2    -1.237237E-1    4.484468E+4    2.714795E+2    -1.967715E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1265.1 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1350.2 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 80.7 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 78.122 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 162.728 cm3/mol
# mole wt. = 419.4170 g/mol
# date: 10. Feb. 2017

Montmor_Fe
Fe0.165(Mg0.33Al1.67)(Si4)O10(OH)2 + 6 H+ + 4 H2O = + 0.165 Fe+2 + 0.33 Mg+2 + 1.67 Al+3 + 4 Si(OH)4
log_k      3.6050 # +/- 2
delta_h    -38.5 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.180266E+03    -3.037733E-01    1.327712E+05    7.738884E+02    -7.628462E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1254.0 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1340.1 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 69.7 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 74.826 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 141.503 cm3/mol (assumed same as Montmor_K)
# mole wt. = 368.6449 g/mol
# date: 18. May. 2016

Montmor_Fe (avg)
Fe0.2(Mg0.4Fe0.2Al1.45)(Al0.1Si3.9)O10(OH)2 + 6.25 H+ + 3.675 H2O = + 0.4 Mg+2 + 0.4 Fe+2 + 0.0375 O2 + 1.55 Al+3 + 3.9 Si(OH)4
log_k      3.8500 # +/- 2
delta_h    -39.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.189065E+03    -3.050883E-01    1.331050E+05    7.771810E+02    -7.613460E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1239.4 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1324.4 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 74.0 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.306 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 141.503 cm3/mol
# mole wt. = 377.4235 g/mol
# date: 18. May. 2016

Montmor_K
K0.33(Mg0.33Al1.67)(Si4)O10(OH)2 + 6 H+ + 4 H2O = + 0.33 K+ + 0.33 Mg+2 + 1.67 Al+3 + 4 Si(OH)4
log_k      3.1430 # +/- 2
delta_h    -34.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.152434E+03    -2.995311E-01    1.305177E+05    7.646664E+02    -7.555715E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1273.3 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1360.7 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 69.4 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.179 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 141.503 cm3/mol (a = 5.21 A, b = 9.02 A, c = 10 A, Beta = 90 deg)
# mole wt. = 372.3329 g/mol
# date: 18. May. 2016

Montmor_K (avg)
K0.4(Mg0.4Fe0.2Al1.45)(Al0.1Si3.9)O10(OH)2 + 6.25 H+ + 3.675 H2O = + 0.4 K+ + 0.4 Mg+2 + 0.2 Fe+2 + 0.0375 O2 + 1.55 Al+3 + 3.9 Si(OH)4
log_k      3.2856 # +/- 2
delta_h    -33.8 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.155319E+03    -2.999462E-01    1.303698E+05    7.660022E+02    -7.525273E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1262.8 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1349.4 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 73.6 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 77.947 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 141.503 cm3/mol
# mole wt. = 381.8938 g/mol
# date: 18. May. 2016

Montmor_KunipiaF
K0.005Na0.375Ca0.06(Mg0.31Fe0.1Al1.56)(Al0.09Si3.91)O10(OH)2 + 6.27 H+ + 3.685 H2O = + 0.005 K+ + 0.375 Na+ + 0.31 Mg+2 + 0.06 Ca+2 + 0.1 Fe+2 +
0.0225 O2 + 1.65 Al+3 + 3.91 Si(OH)4
log_k      3.8395 # +/- 2
delta_h    -36.2 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.184533E+03    -3.040143E-01    1.323792E+05    7.761591E+02    -7.604495E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1269.1 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1355.9 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 71.3 +/- 5 cal/mol/K

```

```

# CpPrTr = 76.559 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 138.031 cm3/mol
# mole wt. = 372.6829 g/mol
# date: 18. May. 2016

Montmor_Mg
Mg0.165(Mg0.33Al1.67)(Si4)O10(OH)2 + 6 H+ + 4 H2O = + 0.495 Mg+2 + 1.67 Al+3 + 4 Si(OH)4
log_k 4.1142 # +/- 2
delta_h -39.2 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.183775E+03 -3.040244E-01 1.331091E+05 7.751189E+02 -7.636068E+06
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1267.6 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1354.1 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 68.4 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 74.354 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 142.918 cm3/mol
# mole wt. = 363.4408 g/mol
# date: 18. May. 2016

Montmor_Mg(avg)
Mg0.2(Mg0.4Fe0.2Al1.45)(Al0.1Si3.9)O10(OH)2 + 6.25 H+ + 3.675 H2O = + 0.6 Mg+2 + 0.2 Fe+2 + 0.0375 O2 + 1.55 Al+3 + 3.9 Si(OH)4
log_k 4.5295 # +/- 2
delta_h -40.0 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.193504E+03 -3.054271E-01 1.335361E+05 7.787507E+02 -7.623283E+06
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# mole vol. = 142.918 cm3/mol
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1255.8 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1341.4 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 72.3 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 75.734 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 142.918 cm3/mol
# mole wt. = 371.1155 g/mol
# date: 18. May. 2016

Montmor_MX80(avg)
K0.002Na0.21Mg0.018Ca0.036(Mg0.24Fe0.2Al1.55)(Al0.04Si3.96)O10(OH)2 + 5.97 H+ + 3.935 H2O = + 0.002 K+ + 0.21 Na+ + 0.258 Mg+2 + 0.036 Ca+2 + 0.2
Fe+2 + 0.0475 O2 + 1.59 Al+3 + 3.96 Si(OH)4
log_k 1.2196 # +/- 2
delta_h -31.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.148227E+03 -2.984435E-01 1.295703E+05 7.631105E+02 -7.504748E+06
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# mole vol. = 133.783 cm3/mol
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1249.9 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1336.6 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 69.4 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 75.750 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 133.783 cm3/mol
# mole wt. = 371.9165 g/mol
# date: 18. May. 2016

Montmor_MX80(WY) # from Wyoming. Parent mineral for other montmorillonites
K0.024Na0.409Ca0.009(Mg0.214Fe0.208Al1.598)(Al0.262Si3.738)O10(OH)2 + 6.875 H+ + 3.0385 H2O = + 0.024 K+ + 0.409 Na+ + 0.009 Ca+2 + 0.214 Mg+2 +
0.208 Fe+2 + 0.04325 O2 + 1.86 Al+3 + 3.738 Si(OH)4
log_k 3.7288 # +/- 1.7
delta_h -39.60 kcal/mol # +/- 2.5
analytical_expression -2.231193E+3 -3.134989E-1 1.349184E+5 7.929850E+2 -7.673279E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [2012GAI/BLA]
# delfG0 = -1265.09 +/- 1.6 kcal/mol *
# delfH0 = -1351.90 +/- 1.6 kcal/mol
# SOPrTr = 72.16 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.861 +/- 0.02 cal/mol/K
# mole vol. = 134.920 cm3/mol
# mole wt. = 376.6971 g/mol
# date: 22. Mar. 2019

Montmor_Na
Na0.33(Mg0.33Al1.67)(Si4)O10(OH)2 + 6 H+ + 4 H2O = + 0.33 Na+ + 0.33 Mg+2 + 1.67 Al+3 + 4 Si(OH)4
log_k 4.1521 # +/- 2
delta_h -36.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.174809E+03 -3.020557E-01 1.321070E+05 7.725247E+02 -7.612450E+06
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# mole vol. = 135.843 cm3/mol
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1270.3 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1357.8 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 67.8 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 75.578 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 135.843 cm3/mol
# mole wt. = 367.0171 g/mol
# date: 18. May. 2016

Montmor_Na(avg)
Na0.4(Mg0.4Fe0.2Al1.45)(Al0.1Si3.9)O10(OH)2 + 6.25 H+ + 3.675 H2O = + 0.4 Na+ + 0.4 Mg+2 + 0.2 Fe+2 + 0.0375 O2 + 1.55 Al+3 + 3.9 Si(OH)4
log_k 4.4821 # +/- 2
delta_h -36.2 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.181660E+03 -3.028683E-01 1.322658E+05 7.752147E+02 -7.591605E+06
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1259.2 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1345.9 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 72.0 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 77.218 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 135.843 cm3/mol
# mole wt. = 375.4504 g/mol
# date: 23. May. 2016

Montmor_NH4

```

```

(NH4)0.33(Mg0.33Al1.67)(Si4)010(OH)2 + 6 H+ + 4 H2O = + 0.33 NH4+ + 0.33 Mg+2 + 1.67 Al+3 + 4 Si(OH)4
log_k      -1.7034 # +/- 3
delta_h    -28.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.141173E+3    -2.979022E-1    1.284044E+5    7.605591E+2    -7.497200E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1263.9 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1357.4 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 71.9 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 78.466 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 150.418 cm3/mol
# mole wt. = 365.3830 g/mol
# date: 19. Dec. 2017
#
Montmor_NH4 (avg)
(NH4)0.4(Mg0.4Fe0.2Al1.45)(Al0.1Si3.9)010(OH)2 + 6.25 H+ + 3.675 H2O = + 0.4 NH4+ + 0.4 Mg+2 + 0.2 Fe+2 + 0.0375 O2 + 1.55 Al+3 + 3.9 Si(OH)4
log_k      -2.5843 # +/- 3
delta_h    -26.2 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.142900E+3    -2.981890E-1    1.278453E+5    7.615164E+2    -7.458193E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1251.4 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1345.6 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 76.1 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 80.719 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 150.418 cm3/mol
# mole wt. = 373.4701 g/mol
# date: 19. Dec. 2017
#
Mordenite_dia
K1.2Na2.8Ca2(A18Si40096)(H2O)29.3333 + 32 H+ + 34.6667 H2O = 1.2 K+ + 2.8 Na+ + 2 Ca+2 + 8 Al+3 + 40 Si(OH)4
log_k      -17.6321 # +/- 16
delta_h    -112.8 kcal/mol # +/- 43
analytical_expression  -1.700765E+4    -2.262356E+0    1.015334E+6    6.040303E+3    -6.109568E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -12028.0 +/- 13 kcal/mol
# delfH0 = -13006.7 +/- 39 kcal/mol
# SOPrTr = 1013 +/- 150 cal/mol/K
# CpPrTr = 871.694 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1698.000 cm3/mol
# mole wt. = 3595.1082 g/mol
# date: 24. Aug. 2016
#
Mordenite_Ca
Ca4(A18Si40096)(H2O)28 + 32 H+ + 36 H2O = + 4 Ca+2 + 8 Al+3 + 40 Si(OH)4
log_k      -19.2513 # +/- 18
delta_h    -116.4 kcal/mol # +/- 44
analytical_expression  -1.705475E+4    -2.281288E+0    1.018341E+6    6.057989E+3    -6.133722E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -11962.6 +/- 18 kcal/mol
# delfH0 = -12938.5 +/- 39 kcal/mol
# SOPrTr = 915 +/- 140 cal/mol/K
# CpPrTr = 843.325 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1678.004 cm3/mol
# mole wt. = 3539.9551 g/mol
# date: 5. Apr. 2016
#
Mordenite_Na
Na8(A18Si40096)(H2O)28 + 32 H+ + 36 H2O = + 8 Na+ + 8 Al+3 + 40 Si(OH)4
log_k      -10.4200 # +/- 18
delta_h    -117.5 kcal/mol # +/- 44
analytical_expression  -1.705494E+4    -2.247404E+0    1.020690E+6    6.054098E+3    -6.127770E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -11922.8 +/- 18 kcal/mol
# delfH0 = -12877.6 +/- 39 kcal/mol
# SOPrTr = 1044 +/- 140 cal/mol/K
# CpPrTr = 860.725 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1678.004 cm3/mol
# mole wt. = 3563.5613 g/mol
# date: 30. Aug. 2016
#
MSH06
(Mg0)0.6(Si02)(H2O)1.08 + 1.2 H+ + 0.32 H2O = + 0.6 Mg+2 + 1 Si(OH)4
log_k      5.3486 # +/- 999999
delta_h    -9.213 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -4.988532E+2    -6.527831E-2    3.086643E+4    1.776885E+2    -1.737115E+6
#
# -Range: 0.01 - 150 deg C
#
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 423K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2014LOT/NIE][2016NIE/ENE][2017BER/LOT][Unpublished]
# delfG0 = -352.573 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -384.886 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 24.753 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 26.447 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 54.949 cm3/mol
# mole wt. = 103.7234 g/mol
# date: 12. Oct. 2017
#
MSH07
(Mg0)0.7(Si02)(H2O)1.2 + 1.4 H+ + 0.1 H2O = + 0.7 Mg+2 + 1 Si(OH)4
log_k      6.6921 # +/- 999999
delta_h    -11.661 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -5.356976E+2    -7.060753E-2    3.331962E+4    1.909002E+2    -1.838694E+6
#
# -Range: 0.01 - 150 deg C
#
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 423K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2014LOT/NIE][2016NIE/ENE][2017BER/LOT][Unpublished]
# delfG0 = -374.062 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -408.605 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 27.196 +/- 999999 cal/mol/K

```

```

# CpPrTr = 28.482 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 57.786 cm3/mol
# mole wt. = 109.9156 g/mol
# date: 12. Oct. 2017

MSH08
(MgO)0.8(SiO2)(H2O)1.32 + 1.6 H+ = + 0.8 Mg+2 + 1 Si(OH)4 + 0.12 H2O
log_k      8.1119 # +/- 999999
delta_h    -14.112 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -5.724690E+2 -7.593689E-2 3.577371E+4 2.041120E+2 -1.940274E+6
#
# -Range: 0.01 - 150 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 423K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2014LOT/NIE] [2016NIE/ENE] [2017BER/LOT] [Unpublished]
# delfG0 = -395.447 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -432.320 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 29.304 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 30.518 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 60.623 cm3/mol
# mole wt. = 116.1079 g/mol
# date: 12. Oct. 2017

MSH09
(MgO)0.9(SiO2)(H2O)1.44 + 1.8 H+ = + 0.9 Mg+2 + 1 Si(OH)4 + 0.34 H2O
log_k      9.5859 # +/- 999999
delta_h    -16.594 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -6.092155E+2 -8.126619E-2 3.823629E+4 2.173236E+2 -2.041863E+6
#
# -Range: 0.01 - 150 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 423K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2014LOT/NIE] [2016NIE/ENE] [2017BER/LOT] [Unpublished]
# delfG0 = -416.758 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -456.004 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 31.266 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 32.554 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 63.460 cm3/mol
# mole wt. = 122.3001 g/mol
# date: 12. Oct. 2017

MSH10
(MgO)1(SiO2)(H2O)1.56 + 2 H+ = 1 Mg+2 + 1 Si(OH)4 + 0.56 H2O
log_k      11.1177 # +/- 999999
delta_h    -19.122 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -6.459222E+2 -8.659534E-2 4.070513E+4 2.305352E+2 -2.143439E+6
#
# -Range: 0.01 - 150 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 423K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2014LOT/NIE] [2016NIE/ENE] [2017BER/LOT] [Unpublished]
# delfG0 = -437.990 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -479.643 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 33.115 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 34.589 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 66.297 cm3/mol
# mole wt. = 128.4924 g/mol
# date: 12. Oct. 2017

MSH11
(MgO)1.1(SiO2)(H2O)1.68 + 2.2 H+ = 1.1 Mg+2 + 1 Si(OH)4 + 0.78 H2O
log_k      12.7053 # +/- 999999
delta_h    -21.695 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -6.826154E+2 -9.192472E-2 4.318596E+4 2.437470E+2 -2.245031E+6
#
# -Range: 0.01 - 150 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 423K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2014LOT/NIE] [2016NIE/ENE] [2017BER/LOT] [Unpublished]
# delfG0 = -459.146 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -503.236 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 34.864 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 36.626 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 69.134 cm3/mol
# mole wt. = 134.6847 g/mol
# date: 12. Oct. 2017

MSH12
(MgO)1.2(SiO2)(H2O)1.8 + 2.4 H+ = 1.2 Mg+2 + 1 Si(OH)4 + 1 H2O
log_k      14.3413 # +/- 999999
delta_h    -24.305 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -7.192858E+2 -9.725401E-2 4.567458E+4 2.569586E+2 -2.346608E+6
#
# -Range: 0.01 - 150 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 423K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2014LOT/NIE] [2016NIE/ENE] [2017BER/LOT] [Unpublished]
# delfG0 = -480.236 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -526.793 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 36.513 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 38.661 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 71.971 cm3/mol
# mole wt. = 140.8769 g/mol
# date: 12. Oct. 2017

MSH13
(MgO)1.3(SiO2)(H2O)1.92 + 2.6 H+ = 1.3 Mg+2 + 1 Si(OH)4 + 1.22 H2O
log_k      16.0102 # +/- 0.8
delta_h    -26.926 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -7.559319E+2 -1.025832E-1 4.816575E+4 2.701702E+2 -2.448186E+6
#
# -Range: 0.01 - 150 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 423K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2014LOT/NIE] [2016NIE/ENE] [2017BER/LOT] [Unpublished]
# delfG0 = -501.281 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -550.338 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 38.050 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 40.696 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 74.808 cm3/mol
# mole wt. = 147.0692 g/mol
# date: 12. Oct. 2017

MSH14
(MgO)1.4(SiO2)(H2O)2.04 + 2.8 H+ = 1.4 Mg+2 + 1 Si(OH)4 + 1.44 H2O
log_k      17.6946 # +/- 0.8
delta_h    -30.455 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -7.925464E+2 -1.079125E-1 5.065202E+4 2.833819E+2 -2.549775E+6
#
# -Range: 0.01 - 150 deg C

```

```

# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 423K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2014LOT/NIE] [2016NIE/ENE] [2017BER/LOT] [Unpublished]
# delfG0 = -522.305 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -573.906 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 39.440 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 42.732 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 77.645 cm3/mol
# mole wt. = 153.2615 g/mol
# date: 12. Oct. 2017

MSH15
(MgO)1.5 (SiO2) (H2O)2.16 + 3 H+ = 1.5 Mg+2 + 1 Si (OH)4 + 1.66 H2O
log_k 19.3987 # +/- 0.8
delta_h -32.050 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -8.290873E+2 -1.132418E-1 5.312233E+4 2.965935E+2 -2.651353E+6
# -Range: 0.01 - 150 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 423K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2014LOT/NIE] [2016NIE/ENE] [2017BER/LOT] [Unpublished]
# delfG0 = -543.302 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -597.547 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 40.496 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 44.768 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 80.482 cm3/mol
# mole wt. = 159.4537 g/mol
# date: 12. Oct. 2017

Mullite
Al6Si2O13 + 18 H+ = + 6 Al+3 + 2 Si (OH)4 + 5 H2O
log_k 52.3352 # +/- 1.6
delta_h -184.221 kcal/mol # +/- 2.41
analytical_expression -3.615708E+3 -5.588007E-1 2.320913E+5 1.285950E+3 -1.118178E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978ROB/HEM]
# delfG0 = -1537.114 +/- 0.53 kcal/mol
# delfH0 = -1627.730 +/- 0.53 kcal/mol
# SOPrTr = 64.4 +/- 1 cal/mol/K
# CpPrTr = 77.483 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 134.550 cm3/mol
# mole wt. = 426.0524 g/mol
# date: 24. Aug. 2016

Muscovite
K(Al2)(AlSi3)O10(OH)2 + 10 H+ = 1 K+ + 3 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k 14.7994 # +/- 1.4
delta_h -66.091 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.461599E+3 -3.598742E-1 1.507799E+5 8.767607E+2 -8.134910E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1964PAN] [1978HEL/DEL] [1991SVE/HEM]
# delfG0 = -1335.67 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1427.644 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 70.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.807 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 140.710 cm3/mol
# mole wt. = 398.3081 g/mol
# date: 24. Aug. 2016

Muscovite_dis
K(Al2)(AlSi3)O10(OH)2 + 10 H+ = 1 K+ + 3 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k 12.9962 # +/- 1.4
delta_h -65.72 kcal/mol # +/- 2.1
analytical_expression -2.459952E+3 -3.599238E-1 1.503049E+5 8.759869E+2 -8.128456E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a] [1995ROB/HEM] [1997RIM_a]
# delfG0 = -1338.13 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -1428.01 +/- 1.2 kcal/mol
# SOPrTr = 73.231 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 77.82 +/- 0.4 cal/mol/K
# mole vol. = 140.810 cm3/mol
# mole wt. = 398.3081 g/mol
# date: 7. Sep. 2016

Muscovite_ord
K(Al2)(AlSi3)O10(OH)2 + 10 H+ = 1 K+ + 3 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k 11.3103 # +/- 1.4
delta_h -62.09 kcal/mol # +/- 2.1
analytical_expression -2.458975E+3 -3.599238E-1 1.495110E+5 8.759867E+2 -8.128456E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995ROB/HEM]
# delfG0 = -1340.43 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -1431.64 +/- 1.2 kcal/mol
# SOPrTr = 68.762 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 77.82 +/- 0.4 cal/mol/K
# mole vol. = 140.810 cm3/mol
# mole wt. = 398.3081 g/mol
# date: 7. Sep. 2016

Na2CO3(s)
Na2CO3 + 1 H+ = + 2 Na+ + 1 HCO3-
log_k 10.9687 # +/- 0.2
delta_h -9.50 kcal/mol # +/- 0.2
analytical_expression -9.129841E+2 -1.368357E-1 5.315098E+4 3.316062E+2 -3.027026E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -250.50 +/- 0.2 kcal/mol *
# delfH0 = -270.26 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 33.173 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 26.595 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 41.728 cm3/mol
# mole wt. = 105.9888 g/mol
# date: 31. Aug. 2017

```

```

Na2HP04(s)
Na2HP04 = + 2 Na+ + 1 HP04-2
log_k      0.8005 # +/- 1.5
delta_h    -5.9 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression  -1.650036E+3   -2.521681E-1   9.414713E+4   5.957859E+2   -5.687000E+6
#
# -Range: Not given
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not given
# data source: [1967WAT/STA][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -384.4 +/- 2 kcal/mol *
# delfH0 = -417.8 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 35.970 +/- 0.10 cal/mol/K
# CpPrTr = 32.340 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 55.029 cm3/mol
# mole wt. = 141.9589 g/mol
# date: 4. Dec. 2017

Na2HP04(H2O)2(s) # Dorfmonite
Na2HP04(H2O)2 = + 2 Na+ + 1 HP04-2 + 2 H2O
log_k      -0.1700 # +/- 1.5
delta_h     0.4 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression  -1.653718E+3   -2.491051E-1   9.297185E+4   5.978665E+2   -5.634445E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not given
# data source: [1967WAT/STA][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -499.1 +/- 2 kcal/mol *
# delfH0 = -560.7 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 52.90 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 50.510 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 86.824 cm3/mol
# mole wt. = 177.9893 g/mol
# date: 4. Dec. 2017

Na20(s)
Na20 + 2 H+ = + 2 Na+ + 1 H2O
log_k      67.4359 # +/- 999999
delta_h    -84.043 kcal/mol # +/- 0.08
analytical_expression  -2.812068E+2   -3.617043E-2   3.413379E+4   1.028307E+2   -8.457962E+5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1972OHA][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -89.871 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -99.140 +/- 0.07 kcal/mol
# SOPrTr = 17.935 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 16.457 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 25.000 cm3/mol
# mole wt. = 61.9789 g/mol
# date: 25. Mar. 2016

Na2Si03(s)
Na2Si03 + 2 H+ + 1 H2O = + 2 Na+ + 1 Si(OH)4
log_k      22.4894 # +/- 0.8
delta_h    -22.50 kcal/mol # +/- 1.1
analytical_expression  -5.637381E+2   -7.071879E-2   3.822784E+4   2.026736E+2   -1.991901E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO]
# delfG0 = -350.72 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -373.19 +/- 1.0 kcal/mol
# SOPrTr = 27.21 +/- 0.3 cal/mol/K
# CpPrTr = 26.6 +/- 1 cal/mol/K
# mole vol. = 46.768 cm3/mol
# mole wt. = 122.0633 g/mol
# date: 30. Aug. 2017

Na2S04(s) # Thenardite
Na2S04 = + 2 Na+ + 1 S04-2
log_k      -0.3064 # +/- 0.11
delta_h    -0.58 kcal/mol # +/- 0.1
analytical_expression  -1.676863E+3   -2.545918E-1   9.501263E+4   6.059274E+2   -5.825274E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1955COU][1978ROB/HEM]
# delfG0 = -303.53 +/- 0.1 kcal/mol
# delfH0 = -331.69 +/- 0.1 kcal/mol
# SOPrTr = 35.750 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 28.232 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 53.330 cm3/mol
# mole wt. = 142.0432 g/mol
# date: 24. Aug. 2016

Na_in_CSH_gel
Na00.5 + H+ = 1 Na+ + 0.5 H2O
log_k      999999 # +/- 999999
delta_h    999999 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  9.99999E+05   9.99999E+05   9.99999E+05   9.99999E+05   9.99999E+05
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used] Modeling phase
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [Unpublished]
# delfG0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 999999 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 999999 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 30.9895 g/mol
# date: 6. Feb. 2019

NaAl02(s)
NaAl02 + 4 H+ = 1 Na+ + 1 Al+3 + 2 H2O
log_k      26.5715 # +/- 0.32
delta_h    -51.24 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression  -6.536995E+2   -9.990183E-2   4.553559E+4   2.339936E+2   -1.926507E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1955KIN_a][1960KEL][1977HEM/ROB]
# delfG0 = -256.26 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -271.51 +/- 0.3 kcal/mol

```

```

# SPrTr = 16.90 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 17.529 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 29.869 cm3/mol
# mole wt. = 81.9701 g/mol
# date: 8. Oct. 2015

NaBr (s)
NaBr = 1 Na+ + 1 Br-
log_k      6.8910 # +/- 0.1
delta_h    -0.09 kcal/mol # +/- 0.1
analytical_expression  -7.789992E+2   -1.192894E-1   4.535520E+4   2.827963E+2   -2.704382E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -78.06 +/- 0.1 kcal/mol *
# delfH0 = -86.38 +/- 0.1 kcal/mol
# SPrTr = 20.750 +/- 0.06 cal/mol/K
# CpPrTr = 12.369 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 32.154 cm3/mol
# mole wt. = 102.8938 g/mol
# date: 1. Sep. 2017

NaF (s)
NaF = 1 Na+ + 1 F-
log_k      -0.2631 # +/- 0.2
delta_h    -0.06 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression  -8.507602E+2   -1.294698E-1   4.765567E+4   3.078012E+2   -2.877393E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -130.29 +/- 0.2 kcal/mol *
# delfH0 = -137.52 +/- 0.2 kcal/mol
# SPrTr = 12.240 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 11.232 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 15.104 cm3/mol
# mole wt. = 41.9882 g/mol
# date: 31. Aug. 2017

NaHCO3 (s)
NaHCO3 = 1 Na+ + 1 HCO3-
log_k      -0.3790 # +/- 0.1
delta_h    4.460 kcal/mol # +/- 0.21
analytical_expression  -7.535009E+2   -1.156019E-1   4.104455E+4   2.740524E+2   -2.506451E+6
# -Range: 0.01 - 127 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 400K
# data source: [1960KEL][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -203.39 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -226.791 +/- 0.20 kcal/mol
# SPrTr = 24.31 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 20.941 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 38.185 cm3/mol
# mole wt. = 84.0069 g/mol
# date: 30. Aug. 2017

NaI (s)
NaI = 1 Na+ + 1 I-
log_k      5.1245 # +/- 0.3
delta_h    -2.23 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression  -7.364117E+2   -1.139150E-1   4.209376E+4   2.679041E+2   -2.541494E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -68.01 +/- 0.3 kcal/mol *
# delfH0 = -68.80 +/- 0.2 kcal/mol
# SPrTr = 23.5 +/- 1 cal/mol/K
# CpPrTr = 12.486 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 40.843 cm3/mol
# mole wt. = 149.8943 g/mol
# date: 20. May. 2016

NaOH (s)
NaOH + 1 H+ = 1 Na+ + 1 H2O
log_k      20.8900 # +/- 0.3
delta_h    -23.95 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression  -1.504044E+2   -1.950762E-2   1.352199E+4   5.519767E+1   -4.289446E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -90.78 +/- 0.4 kcal/mol *
# delfH0 = -101.80 +/- 0.4 kcal/mol
# SPrTr = 15.40 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 14.23 +/- 0.1 cal/mol/K
# mole vol. = 18.780 cm3/mol
# mole wt. = 39.9971 g/mol
# date: 24. Aug. 2016

Natrolite
Na2(Al2Si3O10) (H2O)2 + 8 H+ = + 2 Na+ + 2 Al+3 + 3 Si (OH)4
log_k      19.2701 # +/- 1
delta_h    -52.87 kcal/mol # +/- 2.0
analytical_expression  -2.182881E+3   -3.057080E-1   1.340062E+5   7.782767E+2   -7.285596E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1983JOH/FLO][2001ARM/GUN]
# delfG0 = -1270.70 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -1366.78 +/- 1.2 kcal/mol
# SPrTr = 85.90 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 85.86 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 169.100 cm3/mol
# mole wt. = 380.2237 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

Natrolite_II
Na2(Al2Si3O10) (H2O)2 + 8 H+ = + 2 Na+ + 2 Al+3 + 3 Si (OH)4
log_k      16.2647 # +/- 2
delta_h    -53.8 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.190899E+3   -3.056580E-1   1.347504E+5   7.795392E+2   -7.340921E+6

```

```

# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -1274.8 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -1365.8 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 102.8 +/- 12 cal/mol/K
# CpPrTr = 88.908 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 169.100 cm3/mol
# mole wt. = 380.2237 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

#Natrolite_III
# Na2(Al2Si3O10)(H2O)2 + 8 H+ = + 2 Na+ + 2 Al+3 + 3 Si(OH)4
# log_k 16.2647 # +/- 2
# delta_h -53.433 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -2.154186E+3 -3.001736E-1 1.328127E+5 7.662438E+2 -7.247675E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -1274.8 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -1366.217 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 101.600 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 90.768 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 169.720 cm3/mol
# mole wt. = 380.2237 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

#Nepheline
# NaAlSi3O8 + 4 H+ = 1 Na+ + 1 Al+3 + 1 Si(OH)4
# log_k 13.6860 # +/- 0.8
# delta_h -34.5 kcal/mol # +/- 1
# analytical_expression -9.302058E+2 -1.335687E-1 5.912946E+4 3.313429E+2 -3.066201E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL_a][1997RIM_a]
# delfG0 = -473.37 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -500.8 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 29.720 +/- 0.30 cal/mol/K
# CpPrTr = 29.590 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 54.160 cm3/mol
# mole wt. = 142.0544 g/mol
# date: 8. Sep. 2016

#Nesquehonite
# MgCO3(H2O)3 + 1 H+ = 1 Mg+2 + 1 HCO3- + 3 H2O
# log_k 4.9962 # +/- 0.47
# delta_h -8.639 kcal/mol # +/- 0.29
# analytical_expression 7.052557E+3 1.275063E-1 -5.968853E+5 -2.268814E+3 4.715236E+7
# -Range: 0.01 - 67 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 340K
# data source: [1972ROB/HEM][1973ROB/HEM][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -412.035 +/- 0.12 kcal/mol
# delfH0 = -472.576 +/- 0.11 kcal/mol
# SOPrTr = 46.760 +/- 0.14 cal/mol/K
# CpPrTr = 0 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 74.790 cm3/mol
# mole wt. = 138.3598 g/mol
# date: 4. Oct. 2016

#NH4I(s)
# NH4I = 1 NH4+ + 1 I-
# log_k 3.3718 # +/- 0.8
# delta_h 2.9 kcal/mol # +/- 1
# analytical_expression -6.532288E+2 -1.045103E-1 3.607463E+4 2.392303E+2 -2.239229E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -26.8 +/- 1 kcal/mol *
# delfH0 = -48.3 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 27.0 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 19.540 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 57.746 cm3/mol
# mole wt. = 144.9428 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

#NH4NO3(s)
# NH4NO3 + 1 H2O + 2 H+ = + 2 NH4+ + 2 O2
# log_k -51.7107 # +/- 0.8
# delta_h 86.19 kcal/mol # +/- 0.3
# analytical_expression 7.391294E+2 1.019674E-1 -6.518961E+4 -2.584329E+2 3.277722E+6
# -Range: 0.01 - 170 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 442.8K
# data source: [1960KEL][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -43.93 +/- 0.2 kcal/mol *
# delfH0 = -87.37 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 36.11 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 33.600 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 46.537 cm3/mol
# mole wt. = 80.0432 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

#H5NO(l) # Ammonia solution, NH4OH(l)
# NH4OH + 1 H+ = 1 NH4+ + 1 H2O
# log_k 10.9717 # +/- 0.2
# delta_h -13.84 kcal/mol # +/- 0.2
# analytical_expression 1.097170E+1 0.000000E+0 0.000000E+0 0.000000E+0 0.000000E+0
# -Range: 25 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1953HIL/GIA][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -60.71 +/- 0.2 kcal/mol *
# delfH0 = -86.33 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 39.57 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 37.022 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 39.825 cm3/mol
# mole wt. = 35.0456 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

```

```

H8N2O(1) # (NH4)2O(1)
(NH4)2O + 2 H+ = + 2 NH4+ + 1 H2O
log_k      22.6338 # +/- 0.2
delta_h    -29.08 kcal/mol # +/- 0.2
analytical_expression  2.263380E+1    0.000000E+0    0.000000E+0    0.000000E+0    0.000000E+0
#
# -Range: 25 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
#
# extrapolation algorithm: Not used
#
# data source: [1953HIL/GIA][1982WAG/EVA]
#
# delfG0 = -63.79 +/- 0.2 kcal/mol *
#
# delfH0 = -102.94 +/- 0.2 kcal/mol
#
# S0PrTr = 63.94 +/- 0.2 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 56.355 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 63.508 cm3/mol
#
# mole wt. = 52.0760 g/mol
#
# date: 19. Dec. 2017

Nickel
Ni + 2 H+ + 0.5 O2 = 1 Ni+2 + 1 H2O
log_k      50.9916 # +/- 1.48
delta_h    -79.77 kcal/mol # +/- 2.00
analytical_expression  -4.825588E+2    -7.410439E-2    4.421533E+4    1.721347E+2    -1.652489E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
#
# data source: [1978HEL/DEL][1982WAG/EVA]
#
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
#
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
#
# S0PrTr = 7.14 +/- 0.2 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 6.16 +/- 0.2 cal/mol/K
#
# mole vol. = 6.588 cm3/mol
#
# mole wt. = 58.6934 g/mol
#
# date: 27. May. 2016

Ni (OH)2_beta
Ni (OH)2 + 2 H+ = 1 Ni+2 + 2 H2O
log_k      11.0142 # +/- 1.48
delta_h    -19.92 kcal/mol # +/- 2.0
analytical_expression  -3.721022E+2    -5.667651E-2    2.378855E+4    1.342209E+2    -1.057237E+6
#
# -Range: 0.01 - 27 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 300K
#
# data source: [1969SOR/KOS][2005GAM/BUG]
#
# delfG0 = -109.25 +/- 0.3 kcal/mol
#
# delfH0 = -129.61 +/- 0.4 kcal/mol
#
# S0PrTr = 19.12 +/- 0.2 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 19.602 +/- 0.07 cal/mol/K
#
# mole vol. = 23.470 cm3/mol
#
# mole wt. = 92.7081 g/mol
#
# date: 6. Apr. 2016

Nonthro_Ca
Ca0.165(Fe2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 5.32 H+ + 3.68 H2O = + 0.165 Ca+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k      -21.2727 # +/- 2
delta_h    15.3 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression  -1.815170E+03    -2.451838E-01    1.007133E+05    6.465813E+02    -6.286645E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 300K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1070.8 +/- 3 kcal/mol
#
# delfH0 = -1154.7 +/- 3 kcal/mol
#
# S0PrTr = 77.2 +/- 5 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 80.620 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 137.122 cm3/mol
#
# mole wt. = 424.2892 g/mol
#
# date: 20. May. 2016

Nonthro_Ca(avg)
Ca0.2(Mg0.1Fe1.65Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 6.15 H+ + 3.025 H2O = + 0.2 Ca+2 + 1.65 Fe+2 + 0.4125 O2 + 0.1 Mg+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k      -14.0188 # +/- 2
delta_h    -2.6 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -1.944865E+03    -2.676842E-01    1.109899E+05    6.923505E+02    -6.647861E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 300K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1117.6 +/- 3 kcal/mol
#
# delfH0 = -1201.4 +/- 3 kcal/mol
#
# S0PrTr = 78.9 +/- 5 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 79.647 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 136.184 cm3/mol
#
# mole wt. = 416.5387 g/mol
#
# date: 20. May. 2016

Nonthro_CaFe(avg)
Ca0.2(Fe1.75Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 6.15 H+ + 3.025 H2O = + 0.2 Ca+2 + 1.75 Fe+2 + 0.4125 O2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k      -14.5785 # +/- 2
delta_h    -1.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -1.942098E+03    -2.674219E-01    1.106882E+05    6.913535E+02    -6.641281E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 300K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1109.7 +/- 3 kcal/mol
#
# delfH0 = -1193.1 +/- 3 kcal/mol
#
# S0PrTr = 79.9 +/- 5 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 79.934 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 136.259 cm3/mol
#
# mole wt. = 419.6927 g/mol
#
# date: 20. May. 2016

Nonthro_CaFeX2(avg)
Ca0.2(Mg0.1Fe1.95)(Fe0.45Si3.55)O10(OH)2 + 5.4 H+ + 3.4 H2O = + 0.2 Ca+2 + 2.4 Fe+2 + 0.6 O2 + 0.1 Mg+2 + 3.55 Si(OH)4
log_k      -23.8441 # +/- 2
delta_h    22.3 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression  -1.773563E+03    -2.380041E-01    9.674549E+04    6.323929E+02    -6.100173E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1038.0 +/- 3 kcal/mol

```

```

# delfH0 = -1121.2 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 80.5 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 82.925 +/- 99999 cal/mol/K
# mole vol. = 137.946 cm3/mol
# mole wt. = 438.1863 g/mol
# date: 20. May. 2016

Nonthro_Cs
Cs0.33(Fe2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 5.32 H+ + 3.68 H2O = + 0.33 Cs+ + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k -23.2485 # +/- 2
delta_h 20.6 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -1.824426E+3 -2.459588E-1 1.004481E+5 6.502927E+2 -6.356255E+6
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1074.7 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1158.9 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 81.4 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 82.392 +/- 99999 cal/mol/K
# mole vol. = 144.356 cm3/mol
# mole wt. = 461.5391 g/mol
# date: 10. Feb. 2017

Nonthro_Cs(avg)
Cs0.4(Mg0.1Fe1.65Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 6.15 H+ + 3.025 H2O = + 0.4 Cs+ + 1.65 Fe+2 + 0.4125 O2 + 0.1 Mg+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -16.4671 # +/- 2
delta_h 3.8 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -1.949532E+3 -2.675698E-1 1.103131E+5 6.944506E+2 -6.713870E+6
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1122.4 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1206.5 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 84.0 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 81.795 +/- 99999 cal/mol/K
# mole vol. = 144.952 cm3/mol
# mole wt. = 461.6885 g/mol
# date: 10. Feb. 2017

Nonthro_CsFe(avg)
Cs0.4(Fe1.75Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 6.15 H+ + 3.025 H2O = + 0.4 Cs+ + 1.75 Fe+2 + 0.4125 O2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -17.0267 # +/- 2
delta_h 4.5 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -1.946780E+3 -2.673097E-1 1.100122E+5 6.934593E+2 -6.707335E+6
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1114.5 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1198.3 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 85.0 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 82.081 +/- 99999 cal/mol/K
# mole vol. = 145.027 cm3/mol
# mole wt. = 464.8427 g/mol
# date: 10. Feb. 2017

Nonthro_CsFeX2(avg)
Cs0.4(Mg0.1Fe1.95)(Fe0.45Si3.55)O10(OH)2 + 5.4 H+ + 3.4 H2O = + 0.4 Cs+ + 2.4 Fe+2 + 0.6 O2 + 0.1 Mg+2 + 3.55 Si(OH)4
log_k -26.2191 # +/- 2
delta_h 28.7 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -1.778230E+3 -2.378896E-1 9.609046E+4 6.344933E+2 -6.166174E+6
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1042.7 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1126.3 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 85.6 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 85.072 +/- 99999 cal/mol/K
# mole vol. = 146.714 cm3/mol
# mole wt. = 483.3376 g/mol
# date: 10. Feb. 2017

Nonthro_Fe
Fe0.165(Fe2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 5.32 H+ + 3.68 H2O = + 2.165 Fe+2 + 0.5 O2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k -21.9993 # +/- 2
delta_h 15.4 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -1.822439E+03 -2.460672E-01 1.010890E+05 6.489321E+02 -6.310737E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 300K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1053.6 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1137.0 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 78.4 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 80.893 +/- 99999 cal/mol/K
# mole vol. = 136.336 cm3/mol
# mole wt. = 426.8908 g/mol
# date: 20. May. 2016

Nonthro_Fe(avg)
Fe0.2(Mg0.1Fe1.65Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 6.15 H+ + 3.025 H2O = 1.85 Fe+2 + 0.4125 O2 + 0.1 Mg+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -14.9351 # +/- 2
delta_h -2.4 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -1.953665E+03 -2.687552E-01 1.114313E+05 6.952000E+02 -6.677070E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 300K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1096.8 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1180.0 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 80.3 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 79.980 +/- 99999 cal/mol/K
# mole vol. = 135.231 cm3/mol
# mole wt. = 419.6921 g/mol
# date: 20. May. 2016

Nonthro_FeX2(avg)
Fe0.2(Fe1.75Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 6.15 H+ + 3.025 H2O = 1.95 Fe+2 + 0.4125 O2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -15.4214 # +/- 2
delta_h -1.9 kcal/mol # +/- 5

```

```

analytical_expression -1.950921E+03 -2.684960E-01 1.111527E+05 6.942115E+02 -6.670567E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 300K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1088.8 +/- 3 kcal/mol
#
# delfH0 = -1171.6 +/- 3 kcal/mol
#
# SOPrTr = 81.3 +/- 5 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 80.266 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 135.306 cm3/mol
#
# mole wt. = 422.8461 g/mol
#
# date: 20. May. 2016

Nonthro_FeX3(avg)
Fe0.2(Mg0.1Fe1.95)(Fe0.45Si3.55)O10(OH)2 + 5.4 H+ + 3.4 H2O = + 2.6 Fe+2 + 0.6 O2 + 0.1 Mg+2 + 3.55 Si(OH)4
log_k -24.6871 # +/- 2
delta_h 22.3 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -1.782362E+03 -2.390752E-01 9.720861E+04 6.352424E+02 -6.129371E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 300K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1017.1 +/- 3 kcal/mol
#
# delfH0 = -1099.7 +/- 3 kcal/mol
#
# SOPrTr = 81.9 +/- 5 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 83.257 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 136.993 cm3/mol
#
# mole wt. = 441.3397 g/mol
#
# date: 20. May. 2016

Nonthro_K
K0.33(Fe2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 5.32 H+ + 3.68 H2O = + 0.33 K+ + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k -22.4612 # +/- 2
delta_h 19.4 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -1.791536E+03 -2.412874E-01 9.873979E+04 6.384906E+02 -6.228464E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 300K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1072.9 +/- 3 kcal/mol
#
# delfH0 = -1157.2 +/- 3 kcal/mol
#
# SOPrTr = 79.3 +/- 5 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 82.247 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 141.019 cm3/mol
#
# mole wt. = 430.5788 g/mol
#
# date: 20. May. 2016

Nonthro_K(avg)
K0.4(Mg0.1Fe1.65Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 6.15 H+ + 3.025 H2O = + 0.4 K+ + 1.65 Fe+2 + 0.4125 O2 + 0.1 Mg+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -15.4262 # +/- 2
delta_h 2.3 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -1.916230E+03 -2.629614E-01 1.086114E+05 6.825439E+02 -6.577352E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 300K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1120.1 +/- 3 kcal/mol
#
# delfH0 = -1204.4 +/- 3 kcal/mol
#
# SOPrTr = 81.5 +/- 5 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 81.620 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 140.907 cm3/mol
#
# mole wt. = 424.1624 g/mol
#
# date: 20. May. 2016

Nonthro_KFe(avg)
K0.4(Fe1.75Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 6.15 H+ + 3.025 H2O = + 0.4 K+ + 1.75 Fe+2 + 0.4125 O2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -15.9858 # +/- 2
delta_h 2.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -1.913487E+03 -2.627022E-01 1.083110E+05 6.815554E+02 -6.570847E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 300K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1112.2 +/- 3 kcal/mol
#
# delfH0 = -1196.1 +/- 3 kcal/mol
#
# SOPrTr = 82.5 +/- 5 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 81.906 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 140.982 cm3/mol
#
# mole wt. = 427.3164 g/mol
#
# date: 20. May. 2016

Nonthro_KFeX2(avg)
K0.4(Mg0.1Fe1.95)(Fe0.45Si3.55)O10(OH)2 + 5.4 H+ + 3.4 H2O = + 0.4 K+ + 2.4 Fe+2 + 0.6 O2 + 0.1 Mg+2 + 3.55 Si(OH)4
log_k -25.2515 # +/- 2
delta_h 27.1 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -1.744929E+03 -2.332813E-01 9.436692E+04 6.225864E+02 -6.029654E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1040.5 +/- 3 kcal/mol
#
# delfH0 = -1124.2 +/- 3 kcal/mol
#
# SOPrTr = 83.1 +/- 5 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 84.897 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 142.669 cm3/mol
#
# mole wt. = 445.81 g/mol
#
# date: 20. May. 2016

Nonthro_Mg
Mg0.165(Fe2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 5.32 H+ + 3.68 H2O = + 0.165 Mg+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k -21.4167 # +/- 2
delta_h 14.8 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -1.826957E+03 -2.464955E-01 1.014799E+05 6.505640E+02 -6.321473E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1067.1 +/- 3 kcal/mol
#
# delfH0 = -1151.1 +/- 3 kcal/mol
#
# SOPrTr = 76.7 +/- 5 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 80.422 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 136.212 cm3/mol
#
# mole wt. = 421.6867 g/mol

```

```

# date: 20. May. 2016

Nonthro_Mg(avg)
Mg0.2(Mg0.1Fe1.65Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 6.15 H+ + 3.025 H2O = + 0.2 Mg+2 + 1.65 Fe+2 + 0.4125 O2 + 0.1 Mg+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -14.2556 # +/- 2
delta_h 7.6 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -1.959155E+03 -2.692741E-01 1.119011E+05 6.971783E+02 -6.690076E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1113.2 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1196.8 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 78.3 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 79.406 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 135.081 cm3/mol
# mole wt. = 413.3841 g/mol
# date: 20. May. 2016

Nonthro_MgFe(avg)
Mg0.2(Fe1.75Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 6.15 H+ + 3.025 H2O = + 0.2 Mg+2 + 1.75 Fe+2 + 0.4125 O2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -14.7419 # +/- 2
delta_h -2.7 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -1.956410E+03 -2.690148E-01 1.116225E+05 6.961893E+02 -6.683572E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1105.2 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1188.7 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 79.3 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 79.693 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 135.156 cm3/mol
# mole wt. = 416.5381 g/mol
# date: 20. May. 2016

Nonthro_MgFeX2(avg)
Mg0.2(Mg0.1Fe1.95)(Fe0.45Si3.55)O10(OH)2 + 5.4 H+ + 3.4 H2O = + 0.3 Mg+2 + 2.4 Fe+2 + 0.6 O2 + 3.55 Si(OH)4
log_k -24.0076 # +/- 2
delta_h 21.6 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -1.787853E+03 -2.395940E-01 9.767852E+04 6.372208E+02 -6.142389E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1033.5 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1116.8 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 79.9 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 82.684 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 136.843 cm3/mol
# mole wt. = 435.0317 g/mol
# date: 20. May. 2016

Nonthro_Na
Na0.33(Fe2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 5.32 H+ + 3.68 H2O = + 0.33 Na+ + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k -21.3788 # +/- 2
delta_h 17.1 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -1.811885E+03 -2.434533E-01 1.002936E+05 6.455358E+02 -6.278861E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1069.8 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1154.0 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 78.6 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 81.647 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 138.481 cm3/mol
# mole wt. = 425.263 g/mol
# date: 20. May. 2016

Nonthro_Na(avg)
Na0.4(Mg0.1Fe1.65Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 6.15 H+ + 3.025 H2O = + 0.4 Na+ + 1.65 Fe+2 + 0.4125 O2 + 0.1 Mg+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -14.2296 # +/- 2
delta_h -0.4 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -1.940884E+03 -2.655868E-01 1.104570E+05 6.910833E+02 -6.638429E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1116.5 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1200.6 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 80.6 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 80.892 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 137.831 cm3/mol
# mole wt. = 417.719 g/mol
# date: 20. May. 2016

Nonthro_NaFe(avg)
Na0.4(Fe1.75Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 6.15 H+ + 3.025 H2O = + 0.4 Na+ + 1.75 Fe+2 + 0.4125 O2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -14.7893 # +/- 2
delta_h 0.3 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -1.938141E+03 -2.653275E-01 1.101566E+05 6.900947E+02 -6.631924E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1108.6 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1192.4 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 81.6 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 81.178 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 137.906 cm3/mol
# mole wt. = 420.873 g/mol
# date: 20. May. 2016

Nonthro_NaFeX2(avg)
Na0.4(Mg0.1Fe1.95)(Fe0.45Si3.55)O10(OH)2 + 5.4 H+ + 3.4 H2O = + 0.4 Na+ + 2.4 Fe+2 + 0.6 O2 + 0.1 Mg+2 + 3.55 Si(OH)4
log_k -23.9816 # +/- 2
delta_h 24.5 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -1.769583E+03 -2.359066E-01 9.623436E+04 6.311258E+02 -6.090731E+06
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]

```

```

# delfG0 = -1036.8 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1120.4 +/- 3 kcal/mol
# S0PrTr = 82.2 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 84.169 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 139.593 cm3/mol
# mole wt. = 439.3666 g/mol
# date: 20. May. 2016

Nontro_NAu-1 # from Uley graphite mine. Parent mineral for other nontronites
K0.02Ca0.247(Mg0.066Fe1.688Al0.268Ti0.007)(Al0.542Si3.458)O10(OH)2 + 6.452 H+ + 2.704 H2O = + 0.02 K+ + 0.247 Ca+2 + 0.066 Mg+2 + 1.688 Fe+2 +
0.422 O2 + 0.81 Al+3 + 0.007 Ti(OH)4 + 3.458 Si(OH)4
log_k -12.9610 # +/- 1.5
delta_h -5.20 kcal/mol # +/- 3.4
analytical_expression -1.202923E+3 -1.738909E-1 6.629877E+4 4.289675E+2 -3.736232E+6
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [2013GA1/BLA]
# delfG0 = -1119.42 +/- 1.4 kcal/mol *
# delfH0 = -1203.25 +/- 1.3 kcal/mol
# S0PrTr = 79.53 +/- 1.7 cal/mol/K
# CpPrTr = 80.102 +/- 0.08 cal/mol/K
# mole vol. = 136.380 cm3/mol
# mole wt. = 419.8734 g/mol
# date: 3. Dec. 2019

Nontro_NH4
(NH4)0.33(Fe2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 5.32 H+ + 3.68 H2O = + 0.33 NH4+ + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k -27.2343 # +/- 3
delta_h 25.9 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -1.816042E+3 -2.454787E-1 9.840353E+4 6.476224E+2 -6.271636E+6
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1063.4 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1154.4 +/- 3 kcal/mol *
# S0PrTr = 79.9 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 84.536 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 142.517 cm3/mol
# mole wt. = 423.6329 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

Nontro_NH4(avg)
(NH4)0.4(Mg0.1Fe1.65Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 6.15 H+ + 3.025 H2O = + 0.4 NH4+ + 0.1 Mg+2 + 1.65 Fe+2 + 0.4125 O2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -21.2961 # +/- 3
delta_h 10.3 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -1.939352E+3 -2.669880E-1 1.078302E+5 6.912141E+2 -6.611298E+6
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1108.7 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1201.1 +/- 3 kcal/mol *
# S0PrTr = 82.1 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 84.393 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 142.723 cm3/mol
# mole wt. = 415.7416 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

Nontro_NH4Fe(avg)
(NH4)0.4(Fe1.75Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 6.15 H+ + 3.025 H2O = + 0.4 NH4+ + 1.75 Fe+2 + 0.4125 O2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -21.8558 # +/- 3
delta_h 11.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -1.936597E+3 -2.667275E-1 1.075291E+5 6.902217E+2 -6.604752E+6
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1100.8 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1192.9 +/- 3 kcal/mol *
# S0PrTr = 83.1 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 84.679 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 142.798 cm3/mol
# mole wt. = 418.8958 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

Nontro_NH4FeX2(avg)
(NH4)0.4(Mg0.1Fe1.95)(Fe0.45Si3.55)O10(OH)2 + 5.4 H+ + 3.4 H2O = + 0.4 NH4+ + 0.1 Mg+2 + 2.4 Fe+2 + 0.6 O2 + 3.55 Si(OH)4
log_k -31.1214 # +/- 3
delta_h 35.3 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -1.768044E+3 -2.373071E-1 9.358534E+4 6.312547E+2 -6.063579E+6
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1029.1 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1121.0 +/- 3 kcal/mol *
# S0PrTr = 83.7 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 87.670 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 144.485 cm3/mol
# mole wt. = 437.3907 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

Odenite_7A(avg)
Mg0.85Fe1.12Al0.46(Al0.12Si1.88)O5(OH)4 + 5.68 H+ = + 0.85 Mg+2 + 1.12 Fe+2 + 0.2 O2 + 0.58 Al+3 + 1.88 Si(OH)4 + 1.08 H2O
log_k 4.1899 # +/- 1
delta_h -22.581 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.481805E+03 -2.080553E-01 8.719966E+04 5.292624E+02 -4.806416E+06
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][Unpublished]
# delfG0 = -827.3 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -902.158 +/- 999999 kcal/mol
# S0PrTr = 58.302 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 66.860 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 107.793 cm3/mol
# mole wt. = 299.6821 g/mol
# date: 22. Jul. 2016

Okenite
CaSi2O4(OH)2(H2O) + 2 H+ + 1 H2O = 1 Ca+2 + 2 Si(OH)4

```

```

log_k      9.1274 # +/- 999999
delta_h    -10.284 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -9.135653E+2   -1.112321E-1   5.607664E+4   3.249596E+2   -3.228431E+6
#
# -Range: not reported
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [2010BLA/BOU][2012ART/SAS]
# delfG0 = -688.794 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -749.480 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 49.323 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 26.740 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 94.770 cm3/mol
# mole wt. = 212.2766 g/mol
# date: 15. Jul. 2015

P4010(s)
P4010 + 6 H2O = + 8 H+ + 4 HP04-2
log_k      36.8058 # +/- 2
delta_h    -106.0 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression  -5.398941E+3   -8.695607E-1   3.250415E+5   1.947114E+3   -1.894878E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -650.9 +/- 2 kcal/mol *
# delfH0 = -719.4 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 54.68 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 49.11 +/- 4.7 cal/mol/K
# mole vol. = 123.430 cm3/mol
# mole wt. = 283.8892 g/mol
# date: 26. Oct. 2016

Palygorskite
Mg2Al2(Si8O20)(OH)2(H2O)4 + 10 H+ + 6 H2O = + 2 Mg+2 + 8 Si(OH)4 + 2 Al+3
log_k      47.0767 # +/- 5
delta_h    -106.4 kcal/mol # +/- 7
analytical_expression  -4.029576E+3   -5.419962E-1   2.555351E+5   1.430968E+3   -1.419321E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][2015OG0/VIG]
# delfG0 = -2549.0 +/- 6 kcal/mol
# delfH0 = -2756.9 +/- 6 kcal/mol
# SOPrTr = 161.4 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 168.037 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 359.000 cm3/mol
# mole wt. = 753.3204 g/mol
# date: 14. Dec. 2016

Paragonite_# = Paragonite_ord
Na(Al2)(AlSi3)O10(OH)2 + 10 H+ = 1 Na+ + 3 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k      14.6829 # +/- 1.3
delta_h    -68.98 kcal/mol # +/- 2.0
analytical_expression  -2.536422E+3   -3.682309E-1   1.552489E+5   9.028817E+2   -8.350545E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995ROB/HEM]
# delfG0 = -1330.91 +/- 0.9 kcal/mol
# delfH0 = -1421.92 +/- 0.9 kcal/mol
# SOPrTr = 66.23 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.87 +/- 0.6 cal/mol/K
# mole vol. = 132.100 cm3/mol
# mole wt. = 382.1996 g/mol
# date: 7. Sep. 2016

#Paragonite_II
Na(Al2)(AlSi3)O10(OH)2 + 10 H+ = 1 Na+ + 3 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k      18.2746 # +/- 1.4
delta_h    -73.935 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -2.53286E+3   -3.664933E-1   1.554681E+5   8.982361E+2   -8.288645E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL]
# delfG0 = -1326.01 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1416.963 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 66.400 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 74.991 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 132.530 cm3/mol
# mole wt. = 382.1996 g/mol
# date: 15. Jul. 2015

Paragonite_dis
Na(Al2)(AlSi3)O10(OH)2 + 10 H+ = 1 Na+ + 3 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k      16.5667 # +/- 1.3
delta_h    -72.88 kcal/mol # +/- 2.0
analytical_expression  -2.537399E+3   -3.682309E-1   1.561018E+5   9.028818E+2   -8.350546E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][1995ROB/HEM][1997RIM_a]
# delfG0 = -1328.34 +/- 0.9 kcal/mol
# delfH0 = -1418.02 +/- 0.9 kcal/mol
# SOPrTr = 70.70 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.87 +/- 0.6 cal/mol/K
# mole vol. = 132.100 cm3/mol
# mole wt. = 382.1996 g/mol
# date: 7. Sep. 2016

Paragonite_ord
Na(Al2)(AlSi3)O10(OH)2 + 10 H+ = 1 Na+ + 3 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k      14.6829 # +/- 1.3
delta_h    -68.98 kcal/mol # +/- 2.0
analytical_expression  -2.536422E+3   -3.682309E-1   1.552489E+5   9.028817E+2   -8.350545E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995ROB/HEM]
# delfG0 = -1330.91 +/- 0.9 kcal/mol
# delfH0 = -1421.92 +/- 0.9 kcal/mol
# SOPrTr = 66.23 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 76.87 +/- 0.6 cal/mol/K

```

```

# mole vol. = 132.100 cm3/mol
# mole wt. = 382.1996 g/mol
# date: 7. Sep. 2016

Pargasite
NaCa2Mg4Al3Si6O22(OH)2 + 22 H+ = 1 Na+ + 2 Ca+2 + 4 Mg+2 + 3 Al+3 + 6 Si(OH)4
log_k 103.4947 # +/- 2.8
delta_h -226.763 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -5.462602E+3 -7.815416E-1 3.522584E+5 1.947517E+3 -1.790045E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
#
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS]
#
# delfG0 = -2846.73 +/- 1.0 kcal/mol
#
# delfH0 = -3016.624 +/- 999999 kcal/mol
#
# SOPrTr = 160.000 +/- 999999 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 161.738 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 273.500 cm3/mol
#
# mole wt. = 835.8249 g/mol
#
# date: 15. Jul. 2015

Pb2SiO4(s)
Pb2SiO4 + 4 H+ = + 2 Pb+2 + 1 Si(OH)4
log_k 15.6710 # +/- 2.9
delta_h -19.2 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -8.908836E+2 -1.263676E-1 5.542718E+4 3.206666E+2 -3.123801E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
#
# data source: [1959KIN][1980KAT][1998CHA]
#
# delfG0 = -303.0 +/- 4 kcal/mol *
#
# delfH0 = -329.5 +/- 4 kcal/mol
#
# SOPrTr = 44.60 +/- 0.5 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 32.780 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 66.984 cm3/mol
#
# mole wt. = 506.4831 g/mol
#
# date: 23. Oct. 2019

Pb3(P04)2(s)
Pb3(P04)2 + 2 H+ = + 3 Pb+2 + 2 HP04-2
log_k -19.9026 # +/- 0.4
delta_h 1.02 kcal/mol # +/- 1.4
analytical_expression -3.677132E+3 -5.800452E-1 2.052929E+5 1.327398E+3 -1.270527E+7
#
# -Range: 0.01 - 180 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility data for Pb3(P04)2(s) = 3 Pb+2 + 2 P04-3
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 453K
#
# data source: [1938PIT/SMI][1938PIT][1960KEL][1972NRI_a][1973BRI/BIE][1978HEL/DEL_a]
#
# delfG0 = -564.98 +/- 0.6 kcal/mol
#
# delfH0 = -617.99 +/- 0.7 kcal/mol *
#
# SOPrTr = 84.45 +/- 0.4 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 61.25 +/- 1.0 cal/mol/K
#
# mole vol. = 108.926 cm3/mol
#
# mole wt. = 811.5428 g/mol
#
# date: 23. Oct. 2019

PbB2O4(s)
PbB2O4 + 2 H+ + 2 H2O = + 1 Pb+2 + 2 B(OH)3
log_k 6.5531 # +/- 1.3
delta_h -3.84 kcal/mol # +/- 1.5
analytical_expression -5.119316E+2 -7.325387E-2 3.070627E+4 1.851593E+2 -1.851556E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
#
# data source: [1998CHA]
#
# delfG0 = -346.5 +/- 2 kcal/mol *
#
# delfH0 = -371.89 +/- 1.4 kcal/mol
#
# SOPrTr = 31.19 +/- 2.9 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 25.597 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 75.664 cm3/mol
#
# mole wt. = 292.8196 g/mol
#
# date: 23. Oct. 2019

PbHP04(s)
PbHP04 = + 1 Pb+2 + 1 HP04-2
log_k -11.4012 # +/- 0.1
delta_h 4.474 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.699802E+3 -2.709263E-1 9.358985E+4 6.146140E+2 -5.825907E+6
#
# -Range: 0.01 - 35 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility data for reaction shown
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 308K
#
# data source: [1932JOW/PR1][1972NRI_a][1978HEL/DEL_a][1981LOP/TEL][1989ROB/LEF]
#
# delfG0 = -281.60 +/- 0.2 kcal/mol
#
# delfH0 = -313.069 +/- 999999 kcal/mol *
#
# SOPrTr = 33.441 +/- 999999
#
# CpPrTr = 29.027 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 53.732 cm3/mol
#
# mole wt. = 303.1793 g/mol
#
# date: 23. Oct. 2019

Periclase
MgO + 2 H+ = 1 Mg+2 + 1 H2O
log_k 21.3327 # +/- 0.5
delta_h -35.88 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression -3.725656E+2 -5.460809E-2 2.765079E+4 1.333070E+2 -1.104097E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
#
# data source: [1960KEL][1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
#
# delfG0 = -136.09 +/- 0.1 kcal/mol
#
# delfH0 = -143.80 +/- 0.1 kcal/mol
#
# SOPrTr = 6.440 +/- 0.04 cal/mol/K
#
# CpPrTr = 9.034 +/- 999999 cal/mol/K
#
# mole vol. = 11.248 cm3/mol
#
# mole wt. = 40.3044 g/mol
#
# date: 16. Jul. 2015

Perovskite
CaTiO3 + 2 H+ + 1 H2O = + 1 Ca+2 + 1 Ti(OH)4
log_k 9.5054 # +/- 1.3
delta_h -27.98 kcal/mol # +/- 2.1
analytical_expression -8.838275E+2 -1.266308E-1 5.421574E+4 3.153506E+2 -2.760718E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry

```

```

# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1961KEL/KIN][1968ROB/WAL]
# delfG0 = -376.50 +/- 0.4 kcal/mol *
# delfH0 = -396.900 +/- 0.41 kcal/mol
# SOPrTr = 22.40 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 23.350 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 33.630 cm3/mol
# mole wt. = 135.9432 g/mol
# date: 3. Dec. 2019

# Phillipsite_alk
K1.4Na1.6Ca0.4Al3.8Si12.2032 (H2O)12 + 15.2 H+ + 4.8 H2O = 1.4 K+ + 1.6 Na+ + 0.4 Ca+2 + 3.8 Al+3 + 12.2 Si (OH)4
log_k 9.6275 # +/- 6
delta_h -75.9 kcal/mol # +/- 13
analytical_expression -6.047651E+3 -8.200933E-1 3.632497E+5 2.150126E+3 -2.106029E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001CHI/APP][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -4222.6 +/- 6 kcal/mol
# delfH0 = -4572.9 +/- 12 kcal/mol
# SOPrTr = 403.4 +/- 45 cal/mol/K
# CpPrTr = 328.111 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 609.100 cm3/mol
# mole wt. = 1280.8898 g/mol
# date: 24. Aug. 2016

# Phillipsite_dia
K0.6Na0.7Ca1.2Al3.7Si12.3032 (H2O)12 + 14.8 H+ + 5.2 H2O = + 0.6 K+ + 0.7 Na+ + 1.2 Ca+2 + 3.7 Al+3 + 12.3 Si (OH)4
log_k 8.0275 # +/- 6
delta_h -74.3 kcal/mol # +/- 13
analytical_expression -6.049512E+3 -8.222304E-1 3.631454E+5 2.150853E+3 -2.110922E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001CHI/APP][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -4217.1 +/- 6 kcal/mol
# delfH0 = -4573.1 +/- 12 kcal/mol
# SOPrTr = 368.6 +/- 45 cal/mol/K
# CpPrTr = 319.972 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 609.100 cm3/mol
# mole wt. = 1261.0932 g/mol
# date: 24. Aug. 2016

# Phillipsite_Ca
Ca3Al6Si10O32 (H2O)12 + 24 H+ = + 3 Ca+2 + 6 Al+3 + 10 Si (OH)4 + 4 H2O
log_k 39.5385 # +/- 5
delta_h -157.5 kcal/mol # +/- 11
analytical_expression -6.928057E+3 -9.831830E-1 4.216096E+5 2.467919E+3 -2.311844E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -4397.5 +/- 5 kcal/mol
# delfH0 = -4768.7 +/- 10 kcal/mol
# SOPrTr = 323.8 +/- 37 cal/mol/K
# CpPrTr = 326.440 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 599.766 cm3/mol
# mole wt. = 1291.1426 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

# Phillipsite_K
K6Al6Si10O32 (H2O)12 + 24 H+ = + 6 K+ + 6 Al+3 + 10 Si (OH)4 + 4 H2O
log_k 33.8944 # +/- 5
delta_h -142.2 kcal/mol # +/- 12
analytical_expression -6.639441E+3 -9.457947E-1 4.021953E+5 2.366564E+3 -2.218478E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -4413.9 +/- 6 kcal/mol
# delfH0 = -4756.2 +/- 10 kcal/mol
# SOPrTr = 483.6 +/- 40 cal/mol/K
# CpPrTr = 368.812 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 599.766 cm3/mol
# mole wt. = 1405.4984 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

# Phillipsite_Na
Na6Al6Si10O32 (H2O)12 + 24 H+ = + 6 Na+ + 6 Al+3 + 10 Si (OH)4 + 4 H2O
log_k 46.1986 # +/- 5
delta_h -158.0 kcal/mol # +/- 12
analytical_expression -6.927904E+3 -9.577700E-1 4.232938E+5 2.465001E+3 -2.307381E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -4367.6 +/- 6 kcal/mol
# delfH0 = -4723.4 +/- 10 kcal/mol
# SOPrTr = 419.2 +/- 40 cal/mol/K
# CpPrTr = 339.490 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 599.766 cm3/mol
# mole wt. = 1308.8473 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

# Phillipsite_CaII
Ca2.2857Al4.5714Si11.4286O32 (H2O)11.4286 + 18.2856 H+ + 2.2857 H2O = + 2.2857 Ca+2 + 4.5714 Al+3 + 11.4286 Si (OH)4
log_k 19.8374 # +/- 5
delta_h -123.143 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -6.257131E+3 -8.560219E-1 3.838116E+5 2.218429E+3 -2.173352E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -4254.2 +/- 5 kcal/mol
# delfH0 = -4595.822 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 380.800 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 320.001 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 605.700 cm3/mol
# mole wt. = 1253.7981 g/mol
# date: 25. Aug. 2016

# Phillipsite_KII

```

```

# K4.5714(A14.5714Si11.4286032)(H2O)11.4286 + 18.2856 H+ + 2.2858 H2O = + 4.5714 K+ + 4.5714 Al+3 + 11.4286 Si(OH)4
# log_k 15.5336 # +/- 5
# delta_h -78.860 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -5.964564E+3 -8.082485E-1 3.610308E+5 2.120411E+3 -2.103742E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL] [2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -4266.7 +/- 5 kcal/mol
# delfH0 = -4618.939 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 393.400 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 342.553 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 605.700 cm3/mol
# mole wt. = 1340.9258 g/mol
# date: 25. Aug. 2016

#Phillipsite_Na11
# Na4.5714(A14.5714Si11.4286032)(H2O)11.4286 + 18.2856 H+ + 2.2858 H2O = + 4.5714 Na+ + 4.5714 Al+3 + 11.4286 Si(OH)4
# log_k 24.8525 # +/- 5
# delta_h -105.653 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -6.223696E+3 -8.342131E-1 3.802336E+5 2.208849E+3 -2.166387E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL] [2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -4231.5 +/- 5 kcal/mol
# delfH0 = -4579.177 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 394.100 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 334.218 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 605.700 cm3/mol
# mole wt. = 1267.2872 g/mol
# date: 25. Aug. 2016

#Phlogopite
# K(Mg3(AlSi3)O10(OH)2 + 10 H+ = 1 K+ + 1 Al+3 + 3 Mg+2 + 3 Si(OH)4
# log_k 38.0204 # +/- 2
# delta_h -82.171 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -2.557533E+3 -3.596405E-1 1.609309E+5 9.126479E+2 -8.469468E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL] [1991SVE/HEM]
# delfG0 = -1396.42 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1488.303 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 76.100 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 85.004 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 149.660 cm3/mol
# mole wt. = 417.2600 g/mol
# date: 15. Jul. 2015

#Phosphorus # White
# P + 1.5 H2O + 1.25 O2 = + 1 HP04-2 + 2 H+
# log_k 132.1028 # +/- 0.5
# delta_h -202.71 kcal/mol # +/- 0.6
# analytical_expression 2.052027E+3 -4.496339E-1 2.219928E+5 1.091828E+3 -1.137815E+7
# -Range: 0.01 - 280 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 553K
# data source: [1969STE/POT] [1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 9.821 +/- 0.06 cal/mol/K
# CpPrTr = 5.69 +/- 0.1 cal/mol/K
# mole vol. = 17.019 cm3/mol
# mole wt. = 30.9738 g/mol
# date: 1. Jul. 2019

#Plattnerite
# PbO2 + 2 H+ = + 1 Pb+2 + 0.5 O2 + 1 H2O
# log_k 6.5729 # +/- 0.6
# delta_h -3.95 kcal/mol # +/- 0.7
# analytical_expression -1.756920E+2 -2.540388E-2 9.824821E+3 6.527832E+1 -4.124924E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -51.48 +/- 0.7 kcal/mol *
# delfH0 = -65.60 +/- 0.7 kcal/mol
# SOPrTr = 17.16 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 14.618 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 25.073 cm3/mol
# mole wt. = 239.1988 g/mol
# date: 23. Oct. 2019

#Plumbonacrite
# Pb1002(CO3)6(OH)4 + 14 H+ = + 10 Pb+2 + 6 HCO3- + 6 H2O
# log_k 19.4834 # +/- 5
# delta_h -15.833 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -6.736335E+3 -1.047329E+0 3.784184E+5 2.446099E+3 -2.256330E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a] [1984TAY/LOP] [2000KR1/BUR]
# delfG0 = -1212.6 +/- 7 kcal/mol
# delfH0 = -1381.257 +/- 999999 kcal/mol *
# SOPrTr = 248.270 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 185.510 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 358.170 cm3/mol
# mole wt. = 2532.0832 g/mol
# date: 23. Oct. 2019

#Poitevinite
# CuS04(H2O) = + 1 Cu+2 + 1 S04-2 + 1 H2O
# log_k -0.3570 # +/- 0.2
# delta_h -10.49 kcal/mol # +/- 0.7
# analytical_expression -1.729370E+3 -2.692121E-1 9.852533E+4 6.243040E+2 -5.864187E+6
# -Range: 0.01 - 240 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 513K
# data source: [1960KEL] [1978HEL/DEL_a] [1982WAG/EVA] [1988GIE] [1994GIE/LEN]
# delfG0 = -219.43 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -259.53 +/- 0.6 kcal/mol *
# SOPrTr = 34.9 +/- 2 cal/mol/K

```

```

# CpPrTr = 32.600 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 52.929 cm3/mol
# mole wt. = 177.6248 g/mol
# date: 25. Jun. 2019

Pollucite
CsAlSi2O6 + 4 H+ + 2 H2O = 1 Cs+ + 1 Al+3 + 2 Si(OH)4
log_k 3.1454 # +/- 1.0
delta_h -17.8 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression -1.165556E+3 -1.619031E-1 7.131202E+4 4.142584E+2 -4.201705E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1993SEM/BYG]
# delfG0 = -694.4 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -734.2 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 49.8 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 41.4 +/- 1 cal/mol/K
# mole vol. = 96.313 cm3/mol
# mole wt. = 312.0544 g/mol
# date: 22. Jun. 2016

Portlandite
Ca(OH)2 + 2 H+ = 1 Ca+2 + 2 H2O
log_k 22.8009 # +/- 0.3
delta_h -31.09 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression -2.961411E+2 -4.527026E-2 2.233214E+4 1.078700E+2 -8.337774E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1959HAT/HIL][1976BAE/MES]
# delfG0 = -214.39 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -235.34 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 19.93 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 20.97 +/- 0.1 cal/mol/K
# mole vol. = 33.060 cm3/mol
# mole wt. = 74.0926 g/mol
# date: 2. Nov. 2017

Potassium # Kalium
K + 1 H+ + 0.25 O2 = 1 K+ + 0.5 H2O
log_k 70.9862 # +/- 0.10
delta_h -93.703 kcal/mol # +/- 0.04
analytical_expression -2.712254E+02 -3.561557E-02 3.773947E+04 9.679289E+01 -1.177732E+06
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 15.459 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = 7.124 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 45.358 cm3/mol
# mole wt. = 39.0983 g/mol
# date: 30. Oct. 2015

Prehnite
Ca2Al2Si3O10(OH)2 + 10 H+ = + 2 Ca+2 + 2 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k 33.6795 # +/- 1
delta_h -82.735 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.482369E+3 -3.614316E-1 1.557950E+5 8.865258E+2 -8.211870E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -1390.10 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1481.649 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 65.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 80.827 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 140.330 cm3/mol
# mole wt. = 412.3843 g/mol
# date: 15. Jul. 2015

Pyrite
FeS2 + 1 H2O + 3.5 O2 = + 2 H+ + 1 Fe+2 + 2 SO4-2
log_k 217.3959 # +/- 2
delta_h -337.4 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -4.013968E+3 -6.328950E-1 3.045068E+5 1.441605E+3 -1.496949E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1950COU][1962GRO/WES][1968ROB/WAL][1974MIL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -38.3 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -41.0 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 12.650 +/- 0.03 cal/mol/K
# CpPrTr = 14.842 +/- 0.15 cal/mol/K
# mole vol. = 23.940 cm3/mol
# mole wt. = 119.9650 g/mol
# date: 16. Jul. 2015

Pyromorphite
Pb10(P04)6Cl2 + 6 H+ = + 10 Pb+2 + 6 HP04-2 + 2 Cl-
log_k -84.0186 # +/- 1.0
delta_h 37.6 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -1.246831E+4 -1.969368E+0 6.891391E+5 4.504185E+3 -4.312913E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility data for Pyromorphite = 10 Pb+2 + 6 P04-3 + 2 Cl-
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1932JOW/PR][1974NR][1978HEL/DEL_a][1989DAI/HUG][2011BIS/HUG][2016TOP/MAN]
# delfG0 = -1796.60 +/- 1.9 kcal/mol
# delfH0 = -1968.2 +/- 2 kcal/mol *
# SOPrTr = 279.79 +/- 0.5 cal/mol/K
# CpPrTr = 198.36 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 381.577 cm3/mol
# mole wt. = 2712.7338 g/mol
# date: 23. Oct. 2019

Pyrope
Mg3Al2Si3O12 + 12 H+ = + 3 Mg+2 + 2 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k 58.2389 # +/- 2.1
delta_h -136.82 kcal/mol # +/- 2.3
analytical_expression -3.002789E+3 -4.338602E-1 1.953823E+5 1.068998E+3 -9.787168E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C

```

```

# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978ROB/HEM]
# delfG0 = -1417.87 +/- 1.6 kcal/mol *
# delfH0 = -1502.06 +/- 1.4 kcal/mol
# SOPrTr = 62.30 +/- 2.4 cal/mol/K
# CpPrTr = 77.89 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 113.270 cm3/mol
# mole wt. = 403.1273 g/mol
# date: 19. Mar. 2019

Pyrophyllite
Al2Si4O10(OH)2 + 6 H+ + 4 H2O = + 2 Al+3 + 4 Si(OH)4
log_k -0.4896 # +/- 1.3
delta_h -32.67 kcal/mol # +/- 2.1
analytical_expression -2.161146E+3 -3.020854E-1 1.303914E+5 7.672619E+2 -7.569754E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][1995ROB/HEM][1997RIM_a]
# delfG0 = -1258.63 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -1348.00 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 57.22 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 70.24 +/- 0.6 cal/mol/K
# mole vol. = 128.100 cm3/mol
# mole wt. = 360.3138 g/mol
# date: 7. Sep. 2016

Pyroxene_CaAl
CaAl(AlSi)O6 + 8 H+ = 1 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 Si(OH)4 + 2 H2O
log_k 36.2245 # +/- 1
delta_h -89.143 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.603191E+3 -2.450023E-1 1.053271E+5 5.720460E+2 -5.004368E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -742.07 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -783.793 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 35.000 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 39.282 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 63.500 cm3/mol
# mole wt. = 218.1230 g/mol
# date: 16. Jul. 2015

Pyrrhotite
FeS + 2 O2 = 1 Fe+2 + 1 SO4-2
log_k 134.6006 # +/- 0.9
delta_h -209.65 kcal/mol # +/- 1.6
analytical_expression -2.252831E+3 -3.552269E-1 1.746579E+5 8.086728E+2 -8.308056E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1959GRO/WES][1974MLL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -24.08 +/- 0.1 kcal/mol
# delfH0 = -24.00 +/- 0.1 kcal/mol
# SOPrTr = 14.415 +/- 0.01 cal/mol/K
# CpPrTr = 13.061 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 18.200 cm3/mol
# mole wt. = 87.9050 g/mol
# date: 16. Jul. 2015

Quartz
SiO2 + 2 H2O = 1 Si(OH)4
log_k -3.7493 # +/- 0.06
delta_h 5.143 kcal/mol # +/- 0.62
analytical_expression -2.846444E+2 -3.482157E-2 1.655137E+4 1.005385E+2 -1.156808E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -204.646 +/- 0.41 kcal/mol
# delfH0 = -217.650 +/- 0.40 kcal/mol
# SOPrTr = 9.880 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.63 +/- 0.1 cal/mol/K
# mole vol. = 22.688 cm3/mol
# mole wt. = 60.0843 g/mol
# date: 16. Jul. 2015

Rb20(s)
Rb2O + 2 H+ = + 2 Rb+ + 1 H2O
log_k 88.3918 # +/- 15
delta_h -107.4 kcal/mol # +/- 20
analytical_expression -1.642623E+2 -2.257694E-2 3.408243E+4 6.176551E+1 -6.900664E+5
# -Range: not reported
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [1978HEL/DEL_a][1982WAG/EVA][1993BAR]
# delfG0 = -71.7 +/- 20 kcal/mol
# delfH0 = -81.0 +/- 20 kcal/mol
# SOPrTr = 30.000 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = 22.226 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 46.735 cm3/mol
# mole wt. = 186.9350 g/mol
# date: 25. Mar. 2016

RbOH(s)
RbOH + 1 H+ = 1 Rb+ + 1 H2O
log_k 25.7417 # +/- 0.3
delta_h -28.24 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression -2.933970E+2 -4.064248E-2 2.338456E+4 1.069071E+2 -1.040821E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997GUR/BER]
# delfG0 = -89.37 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -100.10 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 22.47 +/- 0.7 cal/mol/K
# CpPrTr = 16.49 +/- 0.5 cal/mol/K
# mole vol. = 58.894 cm3/mol
# mole wt. = 102.4752 g/mol
# date: 31. May. 2016

```

Rhodochrosite
 $MnCO_3 + 1 H^+ = 1 Mn^{+2} + 1 HCO_3^-$
log_k 0.2470 # +/- 0.57
delta_h -5.277 kcal/mol # +/- 0.42
analytical_expression -9.308917E+2 -1.463900E-1 5.213766E+4 3.370716E+2 -3.035033E+6
-Range: 0.01 - 300 deg C
gflag: 1 [reported delfG0 used]
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
delfG0 = -195.0450 +/- 0.330 kcal/mol
delfH0 = -212.521 +/- 0.29 kcal/mol
SOPrTr = 23.90 +/- 0.5 cal/mol/K
CpPrTr = 19.49 +/- 0.5 cal/mol/K
mole vol. = 31.075 cm3/mol
mole wt. = 114.9472 g/mol
date: 5. May. 1978

Ripidolite_14A
 $Mg_3Fe_2Al(AlSi_3)O_{10}(OH)_8 + 16 H^+ = + 3 Mg^{+2} + 2 Fe^{+2} + 2 Al^{+3} + 3 Si(OH)_4 + 6 H_2O$
log_k 59.7885 # +/- 999999
delta_h -144.418 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.666014E+03 -5.314287E-01 2.315175E+05 1.308647E+03 -1.159422E+07
-Range: 0.01 - 300 deg C
gflag: [reported delfG0 used], treated as ideal solid solution between Daphnite and Clinocllore
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
data source: [2007WOL/JOV_a]
delfG0 = -1799.624 +/- 999999 kcal/mol
delfH0 = -1948.467 +/- 999999 kcal/mol
SOPrTr = 130.407 +/- 999999 cal/mol/K
CpPrTr = 142.625 +/- 999999 cal/mol/K
mole vol. = 209.634 cm3/mol
mole wt. = 618.8774 g/mol
date: 21. Jul. 2016

Ripidolite_7A
 $Mg_{1.5}Fe(AlSi_{1.5}O_5(OH)_4 + 8 H^+ = 1.5 Mg^{+2} + 1 Fe^{+2} + 1 Al^{+3} + 1.5 Si(OH)_4 + 3 H_2O$
log_k 31.5809 # +/- 999999
delta_h -73.875 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.832702E+03 -2.658498E-01 1.159697E+05 6.545010E+02 -5.772634E+06
-Range: 0.01 - 300 deg C
gflag: 1 [reported delfG0 used], treated as ideal solid solution
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
data source: [2007WOL/JOV_a]
delfG0 = -897.511 +/- 999999 kcal/mol
delfH0 = -972.568 +/- 999999 kcal/mol
SOPrTr = 63.074 +/- 999999 cal/mol/K
CpPrTr = 68.825 +/- 999999 cal/mol/K
mole vol. = 107.690 cm3/mol
mole wt. = 309.4387 g/mol
date: 21. Jul. 2016

Romarchite
 $SnO + 2 H^+ = 1 Sn^{+2} + 1 H_2O$
log_k 1.3180 # +/- 0.3
delta_h -2.077 kcal/mol # +/- 0.26
analytical_expression -3.235423E+2 -4.836893E-2 1.851402E+4 1.169157E+2 -1.076918E+6
-Range: 0.01 - 300 deg C
gflag: 1 [reported delfG0 used]
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
data source: [1960KEL][1978COX][1978HEL/DEL_a][1985JAC/HEL_b]
delfG0 = -61.46 +/- 0.2 kcal/mol *
delfH0 = -68.340 +/- 0.17 kcal/mol
SOPrTr = 13.660 +/- 0.07 cal/mol/K
CpPrTr = 11.472 +/- 999999 cal/mol/K
mole vol. = 20.895 cm3/mol
mole wt. = 134.7094 g/mol
date: 05. Jul. 2018

Rozenite
 $FeSO_4(H_2O)_4 = 1 Fe^{+2} + 1 SO_4^{-2} + 4 H_2O$
log_k -1.4059 # +/- 0.5
delta_h -4.00 kcal/mol # +/- 1.7
analytical_expression -1.749534E+3 -2.907005E-1 9.332228E+4 6.390898E+2 -5.297190E+6
-Range: 0.01 - 60 deg C
gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 333K
data source: [2013LEM/BER][1978HEL/DEL_a]
delfG0 = -428.47 +/- 0.2 kcal/mol
delfH0 = -508.72 +/- 0.4 kcal/mol
SOPrTr = 66.0 +/- 1 cal/mol/K *
CpPrTr = 65.687 +/- 999999 cal/mol/K
mole vol. = 97.676 cm3/mol
mole wt. = 223.9714 g/mol
date: 15. Jan. 2018

Rubidium
 $Rb + 1 H^+ + 0.25 O_2 = 1 Rb^{+} + 0.5 H_2O$
log_k 71.1988 # +/- 0.11
delta_h -93.45 kcal/mol # +/- 0.03
analytical_expression -1.246524E+2 -1.759222E-2 2.846694E+4 4.522576E+1 -5.591932E+5
-Range: 0.01 - 39 deg C
gflag: 1 [reported delfG0 used]
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 312K
data source: [1960KEL][1978COX]
delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
SOPrTr = 18.351 +/- 0.07 cal/mol/K
CpPrTr = 7.580 +/- 999999 cal/mol/K
mole vol. = 55.788 cm3/mol
mole wt. = 85.4678 g/mol
date: 11. Mar. 2016

Rutile
 $TiO_2 + 2 H_2O = + 1 Ti(OH)_4$
log_k -8.9500 # +/- 1.4
delta_h -0.67 kcal/mol # +/- 2.2
analytical_expression -7.067326E+2 -9.552830E-2 3.983717E+4 2.502112E+2 -2.352972E+6
-Range: 0.01 - 300 deg C
gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
data source: [1978ROB/HEM][1983BOW/HEL]
delfG0 = -212.87 +/- 0.8 kcal/mol *
delfH0 = -226.10 +/- 0.8 kcal/mol

```

# SOPrTr = 12.020 +/- 0.04 cal/mol/K
# CpPrTr = 13.165 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 18.820 cm3/mol
# mole wt. = 79.8658 g/mol
# date: 3. Dec. 2019

Sanidine_high
KAISi3O8 + 4 H+ + 4 H2O = 1 K+ + 1 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k 1.5042 # +/- 1.2
delta_h -16.332 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.429484E+3 -1.951502E-1 8.660489E+4 5.079135E+2 -5.165283E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1991SVE/HEM]
# delfG0 = -893.97 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -946.774 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 54.530 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 48.496 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 109.008 cm3/mol
# mole wt. = 278.3315 g/mol
# date: 16. Jul. 2015

Saponite_Ca
Ca0.165(Mg3)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.165 Ca+2 + 3 Mg+2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 26.2555 # +/- 3
delta_h -61.0 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.390920E+03 -3.280670E-01 1.491304E+05 8.513439E+02 -8.159906E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1346.4 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1435.2 +/- 4 kcal/mol
# SOPrTr = 71.5 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 81.088 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 139.680 cm3/mol
# mole wt. = 385.5142 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_Ca(avg)
Ca0.225(Mg2.8Fe0.1Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 7.9 H+ + 2.05 H2O = + 0.225 Ca+2 + 2.8 Mg+2 + 0.1 Fe+2 + 0.025 O2 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 24.7697 # +/- 3
delta_h -62.8 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.426601E+03 -3.362821E-01 1.506732E+05 8.642118E+02 -8.192823E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1344.9 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1433.2 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 73.5 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 81.134 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 138.906 cm3/mol
# mole wt. = 389.8038 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_CaFe
Ca0.165(Fe3)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.165 Ca+2 + 3 Fe+2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 18.9951 # +/- 7
delta_h -53.3 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.308654E+03 -3.202895E-01 1.429720E+05 8.216869E+02 -7.964807E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1096.4 +/- 9 kcal/mol
# delfH0 = -1175.0 +/- 9 kcal/mol
# SOPrTr = 101.7 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 89.675 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 141.936 cm3/mol
# mole wt. = 480.1342 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_CaFe(avg)
Ca0.225(Fe2.9Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 7.9 H+ + 2.05 H2O = + 0.225 Ca+2 + 2.9 Fe+2 + 0.025 O2 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 18.6286 # +/- 7
delta_h -56.5 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.349845E+03 -3.290231E-01 1.451222E+05 8.365321E+02 -8.010730E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1110.7 +/- 9 kcal/mol
# delfH0 = -1189.4 +/- 9 kcal/mol
# SOPrTr = 101.8 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 89.149 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 141.012 cm3/mol
# mole wt. = 478.1158 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_Cs
Cs0.33(Mg3)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 Cs+ + 3 Mg+2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 24.2797 # +/- 3
delta_h -55.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.369276E+3 -3.238739E-1 1.472618E+5 8.437485E+2 -8.142917E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1350.3 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1439.3 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 75.7 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 82.858 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 146.913 cm3/mol
# mole wt. = 422.7601 g/mol
# date: 10. Feb. 2017

Saponite_Cs(avg)
Cs0.45(Mg2.8Fe0.1Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 7.9 H+ + 2.05 H2O = + 0.45 Cs+ + 2.8 Mg+2 + 0.1 Fe+2 + 0.025 O2 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 22.0888 # +/- 3
delta_h -55.8 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.397102E+3 -3.305643E-1 1.481339E+5 8.538543E+2 -8.169663E+6

```

```

# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2013GA1/BLA_a] [Unpublished]
# delfG0 = -1350.2 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1438.8 +/- 3 kcal/mol
# S0PrTr = 79.3 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 83.549 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 148.770 cm3/mol
# mole wt. = 440.5939 g/mol
# date: 10. Feb. 2017

Saponite_CsFe
Cs0.33(Fe3)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 Cs+ + 3 Fe+2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 17.0192 # +/- 3
delta_h -48.1 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression -2.287010E+3 -3.160964E-1 1.411035E+5 8.140916E+2 -7.947818E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2013GA1/BLA_a] [Unpublished]
# delfG0 = -1100.3 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1179.1 +/- 3 kcal/mol
# S0PrTr = 105.9 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 91.445 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 149.169 cm3/mol
# mole wt. = 517.3861 g/mol
# date: 10. Feb. 2017

Saponite_CsFe(avg)
Cs0.45(Fe2.9Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 7.9 H+ + 2.05 H2O = + 0.45 Cs+ + 2.9 Fe+2 + 0.025 O2 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 15.9476 # +/- 3
delta_h -49.4 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression -2.325058E+3 -3.238034E-1 1.428580E+5 8.278408E+2 -8.003983E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2013GA1/BLA_a] [Unpublished]
# delfG0 = -1116.0 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1195.1 +/- 3 kcal/mol
# S0PrTr = 107.5 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 91.301 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 150.876 cm3/mol
# mole wt. = 528.9115 g/mol
# date: 10. Feb. 2017

Saponite_Fe
Fe0.165(Mg3)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.165 Fe+2 + 3 Mg+2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 25.5289 # +/- 3
delta_h -61.0 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.398168E+03 -3.289506E-01 1.494997E+05 8.536950E+02 -8.184006E+06
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2013GA1/BLA_a] [Unpublished]
# delfG0 = -1329.2 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1417.5 +/- 4 kcal/mol
# S0PrTr = 72.6 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 81.362 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 138.894 cm3/mol
# mole wt. = 388.1158 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_Fe(avg)
Fe0.225(Mg2.8Fe0.1Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 7.9 H+ + 2.05 H2O = + 0.325 Fe+2 + 2.8 Mg+2 + 0.025 O2 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 23.8122 # +/- 3
delta_h -62.8 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.436510E+03 -3.374874E-01 1.511934E+05 8.674187E+02 -8.225690E+06
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2013GA1/BLA_a] [Unpublished]
# delfG0 = -1321.4 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1409.0 +/- 3 kcal/mol
# S0PrTr = 75.1 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 81.508 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 137.834 cm3/mol
# mole wt. = 393.3514 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_FeX2
Fe0.165(Fe3)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 3.165 Fe+2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 18.3418 # +/- 7
delta_h -53.4 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.315924E+03 -3.211731E-01 1.433696E+05 8.240379E+02 -7.988895E+06
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2013GA1/BLA_a] [Unpublished]
# delfG0 = -1079.1 +/- 9 kcal/mol
# delfH0 = -1157.1 +/- 9 kcal/mol
# S0PrTr = 102.9 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 89.948 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 141.150 cm3/mol
# mole wt. = 482.7358 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_FeX2(avg)
Fe0.225(Fe2.9Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 7.9 H+ + 2.05 H2O = + 3.125 Fe+2 + 0.025 O2 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 17.6711 # +/- 7
delta_h -56.4 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.359732E+03 -3.302284E-01 1.456358E+05 8.397392E+02 -8.043588E+06
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2013GA1/BLA_a] [Unpublished]
# delfG0 = -1087.2 +/- 9 kcal/mol
# delfH0 = -1165.3 +/- 9 kcal/mol
# S0PrTr = 103.3 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 89.521 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 139.940 cm3/mol
# mole wt. = 481.6634 g/mol
# date: 17. May. 2016

```

```

Saponite_K
K0.33(Mg3)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 K+ + 3 Mg+2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 25.0669 # +/- 3
delta_h -57.0 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.367288E+03 -3.241708E-01 1.471570E+05 8.432539E+02 -8.101736E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1348.5 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1437.7 +/- 4 kcal/mol
# SPrTr = 73.6 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 82.715 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 143.576 cm3/mol
# mole wt. = 391.8038 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_K(avg)
K0.45(Mg2.8Fe0.1Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 7.9 H+ + 2.05 H2O = + 0.45 K+ + 2.8 Mg+2 + 0.1 Fe+2 + 0.025 O2 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 23.1956 # +/- 3
delta_h -57.4 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.394404E+03 -3.309690E-01 1.480050E+05 8.531796E+02 -8.113496E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1347.7 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1436.5 +/- 3 kcal/mol
# SPrTr = 76.5 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 83.353 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 144.220 cm3/mol
# mole wt. = 398.3805 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_KFe
K0.33(Fe3)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 K+ + 3 Fe+2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 17.8798 # +/- 7
delta_h -49.4 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.285021E+03 -3.163933E-01 1.410204E+05 8.135967E+02 -7.906625E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1098.4 +/- 9 kcal/mol
# delfH0 = -1177.4 +/- 9 kcal/mol
# SPrTr = 103.8 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 91.301 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 145.832 cm3/mol
# mole wt. = 486.4238 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_KFe(avg)
K0.45(Fe2.9Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 7.9 H+ + 2.05 H2O = + 0.45 K+ + 2.9 Fe+2 + 0.025 O2 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 17.0545 # +/- 7
delta_h -51.1 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.317627E+03 -3.237100E-01 1.424475E+05 8.255003E+02 -7.931395E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1113.5 +/- 9 kcal/mol
# delfH0 = -1192.8 +/- 9 kcal/mol
# SPrTr = 104.7 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 91.366 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 146.325 cm3/mol
# mole wt. = 486.6925 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_Mg
Mg0.165(Mg3)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 3.165 Mg+2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 26.1115 # +/- 3
delta_h -61.7 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.402687E+03 -3.293787E-01 1.498906E+05 8.553270E+02 -8.194732E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1342.7 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1431.5 +/- 4 kcal/mol
# SPrTr = 70.9 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 80.889 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 138.770 cm3/mol
# mole wt. = 382.9117 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_Mg(avg)
Mg0.225(Mg2.8Fe0.1Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 7.9 H+ + 2.05 H2O = + 3.025 Mg+2 + 0.1 Fe+2 + 0.025 O2 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 24.5400 # +/- 3
delta_h -63.7 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.442695E+03 -3.380709E-01 1.517142E+05 8.696435E+02 -8.240326E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1339.9 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1428.2 +/- 3 kcal/mol
# SPrTr = 72.9 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 80.864 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 137.665 cm3/mol
# mole wt. = 386.2549 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_MgFe
Mg0.165(Fe3)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.165 Mg+2 + 3 Fe+2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 18.8510 # +/- 7
delta_h -53.9 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.320442E+03 -3.216013E-01 1.437387E+05 8.256699E+02 -7.999632E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1092.7 +/- 9 kcal/mol

```

```

# delfH0 = -1171.3 +/- 9 kcal/mol
# SOPrTr = 101.2 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 89.476 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 141.026 cm3/mol
# mole wt. = 477.5317 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_MgFe(avg)
Mg0.225(Fe2.9Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 7.9 H+ + 2.05 H2O = + 0.225 Mg+2 + 2.9 Fe+2 + 0.025 O2 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 18.4722 # +/- 7
delta_h -57.4 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.365917E+03 -3.308119E-01 1.461785E+05 8.419640E+02 -8.058224E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1105.6 +/- 9 kcal/mol
# delfH0 = -1184.4 +/- 9 kcal/mol
# SOPrTr = 101.1 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 88.877 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 139.771 cm3/mol
# mole wt. = 474.5669 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_Na
Na0.33(Mg3)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 Na+ + 3 Mg+2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 26.0761 # +/- 3
delta_h -59.2 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.387615E+03 -3.263365E-01 1.486824E+05 8.502988E+02 -8.152121E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1345.5 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1434.6 +/- 4 kcal/mol
# SOPrTr = 72.8 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 82.114 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 141.039 cm3/mol
# mole wt. = 386.4880 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_Na(avg)
Na0.45(Mg2.8Fe0.1Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 7.9 H+ + 2.05 H2O = + 0.45 Na+ + 2.8 Mg+2 + 0.1 Fe+2 + 0.025 O2 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 24.5784 # +/- 3
delta_h -60.4 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.422121E+03 -3.339225E-01 1.500864E+05 8.627864E+02 -8.182202E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1343.6 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1432.3 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 75.4 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 82.534 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 140.759 cm3/mol
# mole wt. = 391.1317 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_NaFe
Na0.33(Fe3)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 Na+ + 3 Fe+2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 18.8889 # +/- 7
delta_h -51.5 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.305370E+03 -3.185591E-01 1.425524E+05 8.206416E+02 -7.957019E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1095.4 +/- 9 kcal/mol
# delfH0 = -1174.3 +/- 9 kcal/mol
# SOPrTr = 103.1 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 90.701 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 143.295 cm3/mol
# mole wt. = 481.1080 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_NaFe(avg)
Na0.45(Fe2.9Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 7.9 H+ + 2.05 H2O = + 0.45 Na+ + 2.9 Fe+2 + 0.025 O2 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 18.5105 # +/- 7
delta_h -54.1 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.345364E+03 -3.266635E-01 1.445573E+05 8.351068E+02 -8.000110E+06
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1109.3 +/- 9 kcal/mol
# delfH0 = -1188.5 +/- 9 kcal/mol
# SOPrTr = 103.7 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 90.548 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 142.865 cm3/mol
# mole wt. = 479.4437 g/mol
# date: 17. May. 2016

Saponite_NH4
(NH4)0.33(Mg3)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 NH4+ + 3 Mg+2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 20.2206 # +/- 3
delta_h -50.3 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.360870E+3 -3.233938E-1 1.451890E+5 8.410783E+2 -8.058304E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1339.1 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1435.0 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 74.1 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 85.003 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 145.075 cm3/mol
# mole wt. = 384.8539 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

Saponite_NH4(avg)
(NH4)0.45(Mg2.8Fe0.1Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 7.9 H+ + 2.05 H2O = + 0.45 NH4+ + 2.8 Mg+2 + 0.1 Fe+2 + 0.025 O2 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 16.5736 # +/- 3
delta_h -48.3 kcal/mol # +/- 4

```

```

analytical_expression -2.385657E+3 -3.299097E-1 1.453185E+5 8.502131E+2 -8.054265E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1334.9 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1432.9 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 77.2 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 86.472 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 146.263 cm3/mol
# mole wt. = 388.9036 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

Saponite_NH4Fe
(NH4)0.33(Fe3)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 NH4+ + 3 Fe+2 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log_k 13.0334 # +/- 3
delta_h -42.7 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression -2.278626E+3 -3.156163E-1 1.390589E+5 8.114214E+2 -7.863196E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1089.0 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1174.7 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 104.4 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 93.589 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 147.331 cm3/mol
# mole wt. = 479.4799 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

Saponite_NH4Fe(avg)
(NH4)0.45(Fe2.9Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 7.9 H+ + 2.05 H2O = + 0.45 NH4+ + 2.9 Fe+2 + 0.025 O2 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 10.5058 # +/- 3
delta_h -42.0 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression -2.308861E+3 -3.226482E-1 1.397818E+5 8.225271E+2 -7.872108E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1100.6 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1189.1 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 105.4 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 94.486 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 148.368 cm3/mol
# mole wt. = 477.2212 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

Saponite_Sap-Ca-1 # from Ballarat. Parent mineral for other saponites
Na0.394K0.021Ca0.038(Mg2.948Fe0.021Mn0.001)(Al0.397Fe0.034Si3.569)O10(OH)2 + 7.69 H+ + 2.293 H2O = + 0.394 Na+ + 0.021 K+ + 0.038 Ca+2 + 2.948
Mg+2 + 0.055 Fe+2 + 0.0085 O2 + 0.001 Mn+2 + 0.397 Al+3 + 3.569 Si(OH)4
log_k 30.4222 # +/- 1.9
delta_h -66.39 kcal/mol # +/- 2.2
analytical_expression -2.412978E+3 -3.311994E-1 1.512797E+5 8.595444E+2 -8.190283E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [2013GA1/BLA]
# delfG0 = -1343.74 +/- 1.2 kcal/mol *
# delfH0 = -1432.56 +/- 1.2 kcal/mol
# SOPrTr = 75.19 +/- 0.4 cal/mol/K
# CpPrTr = 82.93 +/- 0.4 cal/mol/K
# mole vol. = 141.660 cm3/mol
# mole wt. = 391.1371 g/mol
# date: 22. Mar. 2019

Scolecite
Ca8(Al16Si24O80)(H2O)24 + 64 H+ = + 8 Ca+2 + 16 Al+3 + 24 Si(OH)4 + 8 H2O
log_k 133.2023 # +/- 10
delta_h -457.6 kcal/mol # +/- 15
analytical_expression -1.811197E+4 -2.619261E+0 1.102769E+6 6.464466E+3 -5.942715E+7
#
# -Range: 0.01 - 197 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 470K
# data source: [1983JOH/FLO][2001ARM/GUN]
# delfG0 = -10703.2 +/- 8 kcal/mol
# delfH0 = -11565.6 +/- 8 kcal/mol
# SOPrTr = 702.56 +/- 1.6 cal/mol/K
# CpPrTr = 731.95 +/- 1.6 cal/mol/K
# mole vol. = 1380.720 cm3/mol
# mole wt. = 3138.6968 g/mol
# date: 25. Aug. 2016

Scolecite_II
Ca8(Al16Si24O80)(H2O)24 + 64 H+ = + 8 Ca+2 + 16 Al+3 + 24 Si(OH)4 + 8 H2O
log_k 112.8247 # +/- 12
delta_h -430 kcal/mol # +/- 30
analytical_expression -1.765825E+4 -2.526034E+0 1.078542E+6 6.291759E+3 -5.882982E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -10731 +/- 10 kcal/mol
# delfH0 = -11593 +/- 20 kcal/mol
# SOPrTr = 701.5 +/- 90 cal/mol/K
# CpPrTr = 759.293 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1380.720 cm3/mol
# mole wt. = 3138.6998 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

Sepiolite
Mg4Si6O15(OH)2(H2O)6 + 8 H+ + 1 H2O = + 4 Mg+2 + 6 Si(OH)4
log_k 31.5223 # +/- 3.8
delta_h -53.420 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.233721E+3 -4.226828E-1 1.985558E+5 1.152414E+3 -1.122471E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1988STO]
# delfG0 = -2211.77 +/- 3.7 kcal/mol
# delfH0 = -2418.574 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 146.600 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 168.003 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 285.600 cm3/mol

```

```

# mole wt. = 647.8305 g/mol
# date: 16. Jul. 2015

Siderite
FeCO3 + 1 H+ = 1 Fe+2 + 1 HCO3-
log_k -0.2008 # +/- 0.47
delta_h -7.070 kcal/mol # +/- 1.62
analytical_expression -9.388847E+2 -1.474651E-1 5.304876E+4 3.392438E+2 -3.085281E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1984ROB/HAS][2013LEM/BER]
# delfG0 = -162.426 +/- 0.22 kcal/mol
# delfH0 = -179.878 +/- 0.22 kcal/mol
# SOPrTr = 22.82 +/- 0.5 cal/mol/K
# CpPrTr = 19.65 +/- 0.5 cal/mol/K
# mole vol. = 29.378 cm3/mol
# mole wt. = 115.8542 g/mol
# date: 17. Jul. 2015

Silicon
Si + 2 H2O + 1 O2 = 1 Si(OH)4
log_k 149.1559 # +/- 0.51
delta_h -209.61 kcal/mol # +/- 0.49
analytical_expression -5.417757E+2 -7.561821E-2 7.946937E+4 1.912164E+2 -2.330523E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 4.496 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 4.739 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 12.054 cm3/mol
# mole wt. = 28.0855 g/mol
# date: 30. Oct. 2015

Sillimanite
Al2SiO5 + 6 H+ = + 2 Al+3 + 1 Si(OH)4 + 1 H2O
log_k 14.4556 # +/- 0.7
delta_h -56.73 kcal/mol # +/- 1.0
analytical_expression -1.298906E+3 -1.979311E-1 8.217135E+4 4.619205E+2 -4.108878E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995ROB/HEM]
# delfG0 = -582.96 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -618.09 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 22.80 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 29.58 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 49.860 cm3/mol
# mole wt. = 162.0456 g/mol
# date: 7. Sep. 2016

SiO2(am)
SiO2 + 2 H2O = 1 Si(OH)4
log_k -2.7004 # +/- 0.04
delta_h 3.502 kcal/mol # +/- 1.08
analytical_expression -2.581059E+2 -3.437350E-2 1.465276E+4 9.195322E+01 -9.800371E+5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1935HIT][1954ALE/HES][1957GRE/PRI][1958ELM/NOR][1959PIR][1960KIT_b]
# [1977FOU/ROW][1980MAR/WAR][1982CHE/MAR][2000GUN/ARN]
# delfG0 = -203.215 +/- 0.43 kcal/mol
# delfH0 = -216.009 +/- 0.97 kcal/mol
# SOPrTr = 10.59 +/- 2.9 cal/mol/K
# CpPrTr = 8.30 +/- 4.4 cal/mol/K
# mole vol. = 29.000 cm3/mol
# mole wt. = 60.0843 g/mol
# date: 17. Jul. 2015

Smithsonite
ZnCO3 + 1 H+ = 1 Zn+2 + 1 HCO3-
log_k 0.4633 # +/- 0.2
delta_h -7.30 kcal/mol # +/- 0.2
analytical_expression -9.686410E+2 -1.510854E-1 5.473887E+4 3.500610E+2 -3.168451E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -174.85 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -194.26 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 19.70 +/- 2.0 cal/mol/K
# CpPrTr = 19.14 +/- 0.2 cal/mol/K
# mole vol. = 28.275 cm3/mol
# mole wt. = 125.3992 g/mol
# date: 5. May. 1978

SnO2(am)
SnO2 + 2 H+ = 1 Sn+2 + 0.5 O2 + 1 H2O
log_k -45.1085 # +/- 0.4
delta_h 65.28 kcal/mol # +/- 1.5
analytical_expression -1.784805E+2 -2.684501E-2 -5.175639E+3 6.612598E+1 -4.346290E+5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for SnO2(am) + 2 H2O = Sn(OH)4(aq)
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][19980DA/AMA]
# delfG0 = -122.82 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -137.15 +/- 1.5 kcal/mol *
# SOPrTr = 13.2 +/- 5 cal/mol/K
# CpPrTr = 16.5 +/- 5 cal/mol/K
# mole vol. = 27.846 cm3/mol
# mole wt. = 150.7088 g/mol
# date: 03. Jul. 2018

SO3_beta
SO3 + 1 H2O = + 2 H+ + 1 SO4-2
log_k 23.3404 # +/- 1.0
delta_h -41.13 kcal/mol # +/- 1.0
analytical_expression 2.334040E+1 0.000000E+0 0.000000E+0 0.000000E+0 0.000000E+0
#
# -Range: 25 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]

```

```

# extrapolation algorithm: Not used, Tmax for Cp = 298K
# data source: [1974MIL]
# delfG0 = -89.40 +/- 1.3 kcal/mol
# delfH0 = -107.95 +/- 1.0 kcal/mol
# SOPrTr = 19.0 +/- 3 cal/mol/K
# CpPrTr = 999999 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 41.700 cm3/mol
# mole wt. = 80.0642 g/mol
# date: 31. Mar. 2017

Sodium # Natrium
Na + 1 H+ + 0.25 O2 = 1 Na+ + 0.5 H2O
log_k      67.3805 # +/- 0.10
delta_h    -90.866 kcal/mol # +/- 0.03
analytical_expression  -2.093632E+02  -2.836235E-02  3.239975E+04  7.498574E+01  -8.010895E+05
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 12.261 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = 6.715 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 23.799 cm3/mol
# mole wt. = 22.9898 g/mol
# date: 30. Oct. 2015

Spessartine
Mn3Al2Si3O12 + 12 H+ = + 3 Mn+2 + 2 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k      40.3352 # +/- 1.9
delta_h    -102.68 kcal/mol # +/- 1.9
analytical_expression  -2.889600E+3  -4.216507E-1  1.815242E+5  1.031545E+3  -9.393998E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [2009DAC/GEI]
# delfG0 = -1282.08 +/- 0.4 kcal/mol *
# delfH0 = -1360.80 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 80.14 +/- 0.8 cal/mol/K
# CpPrTr = 80.36 +/- 2.4 cal/mol/K
# mole vol. = 117.900 cm3/mol
# mole wt. = 495.0263 g/mol
# date: 20. Mar. 2019

Sphalerite
ZnS + 2 O2 = 1 Zn+2 + 1 SO4-2
log_k      126.8893 # +/- 0.9
delta_h    -199.26 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression  -2.253784E+3  -3.527463E-1  1.726657E+5  8.084026E+2  -8.321253E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1974MIL][1974STU][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -47.93 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -49.00 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 14.020 +/- 0.04 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.771 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 23.830 cm3/mol
# mole wt. = 97.4560 g/mol
# date: 5. May. 1978

Spinel
MgAl2O4 + 8 H+ = 1 Mg+2 + 2 Al+3 + 4 H2O
log_k      37.6274 # +/- 1.0
delta_h    -95.2 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  -1.392840E+3  -2.184470E-1  9.304249E+4  4.968357E+2  -4.076009E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -517.01 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -546.8 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 19.27 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 27.764 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 39.710 cm3/mol
# mole wt. = 142.2657 g/mol
# date: 5. May. 1978

Sr(OH)2(s)
Sr(OH)2 + 2 H+ = 1 Sr+2 + 2 H2O
log_k      27.5141 # +/- 2
delta_h    -36.73 kcal/mol # +/- 2.2
analytical_expression  -3.337231E+2  -4.872001E-2  2.598717E+4  1.211144E+2  -9.856003E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -210.60 +/- 2.3 kcal/mol *
# delfH0 = -231.57 +/- 2.2 kcal/mol
# SOPrTr = 23.2 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 19.7 +/- 2 cal/mol/K
# mole vol. = 39.010 cm3/mol
# mole wt. = 121.6347 g/mol
# date: 9. Mar. 2016

SrO(s)
SrO + 2 H+ = 1 Sr+2 + 1 H2O
log_k      41.8752 # +/- 0.6
delta_h    -58.49 kcal/mol # +/- 0.8
analytical_expression  -3.128974E+2  -4.661084E-2  2.990338E+4  1.129606E+2  -9.902726E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -134.32 +/- 0.8 kcal/mol *
# delfH0 = -141.50 +/- 0.8 kcal/mol
# SOPrTr = 13.72 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.810 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 20.690 cm3/mol
# mole wt. = 103.6194 g/mol
# date: 17. Mar. 2016

SrCl2(H2O)6(s)

```

```

SrCl2(H2O)6 = 1 Sr+2 + 2 Cl- + 6 H2O
log_k      1.6830 # +/- 0.2
delta_h    5.66 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression  -1.763639E+3    -2.764212E-1    9.556855E+4    6.430261E+2    -5.682026E+6
#
# -Range: 0.01 - 61 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 334K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -535.35 +/- 0.2 kcal/mol *
# delfH0 = -627.10 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 93.40 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 82.4 +/- 23 cal/mol/K
# mole vol. = 137.929 cm3/mol
# mole wt. = 266.6166 g/mol
# date: 4. Sep. 2017

SrCl2(s)
SrCl2 = 1 Sr+2 + 2 Cl-
log_k      8.1349 # +/- 0.5
delta_h    -13.44 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression  -1.600678E+3    -2.523434E-1    9.271335E+4    5.800654E+2    -5.532298E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -186.42 +/- 0.6 kcal/mol *
# delfH0 = -198.10 +/- 0.6 kcal/mol
# SOPrTr = 27.440 +/- 0.04 cal/mol/K
# CpPrTr = 18.214 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 51.976 cm3/mol
# mole wt. = 158.5254 g/mol
# date: 30. Aug. 2017

Stilbite
NaCa4(Al9Si27O72)(H2O)30 + 36 H+ + 6 H2O = 1 Na+ + 4 Ca+2 + 9 Al+3 + 27 Si(OH)4
log_k      28.0151 # +/- 12
delta_h    -194.0 kcal/mol # +/- 30
analytical_expression  -1.400860E+4    -1.916480E+0    8.415345E+5    4.982756E+3    -4.836145E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -9710.1 +/- 12 kcal/mol
# delfH0 = -10557.7 +/- 26 kcal/mol
# SOPrTr = 829.1 +/- 98 cal/mol/K
# CpPrTr = 743.804 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1330.596 cm3/mol
# mole wt. = 2876.8599 g/mol
# date: 27. Jul. 2016

#Stilbite_II
Na2Ca4(Al10Si26O72)(H2O)28 + 40 H+ + 4 H2O = + 2 Na+ + 4 Ca+2 + 10 Al+3 + 26 Si(OH)4
log_k      42.8973 # +/- 12
delta_h    -228.074 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.400438E+4    -1.904212E+0    8.517402E+5    4.973676E+3    -4.878402E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -9669.4 +/- 12 kcal/mol
# delfH0 = -10497.188 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 798.600 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 751.064 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1299.820 cm3/mol
# mole wt. = 2862.7120 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

Stilbite_Ca
Ca4.5(Al9Si27O72)(H2O)30 + 36 H+ + 6 H2O = + 4.5 Ca+2 + 9 Al+3 + 27 Si(OH)4
log_k      26.9662 # +/- 12
delta_h    -194.5 kcal/mol # +/- 30
analytical_expression  -1.400863E+4    -1.920716E+0    8.412720E+5    4.983242E+3    -4.836888E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -9715.0 +/- 12 kcal/mol
# delfH0 = -10564.6 +/- 26 kcal/mol
# SOPrTr = 813.2 +/- 98 cal/mol/K
# CpPrTr = 741.628 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1330.596 cm3/mol
# mole wt. = 2873.9092 g/mol
# date: 26. Aug. 2016

Stratlingite_Al # Gehlenite hydrate
(Ca2Al(OH)6)(AlSiO2(OH)4)(H2O)3 + 10 H+ = + 2 Ca+2 + 2 Al+3 + 1 Si(OH)4 + 11 H2O
log_k      49.6547 # +/- 0.5
delta_h    -94.89 kcal/mol # +/- 2.0
analytical_expression  -1.963200E+3    -2.969405E-1    1.245000E+5    7.066762E+2    -5.761437E+6
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1964TUR][1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][1992BEN/REA][1992ATK/BEN][1994ATK/GLA]
# [1994QU1/MAJ][1999GLA/TYR][2000COU][2007MAT/LOT][2015LHO/LOT][2015MYE]
# delfG0 = -1366.06 +/- 1.4 kcal/mol
# delfH0 = -1522.70 +/- 1.8 kcal/mol *
# SOPrTr = 130.14 +/- 3.7 cal/mol/K
# CpPrTr = 143.67 +/- 6.8 cal/mol/K
# mole vol. = 216.714 cm3/mol
# mole wt. = 418.3219 g/mol
# date: 25. Jan. 2019

Stratlingite_Fe
(Ca2Fe(OH)6)(FeSiO2(OH)4)(H2O)3 + 8 H+ = + 2 Ca+2 + 2 Fe+2 + 0.5 O2 + 1 Si(OH)4 + 10 H2O
log_k      29.2397 # +/- 10
delta_h    -37.228 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.496109E+3    -2.172993E-1    8.798665E+4    5.429262E+2    -4.303108E+6
#
# -Range: 0.01 - 80 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][Unpublished]
# delfG0 = -1145.9 +/- 14 kcal/mol
# delfH0 = -1300.230 +/- 999999 kcal/mol *

```

```

# SPrTr = 137.300 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 158.991 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 227.000 cm3/mol
# mole wt. = 476.0529 g/mol
# date: 31. Jan. 2018

Strontianite
SrCO3 + 1 H+ = 1 Sr+2 + 1 HCO3-
log_k 1.0643 # +/- 0.06
delta_h -3.89 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression -9.035237E+2 -1.416687E-1 5.096156E+4 3.273439E+2 -3.030006E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1984BUS/PLU]
# delfG0 = -273.59 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -292.68 +/- 0.3 kcal/mol
# SPrTr = 24.2 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 19.690 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 39.010 cm3/mol
# mole wt. = 147.6292 g/mol
# date: 2. Feb. 2017

Strontium
Sr + 2 H+ + 0.5 O2 = 1 Sr+2 + 1 H2O
log_k 141.782 # +/- 0.24
delta_h -617.774 kcal/mol # +/- 5.74
analytical_expression -4.340950E+2 -6.547147E-2 6.805518E+4 1.554008E+2 -1.545784E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1992GRE/FUG]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SPrTr = 13.313 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = 6.300 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 33.961 cm3/mol
# mole wt. = 87.6200 g/mol
# date: 30. Oct. 2015

Sulfur # Element
S + 1 H2O + 1.5 O2 = + 2 H+ + 1 SO4-2
log_k 93.2189 # +/- 0.61
delta_h -144.733 kcal/mol # +/- 0.18
analytical_expression -3.449863E+3 -5.019896E-1 2.337855E+5 1.234463E+3 -1.297181E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SPrTr = 7.661 +/- 0.01 cal/mol/K
# CpPrTr = 5.440 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 15.610 cm3/mol
# mole wt. = 32.0660 g/mol
# date: 12. Jun. 1998

Sylvite
KCl = 1 K+ + 1 Cl-
log_k 0.8459 # +/- 0.17
delta_h 4.167 kcal/mol # +/- 0.07
analytical_expression -7.213600E+2 -1.137014E-1 3.998401E+4 2.628784E+2 -2.531000E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -97.735 +/- 0.06 kcal/mol
# delfH0 = -104.370 +/- 0.06 kcal/mol
# SPrTr = 19.730 +/- 0.04 cal/mol/K
# CpPrTr = 12.307 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 37.524 cm3/mol
# mole wt. = 74.5510 g/mol
# date: 5. May. 1978

Syngenite
K2Ca(SO4)2 (H2O) = + 2 K+ + 1 Ca+2 + 2 SO4-2 + 1 H2O
log_k -7.2216 # +/- 0.2
delta_h 7.6 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -3.225208E+3 -5.017990E-1 1.808767E+5 1.167318E+3 -1.133400E+7
# -Range: 0.01 - 168 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 441K
# data source: [1934CLA/PAR][1934HIL][2004FRE/V01]
# delfG0 = -689.54 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -761.1 +/- 3 kcal/mol
# SPrTr = 68 +/- 10 cal/mol/K
# CpPrTr = 69.200 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 127.540 cm3/mol
# mole wt. = 328.4170 g/mol
# date: 29. Sep. 2016

Szomolnokite
FeSO4 (H2O) = 1 Fe+2 + 1 SO4-2 + 1 H2O
log_k -1.2395 # +/- 999999
delta_h -10.45 kcal/mol # +/- 1.7
analytical_expression -1.836635E+3 -2.951328E-1 1.022890E+5 6.657975E+2 -5.969540E+6
# -Range: 0.01 - 35 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 308K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013LEM/BER]
# delfG0 = -258.179 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -297.32 +/- 0.4 kcal/mol
# SPrTr = 36.666 +/- 999999 cal/mol/K *
# CpPrTr = 25.987 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 55.900 cm3/mol
# mole wt. = 169.9258 g/mol
# date: 11. Sep. 2017

Talc
Mg3Si4O10(OH)2 + 6 H+ + 4 H2O = + 3 Mg+2 + 4 Si(OH)4
log_k 22.0569 # +/- 2.0
delta_h -46.3 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -2.262941E+3 -3.024478E-1 1.407480E+5 8.052125E+2 -7.942413E+6

```

```

# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL][1997RIM_a]
# delfG0 = -1320.30 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1411.1 +/- 1 kcal/mol
# S0PrTr = 62.340 +/- 0.15 cal/mol/K
# CpPrTr = 79.880 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 136.250 cm3/mol
# mole wt. = 379.2657 g/mol
# date: 5. Sep. 2016

Tenorite
CuO + 2 H+ = 1 Cu+2 + 1 H2O
log_k 7.6621 # +/- 0.4
delta_h -15.42 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression -3.480898E+2 -5.174558E-2 2.172049E+4 1.251383E+2 -1.006268E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -30.56 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -37.20 +/- 0.5 kcal/mol
# S0PrTr = 10.18 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.11 +/- 0.1 cal/mol/K
# mole vol. = 12.220 cm3/mol
# mole wt. = 79.5454 g/mol
# date: 5. May. 1978

Thaumasite
Ca6(Si(OH)6)2(SO4)2(CO3)2(H2O)24 + 6 H+ = + 6 Ca+2 + 2 Si(OH)4 + 2 SO4-2 + 2 HCO3- + 28 H2O
log_k 18.9938 # +/- 0.6
delta_h 0.66 kcal/mol # +/- 5.8
analytical_expression -6.365989E+3 -9.535155E-1 3.560439E+5 2.308889E+3 -2.116353E+7
# -Range: 0.01 - 60 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 333K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][2004MAC/BAR][2013MIT/BAL][2015MAT/GLA]
# delfG0 = -3616.31 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -4155.21 +/- 5.6 kcal/mol *
# S0PrTr = 442 +/- 18 cal/mol/K
# CpPrTr = 510 +/- 16 cal/mol/K
# mole vol. = 663.457 cm3/mol
# mole wt. = 1245.2370 g/mol
# date: 25. Jan. 2019

Thomsonite
Na4Ca8(Al20Si20O80)(H2O)24 + 80 H+ = + 4 Na+ + 8 Ca+2 + 20 Al+3 + 20 Si(OH)4 + 24 H2O
log_k 172.2833 # +/- 11.7
delta_h -572.1 kcal/mol # +/- 24
analytical_expression -1.913930E+4 -2.777912E+0 1.178441E+6 6.824287E+3 -6.213286E+7
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010V1E][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -11021.8 +/- 12 kcal/mol
# delfH0 = -11892.1 +/- 21 kcal/mol
# S0PrTr = 734.3 +/- 81 cal/mol/K
# CpPrTr = 789.258 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1359.600 cm3/mol
# mole wt. = 3226.2431 g/mol
# date: 27. Jul. 2016

Tin
Sn + 2 H+ + 0.5 O2 = 1 Sn+2 + 1 H2O
log_k 47.8177 # +/- 0.3
delta_h -69.0 kcal/mol # +/- 0.2
analytical_expression -7.620432E+2 -1.126805E-1 5.854849E+4 2.737436E+2 -2.691057E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978COX][1985JAC/HEL_b][2012GAM/GRU]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# S0PrTr = 12.230 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 6.391 +/- 0.11 cal/mol/K
# mole vol. = 16.289 cm3/mol
# mole wt. = 118.7100 g/mol
# date: 04. Jul. 2018

TiO2(am)
TiO2 + 2 H2O = + 1 Ti(OH)4
log_k -5.4902 # +/- 0.1
delta_h -5.602 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -6.787948E+2 -9.489527E-2 3.857464E+4 2.411268E+2 -2.171057E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1964NAB/LUK][1969BAB/MAZ][1978HEL/DEL_a][2016SHK]
# delfG0 = -208.15 +/- 1.7 kcal/mol
# delfH0 = -221.165 +/- 999999 kcal/mol *
# S0PrTr = 12.730 +/- 999999
# CpPrTr = 10.837 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 25.132 cm3/mol
# mole wt. = 79.8658 g/mol
# date: 3. Dec. 2019

TiO2(mic)
TiO2 + 2 H2O = + 1 Ti(OH)4
log_k -6.9196 # +/- 0.5
delta_h -3.546 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -6.927178E+2 -9.520616E-2 3.929261E+4 2.456528E+2 -2.261815E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][2001KNA/DIB][2019PIC/PRO]
# delfG0 = -210.10 +/- 1.8 kcal/mol
# delfH0 = -223.221 +/- 999999 kcal/mol *
# S0PrTr = 12.375 +/- 999999
# CpPrTr = 12.002 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 21.976 cm3/mol
# mole wt. = 79.8658 g/mol
# date: 3. Dec. 2019

```

Titanite
 $\text{CaTiSiO}_5 + 2 \text{H}^+ + 3 \text{H}_2\text{O} = + 1 \text{Ca}^{2+} + 1 \text{Ti(OH)}_4 + 1 \text{Si(OH)}_4$
log_k 1.3698 # +/- 1.5
delta_h -16.4 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -1.311497E+3 -1.797626E-1 7.798454E+4 4.668199E+2 -4.462599E+6
-Range: 0.01 - 300 deg C
gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
data source: [1978ROB/HEM][1982PLU/BUS_a][1983BOW/HEL]
delfG0 = -587.13 +/- 1.0 kcal/mol
delfH0 = -621.0 +/- 1 kcal/mol *
SOPrTr = 30.88 +/- 0.2 cal/mol/K
CpPrTr = 33.220 +/- 999999 cal/mol/K
mole vol. = 55.650 cm3/mol
mole wt. = 196.0275 g/mol
date: 3. Dec. 2019

Titanium
 $\text{Ti} + 2 \text{H}_2\text{O} + 1 \text{O}_2 = + 1 \text{Ti(OH)}_4$
log_k 149.9834 # +/- 1.3
delta_h -223.87 kcal/mol # +/- 2.0
analytical_expression -1.305229E+3 -1.807914E-1 1.249559E+5 4.623754E+2 -4.807998E+6
-Range: 0.01 - 300 deg C
gflag: 1 [reported delfG0 used]
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
data source: [1998CHA]
delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
SOPrTr = 7.352 +/- 0.05 cal/mol/K
CpPrTr = 6.03 +/- 0.5 cal/mol/K
mole vol. = 10.637 cm3/mol
mole wt. = 47.8670 g/mol
date: 3. Dec. 2019

Tobermorite_11A
 $\text{Ca}_5\text{Si}_6\text{O}_{16}(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_4.5 + 10 \text{H}^+ + 1.5 \text{H}_2\text{O} = + 5 \text{Ca}^{2+} + 6 \text{Si(OH)}_4$
log_k 65.3975 # +/- 999999
delta_h -88.431 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.226907E+3 -4.285856E-1 2.078464E+5 1.152890E+3 -1.153703E+7
-Range: not reported
gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
data source: [2010BLA/BOU][2012SAS/ART]
delfG0 = -2363.792 +/- 999999 kcal/mol
delfH0 = -2552.937 +/- 999999 kcal/mol
SOPrTr = 165.235 +/- 999999 cal/mol/K
CpPrTr = 182.818 +/- 999999 cal/mol/K
mole vol. = 300.804 cm3/mol
mole wt. = 739.9764 g/mol
date: 23. Jul. 2015

Tobermorite_14A # Plombierite
 $\text{Ca}_5\text{Si}_6\text{O}_{16}(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_9.5 + 10 \text{H}^+ + 3.5 \text{H}_2\text{O} + 5 \text{Ca}^{2+} + 6 \text{Si(OH)}_4$
log_k 62.7770 # +/- 999999
delta_h -72.885 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.235356E+3 -4.218167E-1 2.049174E+5 1.157873E+3 -1.142137E+7
-Range: not reported
gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
data source: [2010BLA/BOU][2012SAS/ART]
delfG0 = -2650.807 +/- 999999 kcal/mol
delfH0 = -2910.067 +/- 999999 kcal/mol
SOPrTr = 208.616 +/- 999999 cal/mol/K
CpPrTr = 232.679 +/- 999999 cal/mol/K
mole vol. = 372.555 cm3/mol
mole wt. = 830.0524 g/mol
date: 23. Jul. 2015

Tobermorite_9A # Riversideite
 $\text{Ca}_5\text{Si}_6\text{O}_{16}(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_2 + 10 \text{H}^+ + 4 \text{H}_2\text{O} = + 5 \text{Ca}^{2+} + 6 \text{Si(OH)}_4$
log_k 70.5813 # +/- 999999
delta_h -95.476 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.259800E+3 -4.446701E-1 2.092545E+5 1.167901E+3 -1.144769E+7
-Range: not reported
gflag: 1 [reported delfG0 used]
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
data source: [1985BAB/MAT]
delfG0 = -2215.000 +/- 999999 kcal/mol
delfH0 = -2375.100 +/- 999999 kcal/mol
SOPrTr = 122.650 +/- 999999 cal/mol/K
CpPrTr = 142.400 +/- 999999 cal/mol/K
mole vol. = 225.434 cm3/mol
mole wt. = 694.9384 g/mol
date: 18. Oct. 2016

#Tobermorite_I(gel) # Superseded by GSH055_CsH165
 $\text{Ca}_2\text{Si}_2.406.8(\text{H}_2\text{O})_3.2 + 4 \text{H}^+ = + 2 \text{Ca}^{2+} + 2.4 \text{Si(OH)}_4 + 0.4 \text{H}_2\text{O}$
log_k 26.7379 # +/- 999999
delta_h -25.145 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.326343E+3 -1.794077E-1 8.212828E+4 4.779372E+2 -4.579217E+6
-Range: 0.01 - 90 deg C
gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
data source: [2008LOT/MAT][2012SAS/ART]
delfG0 = -1001.415 +/- 999999 kcal/mol
delfH0 = -1099.719 +/- 999999 kcal/mol
SOPrTr = 45.849 +/- 999999 cal/mol/K
CpPrTr = 75.930 +/- 999999 cal/mol/K
mole vol. = 140.800 cm3/mol
mole wt. = 314.0058 g/mol
date: 23. Jul. 2015

#Tobermorite_II(gel) # Superseded by GSH055_CsH165
 $\text{Ca}_0.8333\text{Si}_{02.8333}(\text{H}_2\text{O})_1.3333 + 1.6666 \text{H}^+ = + 0.8333 \text{Ca}^{2+} + 1 \text{Si(OH)}_4 + 0.1666 \text{H}_2\text{O}$
log_k 11.1856 # +/- 999999
delta_h -10.548 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -5.526097E+2 -7.474774E-2 3.423219E+4 1.991276E+2 -1.907907E+6
-Range: 0.01 - 90 deg C
gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
data source: [2007MAT/LOT][2008LOT/MAT][2012SAS/ART]
delfG0 = -417.187 +/- 999999 kcal/mol

```

# delfH0 = -458.136 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 19.112 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 31.637 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 58.700 cm3/mol
# mole wt. = 130.8333 g/mol
# date: 23. Jul. 2015

Tremolite
Ca2Mg5Si8O22(OH)2 + 14 H+ + 8 H2O = + 2 Ca+2 + 5 Mg+2 + 8 Si(OH)4
log_k      63.2343 # +/- 3.5
delta_h    -119.0 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -4.730109E+3   -6.429398E-1   2.972970E+5   1.686311E+3   -1.642487E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -2770.25 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -2944.0 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 131.190 +/- 0.30 cal/mol/K
# CpPrTr = 154.882 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 272.920 cm3/mol
# mole wt. = 812.3665 g/mol
# date: 15. Mar. 1990

Truscottite
Ca7Si12O29(OH)4(H2O) + 14 H+ + 14 H2O = + 7 Ca+2 + 12 Si(OH)4
log_k      76.6851 # +/- 999999
delta_h    -113.301 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -5.509065E+3   -7.235315E-1   3.514199E+5   1.961163E+3   -2.044306E+7
#
# -Range: not reported
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [2010BLA/BOU][2012ART/SAS]
# delfG0 = -3781.475 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -4028.551 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 221.558 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 247.156 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 478.730 cm3/mol
# mole wt. = 1167.5993 g/mol
# date: 23. Jul. 2015

Vaterite
CaCO3 + 1 H+ = 1 Ca+2 + 1 HCO3-
log_k      2.4160 # +/- 0.06
delta_h    -6.865 kcal/mol # +/- 0.42
analytical_expression  -8.112371E+2   -1.436844E-1   4.310234E+4   2.983840E+2   -2.346783E+6
#
# -Range: 0.01 - 100 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
# data source: [1982PLU/BUS]
# delfG0 = -269.106 +/- 0.21 kcal/mol
# delfH0 = -287.833 +/- 0.37 kcal/mol
# SOPrTr = 22.05 +/- 2.0 cal/mol/K
# CpPrTr = 14.19 +/- 8.1 cal/mol/K
# mole vol. = 38.000 cm3/mol
# mole wt. = 100.0872 g/mol
# date: 23. Jul. 2015

Vivianite
Fe3(P04)2(H2O)8 + 2 H+ = + 3 Fe+2 + 2 HP04-2 + 8 H2O
log_k      -10.5670 # +/- 0.5
delta_h    -4.1 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression  -3.785239E+3   -5.891155E-1   2.094198E+5   1.369270E+3   -1.246575E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1970ROS][1972NR1_b][1978HEL/DEL_a][1989BAR][1994ALB/TOM][2017060/VIG]
# delfG0 = -1054.15 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1226.2 +/- 3 kcal/mol *
# SOPrTr = 104 +/- 10 cal/mol/K
# CpPrTr = 136.141 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 186.681 cm3/mol
# mole wt. = 501.6054 g/mol
# date: 9. Aug. 2019

Wairakite
Ca8(Al16Si32O96)(H2O)16 + 64 H+ + 16 H2O = + 8 Ca+2 + 16 Al+3 + 32 Si(OH)4
log_k      115.0831 # +/- 999999
delta_h    -467.9 kcal/mol # +/- 20
analytical_expression  -2.004509E+4   -2.840768E+0   1.232206E+6   7.130731E+3   -6.846993E+7
#
# -Range: 0.01 - 130 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 403K
# data source: [1996KIS/NAV][2007NEU/WAN]
# delfG0 = -11870.663 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -12708.8 +/- 12 kcal/mol
# SOPrTr = 766.160 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 769.993 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1528.720 cm3/mol
# mole wt. = 3475.2496 g/mol
# date: 27. Jul. 2016

Wairakite_II
Ca8(Al16Si32O96)(H2O)16 + 64 H+ + 16 H2O = + 8 Ca+2 + 16 Al+3 + 32 Si(OH)4
log_k      91.0867 # +/- 15
delta_h    -401.4 kcal/mol # +/- 36
analytical_expression  -1.987065E+4   -2.807428E+0   1.211226E+6   7.073590E+3   -6.816936E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -11903.4 +/- 15 kcal/mol
# delfH0 = -12775.3 +/- 32 kcal/mol
# SOPrTr = 653 +/- 120 cal/mol/K
# CpPrTr = 761.608 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1524.224 cm3/mol
# mole wt. = 3475.2496 g/mol
# date: 27. Jul. 2016

#Wairakite_III
Ca8(Al16Si32O96)(H2O)16 + 64 H+ + 16 H2O = + 8 Ca+2 + 16 Al+3 + 32 Si(OH)4
log_k      152.6153 # +/- 11
delta_h    -541.388 kcal/mol # +/- 999999

```

```

# analytical_expression -1.965822E+4 -2.761382E+0 1.229673E+6 6.979328E+3 -6.756972E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -11819.46 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -12635.336 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 840.800 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 761.407 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 1494.960 cm3/mol
# mole wt. = 3475.2496 g/mol
# date: 15. Mar. 1990

Whitlockite
Ca3(PO4)2 + 2 H+ = + 3 Ca+2 + 2 HP04-2
log_k -2.3251 # +/- 1
delta_h -30.470 kcal/mol # +/- 1.47
analytical_expression -3.641148E+3 -5.780681E-1 2.080140E+5 1.314247E+3 -1.231252E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978ROB/HEM]
# delfG0 = -920.152 +/- 0.51 kcal/mol
# delfH0 = -976.560 +/- 0.50 kcal/mol
# SOPrTr = 56.40 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 54.406 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 98.660 cm3/mol
# mole wt. = 310.1768 g/mol
# date: 13. Dec. 2016

Witherite
BaCO3 + 1 H+ = 1 Ba+2 + 1 HCO3-
log_k 1.7827 # +/- 0.5
delta_h -2.76 kcal/mol # +/- 0.7
analytical_expression -8.855788E+2 -1.388087E-1 5.006336E+4 3.211805E+2 -3.013635E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1995PAR]
# delfG0 = -271.12 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -289.92 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 26.79 +/- 0.5 cal/mol/K
# CpPrTr = 20.399 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 45.810 cm3/mol
# mole wt. = 197.3362 g/mol
# date: 20. Jun. 2016

Wollastonite
CaSiO3 + 2 H+ + 1 H2O = 1 Ca+2 + 1 Si(OH)4
log_k 14.0070 # +/- 0.8
delta_h -21.0 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression -5.800818E+2 -8.080395E-2 3.787378E+4 2.076941E+2 -2.024155E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -369.23 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -389.6 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 19.60 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 20.38 +/- 2.0 cal/mol/K
# mole vol. = 39.930 cm3/mol
# mole wt. = 116.1617 g/mol
# date: 12. Jun. 2017

Wulfingite # Zn(OH)2-epsilon
Zn(OH)2 + 2 H+ = 1 Zn+2 + 2 H2O
log_k 10.8822 # +/- 0.3
delta_h -18.50 kcal/mol # +/- 0.7
analytical_expression -3.541934E+2 -5.154680E-2 2.275502E+4 1.275057E+2 -1.011663E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978HEL/DEL_a][1986DIR]
# delfG0 = -133.73 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -154.79 +/- 0.7 kcal/mol
# SOPrTr = 19.5 +/- 2 cal/mol/K
# CpPrTr = 20.293 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 32.443 cm3/mol
# mole wt. = 99.4047 g/mol
# date: 24. Mar. 2016

Wurtzite
ZnS + 2 O2 = 1 Zn+2 + 1 SO4-2
log_k 129.1763 # +/- 0.82
delta_h -202.41 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression -2.253628E+3 -3.527336E-1 1.733518E+5 8.083381E+2 -8.322532E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1974STU][1974MIL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -44.81 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -45.85 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 14.064 +/- 0.04 cal/mol/K
# CpPrTr = 10.996 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 23.846 cm3/mol
# mole wt. = 97.4500 g/mol
# date: 5. May. 1978

Xonotlite
Ca6Si6O17(OH)2 + 12 H+ + 5 H2O = + 6 Ca+2 + 6 Si(OH)4
log_k 91.0879 # +/- 999999
delta_h -136.548 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.512081E+3 -4.799285E-1 2.335835E+5 1.254328E+3 -1.252836E+7
# -Range: not reported
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polyhedral model
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [2010BLA/BOU][2012ART/SAS]
# delfG0 = -2262.456 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -2395.511 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 137.114 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 150.249 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 264.212 cm3/mol
# mole wt. = 714.9855 g/mol

```

```

# date: 23. Jul. 2015
Yugawaralite
Ca2(Al4Si12O32)(H2O)8 + 16 H+ + 8 H2O = + 2 Ca+2 + 4 Al+3 + 12 Si(OH)4
log_k 11.1799 # +/- 999999
delta_h -90.86 kcal/mol # +/- 7.7
analytical_expression -6.284510E+3 -8.666522E-1 3.800365E+5 2.233898E+3 -2.206455E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][1996KIS/NAV]
# delfG0 = -4016.540 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -4326.62 +/- 5.0 kcal/mol
# SOPrTr = 291.492 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 289.418 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 531.706 cm3/mol
# mole wt. = 1181.2114 g/mol
# date: 26. Aug. 2016

Yugawaralite II
Ca2(Al4Si12O32)(H2O)8 + 16 H+ + 8 H2O = + 2 Ca+2 + 4 Al+3 + 12 Si(OH)4
log_k 11.9716 # +/- 6
delta_h -86.5 kcal/mol # +/- 13
analytical_expression -6.170777E+3 -8.501211E-1 3.722885E+5 2.194650E+3 -2.159930E+7
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010V1E][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -4015.46 +/- 5.4 kcal/mol
# delfH0 = -4331.0 +/- 12 kcal/mol
# SOPrTr = 272.3 +/- 43 cal/mol/K
# CpPrTr = 274.392 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 528.038 cm3/mol
# mole wt. = 1181.2114 g/mol
# date: 27. Jul. 2016

ZeoliteP_Ca
CaAl2Si2.6609.32(H2O)4 + 8 H+ = 1 Ca+2 + 2 Al+3 + 2.66 Si(OH)4 + 2.68 H2O
log_k 14.9992 # +/- 1.2
delta_h -55.0 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.104669E+3 -3.017424E-1 1.285653E+5 7.500874E+2 -6.900097E+6
#
# -Range: 0.01 - 227 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [1994ATK/GLA][2010V1E][2011ART/SAS_a]
# delfG0 = -1329.0 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -1444.0 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 100.8 +/- 10 cal/mol/K
# CpPrTr = 101.647 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 196.000 cm3/mol
# mole wt. = 389.9241 g/mol
# date: 5. Apr. 2016

Zinc
Zn + 2 H+ + 0.5 O2 = 1 Zn+2 + 1 H2O
log_k 68.8037 # +/- 0.21
delta_h -103.53 kcal/mol # +/- 0.07
analytical_expression -4.897794E+2 -7.348839E-2 4.981667E+4 1.746066E+2 -1.657332E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 9.950 +/- 0.03 cal/mol/K
# CpPrTr = 6.066 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 9.158 cm3/mol
# mole wt. = 65.3900 g/mol
# date: 17. Mar. 2016

Zincite
ZnO + 2 H+ = 1 Zn+2 + 1 H2O
log_k 11.2091 # +/- 0.07
delta_h -21.215 kcal/mol # +/- 0.08
analytical_expression -3.557137E+2 -5.256709E-2 2.355552E+4 1.274918E+2 -1.056002E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = -76.596 +/- 0.07 kcal/mol *
# delfH0 = -83.762 +/- 0.06 kcal/mol
# SOPrTr = 10.43 +/- 0.1 cal/mol/K
# CpPrTr = 9.621 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 14.338 cm3/mol
# mole wt. = 81.3894 g/mol
# date: 17. Mar. 2016

Zoisite
Ca2Al3Si3O12(OH) + 13 H+ = + 2 Ca+2 + 3 Al+3 + 3 Si(OH)4 + 1 H2O
log_k 44.0523 # +/- 1.4
delta_h -117.690 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.992106E+3 -4.437145E-1 1.895229E+5 1.067660E+3 -9.695265E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfG0 = -1549.18 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -1643.691 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 70.740 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 83.099 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 135.900 cm3/mol
# mole wt. = 454.3571 g/mol
# date: 23. Jul. 2015

#-----
# 2. Gases
#-----

Br2(g)
Br2 + 1 H2O = + 2 Br- + 2 H+ + 0.5 O2
log_k -5.9974 # +/- 0.21
delta_h 1.399 kcal/mol # +/- 0.095
analytical_expression -1.184780E+3 -1.865645E-1 6.566107E+4 4.282374E+2 -4.041081E+6

```

```

# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0.743 +/- 0.027 kcal/mol *
# delfH0 = 7.388 +/- 0.026 kcal/mol
# SOPrTr = 58.666 +/- 0.013 cal/mol/K
# CpPrTr = 8.618 +/- 999999 cal/mol/K
# mol vol. = 0.000 cm3/mol
# mol wt. = 159.8080 g/mol
# date: 10. Nov. 2017

CH4(g) # Methane
1 CH4 = 1 CH4
log_k -2.8514 # +/- 0.5
delta_h -3.13 kcal/mol # +/- 1.6
analytical_expression 2.074470E+2 3.454035E-2 -1.355414E+4 -7.585493E+1 1.116699E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -12.12 +/- 0.2 kcal/mol *
# delfH0 = -17.88 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 44.518 +/- 0.02 cal/mol/K
# CpPrTr = 8.543 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 16.0428 g/mol
# date: 23. Jul. 2015

Cl2(g) # Chlorine, element
Cl2 + 1 H2O = + 0.5 O2 + 2 Cl- + 2 H+
log_k 3.0002 # +/- 0.20
delta_h -13.00 kcal/mol # +/- 0.07
analytical_expression -1.185175E+3 -1.879701E-1 6.839292E+4 4.282737E+2 -3.991245E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 53.316 +/- 0.01 cal/mol/K
# CpPrTr = 8.133 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 70.9054 g/mol
# date: 29. Oct. 2015

CO2(g) # Carbon dioxide
CO2 + 1 H2O = 1 H+ + 1 HCO3-
log_k -7.8139 # +/- 0.03
delta_h -2.530 kcal/mol # +/- 0.06
analytical_expression -6.144034E+2 -9.687623E-2 3.443180E+4 2.196679E+2 -2.094464E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -94.254 +/- 0.02 kcal/mol *
# delfH0 = -94.051 +/- 0.02 kcal/mol
# SOPrTr = 51.09 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 8.879 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 44.0098 g/mol
# date: 23. Jul. 2015

F2(g) # Fluorine, element
F2 + 1 H2O = + 0.5 O2 + 2 F- + 2 H+
log_k 55.7195 # +/- 0.31
delta_h -93.4333 kcal/mol # +/- 0.316
analytical_expression -1.302587E+3 -2.028509E-1 9.195760E+4 4.683456E+2 -4.313410E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 48.469 +/- 0.01 cal/mol/K
# CpPrTr = 7.494 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 37.9968 g/mol
# date: 29. Oct. 2015

H2(g) # Hydrogen, element
H2 + 0.5 O2 = 1 H2O
log_k 43.0018 # +/- 0.20
delta_h -66.87 kcal/mol # +/- 0.06
analytical_expression -1.428312E+2 -2.057732E-2 2.298438E+4 4.903725E+1 -5.743409E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 31.233 +/- 0.008 cal/mol/K
# CpPrTr = 6.888 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 2.0159 g/mol
# date: 23. Jul. 2015

H2O(g) # Steam
H2O = 1 H2O
log_k 1.5855 # +/- 999999
delta_h -10.382 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.653353E+1 8.420828E-4 2.854421E+3 3.380064E+0 -6.199135E+3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1990JOH]
# delfG0 = -54.525 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -57.935 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 44.763 +/- 999999 cal/mol/K
# CpPrTr = 9.577 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 18.0153 g/mol
# date: 24. Mar. 1990

```

```

H2S(g) # Hydrogen sulfide
H2S = + 1 HS- + 1 H+
log_k      -7.9751 # +/- 0.2
delta_h    1.080 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -6.801879E+2   -1.049799E-1   3.748273E+4   2.439872E+2   -2.305142E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -8.02 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -4.93 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 49.18 +/- 0.2 cal/mol/K
# CpPrTr = 8.148 +/- 0.05 cal/mol/K
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 34.0818 g/mol
# date: 3. Feb. 2019

N2(g) # Nitrogen, element
N2 + 2 H+ + 3 H2O = + 2 NH4+ + 1.5 O2
log_k      -101.1659 # +/- 0.62
delta_h    136.90 kcal/mol # +/- 0.21
analytical_expression  2.737269E+2   4.126164E-2   -4.787386E+4   -9.767426E+1   1.339037E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 45.796 +/- 0.006 cal/mol/K
# CpPrTr = 6.963 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 28.0134 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

NH3(g) # Ammonia
NH3 + 1 H+ = 1 NH4+
log_k      11.0435 # +/- 0.08
delta_h    -20.870 kcal/mol # +/- 0.10
analytical_expression  -8.078087E+1   -1.071380E-2   8.460485E+3   2.778091E+1   -1.866392E+5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = -3.924 +/- 0.08 kcal/mol *
# delfH0 = -10.980 +/- 0.08 kcal/mol
# SOPrTr = 46.080 +/- 0.05 cal/mol/K
# CpPrTr = 8.483 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 17.0304 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

O2(g) # Oxygen, element
O2 = 1 O2
log_k      -2.8983 # +/- 0.40
delta_h    -2.900 kcal/mol # +/- 0.10
analytical_expression  2.418486E+2   4.028534E-2   -1.490737E+4   -8.873327E+1   1.138319E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 49.031 +/- 0.008 cal/mol/K
# CpPrTr = 7.008 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 31.9988 g/mol
# date: 27. Dec. 1989

S2(g) # Sulfur
S2 + 2 H2O + 3 O2 = + 2 SO4-2 + 4 H+
log_k      200.3842 # +/- 1.2
delta_h    -320.176 kcal/mol # +/- 0.37
analytical_expression  -3.564877E+3   -5.621535E-1   2.752575E+5   1.277239E+3   -1.340304E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = 19.027 +/- 0.07 kcal/mol *
# delfH0 = 30.710 +/- 0.07 kcal/mol
# SOPrTr = 54.506 +/- 0.01 cal/mol/K
# CpPrTr = 7.755 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 64.1320 g/mol
# date: 23. Jul. 2015

SO2(g) # Sulfur dioxide
SO2 + 1 H2O + 0.5 O2 = 1 SO4-2 + 2 H+
log_k      37.7462 # +/- 0.22
delta_h    -76.694 kcal/mol # +/- 0.12
analytical_expression  -1.537418E+3   -2.408788E-1   1.038149E+5   5.501276E+2   -5.552383E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfG0 = -71.724 +/- 0.05 kcal/mol *
# delfH0 = -70.939 +/- 0.05 kcal/mol
# SOPrTr = 59.326 +/- 0.01 cal/mol/K
# CpPrTr = 9.531 +/- 999999 cal/mol/K
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 64.0648 g/mol
# date: 23. Jul. 2015

#-
# END
#-

#-----
# REFERENCES
#-----

# [1889SET]
# Setschenow, J. (1889) 7ber die konstitution der salzl - ungen auf grund ihres verhaltens zu kohlenst off.

```

Zeitschrift f. Physikalische Chemie, 4(1), 117-125.

[1908KOH]
Kohlrausch, F. (1908) Saturated aqueous solutions of sparingly soluble salts (II). The solubilities and their change in temperature. Zeitschrift für Physikalische Chemie, 64, 129-169.

[1908MUL]
Müller, E. (1908) Über die reduzierende und oxydierende kraft von eisensalzen. Zeitschrift für Elektrochemie und Angewandte Physikalische Chemie, 14(7), 76-82 [in German].

[1909KRA]
Krassa, P. (1909) Zur passivität des eisens. Zeitschrift für Elektrochemie und Angewandte Physikalische Chemie, 15(14), 490-500 [in German].

[1910LAM]
Lamb, A.B. (1910) The potential of iron calculated from equilibria measurements. Journal of the American Chemical Society, 32(10), 1214-1220.

[1910WOO]
Wood, J.K. (1910) LXIII.-Amphoteric metallic hydroxides. Part II. Journal of the Chemical Society, Transactions, 97, 878-890.

[1921GLA]
Glasstone, S. (1921) Physical chemistry of the oxides of lead. Part I. The solubility of lead monoxide. Journal of the Chemical Society, 119, 1689-1697.

[1923HEY]
Heyrovsk., J. (1923) The process at the mercury dropping cathode. Part I. The deposition of metals. Transactions of the Faraday Society, 19, 692-702.

[1923KOL]
Kolthoff, I.M. (1923) Die dissoziationskonstante der erdalkalihydroxyde. Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas, 42, 973-979 [in German].

[1924SHI/MCH]
Shipley, J.W., McHaffie, I.R. (1924) Relation of hydrogen ion concentration to the corrosion of iron. Canadian Chemistry and Metallurgy, 8, 121.

[1925GJA]
Gjaldbaek, J.K. (1925) Untersuchungen über die Löslichkeit des magnesiumhydroxyds. II. Löslichkeitsprodukte und die dissoziationskonstante der magnesiumhydroxyde. Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie, 144, 269-288 [in German].

[1925WHI/RUS]
Whitman, W.G., Russell, R.P., Davis, G.H.B. (1925) The solubility of ferrous hydroxide and its effect upon corrosion. Journal of the American Chemical Society, 47, 70-79.

[1928PRY]
Prytz, M. (1928) Komplexbildung in stannochlorid- und stannobromidlösungen. Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie, 172, 147-166.

[1928RAN/SPE]
Randall, M., Spencer, H.M. (1928) Solubility of lead monoxide and basic lead carbonate in alkaline solutions. Journal of the American Chemical Society, 50, 1572-1583.

[1929HUT/MAG]
Hütig, G.F., Magierkiewicz, S., Fuichman, J.Z. (1929) Zur Kenntnis der spezifischen wärmen und dampfdrucke von systemen, die aus wasser und den oxyden des zirkoniums, thoriums und zinns bestehen. Zeitschrift für Physikalische Chemie, Abteilung A, 141, 1-34 [in German].

[1929TOP]
Töpelmann, H. (1929) Die amphoterie des blei(2)- und des blei(4)oxyds. Journal für Praktische Chemie, 121, 320-363.

[1929TRA/NOU]
Travers, A., Nouvel. (1929) Sur la solubilité de Mg(OH)₂ aux températures élevées. Comptes Rendus Hebdomadaires des Séances de l'Académie, 188, 499-501. [in French]

[1930ELD]
Elder, L.L.J. (1930) A comparison of certain hydrogen ion indicator electrodes in the presence of ferric iron. Journal of the Electrochemical Society, 57(1), 383-393.

[1930RIG/DAV]
Righellato, E.C., and Davies, C.W. (1930) The extent of dissociation of salts in water. Part II. Uni-bivalent salts. Transactions of the Faraday Society, 26, 592-600.

[1931FRO/LIH]
Fromherz, H., Lih, K.-H. (1931) Spektroskopische untersuchung der dissoziationsverhältnisse von blei- und thaliohalogeniden in wässrigen lösungen. Zeitschrift für Physikalische Chemie, 153A(1), 321-375 [in German].

[1932JOW/PR1]
Jowett, M., Price, H.I. (1932) Solubilities of the phosphates of lead. Transactions of the Faraday Society, 28, 668-681.

[1932MUR]
Murata, K. (1932) The electrode potential of iron. Part III Corrosion of iron in water in the absence of water and determinations of the solubility product of ferrous hydroxide. Journal of the Society of Chemical Industry, Japan, 35(Supplement), 523B-533B.

[1932RAN/FRA]
Randall, M., Frandsen, M. (1932) Determination of the free energy of ferrous hydroxide from measurements of electromotive force. Journal of the American Chemical Society, 54, 40-46.

[1934AND]
Anderson, C.T. (1934) The heat capacities of magnesium, zinc, lead, manganese and iron carbonates at low temperatures. Journal of the American Chemical Society, 56(4), 849-851.

[1934CLA/PAR]
Clarke, L., Partridge, E.P. (1934) Potassium sulfate from syngenite by high temperature extraction with water. Journal of Industrial and Engineering Chemistry, 26, 897-903.

[1934FLI/WEL]
Flint, E.P., Wells, L.S. (1934) Study of the system CaO-SiO₂-H₂O at 300°C and of the reaction of water on anhydrous calcium silicates. Journal of Research of the National Bureau of Standards, 12, 751-783.

[1934HIL]
Hill, A.E. (1934) Ternary systems XIX. Calcium sulfate, potassium sulfate and water. Journal of the American Chemical Society, 56, 1071-1078.

[1935HIT]
Hitchen, S. (1935) A method for the experimental investigation of hydrothermal solutions, with notes on its application to the solubility of silica. Transactions of the Institute of Mining and Metallurgy, 44, 255-280.

[1936KAP/ZIL]
Kapustinskii, A.F., Zil'berman, A., Veselovskii, B.K. (1936) Chemical equilibrium in inorganic systems: IV. System: Tin-carbon-oxygen. Trudy Vsesoyuznogo Nauchno Issledovatel'skogo Instituta Mineral'nogo Syr'ya, 109, 68-94.

[1936VON/MOS]
Von Nacken, R., Mosebach, R. (1936) Untersuchungen an den vierstoffsystemen $\text{CaO-Al}_2\text{O}_3\text{-CaCl}_2\text{-H}_2\text{O}$ und $\text{CaO-SiO}_2\text{-CaCl}_2\text{-H}_2\text{O}$. Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie, 228, 19-27.

[1937CRA/BRO]
Cranston, J.A., Brown, H.F. (1937) The hydrolysis of salts. II. KCN, CuSO_4 , Na_2SO_4 , $\text{Pb(NO}_3)_2$. Journal of the Royal Technical College, Glasgow, 4, 54-60.

[1938PIT]
Pitzer, K.S. (1938) The heats of solution of cesium perchlorate, rubidium perchlorate, rubidium chlorate, and lead phosphate. Journal of the American Chemical Society, 60(8), 1828-1829.

[1938PIT/SMI]
Pitzer, K.S., Smith, W.V., and Latimer, W.M. (1938) The heat capacity and entropy of barium fluoride, cesium perchlorate and lead phosphate. Journal of the American Chemical Society, 60(8), 1826-1828.

[1939GAR/VEL]
Garret, A.B., Vellenga, S., Fontana, C.M. (1939) The solubility of red, yellow and black lead oxides (2) and hydrated lead oxide in alkaline solution. The character of the lead-bearing ion. Journal of the American Chemical Society, 61, 367-373.

[1939JON]
Jones, F.E. (1939) The quaternary system $\text{CaO-Al}_2\text{O}_3\text{-CaSO}_4\text{-H}_2\text{O}$ at 250°C. Transactions of the Faraday Society, 35, 1484-1510.

[1940BEL]
Belfiori, P. (1940) The effect of alkali nitrites on several difficulty soluble sulfates. Annali di Chimica Applicata, 30, 233-237.

[1940ROL/ERV]
Roller, P.S., Ervin, G., Jr. (1940) The system calcium-silica-water at 30°C. The association of silicate ion in dilute alkaline solution. Journal of the American Chemical Society, 62, 461-471.

[1941GRE]
Greenwald, I. (1941) The dissociation of calcium and magnesium carbonates and bicarbonates. Journal of Biological Chemistry, 141, 789-796.

[1941KEL/SOU]
Kelley, K.K., Southard, J.C., Anderson, C.T. (1941) Thermodynamic properties of gypsum and its hydration products. U.S. Bur. Mines Tech. Paper, Washington, D.C., USA, pp. 73.

[1943DEM]
Deming, W.E. (1943) Statistical adjustment of data. 261 p. John Wiley & Sons, Inc., New York, NY, USA.

[1943VON/RIH]
von Fricke, R., Rihl, S. (1943) Eigenschaften, vergrennungswärme und beständigkeit von eisen(II)-hydroxyd. Zeitschrift für Anorganische und allgemeine Chemie, 251, 414-421.

[1943WEL/CLA]
Wells, L.S., Clarke, W.F., McMurdie, H.F. (1943) Study of the system $\text{CaO-Al}_2\text{O}_3\text{-H}_2\text{O}$ at temperatures of 210°C and 900°C. Journal of Research of the National Bureau of Standards, 30, 367-409.

[1945PED]
Pedersen, K.J. (1945) The acid dissociation of the hydrated lead ion and the formation of polynuclear ions. Kongelige Danske Videnskabernes Selskab, 22.

[1946KEL/SHO]
Kelley, K.K., Shomate, C.H., Young, F.E., Naylor, B.F., Salo, A.E., Juffman, E.H. (1946) Thermodynamic properties of ammonium and potassium alums and related substances with reference to extraction of alumina from clay and alunite. United States Bureau of Mines Technical Paper, 688, p.104. Washington, DC, USA.

[1946NAY]
Naylor, B.F. (1946) High-temperature heat contents of TiO , Ti_2O_3 , Ti_3O_5 , and TiO_2 . Journal of the American Chemical Society, 68, 1077-1080.

[1949LYO/GIA]
Lyon, D.N., Giaque, W.F. (1949) Magnetism and the third law of thermodynamics. Magnetic properties of sulfate. Journal of the American Chemical Society, 71, 1647-1657.

[1949RIC/POP]
Riccoboni, L., Popoff, P., Arich, G. (1949) Comportamento polarografico delle soluzioni di stagno stannoso. Gazzetta Chimica Italiana, 79, 547-587.

[1950ARD]
Arden, T.V. (1950) The solubility products of ferrous and ferrosic hydroxides. Journal of the Chemical Society, 179, 882-885.

[1950KEN]
Kennedy, G.C. (1950) A portion of the system silica-water. Economic Geology, 45, 629-653.

[1951KIN]
King, E.G. (1951) Heats of formation of crystalline calcium orthosilicate, tricalcium silicate and zinc orthosilicate. Journal of the American Chemical Society, 73, 656-658.

[1951MOR/HES]
Morey, G.W., Hesselgesser, J.M. (1951) The solubility of quartz and some other substances in superheated steam at high pressures. American Society of Mechanical Engineers Transactions, 73, 868-875.

[1951TOD]
Todd, S.S. (1951) Low temperature heat capacities and entropies at 298.16 K of crystalline calcium orthosilicate, zinc orthosilicate and tricalcium silicate. Journal of the American Chemical Society, 73, 3277-3278.

[1952LAT]
Latimer, W.M. (1952) Oxidation potentials. Prentice-Hall, New York, NY, USA.

[1952VAN/RHO]
Vanderzee, C.E., Rhodes, D.E. (1952) Thermodynamic data on the stannous chloride complexes from electromotive force measurement. Journal of the American Chemical Society, 74, 3552-3555.

[1953BEL/GE0]
Bell, R.P., George, J.H.B. (1953) Incomplete dissociation of some thallose and calcium salts at different temperatures. Transactions of the Faraday Society, 49, 619-627.

[1953DAN/EIC]

D'Ans, J.D., Eick, H. (1953) Das system CaO₂Al₂O₃-H₂O bei 200°C und das Verhalten der tonerde zemente. Zement Kalk Gips, 6, 197-210.

[1953HEM]
Hemley, J.J. (1953) A study of lead sulfide solubility and its relation to ore deposition. Economic Geology, 48, 113-138.

[1953HER/SMI]
Hershenson, H.M., Smith, M.E., Hume, D.N. (1953) A polarographic, potentiometric and spectrophotometric study of lead nitrate complexes. Journal of the American Chemical Society, 75(3), 507-511.

[1953HIL/GIA]
Hildenbrand, D.L., Giaque, W.F. (1953) Ammonium oxide and ammonium hydroxide. Heat capacities and thermodynamic properties from 15 to 300 deg K. Journal of the American Chemical Society, 75, 2811-2815.

[1953KIN/TOD]
King, E.G., Todd, S.S. (1953) Heat capacities at low temperatures and entropies at 298.160K of stannic and stannous sulfides. Journal of the American Chemical Society, 75, 3023-3024.

[1953LEU/KOL]
Leussing, D.L., Kolthoff, I.M. (1953) The solubility product of ferrous hydroxide and ionization of the aquo-ferrous ion. Journal of the American Chemical Society, 75, 2476-2479.

[1953PAG]
Page, F.M. (1953) The dissociation constant of thiosulphuric acid. Journal of the Chemical Society, 355, 1719-1724.

[1954ALE/HES]
Alexander, G.B., Heston, W.M., Iler, R.K. (1954) The solubility of amorphous silica in water. Journal of Physical Chemistry, 58, 453-455.

[1954BON]
Bonnickson, K.R. (1954) High temperature heat contents of calcium and magnesium ferrites. Journal of the American Chemical Society, 76, 1480-1482.

[1954DIR/POS]
Dirske, T.P., Postmus, C.J., Vandenbosch, R. (1954) A study of alkaline solutions of zinc oxide. Journal of the American Chemical Society, 76, 6022-6024.

[1954FUL/SWI]
Fulton, J.W., Swinehart, D.F. (1954) The equilibria of crystalline zinc hydroxide in dilute hydrochloric acid and sodium hydroxide at 25°C. The first and second acidic dissociation constants of zinc hydroxide. Journal of the American Chemical Society, 76, 864-867.

[1954GIM/MON]
Gimblett, F.G.R., and Monk, C.B. (1954) E.M.F. studies of electrolyte dissociation. Part 7. Some alkali and alkaline earth metal hydroxides in water. Transactions of the Faraday Society, 50, 965-972.

[1954PEP/WEL]
Pepler, R.B., Wells, L.S. (1954) The system of lime, alumina and water from 50°C to 250°C. Journal of Research of the National Bureau of Standards, 52, 75-94.

[1955BIG/PAR]
Biggs, A.I., Parton, H.N., Robinson, R.A. (1955) The constitution of the lead halides in aqueous solution. Journal of the American Chemical Society, 77, 5844-5848.

[1955COU]
Coughlin, J.P. (1955) High temperature heat contents, heats of transition and heat of fusion of anhydrous sodium sulfate. Journal of the American Chemical Society, 77, 868-870.

[1955KIN a]
King, E.G. (1955) Heat capacities at low temperatures and entropies at 298.16 oK of aluminates and ferrites of lithium and sodium. Journal of the American Chemical Society, 77, 3189-3190.

[1955KIN b]
King, E.G. (1955) Heat capacities at low temperatures and entropies at 298.16o K of crystalline calcium and magnesium aluminates. Journal of Physical Chemistry, 59, 218-219.

[1955KIN c]
King, E.G. (1955) Low temperature heat capacity and entropy at 298.16oK of analcite. Journal of the American Chemical Society, 77(8), 2192-2193.

[1955KIV]
Kivalo, P. (1955) Chloro complexes of lead. Suomen Kemistilehti 28B, 155-158.

[1955NAN]
Nancollas, G.H. (1955) Thermodynamics of ion association. Part 1. Lead chloride, bromide and nitrate. Journal of the Chemical Society, 1458-1462.

[1955PAP/RIC]
Papoff, P., Riccoboni, L., Caliumi, M. (1955) Polarographic behavior of chloride solutions of bivalent lead. Gazzetta, 85, 69-102.

[1955VLC]
Vlcek, A.A. (1955) Polarographische halbstufenpotentiale. II. Des einfluss des grundelektrolyten, das extrapolierte halbstufenpotential und das normalredoxpotential im stromzustand. Collection of Czechoslovak Chemical Communications, 20(2), 400-412.

[1956BAL/DAV]
Bale, W.D., Davies, E.W., Monk, C.B. (1956) Spectrophotometric studies of electrolytic dissociation. Transactions of the Faraday Society, 52, 816-823.

[1956COU]
Coughlin, J.P. (1956) Heats of formation of crystalline CaO·Al₂O₃, 12CaO·7Al₂O₃, and 3CaO·Al₂O₃. Journal of the American Chemical Society, 78, 5479-5482.

[1956HUB/HOL]
Huber, E.J.J., Holley, C.E.J. (1956) The heat of combustion of calcium. Journal of Physical Chemistry, 60, 498-499.

[1956KIV/RIN]
Kivalo, P., Ringbom, A. (1956), Polarographic determination of the solubility products of the sulfides of lead and cadmium. Suomen Kemistilehti, 29, 109-113.

[1957GAR]
Garrels, R.M. (1957) Some free energy values from geologic relations. American Mineralogist, 42, 780-791.

[1957GRE/PRI]
Greenberg, S.A., Price, E.W. (1957) The solubility of silica in solution of electrolytes. Journal of Physical Chemistry, 61, 1539-1541.

[1957KIV/LUO]

Kivalo, P., Luoto, R. (1957) Polarographic determination of stability constants using the indicator method. Suomen Kemistilehte, B30, 163-167.

[1958BUT/TAY]
Buttler, F.G., Taylor, H.F.W. (1958) The system CaO-Al₂O₃-H₂O at 50C. Journal of the Chemical Society, 2103-2110.

[1958CAR]
Carlson, E.T. (1958) The system lime-Alumina-water at 10C. Journal of Research of the National Bureau of Standards, 61, 1-11.

[1958ELM/NOR]
Elmer, T.H., Nordberg, L.C. (1958) Solubility of silica in nitric acid solutions. Journal of the American Ceramic Society, 41, 517-520.

[1958GOT]
Gottschal, A.J. (1958) Heats of formation of hydroxy-, fluor- and chlorapatite. Journal of the South African Chemical Institute, 11, 45-52.

[1958GRE]
Greenberg, S.A. (1958) The nature of the silicate species in sodium silicate solutions. Journal of the American Chemical Society, 80, 6508-6511.

[1958ORR/CHR]
Orr, R.L., Christensen, A.U. (1958) High temperature heat contents of stannous and stannic sulfides. Journal of Physical Chemistry, 62(1), 124-125.

[1958SCH/MUL]
Schwarz, R., Muller, W.D. (1958) Zur kenntnis der kieselsauren. XIV. Die wasserlosliche monokieselsaure. Zeitschrift fur Anorganische und Allgemeine Chemie, 296, 273-279.

[1959GRO/WES]
Gronvold, F., Westrum, E.F.J., Chou, C. (1959) Heat capacities and thermodynamic properties of the pyrrhotites FeS and Fe_{0.8775}S from 5 to 3500K. Journal of Chemical Physics, 30, 528-531.

[1959HAT/HIL]
Hatton, W.E., Hildenbrand, D.L., Sinke, G.C., Stull, D.R. (1959) The chemical thermodynamic properties of calcium hydroxide. Journal of the American Chemical Society, 81, 5028-5030.

[1959ING]
Ingri, N. (1959) Equilibrium studies of polyanions IV. Silicate ions in NaCl medium. Acta Chemica Scandinavica, 13, 758-775.

[1959KIN]
King, E.G. (1959) Low-temperature heat capacities and entropies at 298.150K of crystalline lead metasilicate, lead orthosilicate and cadmium metasilicate. Journal of the American Chemical Society, 81, 799-800.

[1959LAG]
Lagerstrom, G. (1959) Equilibrium studies of polyanions III. Silicate ions in NaClO₄ medium. Acta Chemica Scandinavica, 13, 722-736.

[1959PER/TAY]
Percival, A., Taylor, H.F.W. (1959) Monocalcium aluminate hydrate in the system CaO-Al₂O₃-H₂O at 210. Journal of the Chemical Society, 526, 2629-2631.

[1959PIR]
Piryutko, M.M. (1959) The solubility of silicic acid in salt solutions. Russian Chemical Bulletin, 8, 355-360.

[1959UGG]
Uggla, R. (1959) Corrosion and passive states of zinc, lead, and tin in the system water-oxygen-nitrogen-carbon dioxide. Annales Academiae Scientiarum Fennicae A, 97(2), 74p.

[1960CAR/BER]
Carlson, E.T., Berman, H.A. (1960) Some observations on the calcium aluminate carbonate hydrates. Journal of Research of the National Bureau of Standards, 64, 333-341.

[1960CAR/OLI]
Carell, B., Olin, A. (1960) Studies on the hydrolysis of metal ions. 34. The complexation between Pb²⁺ and OH⁻ in Na⁺ (OH⁻, ClO₄⁻) medium. Acta Chemica Scandinavica, 14, 1999-2008.

[1960FOU]
Fournier, R.O. (1960) Solubility of quartz in the temperature interval from 250C to 3000C. Geological Society of America Bulletin, 71, 1867-1868.

[1960KEL]
Kelley, K.K. (1960) Contributions to the data in theoretical metallurgy XIII: High temperature heat content, heat capacities and entropy data for the elements and inorganic compounds. United States Bureau of Mines Bulletin, 584, p.232.

[1960KIT_a]
Kitahara, S. (1960) The solubility of quartz in water at high temperatures and high pressures. Review of Physical Chemistry of Japan, 30 (2), 109-114.

[1960KIT_b]
Kitahara, S. (1960) The polymerization of silicic acid obtained by the hydrothermal treatment of quartz and the solubility of amorphous silica. Review of Physical Chemistry of Japan, 30, 131-137.

[1960OLI]
Olin, A. (1960) Studies on the hydrolysis of metal ions. 25. The hydrolysis of lead(II) in perchlorate medium. Acta Chemica Scandinavica, 14, 126-150.

[1960VAN/DEB]
Van Lier, J.A., de Bruyn, P.L., Overbeek, J.T.G. (1960) The solubility of quartz. Journal of Physical Chemistry, 64, 1675-1682.

[1960VAN/KOL]
van't Riet, B., Kolthoff, I.M. (1960) Studies on formation and aging of precipitates. XLVII. Maxima in particle size of lead sulfate formed under various conditions. Journal of Physical Chemistry, 64(8), 1045-1047.

[1961GAR/TOM]
Garrels, R.M., Tompson, M.E., Siever, R. (1961) Control of carbonate solubility by carbonate complexes. American Journal of Science, 260, 57-66.

[1961GRJ/HER]
Grjotheim, K., Herstad, O., Toguri, J.M. (1961) The aluminum reduction of magnesium oxide II. The vapor pressure of magnesium over the system Al-MgO-CaO. Canadian Journal of Chemistry, 39, 2290-2294.

[1961KEL/KIN]
Kelley, K.K., King, E.G. (1961) Contributions to the data on theoretical metallurgy. XIV. Entropies of the elements and inorganic compounds. United States Bureau of Mines Bulletin, 592, 149p.

[1961KOE/BAR]
Koehler, M.F., Barany, R., Kelley, K.K. (1961) Heats and free energies of formation of ferrites and aluminates
of calcium, magnesium, sodium, and lithium. United States Bureau of Mines Report of Investigations, 5711, 14.

[1961NAS/MER]
N 鑄 算 en, R., Meril 算 en, P., Lepp 算 en, K. (1961) Potentiometric determination of the solubility product of
lead carbonate. Acta Chemica Scandinavica, 15, 913-918.

[1961NYM/ROE]
Nyman, C.J., Roe, D.K., Plane, R.A. (1961) Approximate thermodynamic formation constants of some complexes
of lead(II) and thallium(I) from polarographic data. Journal of the American Chemical Society, 83, 323-326.

[1961WRI/LIN]
Wright, J.M., Lindsay, W.T., and Druga, T.R. (1961) The behaviour of electrolytic solutions at elevated
temperatures as derived from conductance measurements. U.S. Atomic Energy Commission Research and Development
Report WAPD-TM-2014, 36p. Bettis Atomic Power Laboratory, Pittsburgh, PA, U.S.A.

[1962BAR]
Barany, R. (1962) Heats and free energies of formation of some hydrated and anhydrous sodium and
calcium aluminum silicates. United States Bureau of Mines Report of Investigations, 6251, p.17.

[1962GAR/THO]
Garrels, R.M., Thompson, M.E. (1962) A chemical model for seawater at 25oC and one atmosphere
total pressure American Journal of Science, 260(1), 402-418.

[1962GRO/WES]
Gronvold, F., Westrum, E.F.J. (1962) Heat capacities and thermodynamic functions of iron disulfide
(pyrite), iron diselenide, and nickel diselenide from 5 to 350oK. The estimation of standard entropies
of transition metal chalcogenides. Inorganic Chemistry, 1, 36-48.

[1962KEL]
Kelley, K.K. (1962) Heats and free energies of formation of anhydrous silicates. United States Bureau
of Mines Report of Investigations, 5901, 32p.

[1962LIE/STR] (GWB formatted TDB only)
Lietzke, M.H. & Stroughton, R.W. (1962) The calculation of activity coefficients from osmotic coefficient
data. Journal of Physical Chemistry, 66, 508-509.

[1962MOR/FOU]
Morey, G.W., Fournier, R.O., Rowe, J.J. (1962) The solubility of quartz in water in the temperature
interval from 25o to 300oC. Geochimica et Cosmochimica Acta, 26, 1029-1043

[1962SIE]
Siever, R. (1962) Silica solubility, 0o-200oC, and the diagenesis of siliceous sediments. Journal of
Geology, 70, 127-150.

[1963FEI/SCH]
Feitknecht, W., Schindler, P. (1963) Solubility constants of metal oxides, metal hydroxides and
metal hydroxide salts in aqueous solution. Pure and Applied Chemistry, 6(2), 125-206.

[1963LIB/CHI]
Liberti, A., Chiantella, V., Corigliano, F. (1963) Mononuclear hydrolysis of titanium (IV) from
partition equilibria. Journal of Inorganic Nuclear Chemistry, 25, 415-427.

[1963MAR/MAY]
Marcus, Y., Maydan, D. (1963) Anion exchange of metal complexes. VIII. The effect of the secondary
cation. The zinc-chloride system. Journal of Physical Chemistry, 67, 979-983.

[1963MIR/KUL]
Mironov, V.E., Kul'ba, F.Y., Fedorov, V.A., Tikhomirov, O.B. (1963) Influence of the anionic
background on the formation of chloro- and nitrate-complexes of lead(II). Russian Journal of
Inorganic Chemistry, 8(11), 2536.

[1963MES/HUM]
Mesaric, S., Hume, D.N. (1963) A polarographic study of lead fluoride complexes and solubility.
Inorganic Chemistry, 2(4), 788-790.

[1963OET/MCD]
Oetting, F.L., and McDonald, P.J. (1963) The thermodynamic properties of magnesium orthophosphate
and magnesium orthophosphate. Journal of the American Ceramic Society, 67, 2737-2743.

[1963QUI/FRA]
Quist, A.S., Franck, E.U., Jolley, H.R., Marshall, W.L. (1963) Electrical conductances of aqueous solutions
at high temperature and pressure. I. The conductances of potassium sulfate-water solutions from 25 to 800oC
and at pressures up to 4000 bars. Journal of Physical Chemistry, 67, 2453-2459.

[1963WEL/KEL]
Weller, W.W., Kelley, K.K. (1963) Low temperature heat capacities and entropies at 298.15oK of
akermanite, cordierite, gehlenite, and merwinite. United States Bureau of Mines Report of
Investigations, 6343, p.7.

[1964DAU/DAU]
Dauphin, J., Dauphin, S., Chatonier, D., Vialatte, M.-T. (1964) L'hydroxyde ferreux (3e note). Produit
de solubilite relatif a l'ion Fe++ et complexes ferro-chlores. Bulletin de la Societe Chimique de France, 2588-2592.

[1964HUG]
Hugel, R. (1964) Etude de l'hydrolyse de l'ion Pb2+ dans les solutions de perchlorate de sodium. Bulletin de
la Societe Chimique de France(2), 1462-1469.

[1964KOZ]
Kozintseva, T.N. (1964) The solubility of hydrogen sulfide in water at elevated temperatures.
Geochemistry International, 1, 750-756.

[1964NAB/LUK]
Nabivanets, B.I., and Lukachina, V.V. (1964) Hydroxy complexes of Ti(IV). Ukrainskii Khimicheskii
Zhurnal, 30, 1123-1128.

[1964PAN]
Pankratz, L.B. (1964) High temperature heat contents and entropies of muscovite and dehydrated muscovite.
United States Bureau of Mines Report of Investigations 6371, p.6.

[1964PAN/KEL]
Pankratz, L.B. and Kelley, K.K. (1964) High-temperature heat contents and entropies of akermanite,
cordierite, gehlenite, and merwinite. United States Bureau of Mines Report of Investigations 6555, p.7.

[1964PER]
Perrin, D.D. (1964) The hydrolysis of metal ions. Part IV. Nickel (II). Journal of the Chemical
Society, 3644-3648.

[1964SIL/MAR]
Sillen, L.G., Martell, A.E. (1964) Stability constants of metal-ion complexes. Chemical Society,
London, UK.

[1964TUR]
Turriziani, R. (1964) The calcium aluminate hydrates and related compounds. In H.F.W. Taylor, Ed.
The Chemistry of Cements, p. 233-286. Academic Press, London, U.K.

[1964WEI/FYF]
Weill, D.F., Fyfe, W.S. (1964) The solubility of quartz in h₂O in the range 1000-4000 bars and
400-500°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 28, 1243-1255.

[1965AND/BUR]
Anderson, G.M., Burnham, C.W. (1965) The solubility of quartz in supercritical steam. *American Journal
of Science*, 263, 494-511.

[1965AVE]
Aveston, J. (1965) 821. Hydrolysis of sodium silicate: Ultracentrifugation in chloride solutions.
Journal of the Chemical Society, 4444-4448.

[1965BOT/CIA]
Bottari, E., Ciavatta, L. (1965) On the complex formation between lead(II) and fluoride ions. *Journal of
Inorganic Nuclear Chemistry*, 27, 133-141.

[1965GAR/CHR] (PHREEQC formatted TDB only)
Garrels, R.M., Christ, C.L. (1965) *Solutions, minerals and equilibria*. Jones and Bartlett Publishers,
Boston, MA, USA.

[1965GRE/CHA]
Greenberg, S.A., Chang, T.N. (1965) Investigation of the colloidal hydrated calcium silicates.
II. Solubility relationships in the calcium-silica-water system at 25° C. *Journal of Physical
Chemistry*, 69(1), 182-188.

[1965HUG_a]
Hugel, R. (1965) No. 175 - Complexes nitrato de l'ion Pb²⁺. I. - Etude potentiometrique. *Bulletin de la
Sociéte Chimique de France*, 971-975.

[1965HUG_b]
Hugel, R. (1965) No. 312 - Complexes nitrato de l'ion Pb²⁺. II. - Etude polarographique. *Bulletin de la
Sociéte Chimique de France*, 2017-2019

[1966DEE/HOW]
Deer, W.A., Howie, R.A. & Zussman, J. (1966) *An introduction to the rock forming minerals*. 1st Edition.
Longman Scientific and Technical, Harlow.

[1966FAU]
Faurie-Mounier, M.T. (1966) Contribution à l'étude du système Ca-Al₂O₃-H₂O. *Revue des Matériaux de
Construction*, 635-636, 305-312.

[1966FOU/ROW]
Fournier, R.O., Rowe, J.J. (1966) Estimation of underground temperatures from the silica content of
water from hot springs and wet-steam wells. *American Journal of Science*, 264, 685-697.

[1966HAY]
Hays, J.F. (1966) *Lime-alumina-silica*. Year Book - Carnegie Institute of Washington, 65, 234-239.

[1966STR]
Strubel, G. (1966) Die hydrothermale Löslichkeit von Celestin im System SrSO₄-NaCl-H₂O. *Neues
Jahrbuch für Mineralogie*, 1966, 99-107.

[1967BIL/ING]
Bilinski, H., Ingrid, N. (1967) A determination of the formation constant of SiO(OH)₃⁻. *Acta Chemica
Scandinavica*, 21, 2503-2510.

[1967GUB/STE]
Gubeli, A.O., Ste-Marie, J. (1967) Stabilité des complexes hydroxo et produits de solubilité des
hydroxydes de métaux. I. Argent et zinc. *Canadian Journal of Chemistry*, 45, 827-832.

[1967HOL/KLE]
Holm, J.L., Kleppa, O.J., Westrum, E.F. (1967) Thermodynamics of polymorphic transformations in
silica. Thermal properties from 5 to 1070°K and pressure-temperature stability fields for coesite and
stishovite. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 31, 2289-2307.

[1967KIN/BAR]
King, E.G., Barany, R., Weller, W.W., Pankratz, L.B. (1967) Thermodynamic properties of forsterite and
serpentine. United States Bureau of Mines Report of Investigations, 6962, p.19.

[1967MAH/PAN]
Mah, A.D., Pankratz, L.B., Weller, W.W. & King, E.G. (1967) Thermodynamic data for cuprous and cupric
oxides. United States Bureau of Mines Report of Investigations, 7026, 20.

[1967SHU/VIN]
Shuiling, R.D., and Vink, B.W. (1967) Stability relations of some titanium minerals. *Geochimica et
Cosmochimica Acta*, 31, 2399-2411.

[1967WAT/STA]
Waterfield, C.G., Staveley, L.A.K. (1967) Thermodynamic investigation of disorder in the hydrates of
disodium hydrogen phosphate. *Transactions of the Faraday Society*, 63, 2349-2356.

[1968BOU/PEA]
Boucher, M.L., and Peacor, D.R. (1968) The crystal structure of alamosite, PbSiO₃. *Zeitschrift für
Kristallographie*, 126, 98-111.

[1968LAR/CER]
Larson, J.W., Cerutti, P., Garber, H.K., Hepler, L.G. (1968) Electrode potentials and thermodynamic
data for aqueous ions. Copper, zinc, cadmium, iron, cobalt, and nickel. *Journal of Physical Chemistry*, 72,
2902-2907.

[1968NAK]
Nakayama, F.S. (1968) Calcium activity, complex and ion-pair formation in saturated CaCO₃ solutions.
Soil Science, 106(6), 429-434.

[1968NOR/KIE]
Nord, A.G., and Kierkegaard, P. (1968) The crystal structure of Mg₃(PO₄)₂. *Acta Chemica
Scandinavica*, 22, 1466-1474.

[1968ROB]
Roberts, M.H. (1968) Written discussion of 'Crystal structures and properties of cement hydration (hydrated
calcium aluminates and ferrites)' by Schweite, H.E. and Ludwig, U. Proceedings of the Fifth International
Symposium on the Chemistry of Cement, Vol. 2, p. 67-71. October 7-11th 1968. Cement Association of Japan, Tokyo, Japan.

[1968ROB/WAL]
Robie, R.A., Waldbaum, D.R. (1968) Thermodynamic properties of minerals and related substances at
298.15°K (25.0°C) and one atmosphere (1.013 bars) pressure and at higher temperatures. United States
Geological Survey Bulletin, 1259, 1-256.

[1968TRU/HOS]
Truesdell, A.H., Hopstetler, P.B. (1968) Dissociation constants of KSO_4^- from 100–500°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 32, 1019–1022.

[1968ZAH/BAU]
Zahrobsky, R.F., Baur, W.H. (1968) On the crystal chemistry of salt hydrates. V. The determination of the crystal structure $\text{CuSO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (bonattite). *Acta Crystallographica B*, 24, 508–513.

[1969BAB/MAZ]
Babko, A.K., Mazurenko, E.A., and Nabivanets, B.I. (1969) The sulfato-complexes of titanium(IV) in solution. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 14, 1091–1093.

[1969BAR]
Baranova, N.N. (1969) Investigation of the carbonatocomplexes of lead at 250°C and 2000°C. *Zhurnal Neorganicheskoi Khimii*, 14, 1716–1720.

[1969GAR] (GWB formatted TDB only)
Gardner, E.R. (1969) Osmotic coefficients of some aqueous sodium chloride solutions at high temperature. *Transactions of the Faraday Society*, 65, 91–97.

[1969GED/HEP]
Gedansky, L.M., Hepler, L.G. (1969) Thermochemistry of the aqueous manganous ion. *Canadian Journal of Chemistry*, 47(4), 699–701.

[1969HEL]
Helgeson, H.C. (1969) Thermodynamics of hydrothermal systems at elevated temperatures and pressures. *American Journal of Science* 267, 729–804.

[1969LOB/SAV]
Lobanov, F.I., Savostina, V.M., Zerzhenko, L.V., and Peshkova, V.M. (1969) Distribution study of complex formation by titanium (IV) with thenoyltrifluoroacetate and hydroxide ions. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 14, 562–565.

[1969SOR/KOS]
Sorai, M., Kosaki, A., Suga, H. & Seki, S. (1969) Particle size effect on the magnetic and surface heat capacities of Beta-Co(OH)_2 and Ni(OH)_2 crystals between 1.5 and 300 K. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 1, 119–140.

[1969STE/POT]
Stephenson, C.C., Potter, R.L., Maple, T.G., Morrow. (1969) The thermodynamic properties of elementary phosphorus. The heat capacities of two crystalline modifications of red phosphorus, of [alpha] and [beta] white phosphorus from 15 to 300 K. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 1, 59–76.

[1969YEA/MAR]
Yeatts, L.B., Marshall, W.L. (1969) Apparent invariance of activity coefficients of calcium sulfate at constant ionic strength and temperature in the system $\text{CaSO}_4\text{-Na}_2\text{SO}_4\text{-NaNO}_3\text{-H}_2\text{O}$ to the critical temperature of water. Association equilibria. *Journal of Physical Chemistry*, 73, 81–90.

[1970BUT/HUS]
Butler, J.N., Huston, R. (1970) Activity coefficients and ion pairs in the systems sodium chloride – sodium bicarbonate – water and sodium chloride – sodium carbonate – water. *Journal of Physical Chemistry*, 74, 2976–2983.

[1970GAR/NAN]
Gardner, G., Nancollas, G.H. (1970) Complex formation in lead sulfate solution. *Analytical Chemistry*, 42, 794–795.

[1970HEL/MaC]
Helgeson, H.C., MacKenzie, F.T., 1970. Silicate–sea water equilibria in the ocean system. *Deep Sea Research* 17, 877–892.

[1970LIU/LIN] (GWB formatted TDB only)
Liu, C.-T. & Lindsay, W.T.J. (1970) Osmotic coefficients of aqueous sodium chloride solutions from 125 to 130°C. *Journal of Physical Chemistry*, 74, 341–346.

[1970PAN/KIN]
Pankratz, L.B., King, E.G. (1970) High-temperature enthalpies and entropies of chalcopyrite and bornite. *United States Bureau of Mines Report of Investigations*, 7435, 10p.

[1970ROS]
Rosenqvist, I.T. (1970) Formation of vivianite in holocene clay sediments. *Lithos*, 3, 327–334.

[1970SWE/BAE]
Sweeton, F.H., Baes, C.F. (1970) The solubility of magnetite and hydrolysis of ferrous ion in aqueous solutions at elevated temperatures. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 2, 479–500.

[1971BON]
Bond, A.M. (1971) Use of rapid a.c. polarography for the evaluation of complexes of sparingly soluble salts. *Analytica Chimica Acta*, 53, 159–167.

[1971BON/HEF]
Bond, A.M., Heftler, G. (1971) The validity of the polarographic determination of stability constants. *Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry*, 31, 477–485.

[1971CRE/AND]
Crerar, D.A., Anderson, G.M. (1971) Solubility and solvation reactions of quartz in dilute hydrothermal solutions. *Chemical Geology*, 8, 107–122.

[1971DAV/COL]
Davis, J.W., Collins, A.G. (1971) Solubility of barium and strontium sulfates in strong electrolyte solutions. *Environmental Science and Technology*, 5, 1039–1043.

[1971MAC/GEE]
Mackenzie, F.T., Gees, R. (1971) Quartz: Synthesis at earth surface conditions. *Science*, 173, 533–535.

[1971NAK]
Nakayama, F.S. (1971) Thermodynamic functions for the dissociation of $\text{NaHCO}_3^0, \text{NaCO}_3^-, \text{H}_2\text{CO}_3$ and HCO_3^- . *Journal of Inorganic Nuclear Chemistry*, 33, 1287–1291.

[1971NAZ/ANT]
Nazarenko, V.A., Antonovich, V.P., and Nevskaya, E.M. (1971) Spectrophotometric determination of the constants for the mononuclear hydrolysis of titanium(IV) ions. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 16, 530–533.

[1971NRI/AND]
Nriagu, J.O., Anderson, G.M. (1971) Stability of the lead(II) complexes at elevated temperatures. *Chemical Geology*, 7, 171–183.

[1971PAR/WAG]
Parker, V.B., Wagman, D.D., Evans, W.H. (1971) Selected values of chemical thermodynamic properties. *NBS Technical Note 270-6*, p.119, National Bureau of Standards, Washington, DC, USA.

[1971SIL/MAR]

Sillen, L.G., Martell, A.E. (1971) Stability constants of metal-ion complexes. Chemical Society, London, UK.

[1971STU/PRO]
Stull, D.R., Prophet, H. (1971) JANAF thermochemical tables. p.1141, National Bureau of Standards, Washington, DC, USA.

[1971THO/FLE]
Thompson, W.T., Flengas, S.N. (1971) Drop calorimetric measurements on some chlorides, sulfides, and binary melts. Canadian Journal of Chemistry, 49, 1550-1563.

[1971VIE]
Vierling, F. (1971) Etude des equilibres de coordination entre les ions Pb^{2+} and Cl^- par spectrophotometrie dans l'ultraviolet. Bulletin de la Societe Chimique de France, 25-29 [in French].

[1972BON/HEF]
Bond, A.M., Hefter, G. (1972) Stability constant determination in precipitating systems by rapid alternating current polarography. Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry, 34(1), 227-237.

[1972FED/ROB]
Federov, V.A., Robov, A.M., Grigor, T.I., Mironov, V.E. (1972) Lead (II) nitrate complexes. Russian Journal of Inorganic Chemistry, 17, 990-993.

[1972HEF]
Hefter, G. (1972) The use of ion-selective electrodes for the determination of mixed stability constants. Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry, 39, 345-355.

[1972HEM/ROB]
Hemingway, B.S., Robie, R.A. (1972) The heat capacities at low temperatures and entropies at 298.15K of huntite, $CaMg_3(CO_3)_4$, and artinite, $Mg_2(OH)_2(CO_3)(H_2O)_3$. American Mineralogist, 57, 1754-1767.

[1972NIK/YER]
Nikolaeva, N.M., Yerenburg, A.M., Antinina, V.A. (1972) Temperature dependence of the standard potential of halide complexes of gold. Izvestiya Sibirskogo Otdeleniya Akademii SSSR, Seriya Khimicheskikh, 4, 126-129.

[1972NRI_a]
Nriagu, J.O. (1972) Lead orthophosphates. I. Solubility and hydrolysis of secondary lead orthophosphate. Inorganic Chemistry, 11(10), 2499-2503.

[1972NRI_b]
Nriagu, J.O. (1972) Stability of vivianite and ion-pair formation in the system $Fe_3(PO_4)_2-H_3PO_4-H_2O$. Geochimica et Cosmochimica Acta, 36, 459-470.

[1972OHA]
O'Hare, P.A.G. (1972) Thermochemical and theoretical investigations of the sodium-oxygen system. I The standard enthalpy of formation of sodium oxide (Na_2O). Journal of Chemical Physics, 56, 4513-4516.

[1972ROB/HEM]
Robie, R.A., Hemingway, B.S. (1972) The heat capacities at low-temperature and entropies at 298.15 K of nesquehonite, $MgCO_3 \cdot 3H_2O$, and hydromagnesite. American Mineralogist, 57, 1768-1781.

[1972VAN/KIN]
Vanderzee, C.E., King, D.L. (1972) The enthalpies of solution and formation of ammonia. Journal of Chemical Thermodynamics, 4, 675-683.

[1972VIE]
Vierling, F. (1972) Interpretation plus elaborée des equilibres entre les ions Pb^{2+} and Cl^- . Solubilité de $PbCl_2 \cdot 25-H_2O$ dans les solutions $Na+(ClO_4^-, Cl^-)_4M$. Bulletin de la Societe Chimique de France (4), 4096-4099.

[1972WHI/LAN]
Whittemore, D.O., Langmuir, D. (1972) Standard electrode potential of $Fe^{3+} + e^- = Fe^{2+}$ from 5-35°C. Journal of Chemical and Engineering Data, 17, 288-290.

[1973BON/HEF]
Bond, A.M., Hefter, G. (1973) Influence of anion-induced adsorption on half-wave potentials and other polarographic characteristics. Electroanalytical Chemistry and Interfacial Electrochemistry, 42, 1-23.

[1973BRI/BIE]
Brixner, L.H., Bierstedt, P.E., Jaep, W.F., and Barkley, J.R. (1973) $a-Pb_3(PO_4)_2$ - A pure ferroelastic. Materials Research Bulletin, 8, 497-504.

[1973HAA/ROB]
Haas, J.L., Robie, R.A. (1973) Thermodynamic data for wustite, FeO , magnetite, Fe_3O_4 , and hematite, Fe_2O_3 . American Geophysical Union Transactions, 54, 483.

[1973HEM/ROB]
Hemingway, B.S., Robie, R.A. (1973) A calorimetric determination of the standard enthalpies of formation of huntite, $CaMg_3(CO_3)_4$, and artinite, $Mg_2(OH)_2CO_3 \cdot 3H_2O$. United States Geological Survey Journal of Research, 1, 535-541.

[1973HUT/HIG]
Hutchinson, M.H., Higginson, W.C.E. (1973) Stability constants for association between bivalent cations and some univalent anions. Journal of the Chemical Society Dalton Transactions, 1247-1253.

[1973KLI/BAR]
Klintsova, A.P., Barukov, V.L., Vernadsky, V.I. (1973) Solubility of cassiterite in water and in aqueous NaOH solutions at elevated temperatures. Geochemistry International, 10(5), 540-547.

[1973ROB/HEM]
Robie, R.A., Hemingway, B.S. (1973) The enthalpies of formation of nesquehonite, $MgCO_3 \cdot 3H_2O$, and hydromagnesite, $5MgO \cdot 4CO_2 \cdot 5H_2O$. United States Geological Survey Journal of Research, 1, 543-547.

[1974GIB/SCA] (GWB formatted TDB only)
Gibbard, H.F.J., Scothard, G., Rousseau, R.A. & Creek, J.L. (1974) Liquid-vapor equilibrium of aqueous sodium chloride, from 298 to 373K and from 1 to 6 mol kg⁻¹, and related properties. Journal of Chemical and Engineering Data, 19, 281-288.

[1974GRE/MOR]
Gregory, T.M., Moreno, E.C., Patel, J.M., Brown, W.E. (1974) Solubility of $B_2Ca_3(PO_4)_2$ in the system $Ca(OH)_2-H_3PO_4-H_2O$ at 5, 15, 25, and 37°C. Journal of Research of the National Bureau of Standards A Physics and Chemistry, 78A, 667-674.

[1974HEL/KIR_a]
Helgeson, H.C., Kirkham, D.H. (1974) Theoretical predictions of the thermodynamic properties of aqueous electrolytes at high pressures and temperatures. II. Debye-Huckel parameters for activity coefficients and relative partial molal properties. American Journal of Science, 274, 1199-1261.

[1974HEL/KIR_b]
Helgeson, H.C., Kirkham, D.H. (1974) Theoretical predictions of the thermodynamic properties of

aqueous electrolytes at high pressures and temperatures. I. Summary of the thermodynamic/electrostatic properties of the solvent. *American Journal of Science*, 274, 1089-1198.

[1974JAC/LAN]
Jacobson, R.L., Langmuir, D. (1974) Dissociation constants of calcite and CaHCO_3^+ from 0 to 50oC. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 38, 301-318.

[1974MIL]
Mills, K.C. (1974) Thermodynamic data for inorganic sulphides, selenides and tellurides. Butterworths, London, UK.

[1974NOR]
North, N.A. (1974) Pressure dependence of SrSO_4 solubility. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 38, 1075-1081.

[1974NRI]
Nriagu, J.O. (1974) Lead orthophosphates IV. Formation and stability in the environment. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 37, 367-377.

[1974OPE]
Openshaw, R. (1974) The low temperature heat capacities of analbite, low albite, microcline, and sanidine. PhD thesis, Princeton University, Princeton, New Jersey, USA.

[1974RAM/MAN]
Ramamoorthy, S., Manning, P.G. (1974) Equilibrium studies of metal-ion complexes of interest to natural waters - VIII Fulvate-phosphate, fulvate-NTA and NTA-phosphate complexes of Pb^{2+} , Cd^{2+} and Zn^{2+} . *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, 36(3), 695-698.

[1974REA]
Reardon, E.J. (1974) Thermodynamic properties of some sulfate, carbonate and bicarbonate ion pairs. Ph.D. Thesis, Department of Geosciences, The Penn State University, PA, USA, 170p.

[1974REA/LAN]
Reardon, E.J., Langmuir, D. (1974) Thermodynamic properties of the ion pairs MgCO_3 and CaCO_3 from 10 to 50oC. *American Journal of Science*, 274, 599-612.

[1974RIC/BRO]
Richardson, D.W. & Brown, R.R. (1974) Enthalpy of formation of malachite $[\text{Cu}_2(\text{CO}_3)(\text{OH})_2]$. United States Bureau of Mines Report of Investigations, 7851, 5p.

[1974SAN/SCH]
Santschi, P.H., Schindler, P.W. (1974) Complex formation in the ternary systems $\text{CaII-H}_4\text{SiO}_4\text{-H}_2\text{O}$ and $\text{MgII-H}_4\text{SiO}_4\text{-H}_2\text{O}$. *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions*, 181-184.

[1974SET/JOH]
Settle, J.L., Johnson, G.K., Hubbard, W.N. (1974) The enthalpy of formation of dicesium monoxide (Cs_2O). *Journal of Chemical Thermodynamics*, 6, 263-269.

[1974SEW]
Seward, T.M. (1974) Determination of the first ionization constant of silicic acid from quartz solubility in borate buffer solutions to 350oC. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 38(11), 1651-1664.

[1974STU]
Stuve, J.M. (1974) Low-temperature heat capacities of sphalerite and wurtzite. United States Bureau of Mines Report of Investigations, 7940, 8p.

[1974VAS/VOR]
Vasil'ev, V.P., Vorob'ev, P.N., Khodakovskii, I.L. (1974) Standard formation potentials at constant pressure for the formation of hydroxyl complexes of titanium and the Ti^{4+} ion in aqueous solution. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 19, 1481-1483.

[1975BAC/TIT]
Bacon, G.E., Titterton, D.H. (1975) Neutron diffraction studies of $\text{CuSO}_4 \cdot 5(\text{H}_2\text{O})$ and $\text{CuSO}_4 \cdot 5(\text{D}_2\text{O})$. *Zeitschrift f. Kristallographie*, 141, 330-341.

[1975FED/BOL]
Fedorov, V.A., Bol'shakova, I.M., Moskalenko, T.G. (1975) Formation of mixed bromo/chloro-complexes of tin(II) in aqueous solutions. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 20, 859-861.

[1975KHO/YEL]
Khodakovskiy, I.L., Yelkin, A.Y. (1975) Measurement of the solubility of zincite in aqueous NaOH at 100, 150 and 200oC. *Geochemistry International*, 12(5), 127-133.

[1975KIN/FER]
King, E.G., Ferrante, M.J., and Pankratz, L.B. (1975) Thermodynamic data for $\text{Mg}(\text{OH})_2$ (brucite). United States Bureau of Mines Report of Investigations, 8041, 13p.

[1975REA]
Reardon, E.J. (1975) Dissociation constants of some monovalent sulfate ion pairs at 25o from stoichiometric activity coefficients. *Journal of Physical Chemistry*, 79, 422-425.

[1975REI/MCC]
Reichle, R.A., McCurdy, K.G., Helper, L.G. (1975) Zinc hydroxide: Solubility product and hydroxy-complex stability constants from 12.5-75oC. *Canadian Journal of Chemistry*, 53, 3841-3845.

[1975TUG/GAN]
Tugarinov, I.A., Ganeyev, I.G., Khodakovskiy, I.L. (1975) Experimental determination of hydrolysis constants of lead ions in aqueous solutions at temperatures up to 300oC. *Geokhimiya*, 9, 1345-1354.

[1976BAE/MES]
Baes, C.F., Mesmer, R.E. (1976) The hydrolysis of cations. John Wiley, Sons Inc., New York, NY, USA.

[1976BIL/HUS]
Bilinski, H., Huston, R., Stumm, W. (1976) Determination of the stability constants of some hydroxo and carbonate complexes of $\text{Pb}(\text{II})$, $\text{Cu}(\text{II})$, $\text{Cd}(\text{II})$ and $\text{Zn}(\text{II})$ in dilute solutions by anodic stripping voltammetry and differential pulse polarography. *Analytica Chimica Acta*, 84, 157-164.

[1976HEL/KIR]
Helgeson, H.C., Kirkham, D.H. (1976) Theoretical prediction of the thermodynamic behavior of aqueous electrolytes at high pressures and temperatures: III. Equation of state for aqueous species at infinite dilution. *American Journal of Science* 276, 97-240.

[1976HEM]
Hem, J.D. (1976) Geochemical controls on lead concentrations in stream water and sediments. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 40, 599-609.

[1976LAR/SOL]
Larson, T.E., Sollo, F.W.J., McGurk, F.F. (1976) Complexes affecting the solubility of calcium carbonate in water - phase II. p.57, Water Resources Center Report 108, University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, IL, USA.

[1976RAM]
Raman, S. (1976) Use of the complexation equilibrium between $\text{Fe}(\text{II})$ and 2,2-bipyridine or 1,10 phenanthroline

in the determination of the formation constant of FeCl⁺. Journal of Inorganic Nuclear Chemistry, 38, 1741-1742.

[1976SMI/MAR]
 # Smith, R.M., Martell, A.E. (1976) Critical stability constants Volume 4: Inorganic Complexes.
 # Springer Science + Business Media, New York, NY, USA, 257p.

[1976YUR/KOL]
 # Yurchenko, E.N., Kolonin G. R., Shironsova, G.P. (1976) Determination of the formation constants
 # of the complexes PbCl⁺ and PbCl₂ at elevated temperatures by analysis of the integral intensities of
 # their individual gaussian absorption bands. Russian Journal of Inorganic Chemistry, 21, 1682-1685.

[1977BUS/MES]
 # Busey, R.H., Mesmer, R.E. (1977) Ionization equilibria of silicic acid and polysilicate formation in
 # aqueous sodium chloride solutions to 300°C. Inorganic Chemistry, 16, 2444-2450.

[1977FOU/ROW]
 # Fournier, R.O., Rowe, J.J. (1977) The solubility of amorphous silica in water at high temperatures
 # and pressures. American Mineralogist, 62, 1052-1056.

[1977HEM/ROB]
 # Hemingway, B.S. & Robie, R.A. (1977) Enthalpies of formation of low albite (NaAlSi₃O₈), gibbsite (Al(OH)₃),
 # and NaAlO₂: revised values for delHof,298 and delGof,298 of some aluminosilicate minerals. United States
 # Geological Survey Journal of Research, 5, 413-429.

[1977McG/HOS]
 # McGee, K.A., Hostetler, P.B. (1977) Activity-product constants of brucite from 100 to 900°C. United
 # States Geological Survey Journal of Research, 5(2), 227-233.

[1977PER/ESS]
 # Perkins, D.I., Essene, E.J., Westrum, E.F.J., Wall, V.J. (1977) Application of new thermodynamic data
 # to grossular phase relations. Contributions to Mineralogy and Petrology, 64, 137-147.

[1977SIE/HOS]
 # Siebert, R.M., Hostetler, P.B. (1977) The stability of the magnesium carbonate ion pair from 100 to 900°C.
 # American Journal of Science, 277, 716-734.

[1977WAL/HEL]
 # Walther, J.V., Helgeson, H.C. (1977) Calculation of the thermodynamic properties of aqueous silica and the
 # solubility of quartz and its polymorphs at high pressures and temperatures. American Journal of Science 277,
 # 1315-1351.

[1977WIL/BAT]
 # Wilhelm, E., Battino, R., Wilcock, R.J. (1977) Low-pressure solubility of gases in liquid water.
 # Chemical Reviews, 77, 219-262.

[1978BER/VAN]
 # Berg, R.L., Vanderzee, C.E. (1978) Thermodynamics of carbon dioxide and carbonic acid: (a) the
 # standard enthalpies of Na₂CO₃(s), NaHCO₃(s) and CO₂(g) in water at 298.15 K; (b) the standard
 # enthalpies of formation, standard gibbs energies of formation, and standard entropies of CO₂(aq),
 # HCO₃⁻(aq), CO₃²⁻(aq), NaHCO₃(s), Na₂CO₃(s), Na₂CO₃.H₂O(s), and Na₂CO₃.10H₂O(s). Journal of Chemical
 # Thermodynamics, 10, 1113-1136.

[1978CHA/NEW]
 # Charlu, T.V., Newton, R.C., Kleppa, O.J. (1978) Enthalpy of formation of some lime silicates by
 # high temperature solution calorimetry, with discussion of high pressure phase equilibria. Geochimica et
 # Cosmochimica Acta, 42, 367-375.

[1978COX]
 # Cox, J.D. (1978) CODATA recommended key values for thermodynamics, 1977 report of the codata task group
 # on key values for thermodynamics, 1977. Journal of Chemical Thermodynamics, 10, 903-906.

[1978CUL/LAT]
 # Culbertson, C.H., Latham, G., Bates, R.G. (1978) Solubilities and activity coefficients of
 # calcium and strontium sulphates in synthetic seawater at 0.50°C and 250°C. Journal of Physical
 # Chemistry, 82, 2693-2699.

[1978HEL/DEL]
 # Helgeson, H.C., Delany, J.M., Nesbitt, H.W., Bird, D.K. (1978) Summary and critique of the
 # thermodynamic properties of rock-forming minerals. American Journal of Science, 278a, 1-229.

[1978HEL/DEL_a]
 # Thermodynamic properties estimated using the additivity principles described in [1978HEL/DEL]

[1978HEL/DEL_b]
 # Composition equivalent to that described in [1978HEL/DEL]

[1978JOH/BAU]
 # Johnson, G.K., Bauman, J.E.Jr. (1978) Equilibrium constants for the aquated iron(II) cation.
 # Inorganic Chemistry, 17(10), 2774-2779.

[1978LIN]
 # Lind, C.J. (1978) Polarographic determination of lead hydroxide formation constants at low
 # ionic strength. Environmental Science and Technology, 12, 1406-1410.

[1978ROB/HEM]
 # Robie, R.A., Hemingway, B.S., Fisher, J.R. (1978) Thermodynamic properties of minerals and related
 # substances at 298.15K and 1 bar (10⁵ pascals) pressure and at higher temperatures. United States
 # Geological Survey Bulletin, 1452, 456.

[1979COR/CRO]
 # Corti, H., Crovetto, R., and Fern  dez-Prini, R. (1979) Aqueous solutions of lithium hydroxide at various
 # temperatures: Conductivity and activity coefficients. Journal of Solution Chemistry, 8, 897-908.

[1979EDE/SAT]
 # Ederova, J. & Satava, V. (1979) Heat capacities of C₃AH₆, C₄A\$H₁₂ and C₆A\$₃H₃₂. Thermochimica Acta, 31, 126-128.

[1979EDE/SAT_a]
 # Heat capacities of Katoite_Al (C₃AH₆), Monosulfate_Al (C₄A\$H₁₂) and Ettringite_Al (C₆A\$₃H₃₂) (see [1979EDE/SAT]
 # are used as parents for all Katoite, AFm (except C bearing phases) and AFt phases respectively, using additive
 # principles described in [1978HEL/DEL].

[1979GIO/BAR]
 # Giordano, T.H., Barnes, H.L. (1979) Ore solution chemistry VI. PbS solubility in bisulfide
 # solutions to 300°C. Economic Geology, 74, 1637-1646.

[1979KOL/NOG]
 # Kolesnik, Y.N., Nogteva, V.V., Arkhipenko, D.K., Orekhov, B.A., Paukov, I.Y. (1979) Thermodynamics of
 # pyrope-grossular solid solutions and the specific heat of grossular at 13-300 K. Geochemistry International,
 # 16, 57-64.

[1979KRU/ROB]
 # Krupka, K.M., Robie, R.A., Hemingway, B.S. (1979) High temperature heat capacities of corundum, periclase,
 # anorthite, CaAl₂Si₂O₈ glass, muscovite, pyrophyllite, KAlSi₃O₈ glass, grossular and NaAlSi₃O₈ glass. American

Mineralogist, 64, 86-101.

[1979PAT/OBR]
Patterson, J.W., O'Brien, J.E. (1979) Control of lead corrosion. Journal American Water Works Association,
71(5), 264-271.

[1979RIC/HOL]
Richardson, C.K., Holland, H.D. (1979) The solubility of fluoride in hydrothermal solutions, an
experimental study. Geochimica et Cosmochimica Acta, 43, 1313-1325.

[1979SHI/CR1]
Shin, P., Criss, C.M. (1979) Standard enthalpies of formation of anhydrous and aqueous magnesium
chloride at 298.15 K. Journal of Chemical Thermodynamics, 11, 663-666.

[1979VAS/GLA]
Vasil'ev, V.P., Glavina, S.R., Shokhova, V.I. (1979) Potentiometric determination of normal Gibbs
free energy of formation of tin(IV) ion in an aqueous solution. Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii,
Khimiya i Khimicheskaya Tekhnologiya, 22, 1082-1085 [in Russian].

[1979WES/ESS]
Westrum, E.F.J., Essene, E.J., Perkins, D.I. (1979) Thermophysical properties of the garnet grossular:
Ca₃Al₂Si₃O₁₂. Journal of Chemical Thermodynamics, 11, 57-66.

[1980HAS/WES]
Haselton, H.T., Westrum, E.F.J. (1980) Low temperature heat capacities of synthetic pyrope, grossular,
and pyrope₆₀grossular₄₀. Geochimica et Cosmochimica Acta, 44, 701-709.

[1980HEM/MON]
Hemley, J.J., Montoya, J.W., Marinenko, J.W., Luce, R.W. (1980) Equilibria in the system al₂o₃-sio₂-
h₂o and some general implications for alteration/mineralization processes. Economic Geology, 75,
210-228.

[1980KAT]
Kato, K. (1980) Die OD-Struktur von bleisillicat Pb₂SiO₄ und bleisillicat-germanat-mischkristall Pb₂(Si,Ge)₄.
Acta Crystallographica B, 36, 2539-2545.

[1980LOV/BRA]
Lovric, M., Branica, M. (1980) Application of ASV for trace metal speciation IV: Determination of
lead-chloride stability constants by rotating mercury coated glassy carbon electrode. Croatica Chemica
Acta, 53, 503-508.

[1980MAR/WAR]
Marshall, W.L., Warakomski, J.M. (1980) Amorphous silica solubilities II. Effect of aqueous salt
solutions at 25°C. Geochimica et Cosmochimica Acta, 44, 915-924.

[1980PRA/PRA]
Prasada, K., Prasada, B. (1980) Dissociation of PbCl₂ in aqueous solutions and related thermodynamic
quantities. Journal of the Indian Chemical Society, 57, 155-159.

[1980SCH]
Schock, M.R. (1980) Response of lead solubility to dissolved carbonate in drinking water. Journal
American Water Works Association, 72, 695-704.

[1980SIP/VAL]
Sipos, L., Valenta, P., Nurnberg, H.W., Branica, M. (1980) Voltametric determination of the stability
constants of the predominant labile lead complexes in sea water. p. 61-76 In M. Branica, and Z. Konrad (Eds).
Lead in the marine environment. Proceedings of the international experts discussion on lead occurrence, fate
and pollution in the Marine Environment, Rovinj, Yugoslavia, 18-22nd October 1977. Pergamon Press, Oxford, UK.

[1980SYL/BRO]
Sylva, R.N., Brown, P.L. (1980) The hydrolysis of metal ions. Part 3. Lead(II). Journal of the Chemical
Society Dalton Transactions, 1577-1581.

[1980TRE/LEB]
Tremaine, P.R., LeBlanc, J.C. (1980) The solubility of nickel oxide and hydrolysis of Ni²⁺ in water
to 573K. Journal of Chemical Thermodynamics, 12, 521-538.

[1980UEM/FRA]
Uematsu, M., & Franck, E.U. (1980) Static dielectric constant of water and steam. Journal of Physical and
Chemical Reference Data, 9, 1291-1304.

[1980ZHA/ZHO]
Zhang, F., Zhou, Z., Lou, Z. (1980) Solubility product and stability of ettringite. Proceedings of the
7th International Symposium on the Chemistry of Cement, Session II, 88-93.

[1981BAE/MES]
Baes, C.F.Jr. & Mesmer, R.E. (1981) The thermodynamics of cation hydrolysis. American Journal of Science,
281, 935-962.

[1981DRU]
Drummond, S.E. (1981) Boiling and mixing of hydrothermal fluids - chemical effects on mineral
precipitation. Ph.D. Pennsylvania State University, University Park, PA, USA.

[1981ELI/ELI]
Eliezer, I., Eliezer, N., Howald, R.A., Viswanadham, P. (1981) Thermodynamic properties
of calcium aluminates. Journal of Physical Chemistry, 85, 2835-2838.

[1981FUJ/KON]
Fujii, K., Kondo, W. (1981) Heterogeneous equilibrium of calcium silicate hydrate in water at
30° C. Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions, 2, 645-651.

[1981LOP/TEL]
Lopez-Echarri, A., Tello, M.J., and Jubindo, M.A.P. (1981) Specific heat behavior of the
ferroelectric PbHPO₄. Solid State Communications, 38, 383-387.

[1981PET/MIL]
Pettine, M., Millero, F.J., Macchi, G. (1981) Hydrolysis of Sn(II) in aqueous solutions.
Analytical Chemistry, 53(7), 1039-1043.

[1981SJO/NOR]
Sjöberg, S., Nordin, A., Ingri, N. (1981) Equilibrium and structural studies of silicon(IV) and
aluminum(III) in aqueous solution ii. Formation constants for the monosilicate ions SiO(OH)³⁻ and
SiO₂(OH)²⁻. A precision study at 25°C in a simplified seawater medium. Marine Chemistry, 10, 521-532.

[1981TUR/WHI]
Turner, D.R., Whitfield, M., Dickson, A.G. (1981) The equilibrium speciation of dissolved components
in freshwater and seawater at 25°C and 1 atm pressure#. Geochimica et Cosmochimica Acta, 45, 855-881.

[1982BAR/McC]
Barbero, J.A., McCurdy, K.G., Tremaine, P.R. (1982) Apparent molal heat capacities and volumes of
aqueous hydrogen sulfide and sodium hydrogen sulfide near 25°C: The temperature dependence of h₂s
ionization. Canadian Journal of Chemistry, 60, 1872-1880.

[1982BEN/MEU]
Bendiab, H., Meullemeestre, J., Schwing, M.J., Vierling, F. (1982) Thermodynamic constants and
electronic-spectra of lead(ii) chloro-complexes in aqueous solutions. *Journal of Chemical Research M*,
2718-2745.

[1982BIL/SCH]
Bilinski, H., Schindler, P. (1982) Solubility and equilibrium constants of lead in carbonate solutions
(25oC, I = 0.3 mol dm⁻³). *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 46, 921-928.

[1982CHE/MAR]
Chen, C.-T., A., Marshall, W.L. (1982) Amorphous silica solubilities iv. Behavior in pure water and
aqueous sodium chloride, sodium sulfate, magnesium chloride, and magnesium sulfate solutions up to
350oC. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 46, 279-287.

[1982DEK]
DeKock, C.W. (1982) Thermodynamic Properties of Selected Transition Metal Sulfates and Their Hydrates.
Information Circular 8910, United States Bureau of Mines, Washington, D.C., U.S.A., 45p.

[1982MAJ/STU]
Majer, V., Stulik, K. (1982) A study of the stability of alkaline-earth metal complexes with fluoride
and chloride ions at various temperatures by potentiometry with ion-selective electrodes. *Talanta*, 29,
145-148.

[1982PLU/BUS]
Plummer, L.N., Busenberg, E. (1982) The solubilities of calcite, aragonite and vaterite in CO₂-H₂O
solutions between 0 and 90oC, and an evaluation of the aqueous model for the system CaCO₃-CO₂-H₂O.
Geochimica et Cosmochimica Acta, 46, 1011-1040.

[1982PLU/BUS_a]
Gibbs free energies and enthalpies were corrected to be consistent with updated values of Gibbs free
energies of Ca⁺² and CO₃⁻² [1988SHO/HEL] together with the solubilities of calcite and aragonite
reported in [1982PLU/BUS].

[1982ROH]
R. I. R. (1982) Trace metal speciation in sea water - A paper electrophoretic approach. *Analytica*
Chimica Acta, 135, 99-110.

[1982WAG/EVA]
Wagman, D.D., Evans, W.H., Parker, V.B., Schumm, R.H., Halow, I., Bailey, S.M., Churney, K.L.,
Nuttall, R.L. (1982) The NBS tables of chemical thermodynamic properties, selected values for inorganic
and c1 and c2 organic substances in SI units. *Journal of Physical and Chemical Reference Data* 11, p.392.
NOTE: Data compiled from earlier NBS reports published by the same authors.

[1983ARN/GUN]
Arnorsson, S., Gunnlaugsson, E., Svavarsson, H. (1983) The chemistry of geothermal waters in iceland.
II. Mineral equilibria and independent variable controlling water compositions. *Geochimica et*
Cosmochimica Acta, 47, 547-566.

[1983BOW/HEL]
Bowers, T.S. & Helgeson, H.C. (1983) Calculation of the thermodynamic and geochemical consequences of
nonideal mixing in the system H₂O-co₂-NaCl on phase relations in geologic systems: Equation of state
for H₂O-CO₂-NaCl fluids at high pressures and temperatures. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 47, 1247-1275.

[1983LEV/KAM]
Levelt-Sengers, J.M.H., Kamgar-Parsi, B., Balfour, F.W., Sengers, J.V. (1983) Thermodynamic properties
of steam in the critical region. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 12, 1-28.

[1983PIT]
Pitzer, K.S. (1983) Dielectric constant of water at very high temperature and pressure. *Proceedings of*
the National Academy of Sciences USA, 80, 4575-4576.

[1983SJO/HAG]
Sjöberg, S., Hagglund, Y., Nordin, A., Ingri, N. (1983) Equilibrium and structural studies of
silicon(IV) and aluminium(III) in aqueous solution. V. Acidity constants of silicic acid and the ionic
product of water in the medium range 0.05-2.0 M Na(Cl) at 25oC. *Marine Chemistry*, 13, 35-44.

[1983WAL/ORV]
Walther, J.V., Orville, P.M. (1983) The extraction-quench technique for determination of the
thermodynamic properties of solute complexes: Application to quartz solubility in fluid mixtures.
American Mineralogist, 68, 731-741.

[1984BEN/BRO]
Bennington, K.O., Brown, R.R., Beyer, R.P. (1984) Thermodynamic properties of aegerine. *United*
States Bureau of Mines Report of Investigations, 8912, 16p.

[1984BUS/PLU]
Busenberg, E., Plummer, L.N., Parker, V.B. (1984) The solubility of strontianite (SrCO₃) in CO₂-H₂O
solutions between 2 and 91oC, the association constants of SrHCO₃⁺(aq) and SrCO₃⁰(aq) between 5 and
80oC, and an evaluation of the thermodynamic properties of Sr²⁺(aq) and SrCO₃(cr) at 25oC and 1 atm
total pressure. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 48, 2021-2035.

[1984HAA/GAL]
Haar, L., Gallagher, J.S., Kell, G.S. (1984) NBS/NRC steam tables. Thermodynamic and transport
properties and computer programs for vapor and liquid states of water in SI units. Hemisphere
Publishing Corporation, Washington, DC, USA.

[1984HOU/KEL]
House, C.I., Kelsall, G.H. (1984) Potential-pH diagrams for the Sn/H₂O-Cl system. *Electrochimica*
Acta, 29 (10), 1459-1464.

[1984MIL/BYR]
Millero, F.J., Byrne, R.H. (1984) Use of Pitzer equations to determine the media effect on the
formation of lead chloro complexes. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 48, 1145-1150.

[1984OLO/OSH]
Olofsson, G., Oshodi, A.A., Qvarnstrom, E., Wadso, I. (1985) Calorimetric measurements on slightly
soluble gases in water. Enthalpies of solution of helium, argon, krypton, xenon, methane, ethane,
propane, 1-butane, and oxygen at 288.15, 298.15 and 308.15 K. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 16,
1041-1052.

[1984ROB/HAS]
Robie, R.A., Haselton, H.T.J., Hemingway, B.S. (1984) Heat capacities and entropies of rhodochrosite
(MnCO₃) and siderite (FeCO₃) between 5 and 600 K. *American Mineralogist*, 69, 349-357.

[1984SEW]
Seward, T.M. (1984) The formation of lead(II) chloride complexes to 300oC: A spectrophotometric study.
Geochimica et Cosmochimica Acta, 48, 121-134.

[1984TAY/LOP]
Taylor, P., Lopata, V.J. (1984) Stability and solubility relationship between some solids in the system
PbO-CO₂-H₂O. *Canadian Journal of Chemistry*, 62, 395-402.

[1985ALL]

Allakhverdov, G.R. (1985) Calculation of the formation constants of singly charged complex ions of bivalent metals in solutions. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 59, 39-41.

[1985BAB/MAT]
Babushkin, V.I., Matveyev, G.M., Mchedlov-Petrosyan, O.P. (1985) Thermodynamics of silicates. Springer-Verlag, Berlin, Germany.

[1985BAR/PAR]
Bard, A.J., Parsons, R., Jordan, J. (1985) Standard potentials in aqueous solution. IUPAC. Marcel Dekker, New York, NY, USA.

[1985G10]
Giordano, T.H. (1985) Anglesite solubilities in water and sodium sulfate solutions to 850C. *EoS*, 66(18), 423.

[1985HEL]
Helgeson, H.C. (1985) Errata II. Thermodynamics of minerals, reactions, and aqueous solutions at high pressures and temperatures: *American Journal of Science* 285, 845-855.

[1985JAC/HEL_a]
Jackson, K.J., Helgeson, H.C. (1985) Chemical and thermodynamic constraints on the hydrothermal transport and deposition of tin: I. Calculation of the solubility of cassiterite at high pressures and temperatures. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 49, 1-22.

[1985JAC/HEL_b]
Jackson, K.J., Helgeson, H.C. (1985) Chemical and thermodynamic constraints on the hydrothermal transport and deposition of tin: II. Interpretation of phase relations in the southeast asian tin belt. *Economic Geology*, 80, 1365-1378.

[1985OHA/BAS]
O'Hare, P.A.G., Basile, L., Appelman, E.H. (1985) Thermochemistry of inorganic sulfur compounds V. Peroxymonosulfate revisited: Standard molar enthalpies of formation of $\text{KHSO}_5 \cdot \text{H}_2\text{O}(\text{cr})$, $\text{KHSO}_5(\text{cr})$, and $\text{HSO}_5^-(\text{aq})$. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 17, 473-485.

[1985SIM/BUS]
Simonson, J.M., Busey, R.H., Mesmer, R.E. (1985) Enthalpies of dilution of aqueous calcium chloride to low molalities at high temperatures. *Journal of Physical Chemistry*, 89, 557-560.

[1985WOO/CRE]
Wood, S.A., Crerar, D.A. (1985) A numerical method for obtaining multiple linear regression parameters with physically realistic signs and magnitudes: Applications to the determination of equilibrium constraints from solubility data. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 49, 165-172.

[1986BUS/PLU]
Busenberg, E., Plummer, L.N. (1986) The solubility of $\text{BaCO}_3(\text{cr})$ (witherite) in CO_2 - H_2O solutions between 0 and 900C, evaluation of the association constants of $\text{BaHCO}_3^+(\text{aq})$ and $\text{BaCO}_3^0(\text{aq})$ between 5 and 800C, and a preliminary evaluation of the thermodynamic properties of $\text{Ba}^{2+}(\text{aq})$. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 50, 2225-2233.

[1986DIR]
Dirkse, T.P. (1986) Copper, silver, gold, and zinc, cadmium, mercury oxides and hydroxides. International Union of Pure and Applied Chemistry Solubility Data Series 23, 360p. Pergamon Press, Oxford, UK.

[1986KAM/EZH]
Kamnev, A.A., Ezhov, B.B., Malandin, O.G., Vasey, A.V. (1986) Investigation of the solution process of goethite ($\alpha\text{-FeOOH}$) in alkaline solutions. *Zhurnal Prikladnoi Khimii* (Russian Journal of Applied Chemistry), 59, 1560-1564.

[1986MEI/GRO]
Meisingset, K.K., Gronvold, F. (1986) Thermodynamic properties and phase transitions of salt hydrates between 270 and 400 K IV. $\text{CaCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{CaCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$, $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, and $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 18, 159-173.

[1986PRI/TAS]
Price, J.S., Tasker, I.R., Appelman, E.H., O'Hare, P.A.G. (1986) Thermochemistry of inorganic sulfur compounds IX. Molar heat capacity of $\text{KHSO}_5(\text{cr})$ from 5 to 300 K, and the partial molar entropy of $\text{HSO}_5^-(\text{aq})$. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 18, 923-930.

[1986RUA/SEW]
Ruaya, J.R., Seward, T.M. (1986) The stability of chlorozinc(II) complexes in hydrothermal solutions up to 3500C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 52, 1539-1550.

[1986SEW/RUA]
Seward, T.M., Ruaya, J.R. (1986) personal communication (as listed in [1997SVE/SHO]).

[1986TUR]
Turriziani, R. (1986) Proceedings of the 8th International Congress on the Chemistry of Cement, Rio de Janeiro, Brazil, 22-27th September. Secretaria de CIQC, p.388.

[1986WAL]
Walther, J.V. (1986) Experimental determination of portlandite solubility and brucite solubilities in supercritical H_2O . *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 50, 733-739.

[1986YIS/RUI]
Yishin, Z., Ruiyang, A., Chen, Y. (1986) Determination of the solubility of Fe_2O_3 in dilute aqueous solutions at 3000C and 10 MPa. *Scientia Sinica Series B*, 29, 1221-1232.

[1987BOU/BAR]
Bourcier, W.L., Barnes, H.L. (1987) Ore solution chemistry - VII. Stabilities of chloride and bisulfide complexes of zinc to 3500C. *Economic Geology*, 82(1839-1863).

[1987BRO/WAN]
Brown, P.L., Wanner, H. (1987) Predicted formation constants using the unified theory of metal ion complexation. OECD/NEA report, Paris, France, 102p.

[1987FER/GRE]
Ferri, D., Grenthe, I., Hietanen, S., Salvatore, F. (1987) Studies on metal carbonate equilibria. 18. Lead carbonate complexation in alkaline solution. *Acta Chemica Scandinavica A*, 41, 349-354.

[1987GAR/PAR]
Garvin, D., Parker, V.B., White, H.J. (1987) CODATA thermodynamic tables. Selections for some compounds of calcium and related mixtures: A prototype set of tables. Springer Verlag, Berlin, Germany.

[1987NOD/MAS]
Noda, Y., Masumoto, K., Ohba, S., Saito, Y., Toriumi, K., Iwata, Y., Shibuya, I. (1987) Temperature dependence of atomic thermal parameters of lead chalcogenides, PbS , PbSe and PbTe . *Acta Crystallographica B*, C43(8), 1443-1445.

[1987REA/ARM]
Reardon, E.J., Armstrong, D.K. (1987) Celestite ($\text{SrSO}_4(\text{s})$) solubility in water, seawater and NaCl solution. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 51(1), 63-72.

[1988BER]
Berman, R.G. (1988) Internally consistent thermodynamic data for minerals in the system Na₂O-K₂O-CaO-MgO-FeO-Fe₂O₃-Al₂O₃-SiO₂-TiO₂-H₂O-CO₂. *Journal of Petrology*, 29, 445-522.

[1988GIE]
Giester, G. (1988) The crystal structures of CuSO₄.H₂O and CuSeO₄.H₂O, and their relationships to kieselite. *Mineralogy and Petrology*, 38(277-284).

[1988OEL/HEL]
Oelkers, E.H., Helgeson, H.C. (1988) Calculation of the thermodynamic and transport properties of aqueous species at high pressures and temperatures. Dissociation constants for supercritical alkali metal halides at temperatures from 400 to 800°C and pressures from 500 to 4000 bars. *Journal of Physical Chemistry*, 92, 1631-1639.

[1988PHI/HAL]
Phillips, S.L., Hale, F.V., Silvester, L., Siegel, M.D. (1988) Thermodynamic tables for nuclear waste isolation. Vol 1. Aqueous solutions database. LBL report LBL-22860, Lawrence Berkeley Laboratory, Berkeley, CA, USA, 181p.

[1988PLY/BEL]
Plyasunov, A.V., Belonozhko, A.B., Ivanov, I.P., Khodakovskiy, I.L. (1988) Solubility of zinc oxide in alkaline solutions at 200-350°C under saturated steam pressure. *Geochemistry International*, 25, 77-85.

[1988SHO/HEL]
Shock, E.L., Helgeson, H.C. (1988) Calculation of the thermodynamic and transport properties of aqueous species at high pressures and temperatures: Correlation algorithms for ionic species and equation of state predictions to 5kb and 1000degC. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 52, 2009-2036.

[1988STO]
Stoessel, R.K. (1988) 250°C and 1 atm dissolution experiments of sepiolite and kerolite. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 52, 365-374.

[1988WHE/CAR]
Wheat, C.G., Carpenter, R. (1988) MnCl⁺ and MnSO₄ association constants at 170°C. *Journal of Solution Chemistry*, 17, 467-480.

[1989BAR]
Bartl, H. (1989) Water of crystallization and its hydrogen-bonded crosslinking in vivianite Fe₃(PO₄)₂·8H₂O: a neutron diffraction investigation. *Zeitschrift für Analytische Chemie*, 333, 401-403.

[1989CAP/MEN]
Capmas, A., Menetrier-Sorrentino, D. (1989) The effect of temperature of the hydration of calcium aluminate cement. *Proceedings of the Unified International Technical Conference on Refractories*, p. 1157-1170, Anaheim, CA, USA.

[1989COX/WAG]
Cox, J.D., Wagman, D.D., Medvedev, V.A. (1989) CODATA key values for thermodynamics. Hemisphere Publishing Corporation, New York, N.Y., U.S.A.

[1989DAI/HUG]
Dai, Y.S., Hughes, J.M. (1989) Crystal structure refinements of vanadinite and pyromorphite. *Canadian Mineralogist*, 27, 189-192.

[1989DOR/MAR]
Dorange, G., Marchand, A., Franco, A. (1989) Solubilité de la calcite et constantes de stabilité de PbOH⁺, PbCO₃ et PbHCO₃⁺. *Tribune de l'eau*, 42(53-59).

[1989GRU/BEN]
Grutzeck, M., Benesi, A., Fanning, B. (1989) Silicon-29 magic angle spinning nuclear magnetic resonance study of calcium silicate hydrates. *Journal of the American Ceramic Society*, 72(4), 665-668.

[1989NYH/WIK]
Nyholm, L., Wikmark, G. (1989) Precise polarographic determination of the stability constants of cadmium and lead with oxalate and sulphate. *Analytica Chimica Acta*, 223, 429-440.

[1989ROB/LEF]
Robert, M.C., and Lefaucheur, F. (1989) Critical remarks about lead phosphate crystal structure determination. *Journal of Crystal Growth*, 94, 814-815.

[1989ROB/RUS]
Robie, R.A., Russell-Robinson, S., Hemingway, B.S. (1989) Heat capacities and entropies from 8 to 1000 K of langbeinite (K₂Mg₂(SO₄)₃), anhydrite (CaSO₄) and of gypsum (CaSO₄·2H₂O) to 325 K. *Thermochemical Acta*, 139, 67-81.

[1989SHO/HEL]
Shock, E.L., Helgeson, H.C., Sverjensky, D.A. (1989) Calculation of the thermodynamic and transport properties of aqueous species at high pressures and temperatures: Standard partial molal properties of inorganic neutral species. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 53, 2157-2183.

[1989TAC/STO]
Tacker, R.C., Stormer, J.C.J. (1989) A thermodynamic model for apatite solid solutions, applicable to high-temperature geologic problems. *American Mineralogist*, 74, 877-888.

[1989WAG/EVA]
Wagman, D.D., Evans, W.E., Parker, V.B., Schumm, R.H., Halow, I., Bailey, S.M., Churney, K.L., Nuttall, R.L. (1989) Erratum: The NBS tables of chemical thermodynamic properties. Selected values for inorganic and C1 and C2 organic substances in SI units. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 18(4), 1807-1812.

[1989WIL/SEW]
Williams-Jones, A.E., Seward, T.M. (1989) The stability of calcium chloride ion pairs in aqueous solutions at temperatures between 100 and 360°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 53, 313-318.

[1990DOR/MAR]
Dorange, G., Marchand, A., Le Guyader, M. (1990) Produit de solubilité de la calcite et constantes de dissociation de CaHCO₃⁺ et CaCO₃ entre 5 et 75°C. *Revue des Sciences de l'Eau*, 3, 261-275.

[1990HEF]
Hefter, G. (1990) Stability constants for the lead(II) halide systems. *Polyhedron*, 9, 2429-2432.

[1990HEI/SEW]
Heinrich, C.A., Seward, T.M. (1990) A spectrophotometric study of aqueous iron (II) chloride complexing from 25 to 200°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 54, 2207-2221.

[1990JOH]
Johnson, J.W., Personal calculation, Earth Sciences Dept., Lawrence Livermore National Lab., Livermore, CA, USA. Parameters given provide smooth metastable extrapolation of one-bar steam properties predicted by the Haar, L., et al. [1984HAA/GAL] equation of state to temperatures < the saturation temperature (99.632°C).

[1990SHO/HEL]

Shock, E.L., Helgeson, H.C. (1990) Calculation of the thermodynamic and transport properties of aqueous species at high pressures and temperatures: Standard partial molal properties of organic species. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 54, 915-945.

[1990SVE]
Sverjensky, D.A. (1990) Thermodynamic properties of aqueous inorganic metal complexes. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, cited as being in preparation, (ref. 5 in SPRONS92.dat).

[1990WIL/EUG]
Wilson, G.A., Eugster, H.P. (1990) Cassiterite solubility and tin speciation in supercritical chloride solutions. In R.J. Spencer, and I.-M. Chou, Eds. *Fluid Mineral Interactions*, p. 179-195. The Geochemical Society, Washington, DC, USA.

[1991ATK/HEA]
Atkinson, A., Hearne, J.A., Knights, C.F. (1991) Aqueous chemistry and thermodynamic modelling of CaO-SiO₂-H₂O gels at 80 oC. Department of the Environment (UK) HMIP Report, DoE/HMIP/RR/91/045, 16p.

[1991ATK/MAC]
Atkins, M., Macphie, D.E., Kindness, A. & Glasser, F.P. (1991) Solubility properties of ternary and quaternary compounds in the CaO-Al₂O₃-SO₃-H₂O system. *Cement and Concrete Research*, 21, 991-998.

[1991BEN/SOM]
Ben Cherifa, A., Somrani, S., Jemal, M. (1991) Détermination de l'enthalpie standard de formation de la fluorapatite de la hydroxyapatite et de la chlorapatite. *Journal de Chimie Physique*, 88, 1893-1900.

[1991JOH/NOR]
Johnson, J.W., Norton, D. (1991) Critical phenomena in hydrothermal systems: State, thermodynamic, electrostatic and transport properties of H₂O in the critical region. *American Journal of Science*, 291, 541-648.

[1991MGA/FUE]
Mgaidi, A., Furst, W., Renon, H. (1991) Representation of the solubility of lead chloride in various chloride solutions with Pitzer's model. *Metallurgical Transactions*, 22B(491-498).

[1991SVE/HEM]
Sverjensky, D.A., Hemley, J.J., d'Angelo, W.M. (1991) Thermodynamic assessment of hydrothermal alkali feldspar-mica-Aluminosilicate equilibria. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 55, 989-1004.
NOTE: Standard molal Gibbs free energy and enthalpy of formation and third law entropy (muscovite), adjusted from [1978HEL/DEL] values according to recommendations by [1991SVE/HEM]

[1991ZHU/SVE]
Zhu, C., Sverjensky, D.A. (1991) Partitioning of F-Cl-OH between minerals and hydrothermal fluids. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 55, 1837-1858.

[1992ATK/BEN]
Atkins, M., Bennett, D.G., Dawes, A.C., Glasser, F.P., Kindness, A., Read, D. (1992) A thermodynamic model for blended cements. HMIP Report DoE/HMIP/RR/92/005, Department of the Environment, UK, 178p.

[1992ATK/GLA]
Atkins, M., Glasser, F.P. & Kindness, A. (1992) Cement hydrate phases: Solubility at 25oc. *Cement and Concrete Research*, 22, 241-246.

[1992BEN/REA]
Bennett, D.G., Read, D., Atkins, M., Glasser, F.P. (1992) A thermodynamic model for blended cements. II: Cement hydrate phases: thermodynamic values and modelling studies. *Journal of Nuclear Materials*, 190, 315-325.

[1992CHE/GIE]
Chevrier, G., Giester, G., Heger, G., Jarosch, D., Wildner, M., Zemann. (1992) Neutron single-crystal refinement of cerussite, PbCO₃, and comparison with other aragonite-type carbonates. *Zeitschrift für Kristallographie*, 199, 67-74.

[1992DAM/ATK]
Damidot, D., Atkins, M., Kindness, A., Glasser, F.P. (1992) Sulphate attack on concrete: Limits of the Aft stability domain. *Cement and Concrete Research*, 22(2-3), 229-234.

[1992DIN/SEY]
Ding, K., Seyfried, W.E.J. (1992) Determination of Fe-Cl complexing in the low pressure supercritical region (NaCl fluid): Iron solubility constraints on pH of seafloor hydrothermal vents. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 56, 3681-3692.

[1992FEI/HEM]
Fein, J.B., Hemley, J.J., d'Angelo, W.M., Komninou, A., Sverjensky, D.A. (1992) Experimental study of iron-chloride complexing in hydrothermal fluids. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 56, 3179-3190.

[1992GIL/OSC]
Gillespie, S.E., Oscarson, J.L., Chen, X., Izatt, R.M., Pando, C. (1992) Thermodynamic quantities for the interaction of Cl⁻ with Mg²⁺, Ca²⁺ and H⁺ in aqueous solution from 250 to 325oC. *Journal of Solution Chemistry*, 21(8), 761-788.

[1992GRE/FUG]
Grenthe, I., Fuger, J., Konings, R.J.M., Lemire, R.J., Muller, A.B., Nguyen-Trung, C., Wanner, H., Forest, I. (1992) *Chemical thermodynamics of Uranium*. NEA/OECD, OECD Publications, Paris, France.

[1992JAP/GLA]
Jappy, T.G., Glasser, F.P. (1992) Synthesis and stability of silica-substituted hydrogarnet Ca₃A₁₂Si₃XO₁₂-4X(OH)4X. *Advances in Cement Research*, 4(1), 1-8.

[1992JOH/OEL]
Johnson, J.W., Oelkers, E.H., Helgeson, H.C. (1992) Supcrt92: A software package for calculating the standard molal thermodynamic properties of minerals, gases, aqueous species, and reactions from 1 to 5000 bar and 0 to 1000 deg c. *Computers and Geosciences*, 18, 899-947.

[1992NEH]
Neuner-Neumann, E. (1992) Studies on metal carbonate equilibria 24. The hydrogen carbonate and carbonate complexes of the lead(II) and cadmium(II) ions in acid solutions and a 3 M (Na)ClO₄ ionic medium at 25 - c. *Acta Chemica Scandinavica*, 46(231-239).

[1992SHO/OEL]
Shock, E.L., Oelkers, E.H., Johnson, J.W., Sverjensky, D.A., Helgeson, H.C. (1992) Calculation of the thermodynamic properties of aqueous species at high pressures and temperatures. *Journal of the Chemical Society Faraday Transactions*, 88(6), 803-826.

[1992WOL]
Wolery, T.J. (1992) EQ3NR, a computer program for geochemical aqueous speciation-solubility calculations: Theoretical manual, user's guide, and related documentation (version 7.0). Lawrence Livermore National Laboratory Report, UCRL-MA-110662 PT III, Livermore, CA, USA.

[1993ANO/ESS]
Anovitz, L.M., Essene, E.J., Metz, G.W., Bohlen, S.R., Westrum, E.F.J., Hemingway, B.S. (1993) Heat capacity and phase equilibria of almandine, Fe₃Al₂Si₃O₁₂. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 57, 4191-4204.

[1993BAR]
Barin, I. (1993) Thermochemical data of pure substances (2nd Ed.) Verlag Chemie, Weinheim, Germany, 1739p.

[1993CRU/VAN]
Cruywagen, J.J., van de Water, R.F. (1993) The hydrolysis of lead(II). A potentiometric and enthalpimetric study. *Talanta*, 40, 1091-1095.

[1993MIL/CVI]
Mills, I., Cvitas, T., Homann, K., Kallay, N., Kuchitsu, K. (1993) Quantities units and symbols in physical chemistry (2nd ed.). International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC). Blackwell Science Ltd., Oxford, UK, 167p.

[1993PAL/HYD]
Palmer, D.A., Hyde, K.E. (1993) An experimental determination of ferrous chloride and acetate complexation in aqueous solution to 300oC. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 57, 1393-1408.

[1993SAC/SEY]
Saccoccia, P.J., Seyfried, W.E.J. (1993) A resolution of discrepant thermodynamic properties for chamosite retrieved from experimental and empirical techniques. *American Mineralogist*, 78, 607-611.
NOTE: Standard molal Gibbs free energy and enthalpy of [1993SAC/SEY] are consistent with the [1978HEL/DEL] database. The nomenclature for trioctahedral chlorites adopted by the authors requires that the terms chamosite, daphnite and 14A-daphnite all refer to Fe₅Al₂Si₃O₁₀(OH)₈ and are synonymous.

[1993SEM/BYC]
Semenov, Y.V., Bychkov, A.M., Krestina, N.V. & Khodakovskiy, I.L. Thermodynamic properties of Cs-silicates and Aluminosilicates. Proceedings of the Fourth International Conference on the Chemistry and Migration Behavior of Actinides and Fission Products in the Geosphere. Charleston, SC, USA, 1993, Verlag, Munchen, Germany, pp. 63-69.

[1993XIE/WAL]
Xie, Z., Walther, J.V. (1993) Quartz solubilities in NaCl solutions with and without wollastonite at elevated temperatures and pressures. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 57, 1947-1955.

[1993ZIE/JON]
Ziemniak, S.E., Jones, M.E., Combs, K.E.S. (1993) Solubility behavior of titanium(IV) oxide in alkaline media at elevated temperatures. *Journal of Solution Chemistry*, 22(7), 601-623.

[1994ALB/TOM]
Al-Borno, A., Tomson, M.B. (1994) The temperature dependence of the solubility product of vivianite. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 58(24), 5373-5378.

[1994ATK/GLA]
Atkins, M., Glasser, F.P., Moroni, L.P., Jack, J.J. (1994) Thermodynamic modelling of blended cements at elevated temperature (50-90oC). Department of the Environment (UK) HMIP report, DoE/HMIP/RR/94.011, London, UK, 193p.

[1994DAM/STR]
Damidot, D., Stronach, S., Kindness, A., Atkins, M., Glasser, F.P. (1994) Thermodynamic investigation of the CaO-Al₂O₃-CaCO₃-H₂O closed system at 25oC and the influence of Na₂O. *Cement and Concrete Research*, 24(3), 563-572.

[1994FAR/LUM]
Farmer, V.C., and Lumsdon, D.G. (1994) An assessment of complex formation between aluminium and silicic acid in acid solutions. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 58(16), 3331-3334.

[1994GIE/LEN]
Giester, G., Lengauer, C.L., and Redhammer, G. (1994) Characterization of the FeSO₄.H₂O-CuSO₄.H₂O solid-solution series, and the nature of poitevinite, (Cu,Fe)SO₄.H₂O. *Canadian Mineralogist*, 32, 873-884.

[1994GU/GAM]
Gu, Y., Gammons, C.H., Bloom, M.S. (1994). A one-term extrapolation method for estimating equilibrium constants of aqueous reactions at elevated temperatures. *Geochimica et Cosmochimica Acta* 58, 3545-3560.

[1994MAN]
Manning, C.E. (1994) The solubility of quartz in H₂O in the lower crust and upper-mantle. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 58, 4831-4839.

[1994QUI/MAJ]
Quillin, K.C., Majumdar, A.J. (1994) Phase equilibria in the CaO-Al₂O₃-SiO₂-H₂O system at 5oC, 20oC and 38oC. *Advances in Cement Research*, 6(22), 47-56.

[1994WAR/REA]
Warren, C.J. & Reardon, E.J. (1994) The solubility of ettringite at 25oC. *Cement and Concrete Research*, 24, 1515-1524.

[1994ZHU/NEW]
Zhu, H., Newton, R.C., Kleppa, O.J. (1994) Enthalpy of formation of wollastonite (CaSiO₃) and anorthite (CaAl₂Si₂O₈) by experimental phase equilibrium measurements and high-temperature solution calorimetry. *American Mineralogist*, 79, 134-144.

[1995MAR/MAC]
Marani, D., Macchi, G., Pagano, M. (1995) Lead precipitation in the presence of sulphate and carbonate: Testing of thermodynamic predictions. *Water Research*, 29(4), 1085-1092.

[1995OEL/HEL]
Oelkers, E.H., Helgeson, H.C., Shock, E.L., Sverjensky, D.A., Johnson, J.W., Pokrovskii, V.A. (1995) Summary of the apparent standard partial molal gibbs free energies of formation of aqueous species, minerals, and gases at pressures 1 to 5000 bars and temperatures 25 to 1000oC. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 24, 1401-1560.

[1995PAR]
Parker, V.B. (1995) Thermodynamic properties of aqueous Ba²⁺ ion and the key compounds of barium. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 24, 1023-1036.

[1995PAR_a]
Updated to be consistent with the thermodynamic properties of Ba+2 as reported in [1995PAR].

[1995POK/HEL]
Pokrovskii, V.A., Helgeson, H.C. (1995) Thermodynamic properties of aqueous species and the solubilities of minerals at high pressures and temperatures: The system Al₂O₃-H₂O-NaCl. *American Journal of Science*, 295, 1255-1342.

[1995POK/SCH]
Pokrovskii, G.S., Schott, J., Sergeev, A.S. (1995) Experimental determination of the stability constants of NaSO₄- and NaB(OH)₄ in hydrothermal solutions using a new high-temperature sodium-selective glass electrode - implications for boron isotopic fractionation. *Chemical Geology*, 124, 253-265.

[1995ROB/HEM]
Robie, R.A., Hemingway, B.S. (1995) Thermodynamic properties of minerals and related substances at 298.15 K and 1 bar (10⁵ pascals) pressure and at higher temperatures. *United States Geological Survey Bulletin*, 2131, p. 461.

[1995SHO]
Shock, E.L. (1995) Organic acids in hydrothermal solutions: Standard molal thermodynamic properties of
carboxylic acids and estimates of dissociation constants at high temperatures and pressures. *American*
Journal of Science, 295(May), 496-580.

[1995SHO/KOR]
Shock, E.L., and Koretsky, C.M. (1995) Metal-organic complexes in geochemical processes: Estimation of
standard partial molal thermodynamic properties of aqueous complexes between metal cations and monovalent
organic acid ligands at high pressures and temperatures. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 59(8), 1497-1532.

[1995SOR/DAD]
Sorokin, V.I., Dadze, T.P. (1995) Solubility and complex formation in the systems Hg-H₂O, S-H₂O,
SiO₂-H₂O and SnO₂-H₂O. Chapter 4, p.57-93, in K.I. Shmulovich, B.W.D. Yardley, and G.C. Gonchar
(Eds.) *Fluids in the Crust*, Chapman & Hall, London, UK.

[1995ZIE/JON]
Ziemniak, S.E., Jones, M.E., Combs, K.E.S. (1995) Magnetite solubility and phase stability in alkaline
media at elevated temperatures. *Journal of Solution Chemistry*, 24, 837-877.

[1996BET]
Bethke, C.M. (1996) *Geochemical reaction modeling*. Oxford University Press, New York, NY, USA. p.397.

[1996BOS/GEI]
Bosenick, A., Geiger, C.A., Cemic, L. (1996) Heat capacity measurements of synthetic pyrope-grossular
garnets between 320 and 1000 K by differential scanning calorimetry. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 60(17),
3215-3227.

[1996BRO/DRU]
Brown, P.L., Drummond, S.E.J., Palmer, D.A. (1996) Hydrolysis of magnesium (II) at elevated
temperatures. *Journal of the Chemical Society Dalton Transactions*, 3071-3075.

[1996KIS/NAV]
Kiseleva, I.A., Navtrosky, A., Belitsky, I.A. & Fursenko, B.A. (1996) Thermochemistry and phase
equilibria in calcium zeolites. *American Mineralogist*, 81, 658-667.

[1996KUM/NIS]
Kuma, K., Nishioka, J., Matsunaga, K. (1996) Controls on iron(III) hydroxide solubility in seawater:
The influence of pH and natural organic chelators. *Limnology and Oceanography*, 41(3), 396-407.

[1996POK/SCH]
Pokrovskii, G.S., Schott, J., Harrichoury, J.-C., and Sergeev, A.S. (1996) The stability of aluminium
silicate complexes in acidic solutions from 25 to 150°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 60(14),
2495-2501.

[1996STR]
Stronach, S.A., 1996. Thermodynamic modelling and phase relations of cementitious systems, Department
of Chemistry, University of Aberdeen, Aberdeen, Scotland, 224p.

[1997GOT]
Gottschalk, M. (1997) Internally consistent thermodynamic data for rock-forming minerals in the system
SiO₂-TiO₂-Al₂O₃-Fe₂O₃-CaO-MgO-FeO-K₂O-Na₂O-H₂O-CO₂. *European Journal of Mineralogy*, 9, 175-223.

[1997GUR/BER]
Gurvich, L.V., Bergman, G.A., Gorkhov, L.N., Iorish, V.S., Leonidov, V.Y. & Yungman, V.S. (1997)
Thermodynamic properties of alkali metal hydroxides. Part ii. Potassium, rubidium, and cesium
hydroxides. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 26, 1031-1110.

[1997PAL/WES]
Palmer, D.A., Wesolowski, D.J. (1997) Potentiometric measurements of the first hydrolysis quotient of
magnesium(II) to 250°C and 5 molal ionic strength (NaCl). *Journal of Solution Chemistry*, 26, 217-232.

[1997POK/HEL_a]
Pokrovskii, V.A., Helgeson, H.C. (1997a) Calculation of the standard partial molal thermodynamic
properties of KClO and activity coefficients of aqueous KCl at temperatures and pressures to 1000 °C
and 5 kbar. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 61, 2175-2183.

[1997POK/HEL_b]
Pokrovskii, V.A., Helgeson, H.C. (1997b) Thermodynamic properties of aqueous species and the
solubilities of minerals at high pressures and temperatures: The system Al₂O₃-H₂O-KOH. *Chemical*
Geology, 137, 221-242.

[1997RIM]
Rimstidt, J.D. (1997) Quartz solubility at low temperatures. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 61,
2553-2558.

[1997RIM_a]
Gibbs free energy updated as a consequence of changing thermodynamic properties of SiO₂(aq) recommended
by [1997RIM].

[1997SHO/SAS]
Shock, E.L., Sassani, D.C., Willis, M., Sverjensky, D.A. (1997) Inorganic species in geological
fluids: Correlations among standard molal thermodynamic properties of aqueous ions and hydroxide
complexes. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 61, 907-950.

[1997SHO/SAS_a]
Enthalpy, Δ_fH⁰ corrected to conform to Gibbs-Helmholtz (G-H-S) relation.

[1997SHO/SAS_b]
Estimated using correlation methods described in [1997SHO/SAS]

[1997SVE/SHO]
Sverjensky, D.A., Shock, E.L., Helgeson, H.C. (1997) Prediction of the thermodynamic properties of
aqueous metal complexes to 1000 °C and 5 kb. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 61, 1359-1412.

[1997SVE/SHO_a]
Estimated using correlation methods described in [1997SVE/SHO].

[1997TAG/ZOT]
Tagirov, B.R., Zotov, A.V., Akinfiev, N.N. (1997) Experimental study of dissociation of HCl from 350
to 500 °C from 500 to 2500 bars: Thermodynamic properties of HCl(aq). *Geochimica et Cosmochimica Acta*,
61, 4267-4280.

[1997ZHA]
Zhao, R. (1997) Spectroscopic studies of chemical kinetics and complexation at high temperatures, Ph.D. thesis,
University of Regina, Regina, SK, Canada.

[1998BIR/GLA]
Birnin-Yauri, U.A., Glasser, F.P. (1998) Friedel's salt, Ca₂Al(OH)₆(Cl,OH)₆·5H₂O: Its solid solutions
and their role in chloride binding. *Cement and Concrete Research*, 28, 1713-1724.

[1998CAP/HEF]
Capewell, S.G., Heftler, G., May, P.M. (1998) Potentiometric investigation of the weak association of
sodium and carbonate ions at 25°C. *Journal of Solution Chemistry*, 27, 868-877.

[1998CHA]
Chase, M.W.J. (1998) NIST-JANAF thermochemical tables (4th ed.) part 1, Al-Co. Journal of Physical and
Chemical Reference Data, Monograph 9, p.1951.

[1998CHA/KRU]
Chatterjee, N.D., Kruger, R., Haller, G., Olbricht, W. (1998) The Bayesian approach to an internally
consistent thermodynamic database: theory, database, and generation of phase diagrams. Contributions to
Mineralogy and Petrology, 133, 149-168.

[1998GHO/KIS]
Ghorab, H.Y., Kishar, E.A., Abou Elfetouh, S.H. (1998) Studies on the stability of the calcium
sulfoaluminate hydrates, part iii: The monophases. Cement and Concrete Research, 28, 763-771.

[1998HO/PAL]
Ho, P.C., and Palmer, D.A. (1998) Determination of ion association in dilute lithium chloride and lithium
hydroxide solutions to 600oC and 300 MPa by electrical measurements. Journal of Chemical and Engineering Data,
43, 162-170.

[1998MER/ROC]
Mercy, M.A., Rock, P.A., Casey, W.H., Mokarram, M.M. (1998) Gibbs energies of formation
for hydrocerussite [Pb(OH)2.(PbCO3)2(s)] and hydrozincite {[Zn(OH)2]3.(ZnCO3)2(s)} at 298 K
and 1 bar from electrochemical cell measurements. American Mineralogist, 83, 739-745.

[1998ODA/AMA]
Oda, C., Amaya, T. (1998) Effect of ligands on the solubility of tin. JNC Report JNC TN8400 98-001,
Japan Nuclear Cycle, Tokai, Ibaraki, Japan, 14p.

[1998SAL/POK]
Salvi, S., Pokrovski, G.S., and Schott, J. (1998) Experimental investigation of aluminum-silica
aqueous complexing at 300oC. Chemical Geology, 151(1-4), 51-67.

[1999ART/SAS]
Arthur, R.C., Sasamoto, H., Shibata, M., Yui, M., Neyama, A. (1999) Development of thermodynamic databases
for geochemical calculations. Japan Nuclear Cycle Research Report, JNC TN8400 99-079, p.287. Tokai, Ibaraki,
Japan.

[1999DIA/SCH]
Diakonov, I.I., Schott, J., Martin, F., Harrichoury, J.-C., Escalier, J. (1999) Iron(III) solubility and
speciation in aqueous solutions. Experimental study of the modelling: Part 1. Hematite solubility from 60 to
300oC in NaOH-NaCl solutions and thermodynamic properties of Fe(OH)4-(aq). Geochimica et Cosmochimica Acta,
63(15), 2247-2261.

[1999GLA/TYR]
Glasser, F.P., Tyrer, M., Quillin, K., Ross, D., Pedersen, J., Goldthorpe, K., Bennett, D., Atkins,
M. (1999) The chemistry of blended cement and backfills intended for use in radioactive waste disposal.
p.333. Environment Agency, Bristol, UK.

[1999LIU/MIL]
Liu, X., Millero, F.J. (1999) The solubility of iron hydroxide in sodium chloride solutions Geochimica et
Cosmochimica Acta, 63, 3487-3497.

[1999LOT/OCH]
Lothenbach, B., Ochs, M., Wanner, H., Yui, M. (1999) Thermodynamic data for the speciation and solubility
of Pb, Sn, Sb, Nb and Bi in aqueous solution. JNC TN8400 99-011, p. 340. Japan Nuclear Cycle, Tokai, Ibaraki, Japan.

[1999PER/PAL]
Perkins, R.B. & Palmer, C.D. (1999) Solubility of ettringite (Ca6[Al(OH)6]2(SO4)3#26H2O) at 5-75oC.
Geochimica et Cosmochimica Acta, 13/14, 1969-1980.

[1999REF/BON]
Refait, P., Bon, C., Simon, L., Bourrie, G., Trolard, F., Bessiere, J., Genin, J.-M.R. (1999) Chemical
composition and Gibbs standard free energy of formation of Fe(II)-Fe(III) hydroxysulphate green rust and
Fe(II) hydroxide. Clay Minerals, 34, 499-510.

[1999SER/SUL]
Sergeeva, E.I., Suleimenov, O.M., Evstigneev, A.V. (1999) Solubility of hematite, Fe2O3 (cr,a) at 200oC
and the standard entropy of Fe3+ ion in aqueous solution. Geochemistry International, 37, 1097-1107.

[2000COU]
Courault, A.-C. (2000) Simulation experimentale des C-S-H dans les betons modernes: Etude de la composition
et des proprietes a l'equilibre dans des milieux complexes. Laboratoire de Recherches sur la Reactivite des
Solides, Ph.D., p. 212. Universite de Bourgogne, Dijon, France.

[2000GUN/ARN]
Gunnarsson, I., Arnorsson, S. (2000) Amorphous silica solubility and the thermodynamic properties of
H4SiO4*0 in the range of 0o to 350oC at psat. Geochimica et Cosmochimica Acta, 64, 2295-2307.

[2000HO/PAL]
Ho, P.C., Palmer, D.A., and Wood, R.H. (2000) Conductivity measurements of dilute aqueous LiOH, NaOH, and KOH
solutions to high temperatures and pressures using a flow-through cell. Journal of Physical Chemistry B,
104(50), 12084-12089.

[2000KAN/AIZ]
Kanekiyo, Y., Aizawa, S., Koshino, N., Funahashi, S. (2000) Complexation equilibria of
oxy-acid-2-amino-2-deoxy-D-gluconic acid metal(II) ion ternary systems in aqueous solution as studied by
potentiometry. Inorganica Chimica Acta, 298, 154-164.

[2000KRI/BUR]
Krivovichev, S.V., Burns, P.C. (2000) Crystal chemistry of basic lead carbonates. II. Crystal structure
of synthetic "plumbonacrite". Mineralogical Magazine, 64, 1069-1075.

[2000NEW/MAN]
Newton, R.C., Manning, C.E. (2000) Quartz solubility in H2O-NaCl and H2O-CO2 solutions at deep
crust-upper mantle pressures and temperatures: 2-15 kbar and 500-900oC. Geochimica et Cosmochimica Acta,
64(17), 2993-3005.

[2000POI]
Pointeau, I. (2000) Etude mecanistique et modelisation de la retention de radionucleides par les
silicates de calcium hydrates (CSH) des ciments. Chimie, Ph.D., p. 198. L'Universite de Reims
Champagne-Ardenne, Reims, France.

[2000ZHA]
Zhang, M. (2000) Incorporation of oxyanionic b, cr, mo, and se into hydrocalumite and ettringite:
Application to cementitious systems. Ph.D. University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada.

[2001ARM/GUN]
Armbruster, T., Gunter, M.E. (2001) Crystal structures of natural zeolites. p.1-67. In Bish, D.L.,
Ming, D.W., (Eds.) Natural zeolites: Occurrence, properties, applications. Reviews in mineralogy and
geochemistry, 45, The Mineralogical Society of America, Washington, DC, USA.

[2001CHI/APP]
Chipera, S.J., Apps, J.A. (2001) Geochemical stability of natural zeolites. p. 117-161. In Bish, D.L.,

- # Ming, D.W., (Eds.) Natural zeolites: Occurrence, properties, applications, Reviews in mineralogy and geochemistry, 45, The Mineralogical Society of America, Washington, DC, USA.
- # [2001HOB]
Hobbs, M.Y. (2001) Solubilities and ion exchange properties of solid solutions between the OH, Cl and CO₃ end members of the monocalcium aluminate hydrates. Ph.D. University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada.
- # [2001KNA/DIB]
Knauss, K.G., Dibley, M.J., Bourcier, W.L. & Shaw, H.F. (2001) Ti(IV) hydrolysis constants derived from rutile solubility measurements made from 100 to 300°C. Applied Geochemistry, 16, 1115–1128.
- # [2001MUL/SEW]
Moller, B., Seward, T.M. (2001) Spectrophotometric determination of the stability of tin(II) chloride complexes in aqueous solution up to 300°C. Geochimica et Cosmochimica Acta, 65(22), 4187–4199.
- # [2001PER/HEF]
Perera, W.N., Hefter, G., and Sips, P.M. (2001) An investigation of the lead(II)-hydroxide system. Inorganic Chemistry, 40, 3974–3978.
- # [2001ZHA/PAN]
Zhao, R., Pan, P. (2001) A spectrophotometric study of Fe(II)-chloride complexes in aqueous solution from 10 to 100°C. Canadian Journal of Chemistry, 79, 131–144.
- # [2002BAR]
Barbarulo, R. (2002) Comportement des matériaux cimentaires: Actions des sulfates et de la température. Département de génie civil, Ph.D., p. 272. Université Laval, Québec, Canada.
- # [2002HAR/MAN]
Harris, A.W., Manning, M.C., Tearle, W.M., Tweed, C.J. (2002) Testing of models of the dissolution of cements – leaching of synthetic CSH gels. Cement and Concrete Research, 32(5), 731–746.
- # [2002UCH/SAK]
Uchida, E., Sakamori, T., Matsunaga, J. (2002) Aqueous speciation of lead and tin chlorides in supercritical hydrothermal solutions. Geochemical Journal, 36, 61–72.
- # [2003PER/HEF]
Perera, W.N., Hefter, G. (2003) Mononuclear cyano- and hydroxo- complexes of iron(III). Inorganic Chemistry, 42, 5917–5923.
- # [2004BAU/KEL]
Baur, I., Keller, P., Mavrocordatos, D., Wehrli, B. & Johnson, C.A. (2004) Dissolution-precipitation behaviour of ettringite, monosulfate, and calcium silicate hydrate. Cement and Concrete Research, 34, 341–348.
- # [2004BOT/BRO]
Bothe, J.V., Brown, P.W. (2004) Phreeqc modeling of Friedel's Salt equilibria at 23 ± 1 °C. Cement and Concrete Research, 34, 1057–1063.
- # [2004CHE/THO]
Chen, J.J., Thomas, J.J., Taylor, H.F.W., Jennings, H.M. (2004) Solubility and structure of calcium silicate hydrate. Cement and Concrete Research, 34(9), 1499–1519.
- # [2004EVA]
Thermodynamic properties of lizardite based on chrysotile as described in Evans, W.E. (2004) The serpentine multisystem revisited: Chrysotile is metastable. International Geology Review, 46, 479–506.
- # [2004FRE/VOI]
Freyer, D., Voigt, W. (2004) The measurement of sulfate mineral solubilities in the Na₂K₂Ca-Cl-SO₄-H₂O system at temperatures of 100, 150 and 200°C. Geochimica et Cosmochimica Acta, 68(2), 307–318.
- # [2004GUR/GAV]
Gurevich, V.M., Gavrich, K.S., Gorbunov, V.E., Polyakov, B.B., Mineev, S.D., Golushina, L.N. (2004) Thermodynamic properties of cassiterite SnO₂(c) at 0–1500K. Geokhimiya, 42(10), 1096–1105 [in Russian].
- # [2004MAC/BAR]
Macphee, D.E. & Barnett, S.J. (2004) Solution properties of solids in the ettringite-thaumasite solid solution series. Cement and Concrete Research, 34, 1591–1598.
- # [2005ALL/NAV]
Allada, R.K., Navrotsky, A., Boerio-Goates, J. (2005) Thermochemistry of hydrotalcite-like phases in the MgO-Al₂O₃-CO₂-H₂O system: A determination of enthalpy, entropy and free energy. American Mineralogist, 90, 329–335.
- # [2005ALL/NAV_a]
Hydrotalcite-like phase of stoichiometry Mg_{0.74}Al_{0.26}(OH)₂(CO₃)_{0.13}(H₂O)_{0.39} reported by [2005ALL/NAV] used as a parent to estimate entropies, heat capacities and, as necessary, molar volumes for all hydrotalcite phases using additive principles described in [1978HEL/DEL].
- # [2005ART/SAS]
Arthur, R.C., Sasamoto, H., Oda, C., Honda, A., Shibata, M., Yoshida, Y., Yui, M. (2005) Development of thermodynamic databases for hyperalkaline, argillaceous systems. Japanese Nuclear Cycle Research Report, JNC TN8400 2005-010, Tokai, Ibaraki, Japan.
- # [2005CHA/HEA]
Chambers, A.V., Heath, T.G., Hunter, F.M.I., Manning, M.C., Williams, S.J. (2005) The effect of sodium chloride on the dissolution of calcium silicate hydrate gels, p. 38. Serco Assurance, Didcot, UK.
- # [2005CRU/MIN]
Cruz, F.J.A.L., Minas de Piedade, M.E., Calado, J.C.G. (2005) Standard molar enthalpies of formation of hydroxy-, chlor-, and bromapatite. Journal of Chemical Thermodynamics, 37, 1061–1070.
- # [2005GAM/BUG]
Gamsjäger, H., Bugajski, J., Gajda, T., Lemire, R.J. & Preis, W. (2005) Chemical thermodynamics of nickel. Pp. 617. OECD Nuclear Energy Agency, Issy-les-Moulineaux, France.
- # [2005HEN]
Henocq, P. (2005) Modélisation des interactions ioniques à la surface des silicates de calcium hydratés. Ph.D., p. 204. L'Université Laval, Québec, Canada.
- # [2005KLE/AHR]
Klemme, S., Ahrens, M. (2005) Low-temperature heat capacity of magnesioferrite (MgFe₂O₄). Physics and Chemistry of Minerals, 32, 374–378.
- # [2005SPA/SCH]
Spadini, L., Schindler, P.W., and Sjerg, S. (2005) On the stability of the AlOSi(OH)₃²⁺ complex in aqueous solution. Aquatic Geochemistry, 11(1), 21–31.
- # [2005SWA/FAI]
Swanton, S.W., Fairbrother, H.J., Turner, N.A. (2005) The effect of sodium chloride on the dissolution of calcium silicate hydrate gels. II. Effect of temperature and cation type. Serco Assurance, UK, Report SA/ENV-0725, 32p.
- # [2005ZIE/PAL]
Ziemiak, S.E., Palmer, D.A., Bickel, P., Anovitz, L.M. (2005) Solubility of litharge (alpha-PbO) in

alkaline media at elevated temperatures. *Journal of Solution Chemistry*, 34, 1407-1428.

[2006CRE/DeS]
Crea, F., De Stefano, G., Gianguzza, A., Piazzese, D., Sammartano, S. (2006) Protonation of carbonate
in aqueous tetraalkylammonium salts at 25°C. *Talanta*, 68, 1102-1112.

[2006DAC/GE1]
Dachs, E., Geiger, C.A. (2006) Heat capacities and entropies of mixing of pyrope-grossular
(Mg₃Al₂Si₃O₁₂-Ca₃Al₂Si₃O₁₂) garnet solid solutions: a low temperature calorimetric and a thermodynamic
investigation. *American Mineralogist*, 91, 894-906.

[2006LOT/WIN]
Lothenbach, B., Winnefeld, F. (2006) Thermodynamic modelling of the hydration of Portland cement.
Cement and Concrete Research, 36, 209-226.

[2006RYZ/KOV]
Ryzhenko, B.N., Kovalenko, N.I., and Prisyagina, N.I. (2006) Titanium complexation in hydrothermal
systems. *Geochemistry International*, 44(9), 879-895.

[2006SHA/GRA]
Sharygin, A.V., Grafton, B.K., Xiao, C., Wood, R.H., and Balashov, V.N. (2006) Dissociation constants and
speciation in aqueous Li₂SO₄ and K₂SO₄ from measurements of electrical conductance to 673 K and 29 MPa.
Geochimica et Cosmochimica Acta, 70, 5169-5182.

[2007BEN/PAL]
Benezeth, P., Palmer, D.A., Anovitz, L.M., Horita, J. (2007) Dawsonite synthesis and reevaluation
of its thermodynamic properties from solubility measurements: Implications for mineral trapping of CO₂.
Geochimica et Cosmochimica Acta, 71(18), 4438-4455.

[2007LUO/MIL]
Luo, Y., Millero, F.J. (2007) Stability constants for the formation of lead chloride complexes as
a function of temperature and ionic strength. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 71, 326-334.

[2007MAT/LOT]
Matschei, T., Lothenbach, B., Glasser, F.P. (2007) Thermodynamic properties of Portland cement
hydrates in the system CaO-Al₂O₃-SiO₂-CaSO₄-CaCO₃-H₂O. *Cement and Concrete Research*, 37, 1379-1410.

[2007STE]
Stefansson, A. (2007) Iron (III) hydrolysis and solubility at 25°C. *Environmental Science and Technology*,
41(17), 6117-6123.

[2007WAL/SAV]
Walker, C.S., Savage, D., Tyrer, M., Ragnarsdottir, K.V. (2007) Non-ideal solid solution aqueous
solution modeling of synthetic calcium silicate hydrate. *Cement and Concrete Research*, 37(4), 502-511.

[2007WOL/JOV_a]
Ripidolite treated as an ideal solid solution between Daphnite and Clinocllore end-member components as
described in Wolery, T.J., Jove-Colon, C.F. (2007) Qualification of thermodynamic data for geochemical
modeling of mineral-water interactions in dilute systems. Sandia National Laboratories Report, Las Vegas, NV, USA.

[2008LOT/MAT]
Lothenbach, B., Matschei, T., Moschner, G., Glasser, F.P. (2008) Thermodynamic modelling of the effect
of temperature on the hydration and porosity of Portland cement. *Cement and Concrete Research*, 38, 1-18.

[2008LOT/MAT_a]
Using methods described in the Appendix of [2008LOT/MAT].

[2008MOS/LOT]
Moschner, G., Lothenbach, B., Rose, J., Ulrich, A., Figi, R., Kretzschmar, R. (2008). Solubility of
Fe-ettringite (Ca₆[Fe(OH)₆]₂(SO₄)₃·26H₂O). *Geochimica et Cosmochimica Acta* 72, 1-18.

[2008SCH/LOT]
Schmidt, T., Lothenbach, B., Romer, M., Scrivener, K.L., Rentsch, D., Figi, R. (2008) A thermodynamic
and experimental study of the conditions of thaumasite formation. *Cement and Concrete Research*, 38, 337-349.

[2008SUG]
Sugiyama, D. (2008) Chemical alteration of calcium silicate hydrate (C-S-H) in sodium chloride solution.
Cement and Concrete Research, 38(12), 1270-1275.

[2008VEN/JEN]
Venkata Krishnan, R., Jena, H., Govindan Kutty, K.V., Nagarajan, K. (2008) Heat capacity of
Sr₁₀(P₀₄)₆Cl₂ and Ca₁₀(P₀₄)₆Cl₂ by DSC. *Thermochemica Acta*, 478, 13-16.

[2008X10]
Xiong, Y. (2008) Thermodynamic properties of brucite determined by solubility studies and their significance
to nuclear waste isolation. *Aquatic Geochemistry*, 14, 223-228.

[2009DAC/GE1]
Dachs, E., Geiger, C.A., Withers, A.C., Essene, E.J. (2009) A calorimetric investigation of spessartine:
Vibrational and magnetic heat capacity. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 73, 3393-3409.

[2009HON/MAS]
Honda, A., Masuda, K., Nakanishi, H., Fujita, H., Negishi, K. (2009) Modeling of pH elevation due to
the reaction of saline groundwater with hydrated ordinary Portland cement phases. *Materials Research
Society Symposium Proceedings*, 1124.

[2009POW/BRO]
Powell, K.J., Brown, P.L., Bryne, R.H., Gajda, T., Hefter, T., Leuz, A.-K., Sjerg, S., Wanner, H.
(2009) Chemical speciation of environmentally significant metals with inorganic metals. Part 3: the Pb²⁺ +
OH⁻, Cl⁻, CO₃²⁻, SO₄²⁻ and PO₄³⁻ systems. *Pure and Applied Chemistry*, 81, 2425-2476.

[2009SCH/VOG]
Schmidt, J. & Vogelsberger, W. (2009) Aqueous long-term solubility of titania nanoparticles and titanium(IV)
hydrolysis in a sodium chloride system studied by adsorptive stripping voltammetry. *Journal of Solution
Chemistry*, 38, 1267-1282.

[2010BAL/LOT]
Balonis, M., Lothenbach, B., Le Saout, G., Glasser, F.P. (2010) Impact of chloride on the mineralogy
of hydrated Portland cement systems. *Cement and Concrete Research*, 40, 1009-1022.

[2010BET/YEA] (GWB formatted TDB only)
Bethke, C.M., Yeakel, S. (2010) The Geochemist Workbench (R) Release 8.0 GWB Essentials Guide. Hydrogeology
Program, University of Illinois, IL, USA, 122p.

[2010BLA/BOU]
Blanc, P., Bourbon, X., Lassin, A., Gaucher, E.C. (2010) Chemical model for cement-based materials:
Temperature dependence of thermodynamic functions for nanocrystalline and crystalline C-S-H phases.
Cement and Concrete Research, 40, 851-866.

[2010DAC/HAR]
Dachs, E., Harlov, D., Benisek, A. (2010) Excess heat capacity and entropy of mixing along the
chlorapatite-fluorapatite binary join. *Physics and Chemistry of Minerals*, 37, 665-676.

[2010ROZ/BER]
Rozov, K., Berner, U., Taviot-Gueho, C., Leroux, F., Renaudin, G., Kulik, D., Diamond, L.W. (2010)
Synthesis and characterization of the LDH hydrotalcite-pyroaurite solid-solution series. *Cement and*
Concrete Research, 40, 1248-1254.

[2010VIE]
Vieillard, P. (2010) A predictive model for the entropies and heat capacities of zeolites. *European*
Journal of Mineralogy, 22, 823-836.

[2011ART/SAS]
Arthur, R.C., Sasamoto, H., Walker, C., Yui, M. (2011) Polymer model of zeolite thermochemical
stability. *Clays and Clay Minerals*, 59, 626-639.

[2011ART/SAS_a]
Estimated using the methods described in [2011ART/SAS].

[2011BAB/JEN]
Babu, R., Jena, H., Govindan Kutty, K.V., Nagarajan, K. (2011) Thermodynamic functions of Ba10(P04)6Cl2,
Sr10(P04)Cl2 and Ca10(P04)6Cl2. *Thermochimica Acta*, 526, 78-82.

[2011BAL/MED]
Balonis, M., Medala, M., Glasser, F.P. (2011) Influence of calcium nitrate and nitrite on the
constitution of afm and aft cement hydrates. *Advances in Cement Research*, 23, 129-143.
NOTE: Thermodynamic properties were recalculated from the reported solubility data.

[2011BIS/HUG]
Bissengaliyeva, M.R., Gogol, D.B., Bekturganov, N.S. (2011) The heat capacity and thermodynamic functions
of pyromorphite over the temperature range 5-320 K. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 85(2), 157-163.

[2011DAV/WES]
Davis, M.C., Wesolowski, D.J., Rosenqvist, J., Brantley, S.L., Mueller, K.T. (2011) Solubility and
near-equilibrium dissolution rates of quartz in dilute NaCl solutions at 398-473 K under alkaline
conditions. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 75, 401-415.

[2011DIL]
Dilnesa, B.Z. (2011) Fe-containing hydrates and their fate during cement hydration: Thermodynamic data
and experimental study. Ph.D. Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, Lausanne, Switzerland.
NOTE: $\Delta_f H^\circ$ value recalculated to be consistent with G-H-S relations.

[2011DIL/LOT]
Dilnesa, B.Z., Lothenbach, B., Le Saout, G., Renaudin, G., Mesbah, A., Filinchuk, Y., Wichser, A.,
Wieland, E. (2011) Iron in carbonate containing AFm phases. *Cement and Concrete Research*, 41, 311-323.

[2011EAS/BYR]
Easley, R.A., Byrne, R.H. (2011) The ionic strength dependence of lead (II) carbonate complexation in
perchlorate media. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 75, 5638-5647.

[2011RAI/YUI]
Rai, D., Yui, M., Todd Scheaf, H., Kitamura, A. (2011) Thermodynamic model for SnO2(cr) and
SnO2(am) solubility in the aqueous Na+H+OH-Cl-H2O system. *Journal of Solution Chemistry*,
40, 1155-1172.

[2011ROZ/BER]
Rozov, K., Berner, U., Kulik, D.A., Diamond, L.W. (2011) Solubility and thermodynamic properties of
carbonate-bearing hydrotalcite-pyroaurite solid solutions with a 3:1 mg/(al+fe) mole ratio. *Clays and*
Clay Minerals, 59, 215-232.

[2012AIM/KUL]
Aimoz, L., Kulik, D.A., Wieland, E., Curti, E., Lothenbach, B. & Mader, U. (2012) Thermodynamics of
AFm-(12, S04) solid solution and of its end-members in aqueous media. *Applied Geochemistry*, 27, 2117-2129.

[2012ART/SAS]
Arthur, R.C., Sasamoto, H., Walker, C.S., Yui, M. Development of a consistent set of standard
thermodynamic properties for clay minerals, zeolites and Portland cement hydrates. Proceedings of the
5th International Meeting on Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste
Containment, October 22nd-25th 2012, Montpellier, France, 2012.
NOTE: Standard molal thermodynamic properties were revised from the reported values to be consistent
with the standard partial molal thermodynamic properties for aqueous species as given in the current
database.

[2012ART/SAS_a]
Using methods described in [2012ART/SAS]

[2012BIS/GOG]
Bissengaliyeva, M.R., Gogol, D.B., Taimassova, S.T., Bekturganov, N.S. (2012) The heat capacity and
thermodynamic functions of cerussite. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 47, 197-202.

[2012DAC/GEI]
Dachs, E., Geiger, C.A., Benisek, A., Grevel, K.-D. (2012) Grossular: A crystal-chemical, calorimetric,
and thermodynamic study. *American Mineralogist*, 97, 1299-1313.

[2012DIL/LOT]
Dilnesa, B.Z., Lothenbach, B., Renaudin, G., Wichser, A., Wieland, E. (2012) Stability of monosulfate
in the presence of iron. *Journal of the American Ceramic Society*, 95(10), 3305-3316.

[2012GAI/BLA]
Gailhanou, H., Blanc, P., Rogez, J., Mikaelian, G., Kawaji, H., Olives, J., Amouric, M., Denoyel, R., Bourrelly,
S., Montouillout, V., Vieillard, P., Fialips, C.I., Michau, N., Gaucher, E.C. (2012) Thermodynamic properties
of illite, smectite and beidellite by calorimetric methods: Enthalpies of formation, heat capacities, entropies
and gibbs free energies of formation. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 89, 279-301.

[2012GAI/BLA_a]
Beidellite SBId-1, Illite IMt-2 and smectite MX-80 reported in [2012GAI/BLA] used as parents to estimate entropies
and heat capacities for all beidellites, illites and montmorillonites, respectively, using additive principles
described in [1978HEL/DEL].

[2012GAO/LI]
Gao, W., Li, Z. (2012) Solubility and Ksp of Mg4Al2(OH)14.3H2O at the various ionic strengths.
Hydrometallurgy, 117-118, 36-46.

[2012GEI/DAC]
Geiger, C.A., Dachs, E., Benisek, A. (2012) Thermodynamic behavior and properties of katoite (hydrogrossular):
A calorimetric study. *American Mineralogist*, 97, 1252-1255.

[2012LEI/LOT]
Leisinger, S.M., Lothenbach, B., Le Saout, G. & Johnson, A. (2012) Thermodynamic modeling of solid solutions
between monosulfate and monochromate 3CaO.Al2O3.Ca[(CrO4)x(SO4)1-x].nH2O. *Cement and Concrete Research*, 42, 158-165.

[2012LOT/PEL]
Lothenbach, B., Pelletier-Chagnat, L., Winnefeld, F. (2012) Stability in the system CaO-Al2O3-H2O.
Cement and Concrete Research, 42, 1621-1634.

[2012MAR/CRE]

Maria Cigala, R., Crea, F., De Stefano, C., Lando, G., Milea, D., Sammartano, S. (2012) The inorganic speciation of tin(II) in aqueous solution. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 87, 1-20.

[2012PIL/SVO]
Pilar, R., Svoboda, L., Honcova, P., Oravova, L. (2012) Study of magnesium chloride hexahydrate as heat storage material. *Thermochimica Acta*, 546, 81-86.

[2013GAI/BLA]
Gailhanou, H., Blanc, P., Rogez, J., Mikaelian, G., Horiuchi, K., Yamamura, Y., Saito, K., Kawaji, H., Warmont, F., Greneche, J.-M., Vieillard, P., Fialips, C.I., Giffault, E. & Gaucher, E.C. (2013) Thermodynamic properties of saponite, nontronite, and vermiculite derived from calorimetric measurements. *American Mineralogist*, 98, 1834-1847.

[2013GAI/BLA_a]
Nontronite NAu-1 and saponite Sap_Ca-1 reported in [2013GAI/BLA] used as parents to estimate entropies and heat capacities for all nontronites and saponites, respectively, using additive principles described in [1978HEL/DEL].

[2013LEM/BER]
Lemire, R.J., Berner, U., Musikas, C., Palmer, D.A., Taylor, P., Tochiyama, O. (2013) Chemical thermodynamics of iron, part 1. OECD Nuclear Energy Agency, Issy-les-Moulineaux, France.

[2013MIT/BAL]
Mittermayr, F., Baldermann, A., Kurta, C., Rinder, T., Klammer, D., Leis, A., Tritthart, J., Dietzel, M. (2013) Evaporation - A key mechanism for the thaumasite form of sulfate attack. *Cement and Concrete Research*, 49, 55-64.

[2013ROZ/CUR]
Rozov, K., Curtius, H., Neumann, A., Bosbach, D. (2013) Synthesis characterization and stability properties of Cl-bearing hydroxalcalcite-pyroaurite solids. *Radiochimica Acta*, 101, 101-109.

[2013STE/BEN]
Stefansson, A., Benezeth, P., Schott, J. (2013) Carbonic acid ionization and the stability of sodium bicarbonate and carbonate ion pairs to 2000c - a potentiometric and spectrophotometric study. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 120, 600-611.

[2013WOO/MIL]
Woosley, R.J., Millero, F.J. (2013) Pitzer model for the speciation of lead chloride and carbonate complexes in natural waters. *Marine Chemistry*, 139, 1-7.

[2014DIL/LOT]
Dilnesa, B.Z., Lothenbach, B., Renaudin, G., Wichser, A., Kulik, D.A. (2014) Synthesis and characterization of hydrogarnet $Ca_3(Al_xFe_{1-x})_2(SiO_4)_y(OH)_4(3-y)$. *Cement and Concrete Research*, 59, 96-111.

[2014LHO]
L'Hopital, E. (2014) Aluminium and alkali uptake in calcium silicate hydrates (C-S-H). *Laboratoire des Matériaux de Construction*, Ph.D. thesis, Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, Lausanne, Switzerland, 172p.

[2014LOT/NIE]
Lothenbach, B., Nied, D., L'Hopital, E., Achiedo, G., Dauzeres, A. (2014) Calcium and magnesium silicate hydrates. 2nd International Symposium on Cement Based Materials for Nuclear Waste (NUWCEM), p. 12, Avignon, France.

[2014ODA/WAL]
Oda, C., Walker, C.S., Chino, D., Honda, A., Sato, T., Yoneda, T. (2014) Na-montmorillonite dissolution rate determined by varying the gibbs free energy of reaction in a dispersed system and its application to a coagulated system in 0.3 M NaOH solution at 70 °C. *Applied Clay Science*, 93-94, 62-71.

[2014PLU]
Plusquellec, G. (2014) Analyse in situ de suspensions de silicate de calcium hydrate: Application aux interactions ioniques a la surface des particules. *Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne*, Ph.D. these, Universite de Bourgogne, Dijon, France, 203p.

[2015BAQ/MAT]
Baquerizo, L.G., Matschei, T., Scrivener, K., Saeidpour, M., Wads · L. (2015) Hydration states of AFm cement phases. *Cement and Concrete Research* 73, 143-157.

[2015HAA/NON]
Haas, J., Nonat, A. (2015) From C-S-H to C-A-S-H: Experimental study and thermodynamic modelling. *Cement and Concrete Research*, 68(2), 124-138.

[2015LHO/LOT]
L'Hopital, E., Lothenbach, B., Le Saout, G., Kulik, D., Scrivener, K. (2015) Incorporation of aluminium in calcium-silicate-hydrates. *Cement and Concrete Research*, 75, 91-103.

[2015MAT/GLA]
Matschei, T., Glasser, F.P. (2015) Thermal stability of thaumasite. *Materials and Structures*, 48, 2277-2289.

[2015MYE]
Myers, R.J. (2015) Thermodynamic modelling of CaO-Al₂O₃-SiO₂-H₂O based cements. Ph.D. Thesis, Department of Materials Science & Engineering, University of Sheffield, Sheffield, U.K. 362p.

[2015MYE/LHO_a]
Myers, R.J., L'Hopital, E., Provis, J.L., Lothenbach, B. (2015a) Composition-solubility-structure relationships in calcium (alkali) aluminosilicate hydrate (C-(N,K)-A-S-H). *Dalton Transactions*, 44, 13530-13544.

[2015MYE/LHO_b]
Myers, R.J., L'Hopital, E., Provis, J.L., Lothenbach, B. (2015b) Effect of temperature and aluminium on calcium (aluminosilicate) hydrate chemistry under equilibrium conditions. *Cement and Concrete Research*, 68, 83-93.

[2015OGO/VIG]
Ogorodova, L.P., Vigasina, M.F., Melchakova, L., Krupskaya, V.V., Kiseleva, I. (2015) Thermochemical study of natural magnesium aluminum phyllosilicate: Palygorskite. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 89(Oct), 205-211.
NOTE: Entropy and heat capacity parameters estimated from additive properties described in Helgeson et al. (1978) using sepiolite as a parent mineral.

[2015PIC]
Pichavant, A. (2015) Coprecipitation d'oxydes mixtes de titane et d'uranium en solution aqueuse, Ph.D., p. 184. *Laboratoire National Supérieur des Mines de Paris*, Paris, France. [in French].

[2015R00]
Roos, C. (2015) Propriétés thermodynamiques des phases cimentaires hydratées : C-S-H, C-A-S-H et M-S-H. *Institut de Chimie des Milieux et Matériaux de Poitiers*, Ph.D. these, Université de Poitiers, Poitiers, France, 144p.

[2015SHV]
Shvarov, Y. (2015) A suite of programs, OptimA, OptimB, OptimC, and OptimS compatible with the uniterm database, for deriving the thermodynamic properties of aqueous species from solubility, potentiometry and spectroscopy measurements. *Applied Geochemistry*, 55, 17-27.

[2016BAQ/MAT]
Baquerizo, L.G., Matschei, T., Scrivener, K. (2016) Impact of water activity on the stability of ettringite. *Cement and Concrete Research*, 79, 31-44.

[2016BRO/EKB]
Brown, P.L., Ekberg, C. (2016) Hydrolysis of metal ions (Vol. 2). Wiley-VCH, Weinheim, Germany.

[2016NIE/ENE]
Nied, D., Enemark-Rasmussen, K., L'Hopital, E., Skibsted, J., Lothenbach, B. (2016) Properties of magnesium silicate hydrates (M-S-H). Cement and Concrete Research, 79, 323-332.

[2016SHK]
Shkol'nikov, E.V. (2016) Thermodynamics of the dissolution of amorphous and polymorphic TiO₂ modifications in acid and alkaline media. Russian Journal of Physical Chemistry A, 90(3), 567-571.

[2016SWA/HEA]
Swanton, S.W., Heath, T.G., Clacher, A. (2016) Leaching behavior of low Ca:Si ratio CaO-SiO₂-H₂O systems. Cement and Concrete Research, 88, 82-95.

[2016TOP/MAN]
Topolska, J., Manecki, M., Bajda, T., Borkiewicz, O., Budzewski, P. (2016) Solubility of pyromorphite Pb₅(PO₄)₃Cl at 5-65°C and its experimentally determined thermodynamic properties. Journal of Chemical Thermodynamics, 98, 282-287.

[2016WAL/SUT]
Walker, C.S., Sutou, S., Oda, C., Mihara, M., Honda, A. (2016) Calcium silicate hydrate (C-S-H) gel solubility data and a discrete solid phase model at 25°C based on two binary non-ideal solid solutions. Cement and Concrete Research 79, 1-30.
NOTE: C-S-H gel model as described in [2016WAL/SUT], but but uses Margules parameters to account for non-ideality and extended to include changes in temperature, t = 0.01-90 deg C.

[2017BER/LOT]
Bernard, E., Lothenbach, B., Rentsch, D., Pochard, I., Dauzeres, A. (2017) Formation of magnesium silicate hydrates (M-S-H). Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C, 99(June), 142-157.

[2017HUM]
Hummel, W. (2017) Ionic strength corrections and estimation of SIT iron interaction coefficients, p. 16. Paul Scherrer Institut, Villigen, Aargau, Switzerland.

[2017OGO/VIG]
Ogorodova, L., Vigasina, M., Melchakova, L., Rusakov, V., Kosova, D., Ksenofontov, D., Bryzgalov, I. (2017) Enthalpy of formation of natural hydrous iron phosphate: Vivianite. Journal of Chemical Thermodynamics, 110, 193-200.

[2017POL]
Pollmann, H. (2017) Cementitious Materials. De Gruyter, Berlin, Germany.

[2017ZHO/ZHO]
Zhou, X., Zhou, M., Wu, X., Wan, S., Gen, J., Hou, H. (2017) Studies of phase relations and AFm solid solution formations in the system CaO-Al₂O₃-CaCl₂-CaCrO₄-H₂O. Applied Geochemistry, 80, 49-57.

[2018SII/NEK]
Siidra, O., Nekrasova, D., Depmeier, W., Chukanov, N.V., Zaitsev, A., Turner, D.R. (2018) Hydrocerussite-related minerals and materials: structural principles, chemical variations and infrared spectroscopy. Acta Crystallographica B, 74, 182-195.

[2018XIO/KIR]
Xiong, Y., Kirkes, L., Knox, J., Marrs, C., and Burton, H. (2018) Experimental determination of the stability constant of ferrous iron borate complex [FeB(OH)₄]⁺ at 25°C from solubility measurements: Implications for transport of iron in reducing conditions. Chemical Geology, 493, 16-23.

[2019BEL/MAJ]
Bellmann, F., Majzlan, J., Grevel, K.-D., Dachs, E., Ludwig, H.-M. (2019) Analysis of thermodynamic data of calcium aluminate monocarbonate. Cement and Concrete Research, 116, 89-94.

[2019BEL/MAJ_a]
Monocarbonate AlH11 reported in [2019BEL/MAJ] used as a parent to estimate entropies and heat capacities for other carbonate bearing AFm phases using additive principles described in [1978HEL/DEL].

[2019PIC/PRO]
Pichavant, A., Provost, E., Fst, W., and Hochepeid, J.-F. (2019) Determination of the temperature dependence Titanium(IV) hydrolysis and complexation constants in aqueous sulfuric or chlorhydric solutions. Journal of Chemical Thermodynamics, 131, 184-191.

[2019WAL/ANR]
Walker, C.S., Anraku, S., Oda, C., Mihara, M., Honda, A. (2019) Formation of metal ion complexes in cementitious porewater and leachates. 15th International Congress on the Chemistry of Cement, 16-20th September, Prague, Czech Republic.

[Unpublished]
Generated in the development of this thermodynamic database.

RELEASE_NOTES
#

v2019v1.2 (2020-03-03)
a. References checked and tidied up.
b. TDB versions amended to be 1.0, 1.1, 1.2, etc. Version 1.01, 1.02, seems a little optimistic of the possible number of changes made in 1 fiscal year.

v2019v1.01 (2019-12-10)
a. Organic ions Formate- (CHO₂-) and Cyanide- (CN-) have been written as basis species to improve their stability. Metal ion complexes containing formate and non-metal ion complexes containing cyanide have also been added.
b. The basis species for Li, Li+ has been revised to be consistent with the updated SOPrTr = (2.925 +/- 0.04) cal/mol/K given by [1989COX/WAG]. All Li bearing species/complexes, element in the reference state, and Li bearing solid phases have been rewritten to accommodate this revision.
c. The basis species for Pb, Pb++ has been revised to be consistent with CpPrTr = -12.700 cal/mol/K and mole vol. = -15.600 cm³/mol derived by [1988SHO/HEL]. All Pb bearing species/complexes, element in the reference state, and Pb bearing minerals and solid phases have been rewritten to accommodate this revision.
d. The basis species for Ti, TiO₂(aq) (+ 2 H₂O = Ti(OH)₄(aq)) has been refitted to solubility data for the reaction Rutile = TiO₂(aq) [1967SHU/VIN][1974VAS/VOR][1993ZIE/JON][2009SCH/VOG]. All Ti bearing species/complexes, element in the reference state, and Ti bearing minerals have been rewritten to accommodate this change.
e. Miscellaneous revisions/additions for aqueous species/complexes include AlSiO(OH)₃+2, CaAl(OH)₄+, CaSiO₂(OH)₂(aq), Cu(OH)₃-, FeHPO₄(aq), Fe(OH)₄-, HClO(aq), HClO₂(aq), KCO₃-, LiSO₄-, MgAl(OH)₄+, MgOH+, MgSO₄, NaAl(OH)₄(aq), NaFe(OH)₄(aq), Si(OH)₄(aq), SiO(OH)₃-, SiO₂(OH)₂-2-, Sn+4, SnBr+, SnBr₂(aq), SnBr₃-, SnCl+, SnCl₂(aq), SnCl₃-, SnCl₄-2-, SnF+, SnF₂(aq), and SnNO₃+.
f. Miscellaneous revisions/additions for minerals and solid phases include TiO₂(am) and TiO₂(mic).
g. Additional comments given to variable water content cement minerals ettringite, monosulfate, monocarbonate, and hemicarbonat.

v2019v1.00 (2019-08-26)
a. Element lead, Pb added including basis species, relevant hydrolysis reactions and association reactions for the formation of Pb bearing aqueous species/complexes, element in the reference state, and Pb bearing minerals and solid phases. Polymeric Pb species/complexes have not been included owing to a lack of temperature/pressure

```

# extrapolation methods for polymeric species/complexes.
# b. Thermodynamic properties and revised Helgeson-Kirkham-Flowers equations of state for Fe bearing species/complexes
# FeB(OH)4-, FeCO3(aq), Fe(OH)4-, FeHP04(aq), FeH2P04+, and FeSO4(aq) have been derived.
# c. Miscellaneous minor revisions/additions to thermodynamic properties and/or revised Helgeson-Kirkham-Flowers
# equations of state for aqueous species/complexes include BaCl+, MgOH+, Ni(OH)2, and SnOHCl.
# d. Entries for Monoborate_Al (= Monoborate_AlH12) and Ettringite_hiB04 have been added from log K data reported
# in [2000ZHA].
# e. B parameter in Setschenow equation used for polar neutral species as identified by gamma, corrected from
# 0.41 -> 0.041 (PHREEQC formatted TDB only).
# f. Miscellaneous revisions /additions for solid phases include Bonattite, Cesium, Chalcantite, CuSO4(s),
# Friedel_Salt_Fe, Mg3(PO4)2(s), Phosphorus, Poitevinite, Titanium, and Vivianite.
# g. Some minor errors in references corrected.

# v2018v1.02 (2019-03-26)
#
# a. Corrected errors caused by unbalanced reactions for Aegirine and Montmor_MX80(WY).

# v2018v1.01 (2019-03-25)
#
# a. JAEA logo added to the top of the file.
# b. P04-3 properties corrected from [1989WAG/EVA].
# c. Parent mineral properties now given instead of being assigned null (999999) values. Mineral names have been
# changed to those given in the original papers. "parent" is still identified as a comment.
# d. Elements, aqueous/species, minerals, and gases in SUPCRT18.dat, GWB18.dat and PHREEQC18.dat are now equivalent.

# v2018v1.00 (2019-02-14)
#
# a. TDB file names have been renamed to avoid double counting with year and version number, e.g. 2017v1.08,
# 2018v1.09, etc. Now version numbers will be reset every Japanese fiscal year, e.g. 2018 v1.00,
# v1.01, v1.02, etc., so that year and version numbers can be easily followed.
# b. Tin (Sn) has been added to the JAEA TDB, including the basis species (Sn2+), redox reactions (Sn4+),
# relevant hydrolysis reactions, and formation reactions of tin bearing aqueous species/complexes and
# dissolution reactions of tin in its reference state (Sn(s)) and tin bearing minerals.
# c. Helgeson-Kirkham-Flowers equations of state (H 訪芳 EoS) parameters for anionic aqueous species/complexes
# have been re 貌 estimated using equations given in [2015SHV].
# d. Thermodynamic properties and H 訪芳 EoS parameters for the electron (default value = 0) have been added
# to the JAEA TDB in SUPCRT92 format. The electron is already included in the GWB code and written into the
# JAEA TDB in PHREEQC format.
# e. Thermodynamic properties and estimates of H 訪芳 EoS parameters for metal ion (ML) complexes of M = K+,
# Na+, Ca2+, and Mg2+ and L = AlO2·, FeO2·, SiO(OH)3·, SiO32·, HCO3·, CO32·, and SO42· have been compiled
# from the literature or (re-estimated using Deming linear correlation methods [1943DEM].
# f. Hydroxyl (OH) groups have been written into the formulae of relevant aqueous species/complexes in the TDBs
# formatted for GWB and PHREEQC. This mainly affected Si and Ti bearing aqueous species/complexes, which are
# now written as SiOx(OH)y and TiOx(OH)y, respectively.
# g. A discrete solid phase (DSP) type model has been used to describe the solubility behavior of a non 咲 deal
# solid solution between hydroxalcite_M4Ac (Mg4Al2(OH)12(CO3)(H2O)3) and hydroxalcite_M6Ac
# (Mg6Al2(OH)16(CO3)(H2O)5).
# h. The DSP type model used to describe the solubility behavior of the non 咲 deal solid solution between
# katoite_Al (Ca3Al2(OH)12) and grossular (Ca3Al2(SiO4)3) now includes enthalpic, entropic and volumetric
# Margules parameters to provide a full description of the solubility behavior of siliceous hydrogarnets
# as a function of temperature and pressure. The thermodynamic properties of grossular were re 貌 valued
# from calorimetry and phase relations published in the literature.
# i. Two phases, K_in_CSH_gel (K00.5) and Na_in_CSH_gel (Na00.5), have been added to model the uptake
# of the elements K and Na by C 亡 蓬 gel using distribution coefficients, Kd (g/mL).
# j. The solubility behavior of cementitious AFm and AFT minerals of varying water contents have been derived
# from published responses to changes in relative humidity [2015BAQ/MAT] [2016BAQ/MAT]. The same approach
# can be used to describe the solubility behavior of hydrated clay minerals of varying water contents from
# published responses to changes in relative humidity.
# k. Miscellaneous revisions/updates have been made to the thermodynamic properties of minerals/phases in making
# all of the above changes and also a number of other miscellaneous revisions/updates that were missed in
# previous versions of the JAEA 傍 DB.

# v01.08 (2018-02-14)
#
# a. Relative atomic mass (atomic weight) of elements taken from [19993MIL/CVI].
# b. Nitrogen, N basis species has been changed from NH3(aq) to NH4+. All aqueous species, minerals and gases
# containing N are now expressed in terms of NH4+. This change was necessary for sorption reaction modeling in
# CABARET.
# c. Thermodynamic properties of aqueous species/complexes previously estimated have been revised after finding
# inconsistencies in Eq. [35] & [37] reported by [1997SVE/SHO]. Affected species/complexes include:
# H2SiO4-2, H3SiO4-, MgH2SiO4, MgH3SiO4+, Na2H2SiO4(aq), NaH2SiO4-, and NaH3SiO4(aq).
# d. The hyphen/dash mark "-" in mineral names (e.g. Montmor-Ca) has been replaced by an underscore "_"
# (e.g. Montmor_Ca). Using a hyphen was causing problems when copying and pasting to/from other programs.
# e. Mineral suffix notation is used extensively:
# (i) _14A, _11A, _9A, _7A : Basal reflections in angstroms (A).
# (ii) _alpha, _beta, _high, _low, _dis, _ord : alpha, beta, high, low, disordered, and ordered, respectively,
# structural forms of the same mineral.
# (iii) _Al, _Ca, _Fe, _K, _Mg, _Na, _NH4, _Si and combinations thereof : Typically idealized end-member
# stoichiometries (e.g. Montmor_Ca, Nontro_Mg, Phillipsite_K, etc.). FeX2 and FeX3 are used in reference to
# multiple site occupancies by Fe (II, III) (e.g. Nontro_FeX3(avg) has a composition of
# Fe0.2(Mg0.1Fe1.95)Fe0.45Si3.55)O10(OH)2) and additional numbers (e.g. _AlSiO4, FeSiO84, etc.) are used
# in reference to the stoichiometry of solid solution components.
# (iv) (s) : Solid. (st) : Structural. (l) : Liquid. (mic) : Microcrystalline. (gel) : Gel. (am) : Amorphous.
# (z) : zeolitic. (deh) : Dehydrated. (avg) : Averaged, more representative stoichiometry.
# (v) _Parent : 'Parent' mineral used to derive thermodynamic properties of other, structurally similar minerals by
# additive principles described in Helgeson et al. (Helgeson et al., 1978).
# (vi) _II, _III : Variants of the same mineral derived from different sources and/or methods (check source and gflag)
# (vii) _alk, _dia : Zeolites formed in saline alkaline lake, diagenetic environments: see [2001CHI/APP].
# f. The thermodynamic properties of Katoite_Al [1936VON/MOS], [1943WEL/CLA], [1954PEP/WEL], [1958GAR],
# [1966FAU], [1968ROB], [1979EDE/SAT], [1992ATK/BEN], [1992BEN/REA] and Grossular [1966HAY],
# [1966NEW], [1968STR], [1970BOE], [1974SHM], [1974HUC], [1977PER/ESS], [1978CHA], [1979KOL/NO6],
# [1979KRU/ROB], [1979WES/ESS], [1980HAS/WES], [1988BER], [1996BOS/CHA], [2012DAC] have been
# derived. These phases are used as end-member components in a binary non-ideal solid solution describing the
# solubility behavior of siliceous katoite of Al/Si ratios = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4. (miscibility gap here),
# 0.8, 0.9, & 1.0 from [1994QU1/MAJ], [1999GLA/TYR], [2000COU], [2000ZHA], [2007MAT/LOT], [2010BAL/LOT],
# [2012GEI/DAC], [2014DIL/LOT].
# g. Thermodynamic properties of structural, H2O(st) and zeolitic, H2O(z) water have been added to assist in
# estimation calculations by additive principles as described in [1978HEL/DEL].
# h. Common chemical reagents have been added to assist experimental design and formulate synthetic ground/seawaters,
# including: Al(NO3)3(H2O)6(s), AlCl3(s), Ca(NO3)2(s), CaCl2(H2O)2, CaCl2(s), FeCl2(s), FeCl3(s),
# FeSO4(s), H3BO3(s), K2CO3(s), KBr(s), Melanterite, Mg(NO3)2(s), MgCl2(H2O)6(s), MgCl2(s),
# MgSO4(s), Na2CO3(s), Na2SiO3(s), NaBr(s), NaF(s), NaHCO3(s), NH4NO3(s), Rozenite, SrCl2(H2O)6(s),
# SrCl2(s), and Szomolnokite.
# i. Fe(OH)2(s) has been removed. Instead Fe(OH)2(am) [1908MUL], [1909KRA], [1924SHI/MCH], [1925WHI/RUS],
# [1950ARD], [1978JOH/BAU], [1978HEL/DEL_a] and Fe(OH)2(mic) [1910LAM], [1930ELD], [1932MUR],
# [1932RAN/FRA], [1943VON/RIH], [1953LEU/KOL], [1964DAU/DAU], [1978HEL/DEL_a], [1995ZIE/JON],
# [1999REF/BON] have been added.
# j. A new M-S-H gel solubility model has been developed based on non-ideal binary solid solution between end-
# members MSH06 and MSH15 to describe the solubility behavior of M-S-H gel of Mg/Si ratios = 0.6, 0.7, 0.8, 0.8, 0.9,
# 1.0, 1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5 after [2014LOT/NIE], [2016NIE/ENE], [2017BER/LOT], [Unpublished].
# k. C-S-H gel solubility model based on [2016WAL/SUT] has been revised. Non-ideality of C-S-H gel solid solution
# uses Margules parameters, towards the future development of a C-A-S-H gel model. Additional DSP phases at
# Ca/Si ratios = 0.8, 0.9 and 1.0 have been included to add more detail as congruent dissolution is approached at

```

Ca/Si ratio = 0.85 (see discussion in [2016WAL/SUT]) and additional datasets, not used in [2016WAL/SUT], have
been used to derive the model [1991ATK/HEA], [1994ATK/GLA], [2014PLU], [2014LHO], [2015HAA/NON],
[2015MYE/LHO_a], [2015MYE/LHO_b], [2015R00], [2016SWA/HEA].
l. Miscellaneous additions/updates include: Almandine, Brushite, C12A7, C2F, CA, CA2, FA_glass, Kerolite,
Lizardite, Magnesioferrite, Melanterite, Na2HPO4(s), Na2HPO4(H2O)2(s), Perovskite, Portlandite, Rozenite,
SO3_beta, Szomolnokite, Wollastonite.
m. Values for delfGO, delfHO or SOPrTr that are calculated from the delfGO = delfHO - 298.15*(SOPrTr -
SUM(SO elements)) relation are marked with an asterisk "*", although this is still incomplete.

v01.07 (2017-02-14)

a. This version is now fully checked, but still please report errors if you find them.
b. Debye-Huckel A and B terms are now calculated from Helgeson and Kirkham [1974HEL/KIR_a].
c. Osmotic coefficients in GWB format TDB have been refitted to source data [1962LIE/STR], [1969GAR],
[1970LIU/LIN], [1974GIB/SCA].
d. Elements Barium (Ba), cesium (Cs), copper (Cu), lithium (Li), manganese (Mn), nickel (Ni), rubidium (Rb),
titanium (Ti), and zinc (Zn) have been added to the JAEA TDB (v1.07), including all necessary basis species,
relevant hydrolysis reactions and redox reactions for aqueous species/complexes, elements in their reference
predict states, minerals, and solid phases. These elements were added for calibration of the polymer model
used to estimate the thermodynamic properties of clay and zeolite minerals.
e. Updates to the aqueous species/complexes include basis species, redox reactions, hydrolysis reactions and
complex formation associated with the addition of the new elements explained in d. above.
f. The thermodynamic properties of all cementitious AFT, AFm, katoite (hydrogarnet), and hydrothermal minerals
have been revised to provide a match to log equilibrium constants, log Keq values derived from experimental
solubility data. Binary non-ideal solid solution models have been developed to describe the variable
composition and solubility behavior of the siliceous Al and Fe bearing katoite minerals. Hydrothermal
compositions and suffix notation has been revised to be consistent with cement chemistry shorthand notation,
e.g. M4A instead of M2A, and M6A instead of M3A.
g. All 2:1 di-octahedral (montmorillonite, beidellite, nontronite, illite) and tri-octahedral (saponite) clays
have been updated to include: (i) changes to average (avg) compositions, (ii) delfGO (cal/mol) is derived
from a new (unpublished) clay polymer model, based on all accessible delfGO data, (iii) interlayer cations
extended to include K+, Na+, Cs+, NH4+, Ca+2, Mg+2, Fe+2 and (iv) the use of new parents [2012GAI/BLA]
[2013GAI/BLA] to derive SO (cal/K/mol) and CpO (cal/K/mol) from additive principles described in Helgeson et
al. [1978HEL/DEL].
h. The thermodynamic properties of 8 zeolite minerals that were measured calorimetrically or solved by phase
relations have been reinstated. Estimated values using the polymer model (see next point) are also provided
for direct comparison wherever possible using _II identifier.
i. Zeolite stoichiometries have been updated to be consistent with those reported in [1966DEE/HOW],
[2001ARM/GUN].
All zeolite entries have been updated to be consistent with the revised zeolite polymer model as described in
[2011ART/SAS], including all available published thermodynamic data for zeolites and the update to H4SiO4[aa]
in JAEA-TDB (v1.06).
j. A polyhedral model was used to provide estimates of delfGO for layer silicates as a sum of their structural,
'silicated' oxide and hydroxide components. Additive principles are used to provide estimates of SO and Cp
from structurally equivalent or similar minerals. Missing molar volumes, VO (cm3/mol) of the layer silicates
have been calculated from published unit cell dimensions.
k. Values of delfGO and delfHO that were originally derived by Helgeson et al. [1978HEL/DEL] from high PT phase
relations that included SiO2(aq) (+ 2 H2O = H4SiO4(aq)) (e.g. 2 talc = 3 forsterite + 5 SiO2(aq) + 2 H2O =
H4SiO4(aq)) in the JAEA TDB (v1.06).
l. Revisions have also been made to the thermodynamic properties of 43 minerals in making the above changes
and also a number of other miscellaneous revisions that were missed in previous versions of this TDB.
m. Thermodynamic properties of Br2(g) now uses CODATA [1978COX] recommended values.
n. All GWB and PHREEQC datablocks have been reformatted to contain more details where available, including
retrieval method (identified with gflag 1, 2 or 3), extrapolation algorithm (entirely SUPCRT92 [1991JOH/OEL]
where temperature extrapolations were undertaken), CpPrTr (cal/mol/K), mole vol. (cm3/mol), and mole wt.
(g/mol).
o. All references checked and tidied up.

v01.06 (2015-12-18)

a. All thermodynamic properties have been compiled, estimated and/or optimized for all aqueous
species/complexes, minerals and gases in the SUPCRT92 [1992JOH/OEL] database. All reaction
properties have therefore been calculated through the computer program SUPCRT92 (v1.1) [1992JOH/OEL].
b. Uncertainties of thermodynamic properties are shown at the 95% confidence interval wherever possible.
This includes default values for aqueous species, which are based on delGof = +/- 0.6 kcal/mol, delHof
= +/- 1.6 kcal/mol and SoPrTr = +/- 5 cal/mol/K [1995OEL/HEL][1997SVE/SHO]. Thermodynamic properties
are used at one additional significant figure to the known uncertainty, e.g. delfGO = -1234.56 +/- 1.2
kcal/mol. The only exceptions to this are:
(i) Log equilibrium constants, log k are now shown to 4 decimal places as calculated through SUPCRT
regardless of the associated uncertainty, e.g. log_k = 12.3456 # +/- 1.2.
(ii) Thermodynamic properties are used as given if the uncertainty is unknown. Unknown values are
identified with 999999, e.g. delfGO = -1234.567 +/- 999999 kcal/mol.
c. Activity corrections for charged species/complexes solved in PHREEQC (v2.03 onwards) and GWB uses the
B-dot extended Debye Huckel equation using individual ion sizes.
d. Activity corrections for nonpolar neutral species (e.g. H4SiO4) are calculated:
(i) in the PHREEQC format TDB from the Drummond (1981) polynomial [1981DRU]:

$$\ln(\gamma) = (C+FT+G/T)*Im - (E+HT)*(Im/(1+Im)) \dots [1]$$
where C, F, G, E, and H are constants, -1.0312, 0.0012806, 255.9, 0.4445, and -0.001606, respectively,
Im is ionic strength and T is temperature (K) using co2_llnl_gamma identifier.
(ii) in the GWB format TDB from the following polynomial [1996BET]:

$$\log_{10}(\gamma) = a*Im + b*Im^2 + c*Im^3 \dots [2]$$
where a, b and c vary with temperature using the identifier ion size = -0.5 A
e. Activity corrections for polar neutral species (e.g. HF) are calculated:
(i) in PHREEQC by the Setchenow equation [1889SET]:

$$\log_{10}(\gamma) = b*Im \dots [3]$$
by the last term of the WATEQ extended debye huckel equation using the identifier "_gamma", where b is
set a value = 0.041 for all species/complexes and is used at all temperatures.
(ii) in GWB by the Bdot model, which for neutral species is reduced to:

$$\log_{10}(\gamma) = b_dot*Im \dots [4]$$
using the identifier ion size <= -1.0 where b_dot varies with temperature.
f. PHREEQC format TDB datablocks largely rewritten to contain thermodynamic property information.
g. (i) Updates to aqueous species/complexes include addition of Bromine and changes to silica species.
(ii) Newly added aqueous species/complexes are due to addition of Bromine and alkali silicates,
carbonates and sulfates.
h. (i) Updates to minerals are largely a consequence of updating the thermodynamic
properties of H4SiO4(aq). Temperature dependency added to C-S-H gel solubility model [unpublished].
(ii) Newly added minerals/phases are largely zeolites.

v01.05 (2015-01-21)

a. This version unchecked. Please report errors.
b. New Walker et al. [2016WAL/SUT] C-S-H gel solubility model included (CSH165 -> CSH055). Currently only
valid at 25 deg C.
c. Activity correction for nonpolar neutral species (e.g. H4SiO4) changed to Drummond (1981) polynomial:

$$\ln(\gamma) = (C+FT+G/T)*Im - (E+HT)*(Im/(1+Im))$$
where C, F, G, E, and H are constants, -1.0312, 0.0012806, 255.9, 0.4445, and -0.001606, respectively,
Im is ionic strength and T is temperature (K) using co2_llnl_gamma identifier. Ion size parameter still
shown for reference only, but not used in above polynomial.
d. Activity corrections for polar neutral species (e.g. HF) now correctly defined by Setchenow equation:

$$\log_{10}(\gamma) = b*Im$$
by the last term of the WATEQ extended debye huckel equation using the identifier _gamma. b is set a
value = 0.1 for all species and is used at all temperatures.

```

# e. Thermodynamic properties of H3SiO4-, H2SiO4-2, CaH3SiO4+, CaH2SiO4, MgH3SiO4+, and MgH2SiO4
# recalculated from the literature. Log K values extrapolated to zero ionic strength using SIT theory (all species/-
# complexes) and temperature dependency calculated from the assumption drHO = constant for H3SiO4- and
# H2SiO4-2, through SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as CaH3SiO4+ and MgH3SiO4+, and from a 1-term temperature
# extrapolation for CaH2SiO4 and MgH2SiO4 [1994GU/GAM]. Uncertainties for these species/complexes added.
# f. All silica containing cementitious minerals recalculated from CEMDATA07 (v2).
# g. Molar volumes of minerals added to PHREEQC formatted TDB, identified by -Vm
# h. "data source" information added to PHREEQC formatted TDB.
# i. "date" information (e.g. 2014-Nov-27) added for each entry to keep track of updates in future revisions/-
# versions.
# j. Uncertainty assignments have started to be added in based on values of delGof = +/- 2.51 kJ/mol, delHof =
# +/- 6.72 kJ/mol and SoPrTr = +/- 20.92 J/mol/K for aqueous species [1995OEL/HEL][1997SVE/SHO] and
# delGof = +/- 2.46 kJ/mol, delHof = +/- 2.54 kJ/mol and SoPrTr = +/- 2.09 J/mol/K for minerals
# [1995OEL/HEL] (reported uncertainty#1.96[sigma]#4.184[J/cal]).
# k. Additional/updated minerals/PHASES: Friedel_Salt and Friedel_Salt_AI

# v01.04 (2014-04-01)
#
# a. Adapted Lothenbach et al. [2008LOT/MAT] C-S-H gel model recalculated through SUPCRT92 using ideal solid
# solution relations for dfGO, dfHO, SO, CpO (Maier_Kelly a,b,c coefficients), and VO
# b. All zeolites recalculated from source with [2011ART/SAS] revised polymer model, affecting all zeolites
# except Laumontite taken from [1978HEL/DEL].
# c. Additional minerals/PHASES: Chabazite_Ca, Clinoptilolite_Ca, Dachiardite_Ca, Gismondine, Mordenite_Ca,
# Phillipsit_Ca, Mononitrite_AI, and Mononitrate_AI. Laumontite (taken from [1978HEL/DEL]) renamed to
# Laumontite_Ca.
# d. Heulandite renamed to Heulandite_dia to identify its diagenetic origin.

# v01.03 (2014-02-20)
#
# a. Aqueous species checked and formatted in GWB/PHREEQC format TDBs, derived from v01.03 (2014-02-20)
# for SUPCRT92 [1992JOH/OEL].
# b. Log K values for CSH05->CSH16 in GWB/PHREEQC format TDBs rewritten to be more consistent with each
# other (calculated values unaffected).
# c. Analcime-like phase (Analcime-SiR06) added from Oda et al. [2014ODA/WAL].
# d. Added gases S2(g) and NH3(g) to GWB/PHREEQC format TDBs.
# e. References tidied up in SUPCRT92/GWB format TDBs, references currently not reported in PHREEQC
# formatted TDB.
# f. Calcite and aragonite retaken from [1978HEL/DEL], [1982PLU/BUS].

# v01.02 (2013-12-26)
#
# a. Derived from sprons14v0102.dat for SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# b. B, F, I, N, P, and Sr added back into the TDB, largely as aqueous species.
# c. All species and (legacy) minerals still commented out from v0101 have been removed.
# d. Redox sensitive species included C(-4,+4), Fe(+2,+3), H(0,+1), I(-1,-0.33,+1,+5,+7),
# N(-3,0,+3,5), and S(-2,+2,+3,+4,+5,+6,+7,+8). Note inaccurate representation of S chained
# species (e.g. S2-2, S4O6-2) and cyanide ions (e.g. CN-), but these seldom form to any degree.
# e. Hydrogarnet renamed to Katoite; problems with mineral name length in SUPCRT92.
# f. Additional/updated PHASES: Al(OH)3(mic), C2AH75 (C2AH7.5), C4AH13, C4AH19, C4FH13, Fe(OH)3(mic),
# Friedel_Salt_Fe, Hemiacarbonate_Fe, Katoite_AI, Katoite_AISiO41 (Katoite_AISi(0.41)), Katoite_AISiO84
# (Katoite_AISi(0.84)), Katoite_FeSiO95 (Katoite_FeSi(0.95)), Katoite_FeSi152 (Katoite_FeSi(1.52)),
# Monocarbonate_Fe, Monosulfate_Fe, and Mullite.
# g. Discrete CSH gel phases (C/S = 0.5 - 1.6) renamed to exclude brackets () and decimal point ".", due to
# problems opening in the computer program CABARET.
# h. Aqueous species still largely unchecked.

# v01.01 (2013-12-02)
#
# a. All none essential elements temporarily removed (commented out with #) (B, Ba, Bi, Br, Cs, F, I, Li,
# Mn, N, Ni, P, Pb, Pd, Ra#, Rb#, Sb, Se, Sn, Sr, Th, U, Zr).
# b. Non-ideality of liquid phase calculated using B-Dot activity correction (LLNL_AQUEOUS_MODEL_PARAMETERS,
# -llnl_gamma) as used in GWB.
# c. All PHASES renamed and stoichiometries rewritten.
# d. All reactions for PHASES written in terms of basis species as appropriate (Al+3, HCO3-, Ca+2, Cl-, Fe+2,
# H+, H2O, K+, Mg+2, Na+, O2, SO4-2, H4SiO4).
# e. Temperature limit of analytical_expression entered under PHASES. It is up to the user to stay within the
# recommended range.
# f. CSH gel is described by a series of discrete solid phases of Ca/Si ratio = 0.5 -> 1.6, based on
# [2008LOT/MAT] two ideal binary SSAS: (i) SiO2(am) <> Tobermorite-I(gel) and (ii) Tobermorite-II(gel) <>
# Jennite(gel) as shown under PHASES.
# g. Currently unchecked species (largely commented out) have units in kcal/mol.

# v01.00
#
# Starting point = JAEA 130331c1.tdb [2012ART/SAS] revised from JNC 990900c1.tdb [1999ART/SAS]

```


Appendix IV

化学反応－物質輸送解析に用いたパラメータ

化学反応－物質輸送解析に用いたパラメータ

本文 4.2.3「先進的セメント－緩衝材相互作用評価モデルの高度化」において実施した化学反応－物質輸送連成モデルによる解析について、用いたパラメータを以下に示す。

1. 鉱物設定

1.1 緩衝材

緩衝材としてケイ砂を混合せずにクニゲル V1 をそのまま使用することを想定した。初期鉱物組成は、過去の報告では付録表 1.1-1 のように設定していたが(日本原子力研究開発機構(2018))、本研究ではモンモリロナイト重量比の最新分析結果(55.7%)を用いることとし、モンモリロナイトの比率が増加した分はその他の鉱物を均等に減少させた。また、後述する PHREEQC による初期間隙水組成計算の際、80℃の実験であるためカルセドニとカルサイトの量がわずかに 25℃から変化する点も反映させ、

付録表 1.1-2 の通りとした。

付録表 1.1-1 日本原子力研究開発機構(2018)¹⁾で用いられているクニゲル V1 の鉱物組成

Mineral	wt.%
Montmorillonite	48
Quartz	0.6
Chalcedony	38
Calcite	2.4
Dolomite	2.4
Analcime	2.35
Albite	2.35
Anorthite	3.3
Pyrite	0.6

付録表 1.1-2 緩衝材初期鉱物組成(80℃)

Mineral	wt.%	Mol. conc. [mol/dm ³]	vol.%
Montmorillonite	55.6924	1972.6621	26.7972
Quartz	0.5111	110.5795	0.2509
Chalcedony	32.3686	7003.3654	15.8892
Calcite	2.0580	267.3126	0.9873
Dolomite	2.0443	144.1223	0.9276
Analcime	2.8110	165.9861	1.6117
Albite	2.0017	99.2387	0.9949
Anorthite	2.0017	93.5370	0.9428
Pyrite	0.5111	55.3836	0.1326
Porosity			51.4658
Total	100		100

1.2 セメント

セメントとして HFSC424 と OPC を設定した。初期鉱物組成および初期間隙水組成は、原子力機構が開発したセメント水和反応モデル（日本原子力研究開発機構(2018)）に基づいて計算した。OPC, シリカフューム, フライアッシュの化学組成は付録表 1.2-1 の通りとした。HFSC424 は OPC, シリカフューム, フライアッシュを 4:2:4 の重量比で混合したものとした。

付録表 1.2-1 OPC, シリカフューム, フライアッシュの化学組成(wt.%)

	OPC	Silica fume	Fly ash
SiO ₂	21.57	92.8	55.9
Al ₂ O ₃	5.3	0.69	26.3
Fe ₂ O ₃	2.76	1.43	4.75
CaO	64.3	0.44	4.34
MgO	1.95	0.77	0.92
SO ₃	1.95	< 0.01	0.21
Na ₂ O	0.26	0.24	0.63
K ₂ O	0.46	1.23	0.69
CO ₂	0.365*	0	0
LOI*	0.73	2.31	3.00

*LOI : 強熱減量

付録表 1.2-1 の値から計算される HFSC424 および OPC の未水和鉱物組成をそれぞれ付録表 1.2-2 及び付録表 1.2-3 に示す。

付録表 1.2-2 HFSC424 の未水和鉱物組成

Mineral	[mol/kg]
Anhydrite	8.2783 E-2
C2S_beta	0.5198
C3A	0.1388
C3S	0.9162
C4AF	6.9135E-2
Calcite	3.3175E-2
Corundum	1.3535 E-2
FA_glass	3.0992 E-2
FA_glass (unreacted)	0.2670
Graphite	0.9991
Hematite	1.791 E-2
K ₂ O(s)	2.8069 E-2
K ₂ SO ₄ (s)	1.758 E-2
Lime	1.5693 E-2
Mullite	0.1521
Na ₂ O(s)	1.6973 E-2
Na ₂ SO ₄ (s)	7.551 E-3
Periclase	0.2317
Quartz	0.5033
SiO ₂ (am)	2.3044
SiO ₂ (am) (unreacted)	0.7846
SO ₃ _beta	2.498 E-4

付録表 1.2-3 OPC の未水和鉱物組成

Mineral	[mol/kg]
Anhydrite	0.1807
C2S_beta	1.2995
C3A	0.347
C3S	2.2905
C4AF	0.1728
Calcite	0.0829
K ₂ O(s)	0.0049
K ₂ SO ₄ (s)	0.044
Na ₂ O(s)	0.0231
Na ₂ SO ₄ (s)	0.0189
Periclase	0.4838

上記の未水和鉱物組成を用いて PHREEQC を用いて水和計算を行った。計算の際、HFSC424 では液固比を 0.5 とし、OPC では 0.55 とした。また、温度は実験に合わせて 80°C とした。計算された HFSC424 と OPC の初期水和物組成をそれぞれ付録表 1.2-4、付録表 1.2-5 に示す。これらのうち、*印を付けた鉱物についてはその後の反応に関与しないものとした。

付録表 1.2-4 HFSC424 の初期水和物組成(80°C)

Mineral	vol.%	
	80°C	50°C
CSH095	14.9369	27.3684
CSH100	20.0722	6.8169
Ettringite-Al	0.0000	3.1625
Katoite-AlSi08*	5.2839	4.5329
Fe(OH) ₃ (mic)*	0.5988	0.5857
Brucite	0.9097	0.8898
Corundum*	0.0514	0.0502
Hematite*	0.0804	0.0787
Mullite*	3.0356	2.9692
Quartz	1.6937	1.6567
Graphite*	0.7851	0.7680
Anhydrite*	0.2889	0.0000
Calcite	0.1817	0.1777
Porosity	52.0818	50.9433

付録表 1.2-5 OPC の初期水和物組成(80°C)

Mineral	vol.%	
	80°C	50°C
Portlandite	16.5729	16.7325
CSH165	31.7383	30.5281
Ettringite-Al	0.2476	7.0775
Katoite-AlSi08	9.4934	8.0046
Katoite-FeSi084*	0.0000	3.2797
Brucite	1.5384	1.5199
Monosulfate_Fe*	7.1526	0.0000
Calcite	0.3952	0.3904
Porosity	32.8616	32.4673

1.3 二次鉱物の設定

二次鉱物は、付録表 1.3-1 のように設定した。

付録表 1.3-1 二次鉱物設定

Mineral group	Mineral
CSH	CSH165-085
CASH	Katoite_Al, Stratlingite_Al
Aft/AFm	Ettringite_Al, Hemicarbonatite_Al, Friedel_Salt_Al
Zeolite	Clinoptilolite(Na, K, Ca, alk, dia), Heulandite(dia), Laumontite(Ca, dia), Phillipsite(Na, K, alk, dia)
Cement	Gypsum

2. 初期間隙水設定

緩衝材、セメントの間隙水および接触液の初期化学組成を PHREEQC により計算した。モンモリロナイトのイオン交換選択係数は付録表 1.3-1 の通りとした（日本原子力研究開発機構(2018)）。

付録表 1.3-1 モンモリロナイトのイオン交換選択係数

	log <i>K</i>
2ZNa-Z ₂ Ca	0.69
ZNa-ZK	0.42
2ZNa-Z ₂ Mg	0.27

間隙水、接触液の初期化学組成の計算結果をそれぞれ付録表 1.3-2 及び付録表 1.3-3 に示す。

付録表 1.3-2 初期間隙水の組成(80°C)

	Buffer	HFSC	OPC
pH [-]	7.070	10.309	11.359
Al	-	2.15E-03	2.16E-04
C	2.96E-03	2.79E-05	4.28E-05
Ca	3.57E-03	4.13E-03	4.53E-03
Cl	1.96E-03	-	-
Fe	-	2.47E-06	6.72E-07
K	7.75E-04	2.35E-01	3.58E-01
Mg	2.34E-04	1.26E-05	1.37E-07
Na	1.40E-01	1.51E-01	3.07E-01
S	7.02E-02	1.78E-01	2.32E-01
Si	9.94E-04	7.89E-04	7.77E-05

付録表 1.3-3 接触液の初期組成(80°C)

	Pure water	NaCl solution
pH [-]	6.303	6.256
Na	-	6.65E-01
Cl	-	6.65E-01

3. その他の設定

3.1 物質輸送特性

実効拡散係数 D_e [m²/s]は、緩衝材は式(1)、セメント系材料は式(2)を用いて計算した。

$$\begin{aligned} D_e &= D_w \times \theta^n = 2.272 \times 10^{-9} \times \theta^n \\ n &= 2.22 \times f_s^{0.13} + 1 \end{aligned} \quad (1)$$

$$D_e = D_w \times \varepsilon^a = 2.272 \times 10^{-9} \times \varepsilon^{3.05} \quad (2)$$

ここで D_w は自由水中の拡散係数[m²/s]、 θ は緩衝材の間隙率、 f_s はベントナイト中のモンモリロナイト含有割合、 ε はセメント系材料の間隙率、 a はセメントの種類に応じた係数である。 D_w は 80°C の値 6.51e-9 を用い、 a の値は HFSC では 5.84、OPC では 3.05 とした。

3.2 鉱物の溶解速度式

日本原子力研究開発機構(2014)で報告されているデータセットを用いた。以下に概要を示す。

3.2.1 一般鉱物の溶解速度式

反応ギブス自由エネルギー ΔG_r を非線形関数とした場合の溶解反応速度式は(3)式で表される(酸性項は省略)。

$$r = A \cdot \left[k_n \cdot \exp\left\{\frac{-e_n}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right\} + k_b \cdot \exp\left\{\frac{-e_b}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right\} \cdot a_{H^+}^n \right] \cdot \left[1 - \exp\left\{m \cdot \left(\frac{\Delta G_r}{RT}\right)^p\right\} \right] \quad (3)$$

ここで、 r は溶解速度[mol m⁻³ s⁻¹]、 k_n および k_b は中性領域およびアルカリ性領域での単位比表面積当たりの溶解速度定数[mol m⁻² s⁻¹]、 A は水溶液の単位体積当たりの反応表面積[m⁻¹]、 e_n および e_b は中性領域およびアルカリ性領域でのみかけの活性化エネルギー[J mol⁻¹]、 R は気体定数[J mol⁻¹ K⁻¹]、 T および T_0 は絶対温度および 25°C における絶対温度[K]、 a_{H^+} は水素イオン活量[-]、 m 、 n 、 p は経験的パラメータ[-]である。また、反応ギブス自由エネルギー ΔG_r は(4)式で表される。

$$\Delta G_r = RT \cdot \ln\left(\frac{IAP}{K}\right) \quad (4)$$

ここで、 IAP は反応の化学量論に応じた溶存化学種の活量積[-]、 K は反応平衡定数[-]を表す。さらに、一部の鉱物において m のパラメータは(5)式で表される。

$$m = \exp\{4.75 \cdot \log(T) - 0.27 \cdot \text{pH} - 13.39\} \quad (5)$$

なお、 $m=p=1$ の場合、(3)式は飽和指数 SI を用いて、(6)式とも表される。

$$r = A \cdot \left[k_n \cdot \exp\left\{\frac{-e_n}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right\} + k_b \cdot \exp\left\{\frac{-e_b}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right\} \cdot a_{H^+}^n \right] \cdot [1 - 10^{SI}] \quad (6)$$

付録表 3.2-1 に(3)式を用いる場合の溶解速度式中の定数を示す。なお、反応表面積 A については別途記述する。また、C-S-H ゲルをはじめとした、反応速度が温度・pH に依存しないと仮定した鉱物については後述する。

付録表 3.2-1 (3)式を用いる場合の溶解速度式中の定数

	k_n [mol m ⁻² s ⁻¹]	k_b [mol m ⁻² s ⁻¹]	e_n [kJ mol ⁻¹]	e_b [kJ mol ⁻¹]	n	m	p
Albite	3.98*10 ⁻¹³	5.25*10 ⁻¹⁷	56.6	34.8	-0.5	(5)式	3
Anorthite	3.98*10 ⁻¹³	5.25*10 ⁻¹⁷	56.6	34.8	-0.5	(5)式	3
K-Feldspar	3.89*10 ⁻¹²	6.31*10 ⁻²²	38	94.1	-0.823	(5)式	3
Analcime		3.91*10 ⁻¹²		77.1	0	1	1
Chalcedony		3.09*10 ⁻¹⁵		108.4	-0.52	1	1
Brucite		5.75*10 ⁻⁹		42.0	0	1	1
Hydrotalcite_ M6Ac		5.75*10 ⁻⁹		42.0	00	1	1

3.2.2 モンモリロナイトの溶解速度式

モンモリロナイトの溶解速度式は各イオン型共通で(7)式を用いる。

$$r = A \cdot \left[k_b \cdot a_{H^+}^n \cdot \exp\left(\frac{e_b}{RT}\right) \right] \cdot \left[1 - \exp\left\{ m \cdot \left(\frac{\Delta G_r}{RT} \right) \right\}^p \right] \quad (7)$$

付録表 3.2-2 にモンモリロナイトの溶解速度式中の定数を示す。

付録表 3.2-2 モンモリロナイトの溶解速度式中の定数

	$-K_b \cdot a_{H^+}^n$ [mol m ⁻² s ⁻¹]	e_b [kJ mol ⁻¹]	m	p
Montmorillonite	10 ^{0.212*pH-6.40}	38.7	(5)式	3

3.2.3 炭酸を含む鉱物の溶解速度式

炭酸を含む鉱物の溶解速度式は CO₂ 分圧 P_{CO_2} を用いて(8)式で表される。

$$r = A \cdot \left[k_a \cdot a_{H^+}^1 + k_n \cdot \exp\left\{ \frac{-e_n}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right\} + k_b \cdot \exp\left\{ \frac{-e_b}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right\} \cdot P_{CO_2}^n \right] \cdot \left[1 - \exp\left\{ m \cdot \left(\frac{\Delta G_r}{RT} \right) \right\}^p \right] \quad (8)$$

ここで、 k_a は酸性領域での単位比表面積当たりの溶解定数 [mol m⁻² s⁻¹]、 e_a は酸性領域でのみかけの活性化エネルギー [J mol⁻¹]、1 は経験的パラメータ [-] である。付録表 3.2-3 に各鉱物に対応するこれらのパラメータを示す。

付録表 3.2-3 炭酸を含む鉱物の溶解速度式中の定数

	k_a [mol m ⁻² s ⁻¹]	k_n [mol m ⁻² s ⁻¹]	k_b [mol m ⁻² s ⁻¹]	e_a [kJ mol ⁻¹]	e_n [kJ mol ⁻¹]	e_b [kJ mol ⁻¹]	l	n	m	p
Calcite	5.01E-1	1.55E-6	3.31E-4	14.4	23.5	35.4	1	1	1	1
Dolomite	6.46E-4	2.95E-8	3.09E-6	36.1	52.2	34.8	0.5	0.5	1	1

3.2.4 石英の溶解速度式

石英の溶解速度は Al(OH)₄⁻ の反応抑制を考慮して(9)式で表される。

$$r = A \cdot \left[k_a \cdot \exp \left\{ \frac{-e_a}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right\} \cdot a_{H^+}^1 + (1 - S) \cdot k_b \cdot \exp \left\{ \frac{-e_b}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right\} \cdot a_{H^+}^n \right] \cdot \left[1 - \exp \left\{ m \cdot \left(\frac{\Delta G_r}{RT} \right) \right\} \right] \quad (9)$$

ここで、 S は Al(OH)₄⁻ の物質濃度 [Al(OH)₄⁻] [mol/kg] を用いて(10)式で表される。

$$S = \frac{(-3000 \cdot \text{pH} + 39700) \cdot (-0.196 \cdot \text{pH} + 2.94) \cdot [\text{Al(OH)}_4^-]}{1 + (-3000 \cdot \text{pH} + 39700) \cdot [\text{Al(OH)}_4^-]} \quad (10)$$

石英に関するパラメータは付録表 3.2-4 のようにまとめられる。

付録表 3.2-4 石英の溶解速度式中の定数

	k_a [mol m ⁻² s ⁻¹]	k_b [mol m ⁻² s ⁻¹]	e_a [kJ mol ⁻¹]	e_b [kJ mol ⁻¹]	l	n	m	p
Quartz	4.34*10 ⁻¹²	7.20*10 ⁻¹⁵	87.6	8.6*pH+13.06 (上限 100)	0.3	-0.3	1	1

3.2.5 反応速度が温度、pH に依存しないものと仮定した鉱物の溶解速度式

これらの鉱物の場合、(6)式をさらに簡略化した形式になり、溶解速度は以下のように表される。

$$r = A \cdot k \cdot [1 - 10^{Sl}] \quad (11)$$

原子力機構が開発した熱力学データベースでは、C-S-H ゲルは Ca/Si 比 0.55-1.65(0.1 刻み)の離散化モデルで表現されている(Walker et al. 2016)。溶解反応速度については、Trapote-Barreira et al.(2014)によって提案された溶解反応速度式を Ca/Si を 0.1 刻みで離散化して用いた(付録表 3.2-5)。また、付録表 3.2-6 に反応速度が温度、pH に依存しないものと仮定した、その他の鉱物の溶解速度定数を示す。

付録表 3.2-5 C/S 比に依存した C-S-H ゲルの速度定数

	logk
CSH165	-8.44
CSH155	-8.50
CSH145	-8.65
CSH135	-9.19
CSH125	-9.97
CSH115	-10.66
CSH105	-10.96
CSH100	-10.94
CSH095	-10.86
CSH090	-10.79
CSH085	-10.86

付録表 3.2-6 式を用いる場合の溶解速度式中の定数

	logk	根拠
Portlandite	-6	CSH より溶解が早いため
Ettringite-Al	-10.94	CSH100 と同じ
Monosulfate-Al	-10.94	Ettringite と同じ
Laumontite	-11.41	25°Cにおけるゼオライトの沈殿速度式 (全型)
Phillipsite	-11.41	Laumontite と同じ(全型)
Clinoptilolite	-11.41	Laumontite と同じ(全型)
Heulandite	-11.41	Laumontite と同じ(全型)
C4AH13	-10.94	CSH100 と同じ
C4AH19	-10.94	CSH100 と同じ
Katoite-Al	-10.94	CSH100 と同じ
Katoite-AlSi080	-10.94	CSH100 と同じ
Stratlingite	-10.94	CSH100 と同じ
Friedel_Salt	-10.94	Ettringite と同じ

3.3 鉱物の比表面積

鉱物の比表面積は、間隙率の減少に伴って鉱物と間隙水の接する面積を減らす効果を入れるため、以下の式に従って入力するものとする。

$$A = A_0 \left(\frac{n}{n_0} \right)^{2/3} \quad (12)$$

ここで A_0 は初期比表面積 (付録表 3.3-1), n は現在の間隙率, n_0 は初期の間隙率である。C-S-H ゲルについては式(12)を適用せずに比表面積の設定値をそのまま用いて $A=A_0$ とした。

モンモリロナイトについては、溶解に伴う結晶端面比表面積の時間変化を表した経験式(13)を与えた。

$$A = A_0 \left(\frac{M}{M_0} \right)^{-0.59} \quad (13)$$

ここで、 M は現在のモンモリロナイト濃度, M_0 は初期のモンモリロナイト濃度である。

付録表 3.3-1 鉱物の初期比表面積

Mineral	Specific surface area [m ² /g]	Mineral	Specific surface area [m ² /g]
Albite	10	Dolomite	10
Analcime	10	Ettringite	9.8
Anorthite	10	Friedel_Salt	9.8
Brucite	10	Gypsum	10
Calcite	10	Hemicarbonate	9.8
Chalcedony	0.23	Heulandite	10
Clinoptilolite	10	Hydrotalcite	11.94
CSH085	322	Katoite	10
CSH090	314	Laumontite	10
CSH095	307	Monocarbonate	9.8
CSH100	299	Monosulfate	9.8
CSH105	291	Montmorillonite	2.45
CSH115	276	Phillipsite	10
CSH125	261	Portlandite	10.44
CSH135	246	Quartz	0.1
CSH145	230	Stratlingite	10
CSH155	215		
CSH165	200		

引用文献

日本原子力研究開発機構(2014): 平成 25 年度 地層処分技術調査等事業 セメント材料影響評価技術高度化開発報告書 平成 26 年 3 月.

日本原子力研究開発機構(2018): 平成 29 年度 地層処分技術調査等事業 処分システム評価確認技術開発報告書 平成 30 年 3 月.

Trapote-Barreira, A., Cama, J., and Soler, M. (2014) Dissolution kinetics of C-S-H gel: Flow-through experiments. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 70, pp.17-31.

Walker, C.S., Sutou, S., Oda, C., Mihara, M., and Honda, A. (2016) Calcium silicate hydrate (CSH) gel solubility data and a discrete solid phase model at 25 C based on two binary non-ideal solid solutions. *Cement and Concrete Research*, 79, pp.1-30.

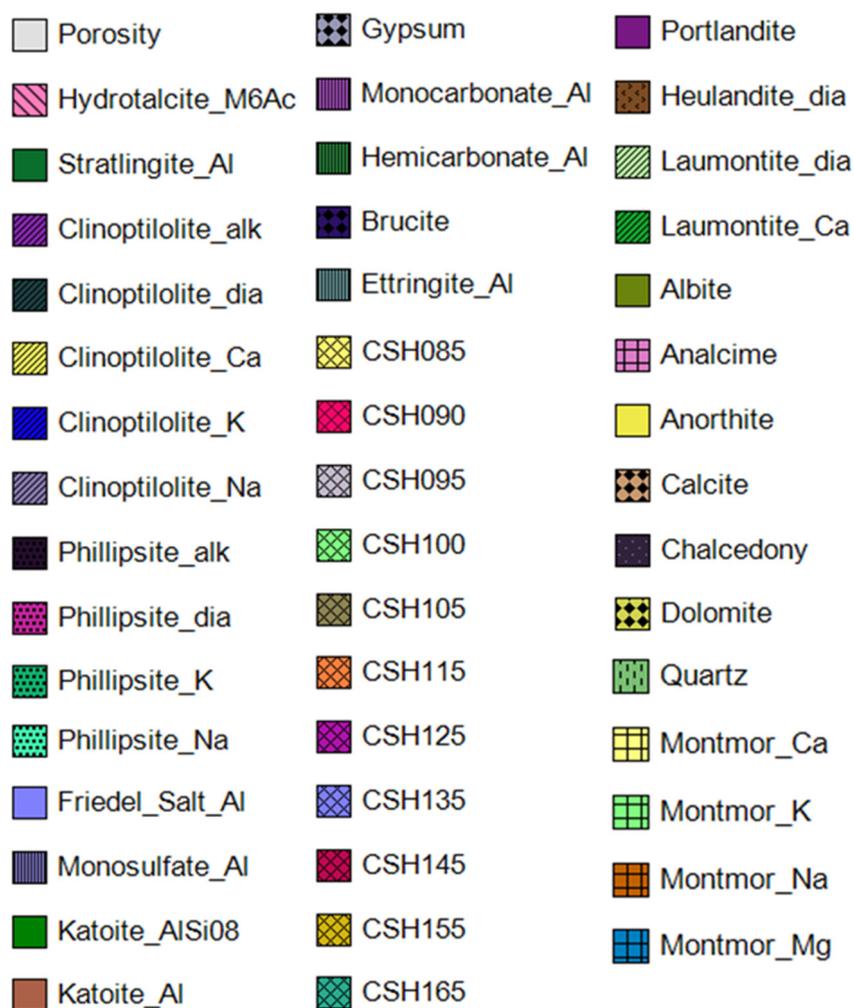
化学反応－物質輸送解析の計算結果

化学反応—物質輸送解析の計算結果

本文 4.2.3「先進的セメント—緩衝材相互作用評価モデルの高度化」において実施した化学反応—物質輸送連成モデルによる解析について、本文表 4.2-6 に示した各解析ケースの計算結果の詳細を以下に示す。

1. 解析結果

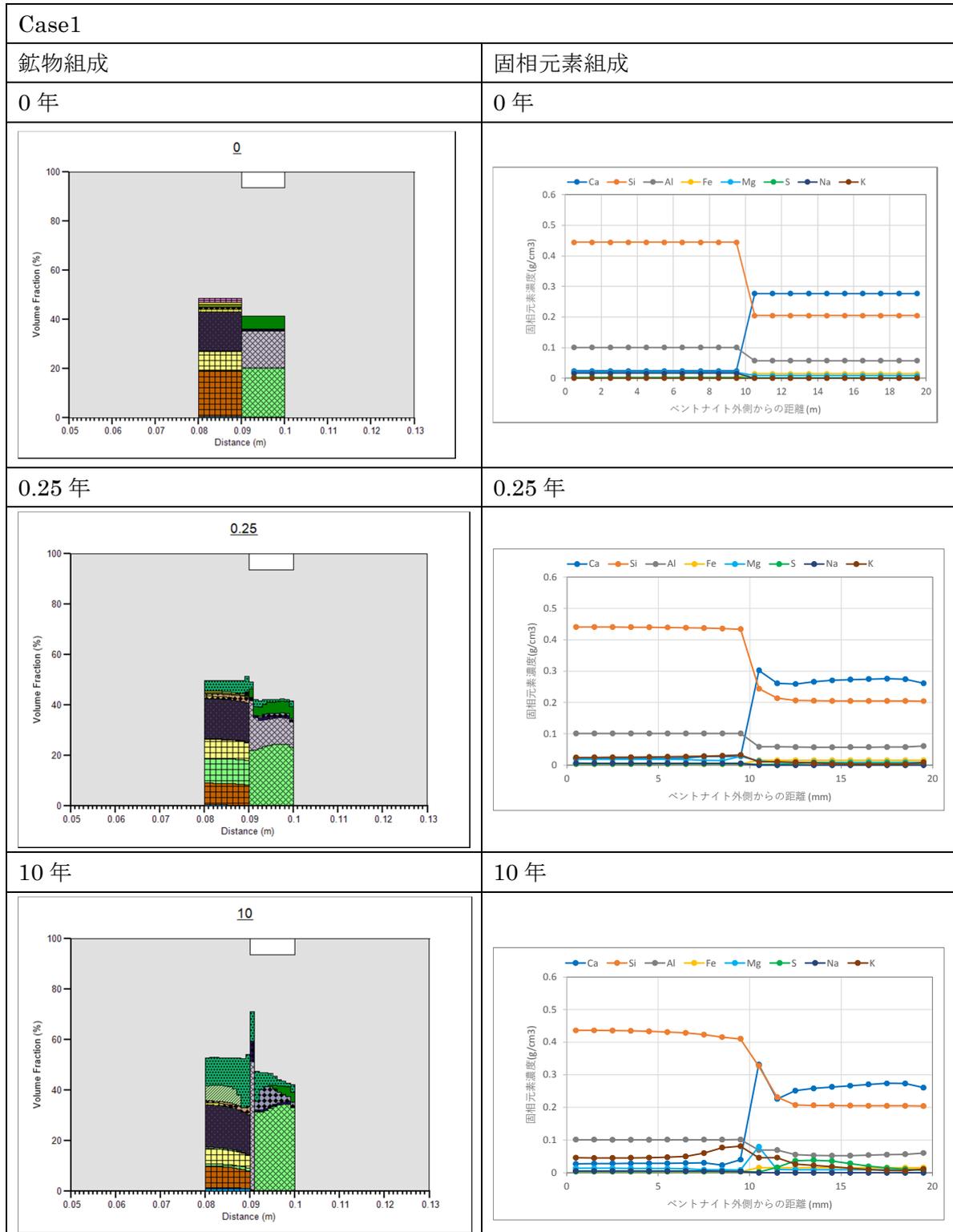
各ケースについて、鉱物組成、固相元素組成、液相組成の時間変遷を示し、最後に各ケースについての計算結果を付録表 1.8-1 から付録表 1.8-4 にまとめた。なお、鉱物組成の図の凡例は付録図 1.1-1 に示すとおりである。



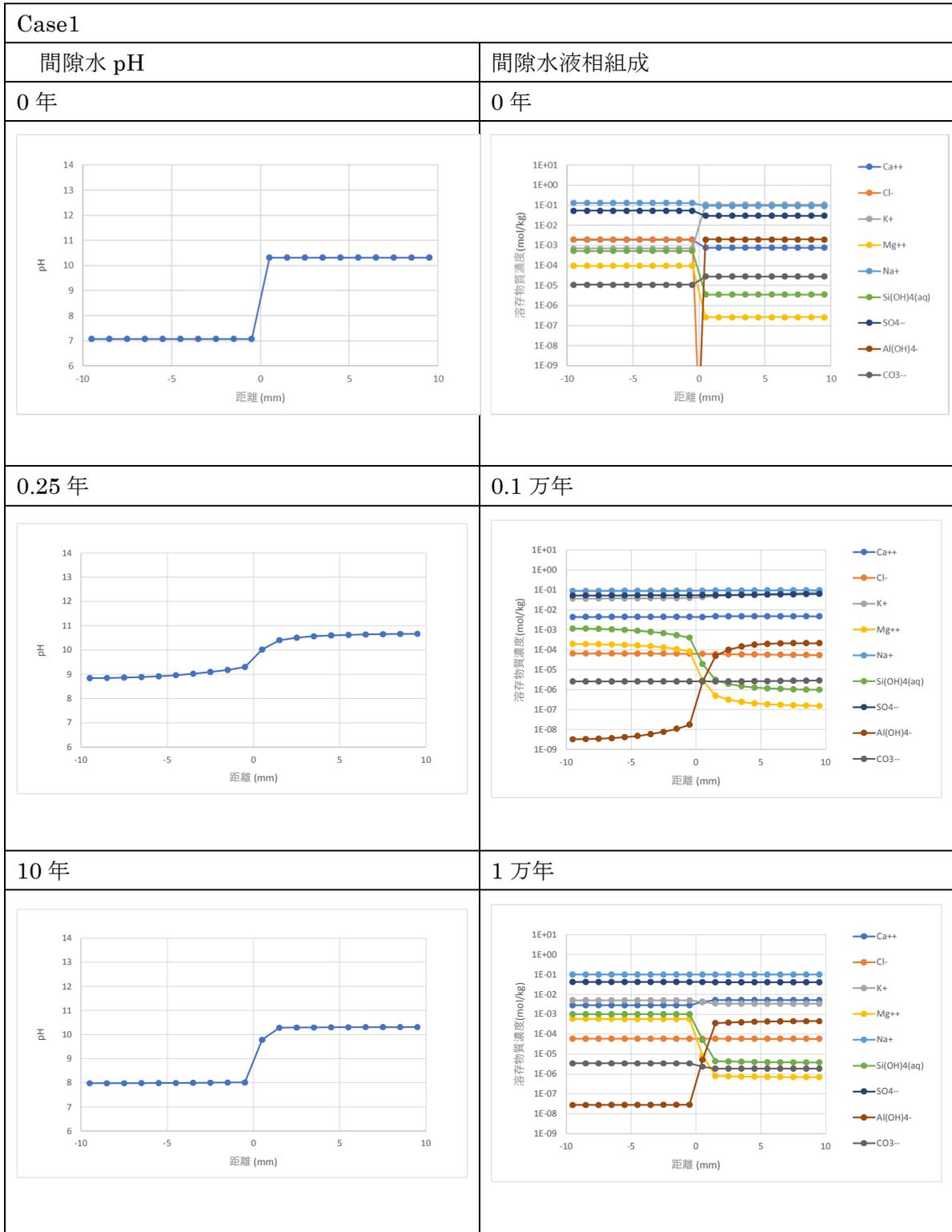
付録図 1.1-1 鉱物組成図における凡例

1.1 Case1 (蒸留水, HFSC, 1cm, 80°C, 安定・準安定ゼオライト考慮)

Case1 の鉱物組成, 固相元素組成, pH, 液相組成の時間変遷を付録図 1.2-1 及び付録図 1.2-2 に示す。



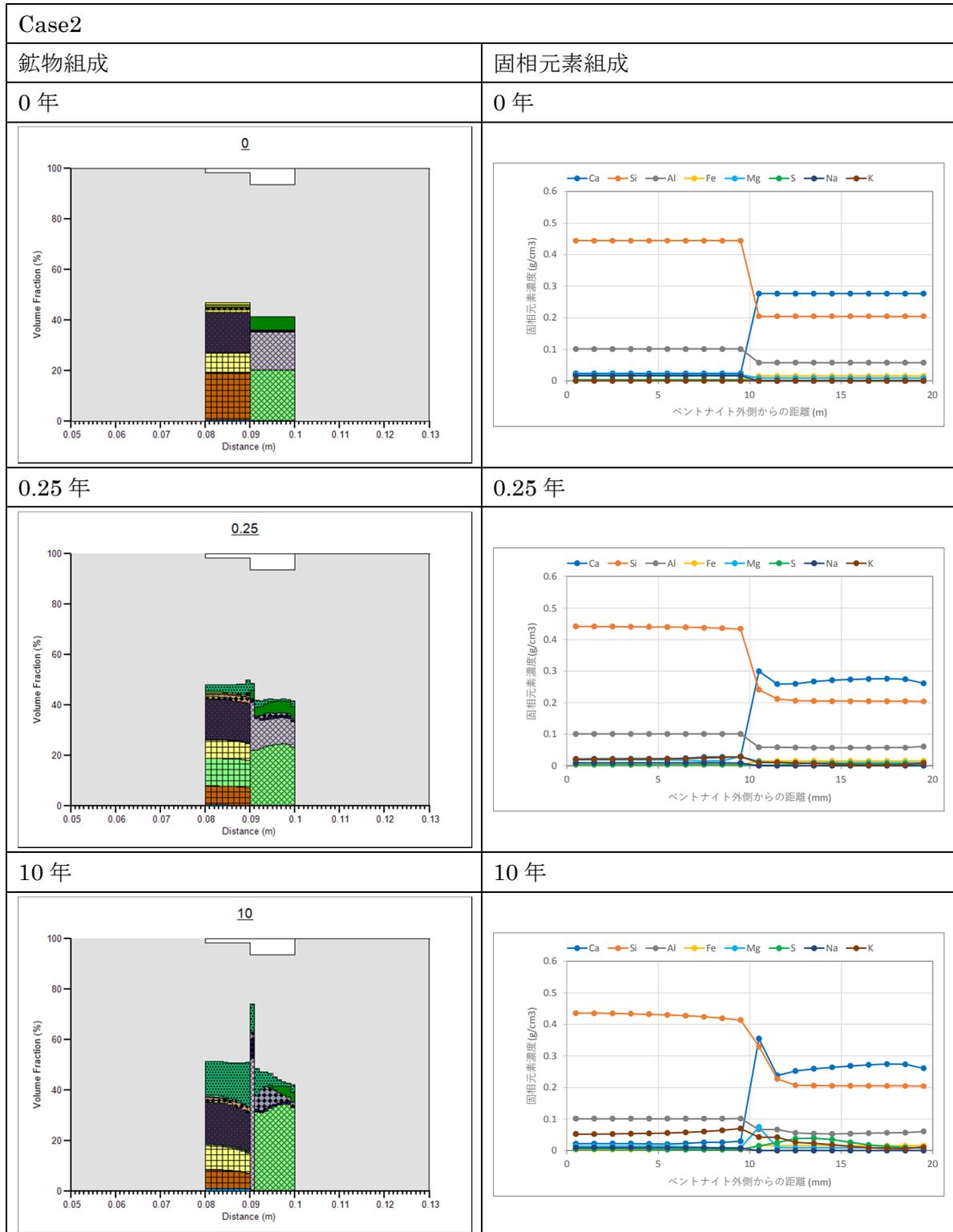
付録図 1.2-1 Case1における鉱物組成と固相元素濃度の時間変遷



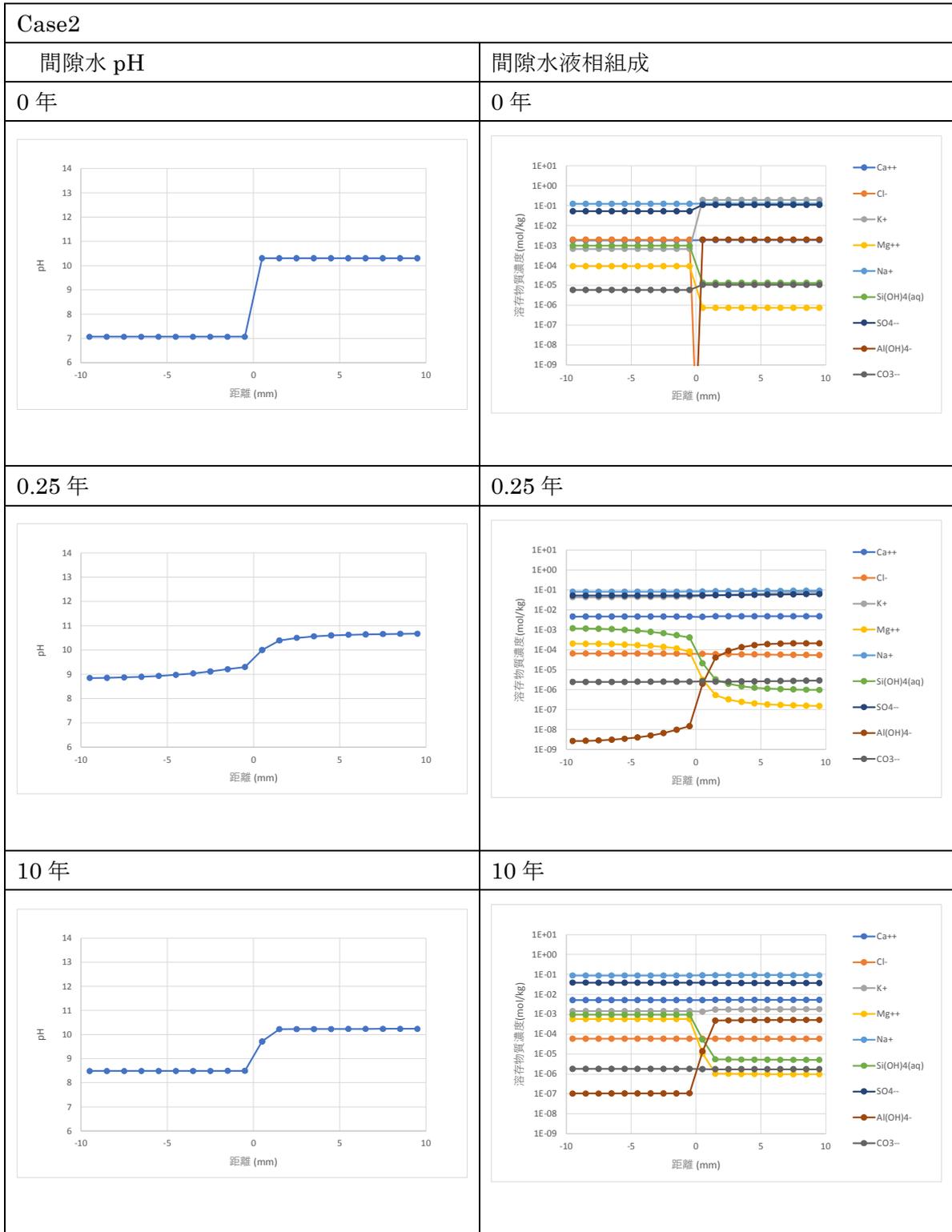
付録図 1.2-2 Case1における間隙水 pH と間隙水液相組成の時間変遷

1.2 Case2 (蒸留水, HFSC, 1cm, 80°C, 準安定ゼオライトのみ考慮)

Case2 の鉱物組成, 固相元素組成, pH, 液相組成の時間変遷を付録図 1.3-1 及び付録図 1.3-2 に示す。



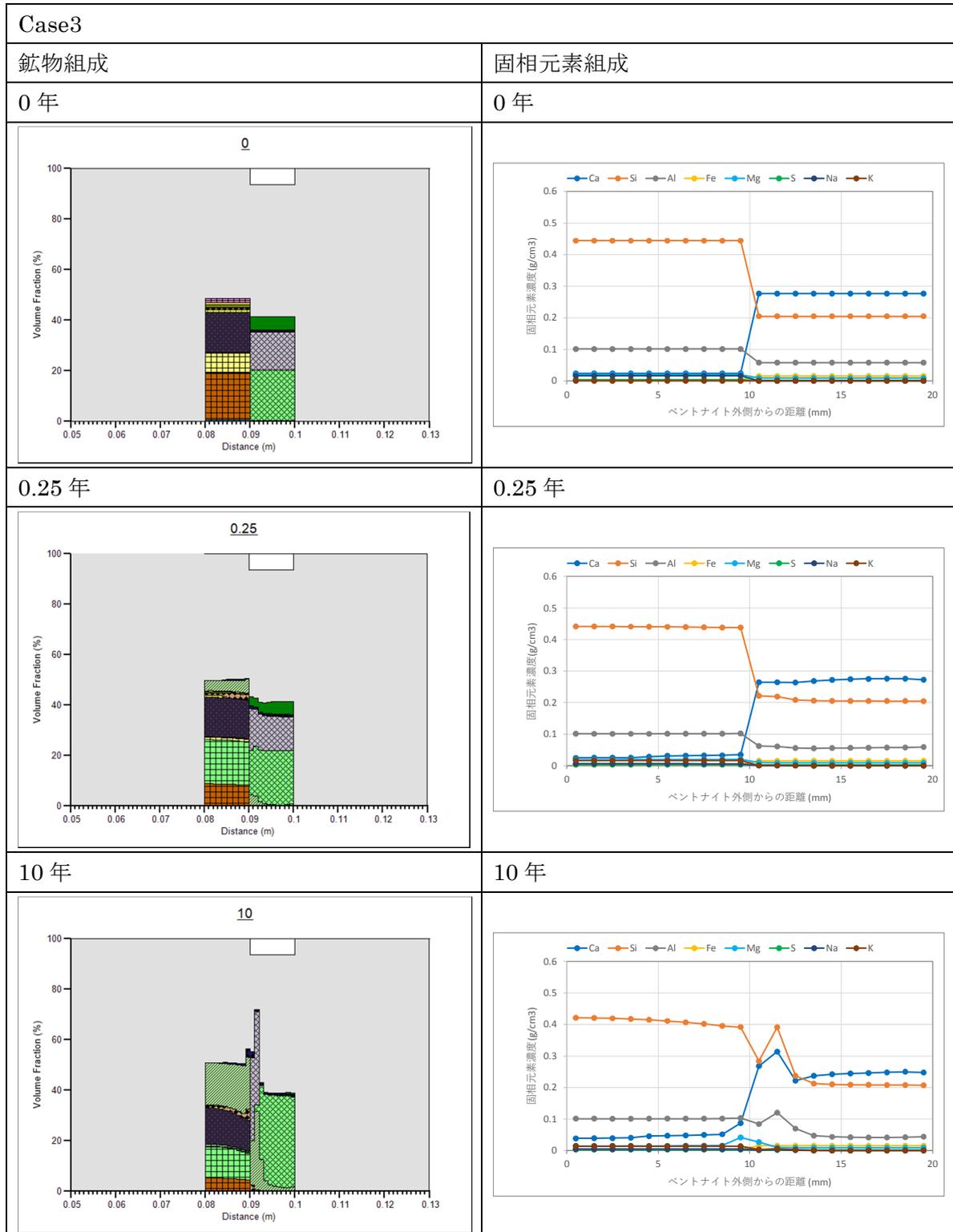
付録図 1.3-1 Case2 における鉱物組成と固相元素濃度の時間変遷



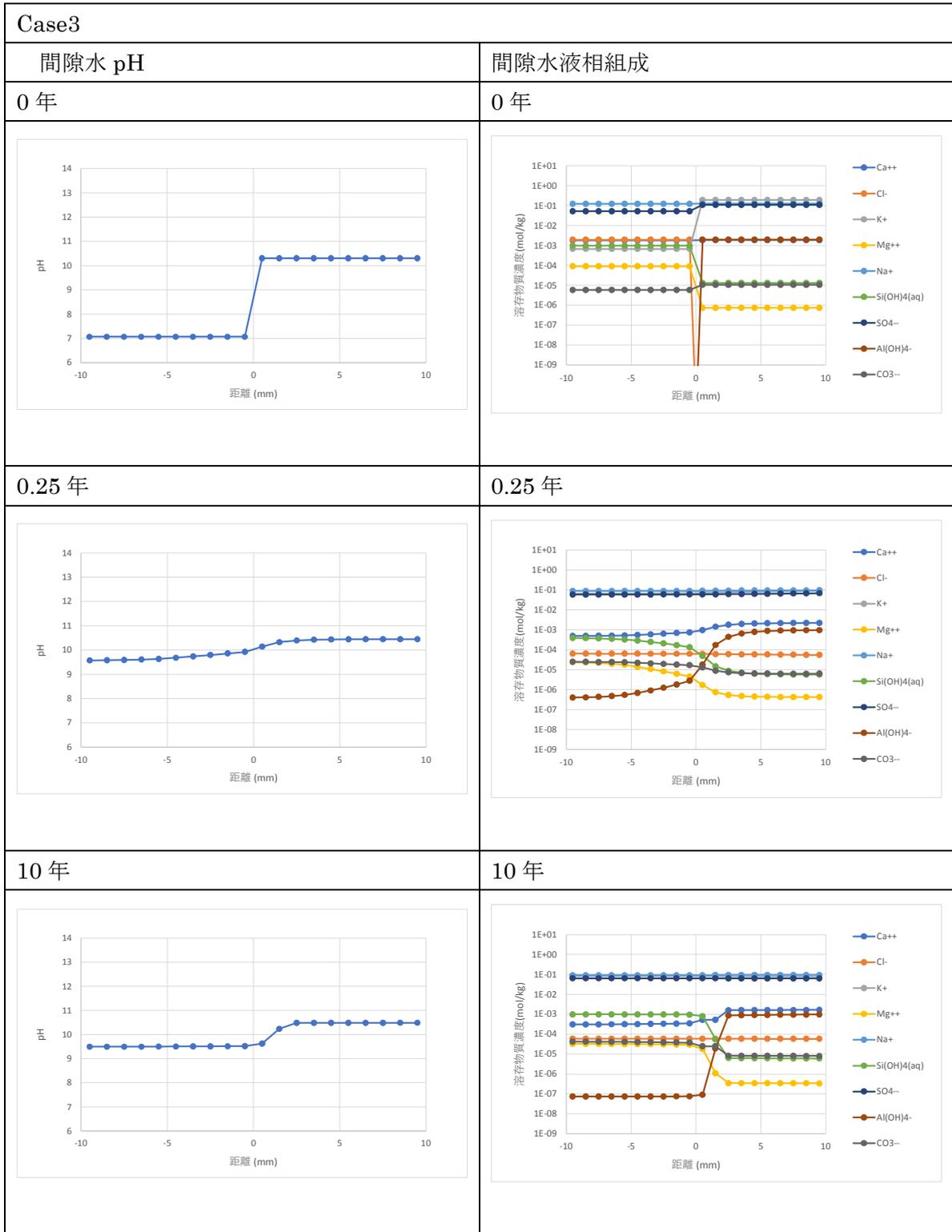
付録図 1.3-2 Case2 における間隙水 pH と間隙水液相組成の時間変遷

1.3 Case3 (蒸留水, HFSC, 1cm, 80°C, 安定ゼオライトのみ考慮)

Case3 の鉱物組成, 固相元素組成, pH, 液相組成の時間変遷を付録図 1.4-1 及び付録図 1.4-2 に示す。



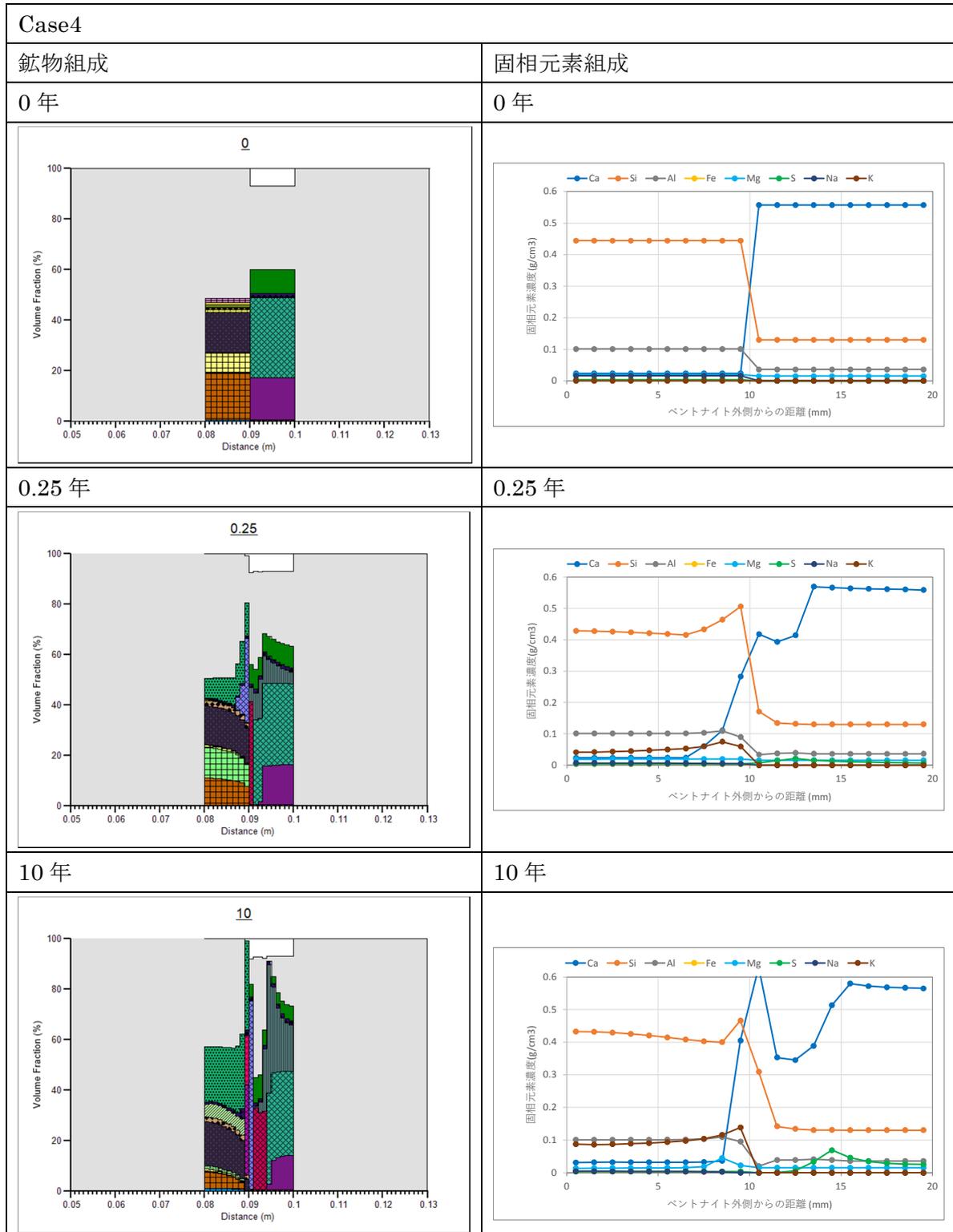
付録図 1.4-1 Case3における鉱物組成と固相元素濃度の時間変遷



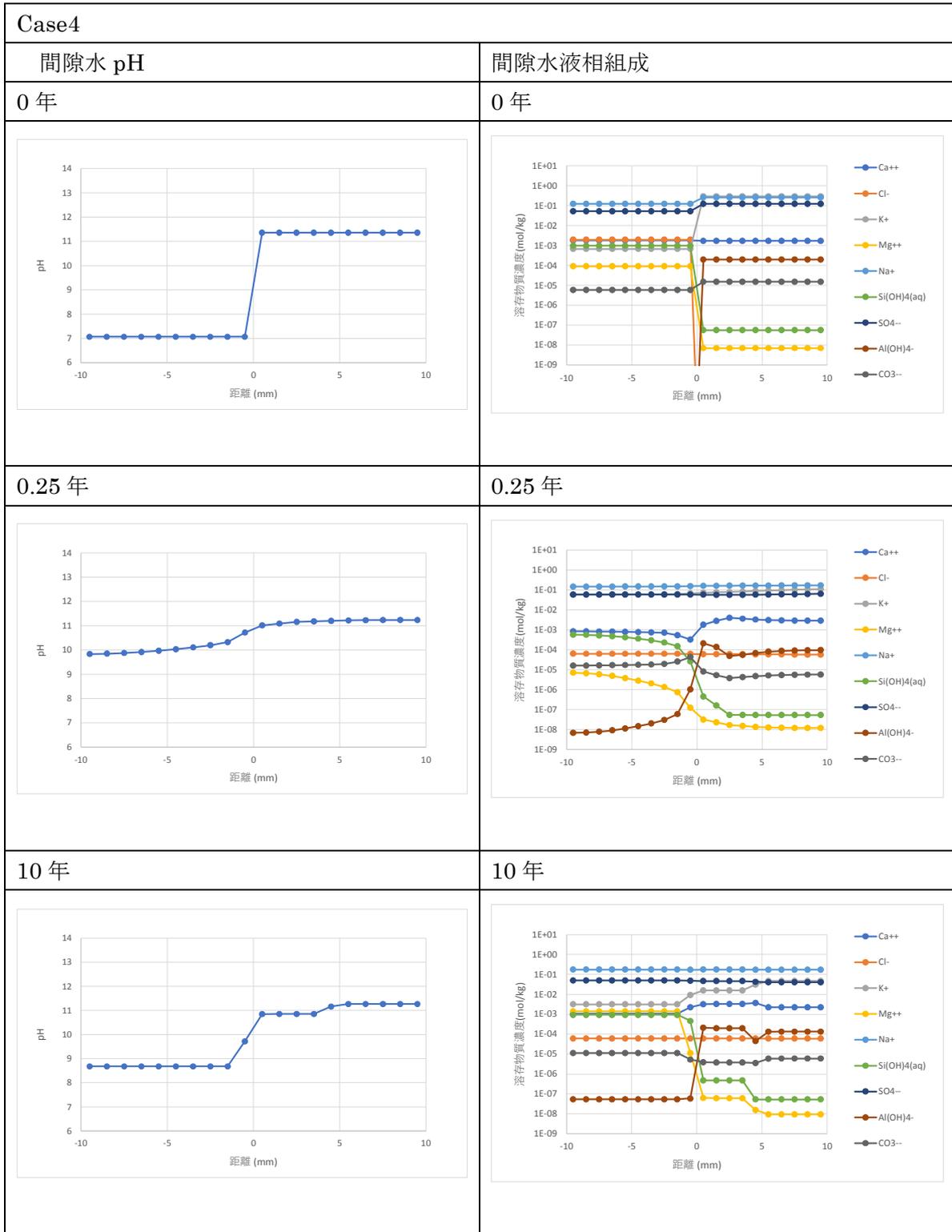
付録図 1.4-2 Case3 における間隙水 pH と間隙水液相組成の時間変遷

1.4 Case4 (蒸留水, OPC, 1cm, 80°C, 安定・準安定ゼオライト考慮)

Case4 の鉱物組成, 固相元素組成, pH, 液相組成の時間変遷を付録図 1.5-1、付録図 1.5-2 に示す。



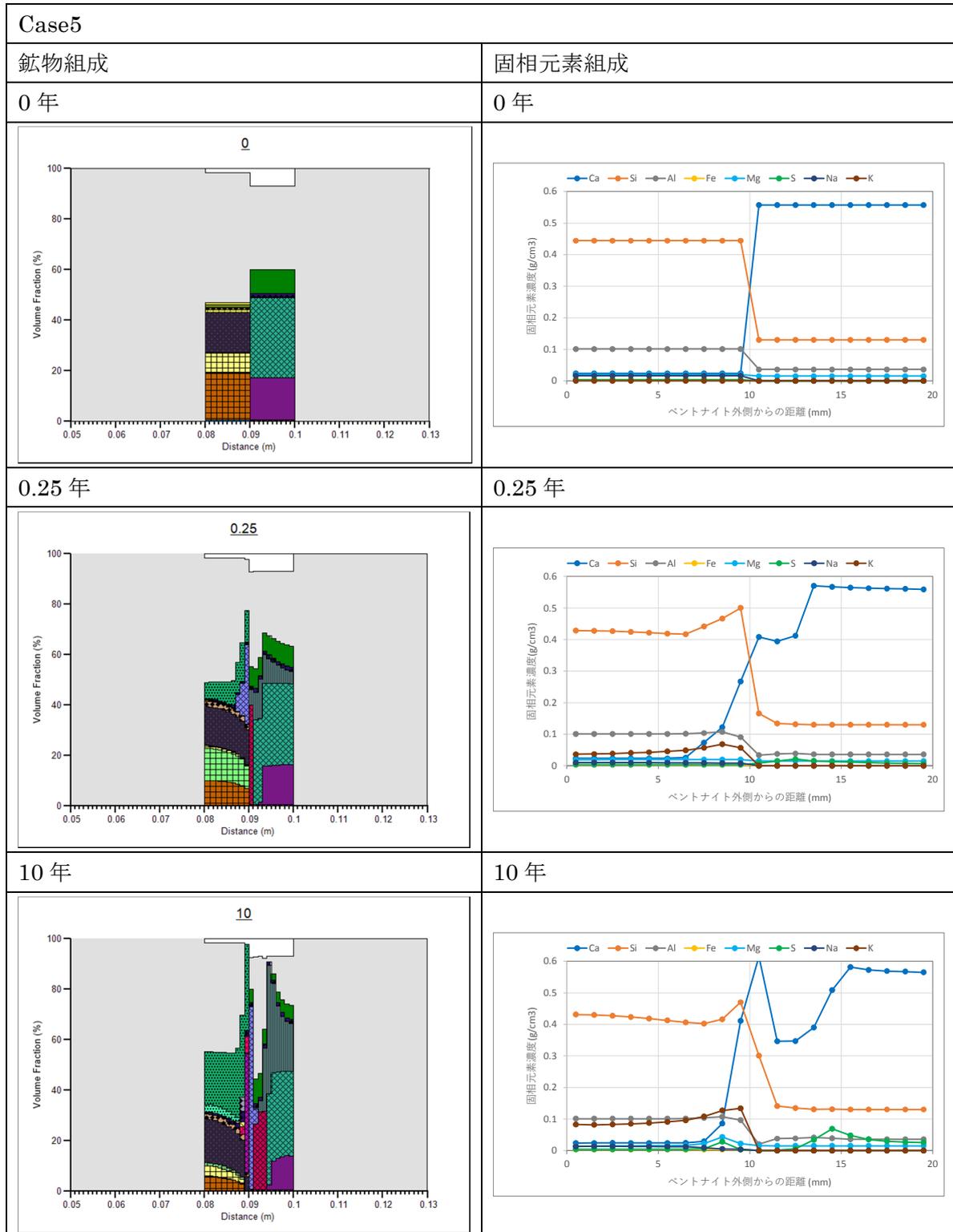
付録図 1.5-1 Case4 における鉱物組成と固相元素濃度の時間変遷



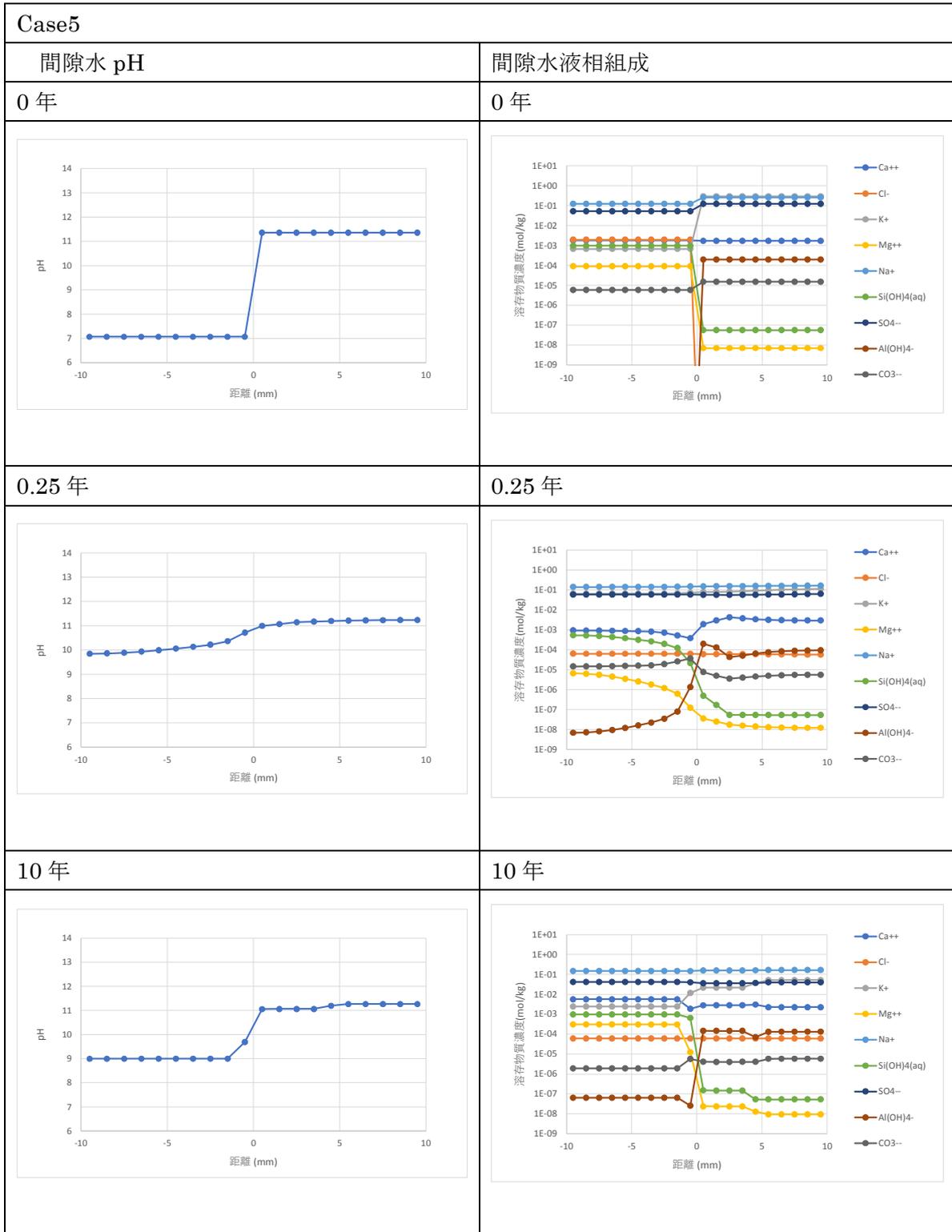
付録図 1.5-2 Case4 における間隙水 pH と間隙水液相組成の時間変遷

1.5 Case5 (蒸留水, OPC, 1cm, 80°C, 準安定ゼオライト考慮)

Case5 の鉱物組成, 固相元素組成, pH, 液相組成の時間変遷を付録図 1.6-1、付録図 1.6-2 に示す。



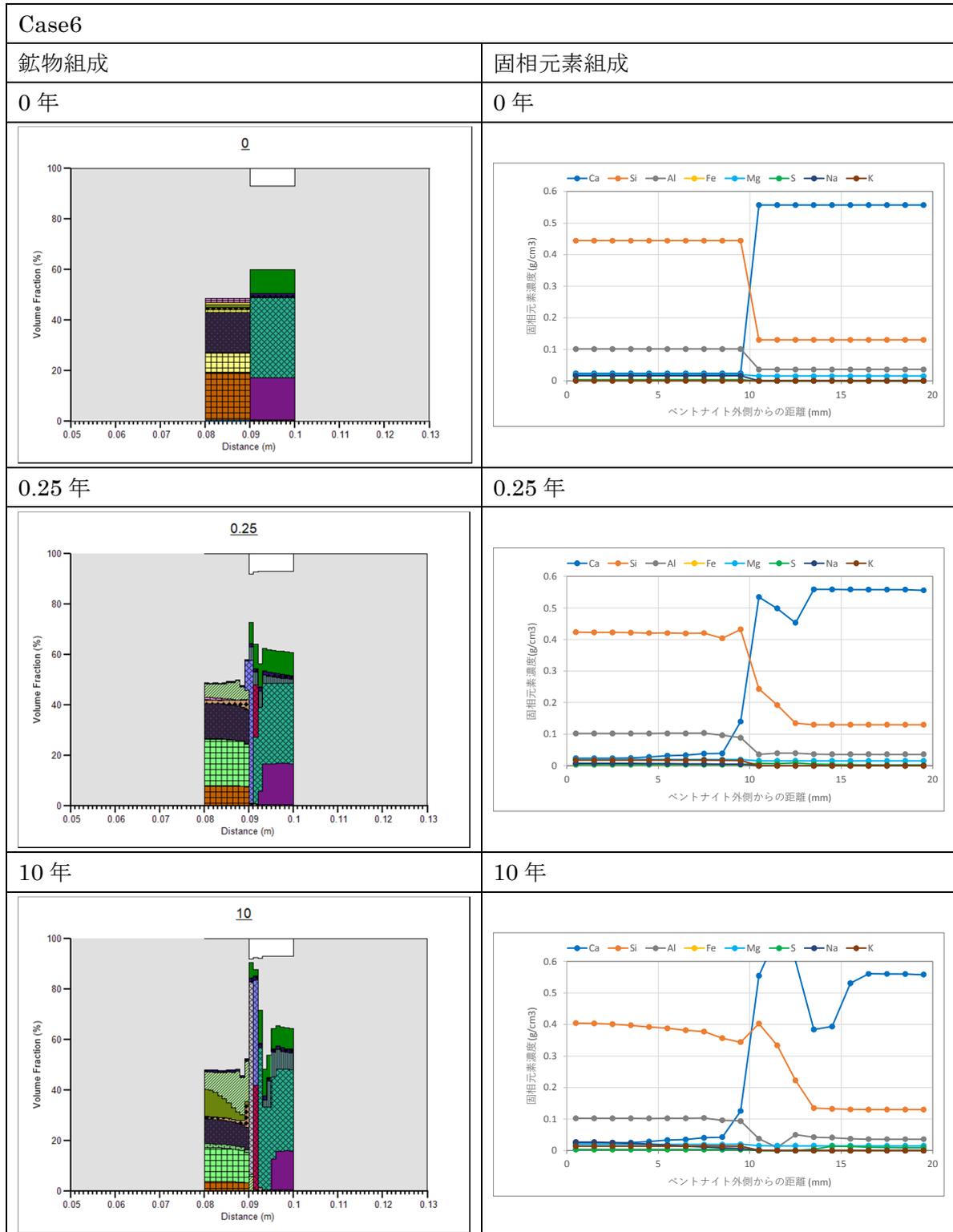
付録図 1.6-1 Case5 における鉱物組成と固相元素濃度の時間変遷



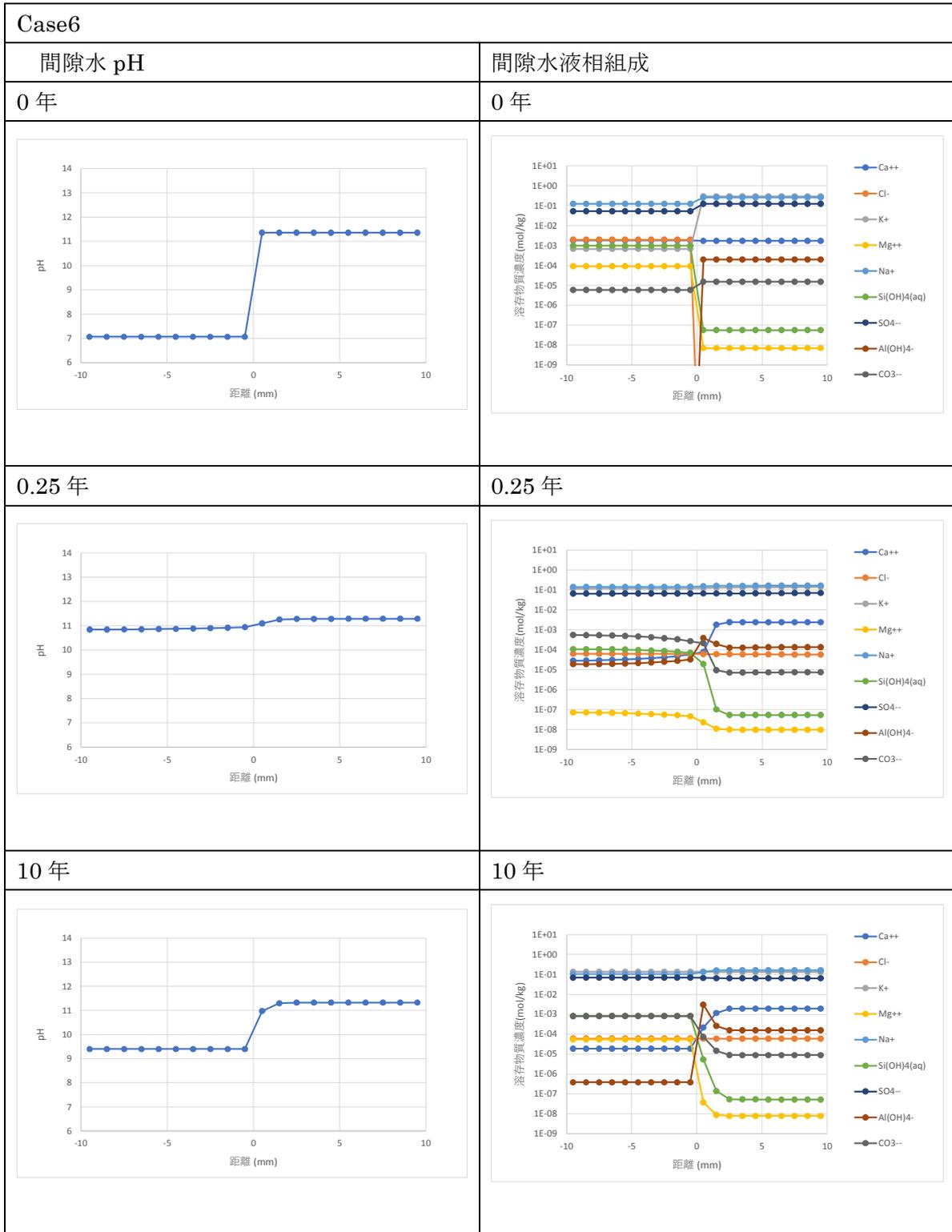
付録図 1.6-2 Case5 における間隙水 pH と間隙水液相組成の時間変遷

1.6 Case6 (蒸留水, OPC, 1cm, 80°C, 安定ゼオライト考慮)

Case6 の鉱物組成, 固相元素組成, pH, 液相組成の時間変遷を付録図 1.7-1、付録図 1.7-2 に示す。



付録図 1.7-1 Case6 における鉱物組成と固相元素濃度の時間変遷



付録図 1.7-2 Case6 における間隙水 pH と間隙水液相組成の時間変遷

1.7 計算結果のまとめ

各ケースについての計算結果を付録表 1.8-1 から付録表 1.8-4 にまとめた。

付録表 1.8-1 各ケースにおける計算結果のまとめ(1/4)

緩衝材側 接触液	セメント 種類	試験体 長さ	温度	考慮した ゼオライト の種類	ケ- ス#	解析結果			
						モンモリロナイト の溶解と変化	その他鉱物の変質	固相元素組成の変遷	間隙水の変遷
蒸留水	HFSC	1cm	80℃	全種	1	<ul style="list-style-type: none"> ● 初期には Ca 型と Na 型が優占していたが、0.25 年後では Na 型から K 型へ変化している。0.25 年では溶解はほとんど進行していないもの、接触界面に近いほど溶解の度合いが大きい。 ● 10 年後には再び Ca 型・Na 型優占になっている。溶解が進んでいる。 	<ul style="list-style-type: none"> ● 緩衝材では 0.25 年後には K 型フィリップサイトの沈殿がみられ、10 年後にはさらに多く沈殿している。 ● HFSC 側では 0.25 年後には緩衝材との接触界面から 1mm の領域で CSH095 の沈殿が生じており、10 年後にはさらに多くの沈殿がみられる。 ● 緩衝材でも HFSC でも時間を経るごとに間隙率が低下している。特に接触界面での HFCS 側で間隙率の低下が顕著である。 	<ul style="list-style-type: none"> ● 0.25 年後には緩衝材側の元素組成はほとんど変わっていない一方、HFSC 側では接触界面から 1mm の領域で Ca と Si の増加がみられる。 ● 10 年後には緩衝材側の Si の量が、セメント接触界面に近いほど低下している。 	<ul style="list-style-type: none"> ● 緩衝材間隙水の pH は初期にはほぼ 7 だったが、0.25 年後には 9 付近まで上昇した。10 年後には 8 まで再び下がった。 ● 緩衝材間隙水における K⁺と Al(OH)₄⁻の増加、HFSC 間隙水における Cl⁻の増加がみられる。
				準安定種のみ	2	<ul style="list-style-type: none"> ● Case1 との顕著な違いは見られない。 	<ul style="list-style-type: none"> ● Case1 との顕著な違いは見られない。 	<ul style="list-style-type: none"> ● Case1 との顕著な違いは見られない。 	<ul style="list-style-type: none"> ● 10 年後の緩衝材間隙水の pH は 8.5 であった。 ● イオン組成については Case1 と同様であった。

付録表 1.8-2 各ケースにおける計算結果のまとめ(2/4)

緩衝材側 接触液	セメント 種類	試験体 長さ	温度	考慮した ゼオライト の種類	ケー ス#	解析結果			
						モンモリロナイト の溶解と変化	その他鉱物の変質	固相元素組成の変遷	間隙水の変遷
蒸留水	HFSC	1cm	80℃	安定種の み	3	<ul style="list-style-type: none"> ● 0.25年後に Na 型が K 型へ変化しているのは Case1 と共通だが, Ca 型も K 型へ変化している。溶解の程度は Case1 と同様である。 	<ul style="list-style-type: none"> ● 緩衝材では 0.25 年後には dia 型ローモンタイトの沈殿がみられ, 10 年後にはさらに多く沈殿している。 ● HFSC 側でも 0.25 年後には接触界面から 2mm までの領域でローモンタイト・dia の沈殿が生じており, 10 年後には接触界面からもっとも離れた 10mm の領域まで沈殿がみられる。 ● 緩衝材では間隙率の時間変化は顕著ではない。HFSC では 10 年後の時点で, 接触界面から 2mm の領域での間隙率の低下が顕著である。 	<ul style="list-style-type: none"> ● 0.25 年後までは Case1 と顕著な違いは見られない。 ● 10 年後の時点で, HFSC の接触界面から 2mm の領域で Si の増加がみられる。 	<ul style="list-style-type: none"> ● 0.25 年後の緩衝材間隙水の pH 上昇が Case1 より顕著であり, 9.5 付近まで上昇した。10 年後にもそのまま維持された。 ● 緩衝材間隙水における 0.25 年後の Al(OH)₄ の増加が Case1 より顕著である。

付録表 1.8-3 各ケースにおける計算結果のまとめ(3/4)

緩衝材側 接触液	セメント 種類	試験体 長さ	温度	考慮した ゼオライト の種類	ケー ス#	解析結果			
						モンモリロナイト の溶解と変化	その他鉱物の変質	固相元素組成の変遷	間隙水の変遷
蒸留水	OPC	1cm	80℃	全種	4	<ul style="list-style-type: none"> ● OPC との接触界面側で 0.25 年後から溶解がみられる。10 年後には初期の半分以下になっている。 	<ul style="list-style-type: none"> ● 0.25 年後の時点で、緩衝材では接触界面から 3mm の領域まで CSH135 の沈殿がみられ、そのために間隙率の低下が起こっている。10 年後には同じ場所に CSH125 の沈殿がみられ、閉塞が起こっている。 ● OPC 側では 0.25 年後には接触界面付近 3mm の領域でポータランタイトの溶解が起こり、間隙率が増加している。全体的にエトリンタイト Al の沈殿がみられる。 ● 10 年後、OPC 側では接触界面付近で CSH135 の沈殿が多くなり、間隙率が低下している。接触界面から 2-3mm の部分では間隙率の増大が進んでいる一方、それより離れた部分ではエトリンタイト Al の沈殿が進んで間隙率が低下している。 	<ul style="list-style-type: none"> ● 0.25 年後において、接触界面の緩衝材側での Si の増加がみられる。10 年後においては同じ場所に K の増加もみられる。 	<ul style="list-style-type: none"> ● OPC の初期間隙水 pH は Case1 で対象とした HFSC より約 1 高い。 ● 0.25 年後には、緩衝材側の間隙水 pH も、Case1 より約 1 高くなっており、その傾向は 10 年後でも続いている。 ● 0.25 年後の K⁺、SO₄²⁻ の濃度が Case1 より高い。 ● 10 年後には OPC 間隙水と近い組成の間隙水が緩衝材側に達している。

付録表 1.8-4 各ケースにおける計算結果のまとめ(4/4)

緩衝材側 接触液	セメント 種類	試験体 長さ	温度	考慮した ゼオライト の種類	ケー ス#	解析結果			
						モンモリロナイト の溶解と変化	その他鉱物の変質	固相元素組成の変遷	間隙水の変遷
蒸留水	OPC	1cm	80℃	準安定種 のみ	5	<ul style="list-style-type: none"> ● 溶解の度合いは Case4 と同様の結果である。10 年後における Ca 型の割合が Case4 より多い。 	<ul style="list-style-type: none"> ● Case4 と同様の結果である。 	<ul style="list-style-type: none"> ● Case4 と同様の結果である。 	<ul style="list-style-type: none"> ● Case4 とほぼ同様の結果であるが、10 年後における緩衝材間隙水の Ca^{2+} 濃度が高く、CO_3^{2-} の濃度が低い。
				安定種 のみ	6	<ul style="list-style-type: none"> ● 溶解は起こっているものの、Case4, 5 に比べるとその度合いは小さく、10 年後でも半分以上は残存している。 	<ul style="list-style-type: none"> ● Case4, 5 とは異なり、接触界面緩衝材側での CSH ゲルの沈殿は顕著ではなく、閉塞も見られない。 ● 接触界面 OPC 側では Case4, 5 と同様に 0.25 年目からポータランダイトの溶出がみられたが、間隙率は増加せず、CSH135 の沈殿によって低下した。 	<ul style="list-style-type: none"> ● Case4, 5 に比べ、緩衝材側の K 濃度が 10 年後まで低い。 	<ul style="list-style-type: none"> ● Case4, 5 に比べて緩衝材間隙水の pH が高い。 ● Case4 に比べて緩衝材側間隙水の $Al(OH)_4^-$ の濃度が 3 桁以上高い。

Appendix VI

微小部蛍光 X 線及び透過 X 線分析結果

HFSC の地球化学モデル開発の現状

1. XGT-9000 による分析結果

1.1 分析方法及び条件

分析に用いたセメントーベントナイト接触試験体の断面試料写真を図 1-1 に示す。XGT-9000 では透過 X 線像が観察可能なため、透過 X 線像が得られ、かつ有効な μ -XRF によるマッピングデータが取得できる最も測定に適した試料厚さについても検討した。測定に際しては、データ取得した後に試料厚さ 3mm, 2mm, 1mm と研磨し、厚さを変えた試料の測定を実施した。分析条件を表 1-1 に示す。

図 1-1 セメントーベントナイト接触試験体の断面試料写真

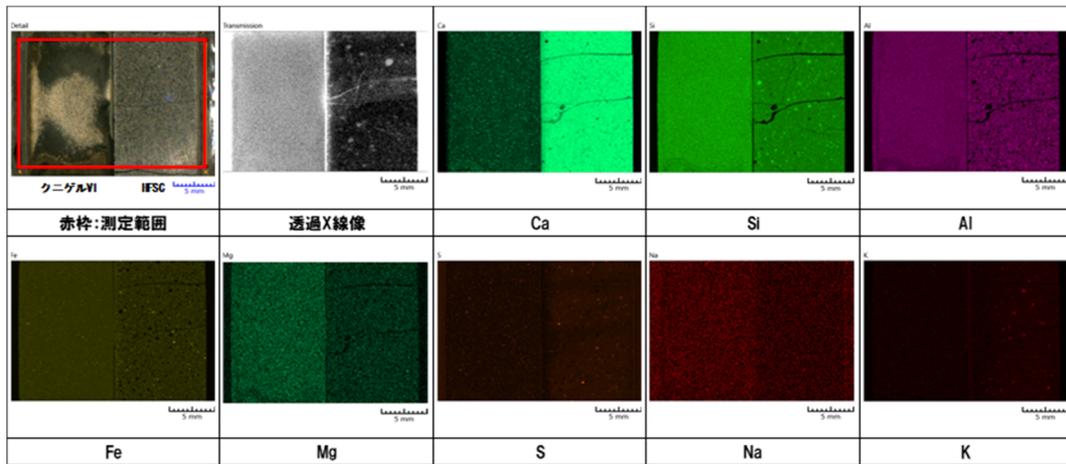
表 1-1 分析条件

分析試料	断面試料(厚さ 3mm, 2mm, 1mm)
装置	堀場製作所製 XGT-9000
測定原理	エネルギー分散型蛍光 X 線分析法
管電流・管電圧	30kV・1000 μ A
測定時間	983s
ピクセルタイム	40ms
パルス処理時間	Process 2
繰返し回数:	1
キャピラリ:	高輝度用 100 μ m 径
真空状態:	全体真空

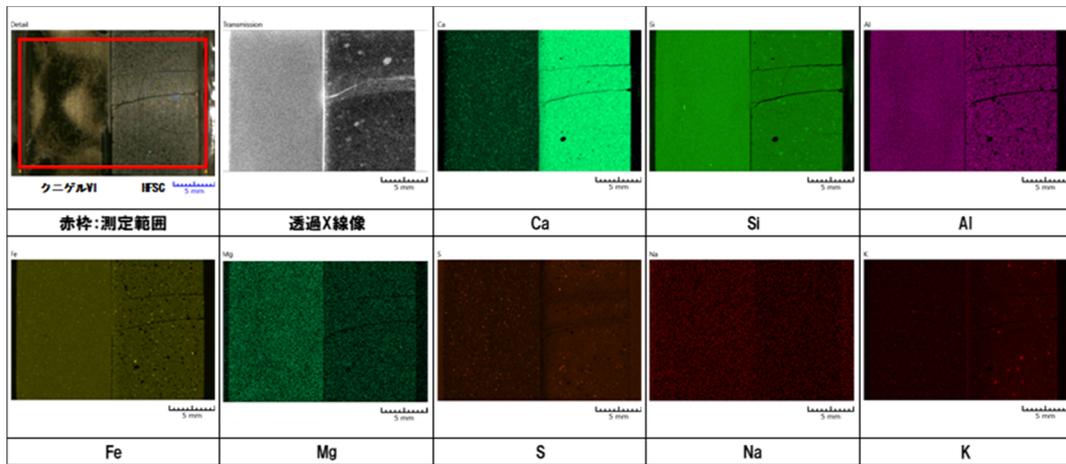
1.2 分析結果

HFSC-ベントナイト接触試験体（以下、HFSC 接触試験体）及び OPC-ベントナイト接触試験体（以下、OPC 接触試験体）の分析結果をそれぞれ図 1-2 と図 1-3 に示す。

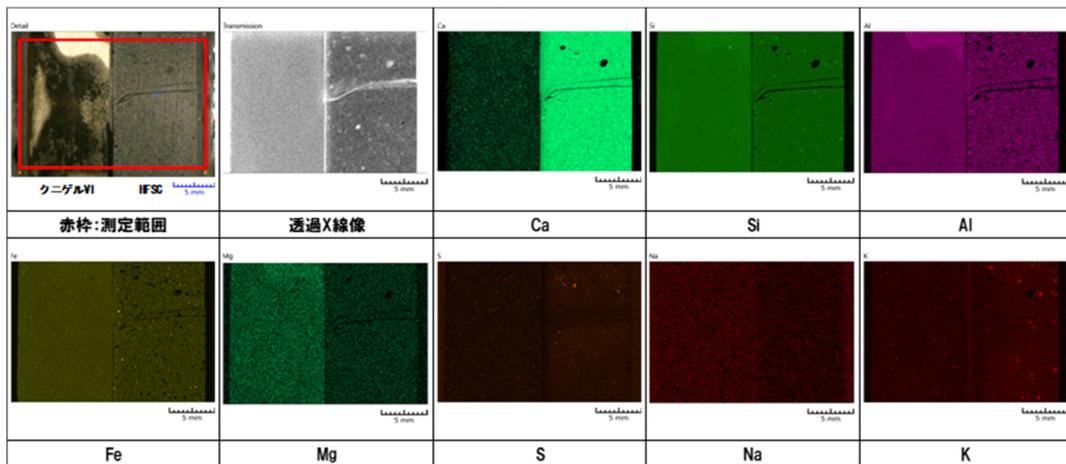
HFSC 接触試験体及び OPC 接触試験体とも、試料厚さ 3mm, 2mm, 1mm において透過 X 線像を取得することができた。 μ -XRF 測定を考慮すると、厚さ 3mm 試料が最も高い強度が得られ、試料厚さとして最適であることがわかった。また透過 X 線像において、HFSC 接触試験体及び OPC 接触試験体ともに接触界面近傍のセメント側で明るい色調に変化していることから変質に伴う密度低下が生じている可能性がある。



(a) 試料厚さ 3mm

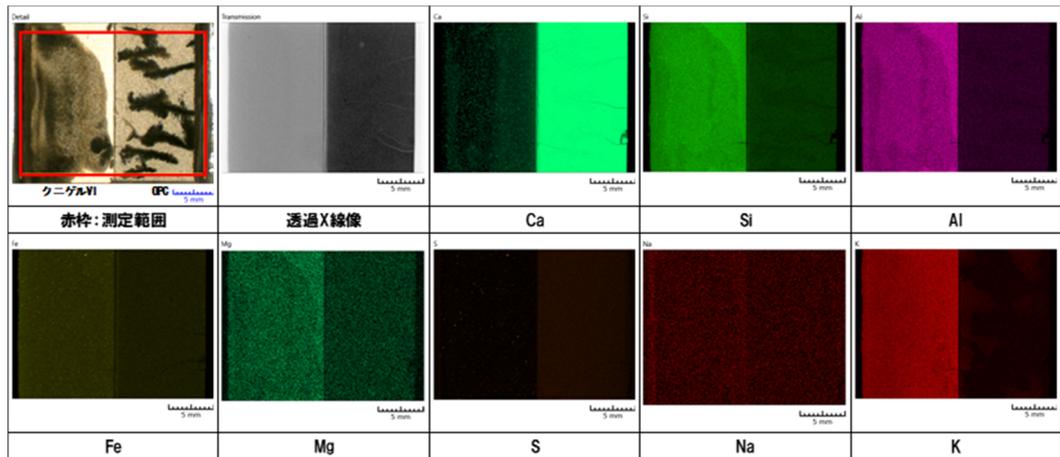


(b) 試料厚さ 2mm

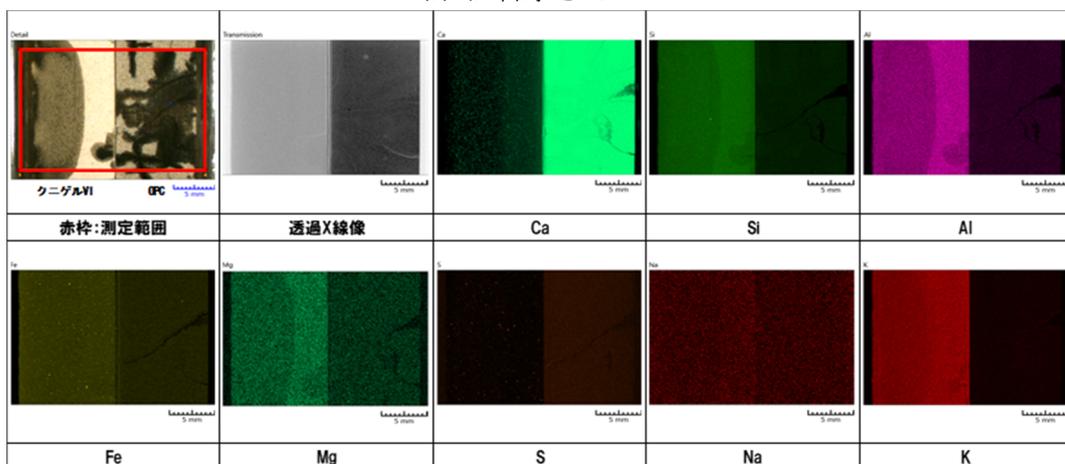


(c) 試料厚さ 1mm

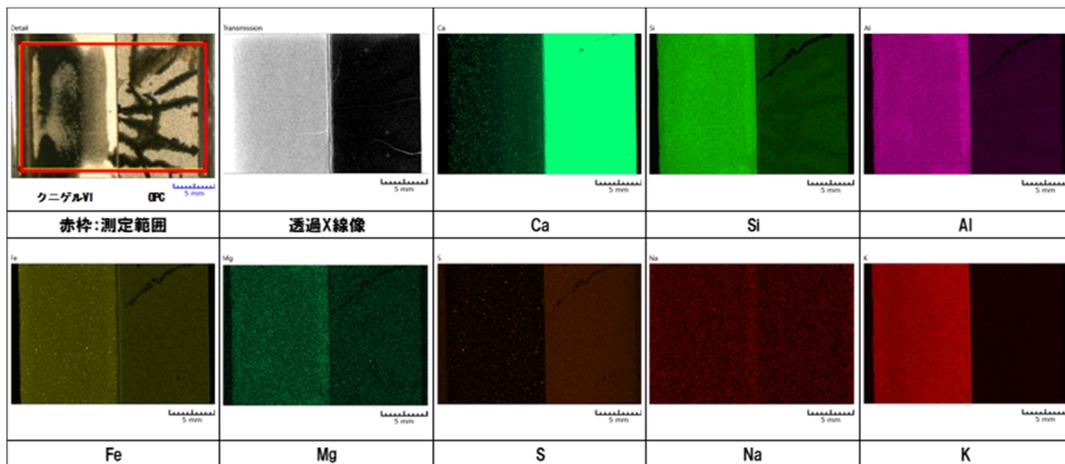
図 1-2 HFSC-ベントナイト接触試験体の分析結果 (XGT-9000) : 試料厚さによる比較



(a) 試料厚さ 3mm



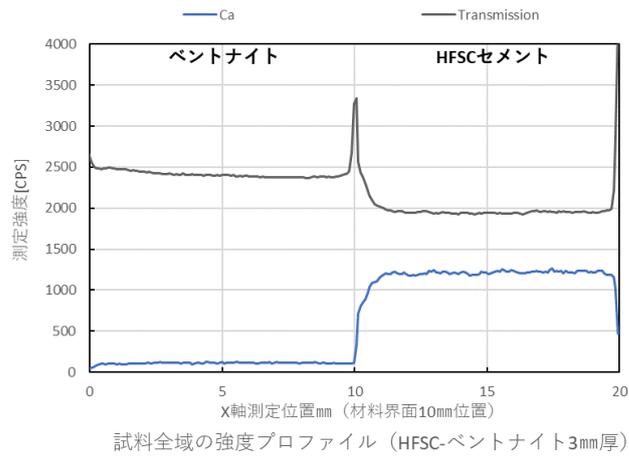
(b) 試料厚さ 2mm



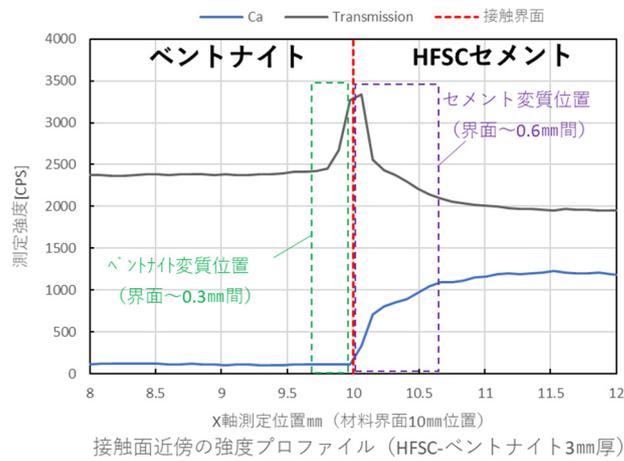
(c) 試料厚さ 1mm

図 1-3 OPC-ベントナイト接触試験体の分析結果 (XGT-9000) : 試料厚さによる比較

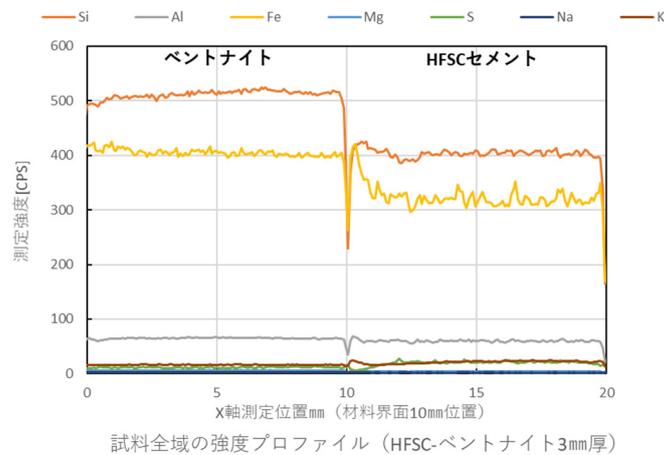
界面近傍の変化を詳細に確認するため、厚さ 3mm の試料について、透過 X 線及び各元素の強度プロファイルを図 1-4 及び図 1-5 に示す。HFSC 及び OPC 接触試験体ともに元素濃度の変化は Ca の変化が最も明瞭であった。図 1-4 (b) より、HFSC 接触試験体では、セメント側が界面から 0.5mm 程度、ベントナイト側では 0.3mm 程度で変化が見られた。図 1-5 (b) より、OPC 接触試験体ではセメント側、ベントナイト側ともに界面から 0.3mm 程度まで変化が見られた。



(a) Ca 及び透過 X 線の強度

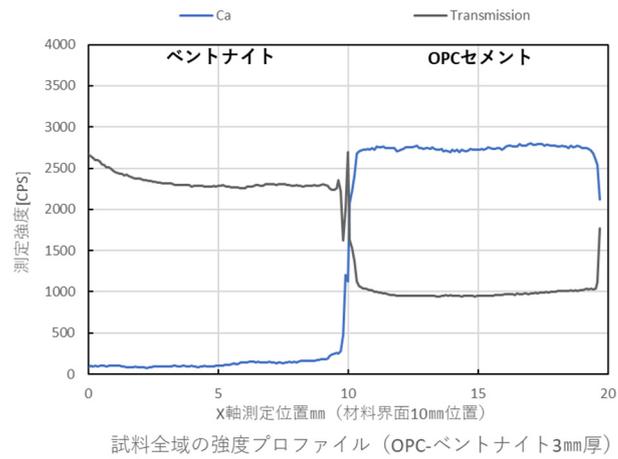


(b) Ca 及び透過 X 線の強度 (界面領域を拡大)

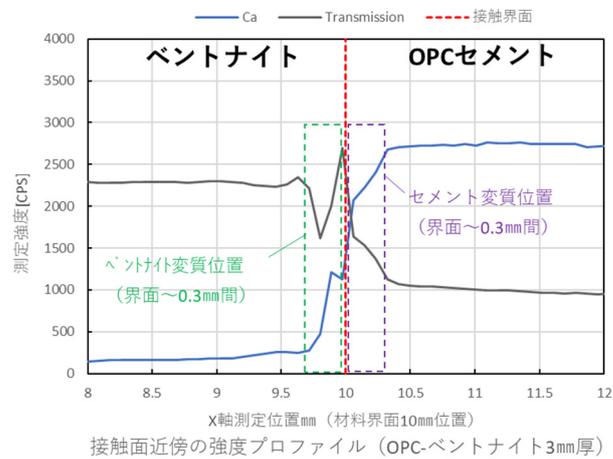


(c) Si, Al, Fe, Mg, S, Na, K

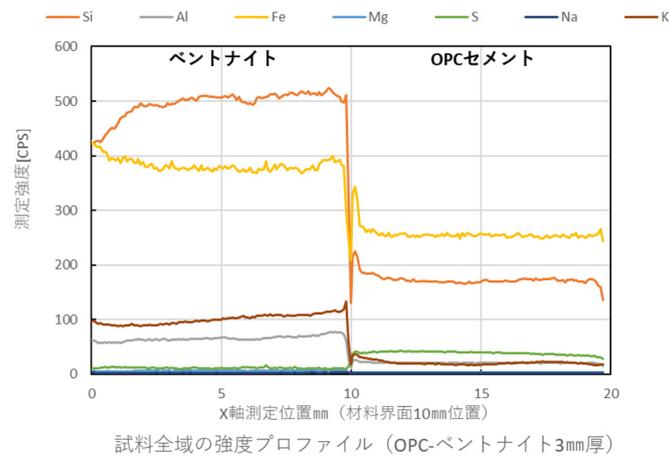
図 1-4 HFSC-ベントナイト接触試験体の強度プロファイル(XGT-9000)



(a) Ca 及び透過 X 線の強度



(b) Ca 及び透過 X 線の強度 (界面領域を拡大)



(c) Si, Al, Fe, Mg, S, Na, K

図 1-5 OPC-ベントナイト接触試験体の強度プロファイル(XGT-9000)

2. XGT-5200S による分析結果

2.1 分析方法及び条件

分析試料には、薄片試料を用いた。分析に用いたセメントーベントナイト接触試験体の薄片試料写真を図 2-1、分析条件を表 2-1 に示す。

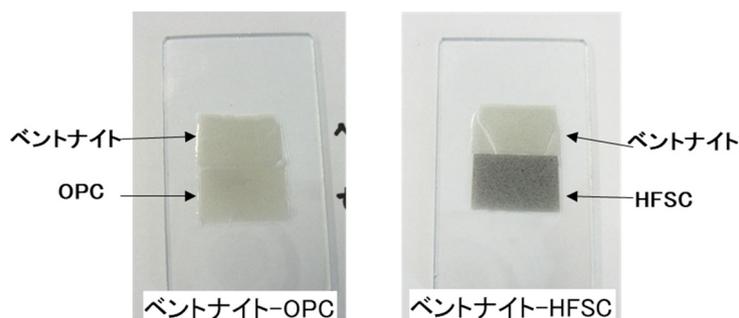


図 2-1 セメントーベントナイト接触試験体の薄片試料写真

表 2-1 分析条件

分析試料	薄片試料
装置	堀場製作所製 XGT-5200S
測定原理	エネルギー分散型蛍光 X 線分析法
管電流・管電流	30kV・1000 μ A
測定時間	14400s
ピクセルタイム	55ms
パルス処理時間	Process 3
繰返し回数:	4
キャピラリ:	高輝度用 100 μ m 径
真空状態:	部分真空

2.2 分析結果

HFSC 接触試験体及び OPC 接触試験体の分析結果を図 2-2～図 2-5 に示す。XGT-9000 の結果と同様に、HFSC 接触試験体及び OPC 接触試験体とも、元素濃度の変化は Ca の変化が最も明瞭であった。

HFSC 接触試験体については、HFSC 側において、界面から 0.5mm 程度までの範囲で Ca の強度が低下している領域が確認された。HFSC から Ca が溶脱し、クニゲル V1 側へ移行していることが推測されるが、HFSC 接触試験体では、クニゲル V1 側の Ca の強度の増加は確認されなかった。他の分析結果と合わせて評価する必要がある。また、HFSC 側で界面から 2mm 程度の範囲で S の強度の低下領域が確認された。しかし、クニゲル V1 側では S の強度に変化が見られず、Ca と同様に他の分析結果と合わせて評価する必要がある。

OPC 接触試験体については、OPC 側において、界面から 0.3mm 程度の範囲で Ca の強度が低下した領域が確認された。クニゲル V1 側において、界面から 0.3mm 程度の範囲で Ca の強度の増加が見られた。

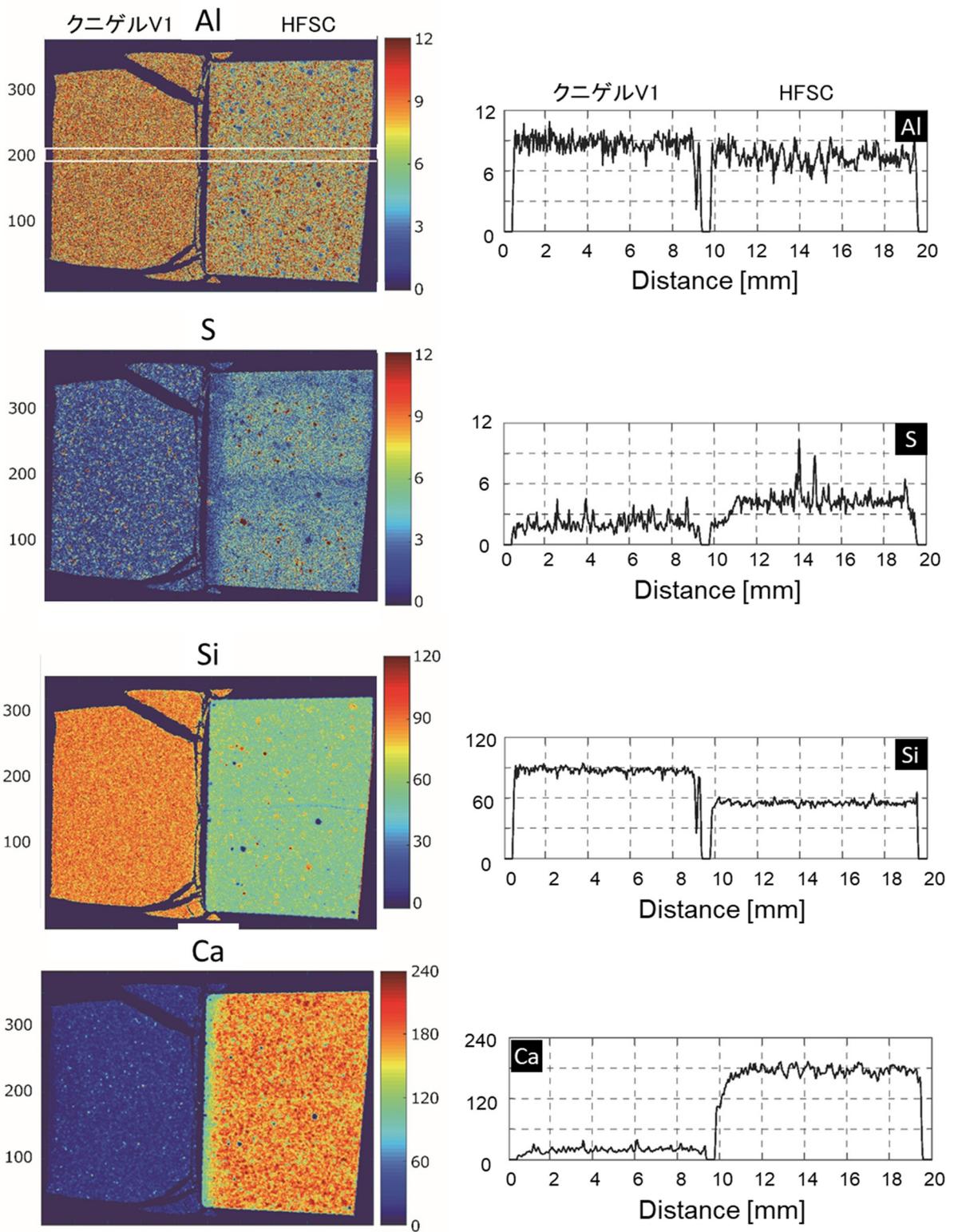


図 2-2 HFSC-ベントナイト接触試験体の分析結果 (XGT-5200S) (Al, S, Si, Ca)
 (強度プロファイルは強度マップの白線 (Al のマップ参照) で囲まれた部分から作成)

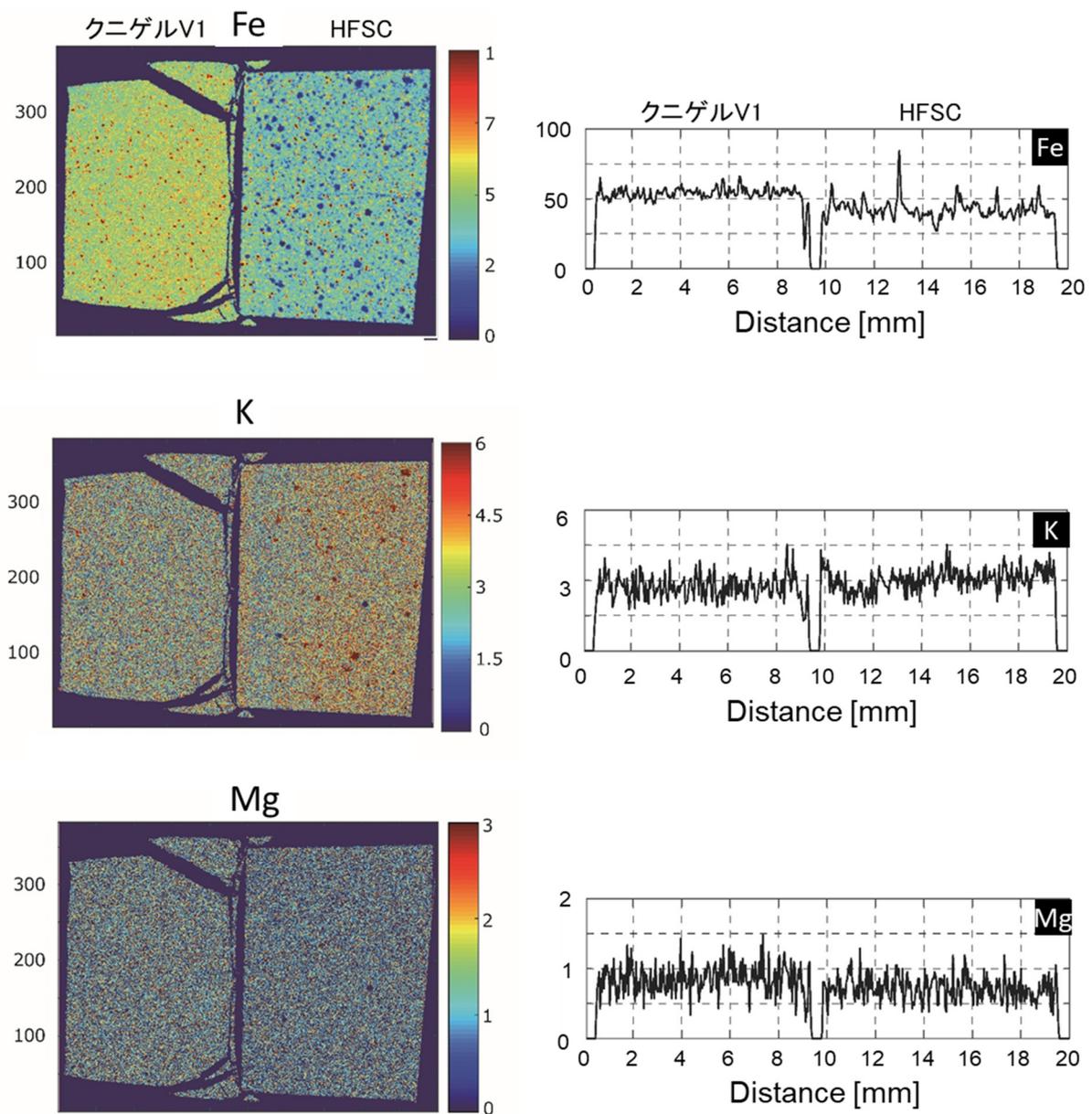


図 2-3 HFSC-ベントナイト接触試験体の分析結果 (XGT-5200S) (Fe, K, Mg)
 (強度プロファイルは強度マップの白線 (Al のマップ参照) で囲まれた部分から作成)

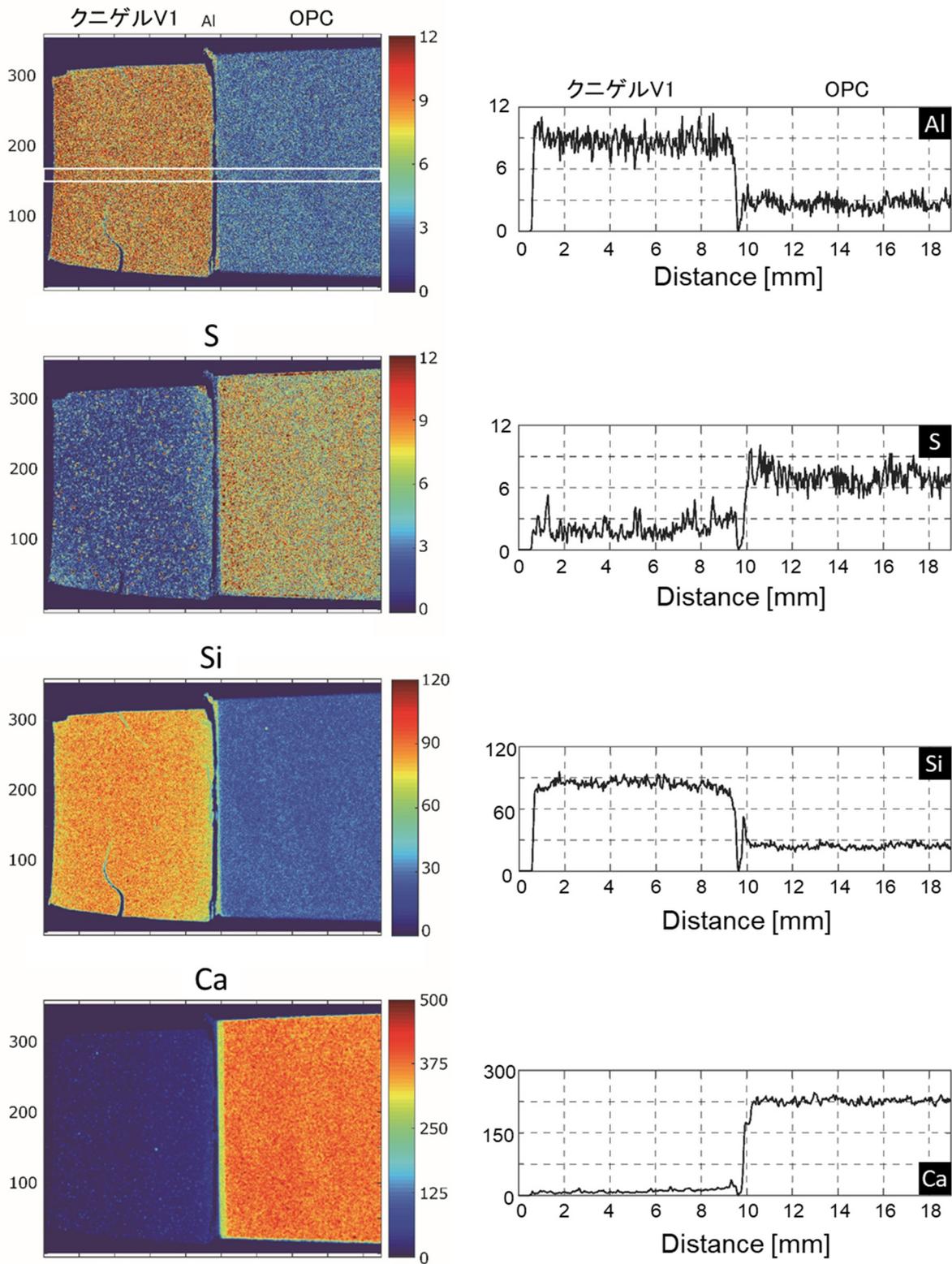


図 2-4 OPC-ベントナイト接触試験体の分析結果 (XGT-5200S) (Al, S, Si, Ca)
 (強度プロファイルは強度マップの白線 (Al のマップ参照) で囲まれた部分から作成)

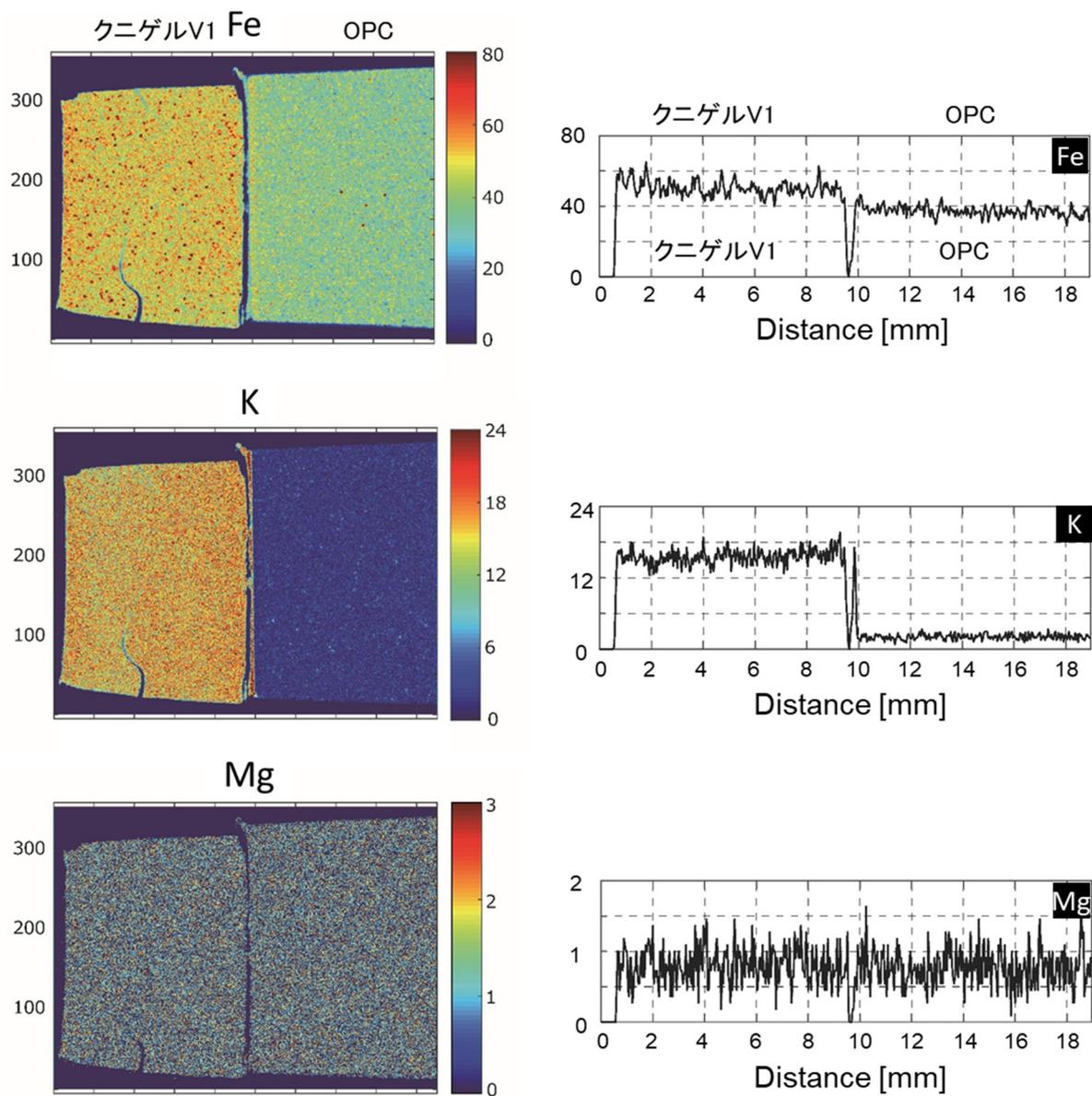


図 2-5 OPC-ベントナイト接触試験体の分析結果 (XGT-5200S) (Fe, K, Mg)
 (強度プロファイルは強度マップの白線 (Al のマップ参照) で囲まれた部分から作成)

廃棄体由来の発生ガスに関する現象解析モデルの妥当性検討に
係る補足資料

廃棄体由来の発生ガスに関する現象解析モデルの妥当性検討に係る補足資料

1. 処分坑道の力学連成ガス移行評価モデルの高度化に係る補足資料

1.1 本検討の全体計画

5ヶ年の検討工程

検討項目	年度 期	2018		2019		2020		2021		2022	
		上期	下期								
1-1 小規模モックアップを用いたガス移行試験などに関する既往の研究事例の調査											
1-2 試験の実施計画の策定及びモックアップ試験装置の設計・調達											
2-1 製作したモックアップ試験装置による再冠水試験（人工バリアの再冠水挙動評価）											
2-2 緩衝材候補材料（ベントナイト・砂混合材料）を対象としたガス移行試験（要素試験）などによる物性取得・特性評価											
2-3 要素試験結果の再現解析による解析パラメータの精度向上											
2-4 実スケールの人工バリア（二次元横断面）を対象とした力学連成ガス移行評価モデルの検討・構築											
3-1 緩衝材候補材料（ベントナイト・砂混合材料）を対象としたガス移行試験（要素試験）などによる物性取得・特性評価（2-2の継続検討）											
3-2 要素試験結果の再現解析による解析パラメータの精度向上（2-3の継続検討）											
3-3 再冠水完了状態を模擬した試験装置によるガス移行試験（人工バリアのガス移行特性評価）											
3-4 実スケールの人工バリア（2次元横断面）を対象とした力学連成ガス移行評価モデルの構築・高度化											
4-1 モックアップ試験装置の解体調査と試験結果の整理											
4-2 試験結果と予察（2018年度）／再現（平成2019～2020年度）解析結果との比較検証などによる力学連成ガス移行評価モデルの更なる精度向上											
4-3 実スケールの人工バリア（二次元横断面）を対象とした力学連成ガス移行評価モデルへの反映（実スケールでの評価モデル精度の向上）											
5 成果の取りまとめ（必要に応じ技術課題の抽出など）と「ガス・核種移行連成評価モデルによる解析とガス影響の評価」に資する検討											

マイルストーン

「核種移行を考慮したガス移行影響評価モデルの検討に関する業務」との成果の連携（2021年度までに）

1.2 小規模モックアップによる再冠水試験等の実施

1.2.1 モックアップ供試体の成型

対象とするモックアップ供試体は、図 1-1 に示す「小規模モックアップ試験装置」を用いて成型する。

モックアップ供試体（緩衝材模擬部：高さ 320 mm、幅 300 mm×300 mm）の配合は包括的技術報告書レビュー版（NUMO, 2018）に示された緩衝材仕様 [ベントナイト（クニゲル V1）：ケイ砂（3号と5号ケイ砂を乾燥重量比 1：1 で混合したもの） = 70wt%：30wt%] とし、混合土の真密度を 2.7 と設定し、各層において圧縮成型後に乾燥密度 1.6 Mg/m³、飽和度 95%となるよう計量・加水（イオン交換水）調整し、全 7 層に分けて圧縮成型した。

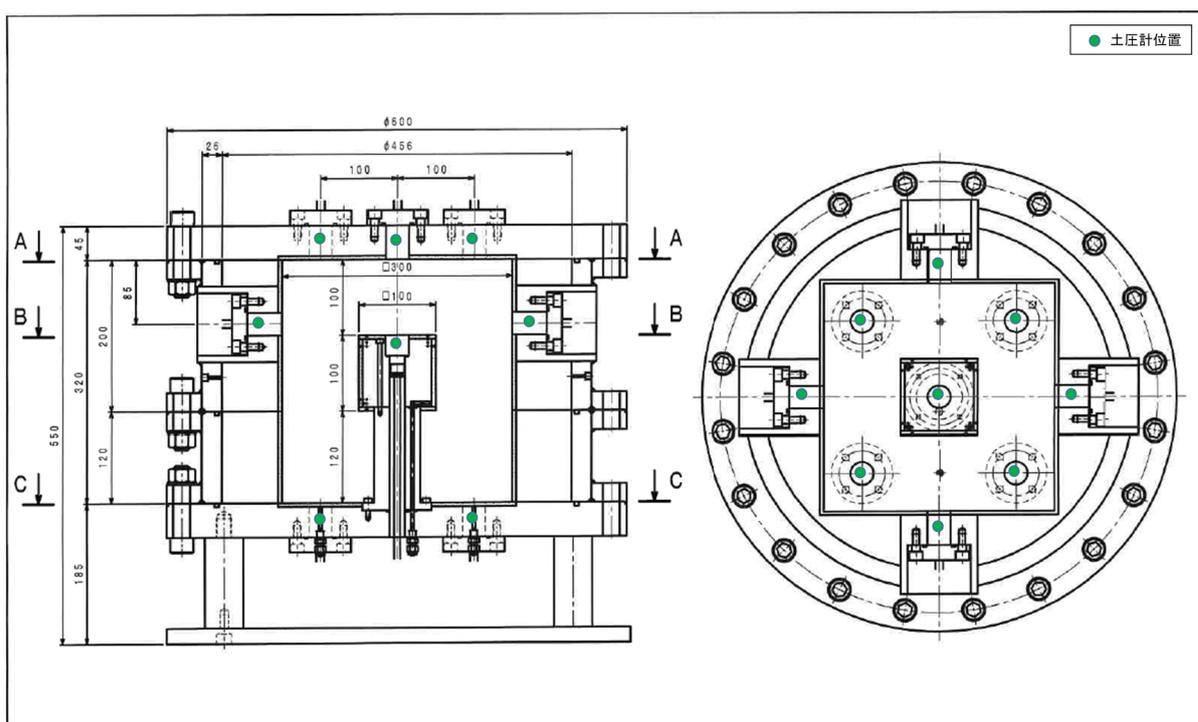


図 1-1 小規模モックアップ試験装置

小規模モックアップ供試体の成型概要を図 1-2 に示す。

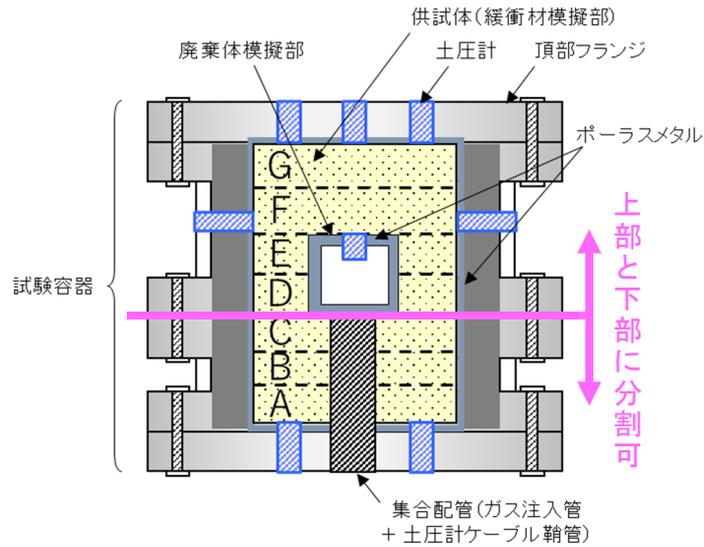


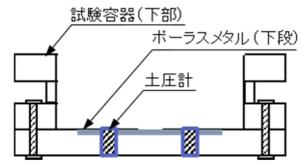
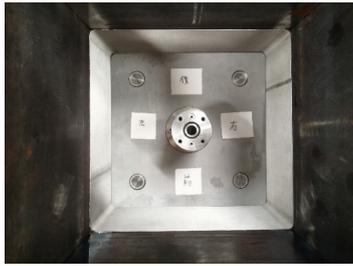
図 1-2 小規模モックアップ供試体の成型概要図

小規模モックアップ供試体（緩衝材模擬部：高さ 320 mm、幅 300 mm×300 mm）の配合は包括的技術報告書レビュー版（NUMO, 2018）に示された緩衝材仕様 [ベントナイト（クニゲル V1）：ケイ砂（3号と5号ケイ砂を乾燥重量比 1：1 で混合したもの）＝70wt%：30wt%] とし、混合土の真密度を 2.7 と設定し、各層において圧縮成型後に乾燥密度 1.6 Mg/m³、飽和度 95%となるよう計量・加水（イオン交換水）調整し、全 7 層に分けて圧縮成型した。

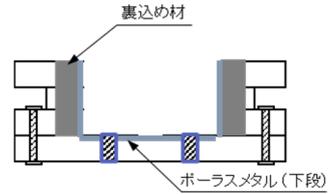
供試体の成型手順は以下の通りとした。

- ① 試験容器の下部を組み立てる
- ② 下部ポーラスメタルを設置する
- ③ 土圧計（底面 4 個）を設置する
- ④ 下部裏込め材（不透水・高強度エポキシ系材料）を打設する
- ⑤ 供試体のうち「A～C」部を 40 mm ずつ圧縮成型（全高：120 mm）する
- ⑥ 試験容器の上部（頂部フランジを除く）を組み立てる
- ⑦ 上部裏込め材（不透水・高強度エポキシ系材料）を打設する
- ⑧ 土圧計（側面 4 個）を設置する
- ⑨ 模擬廃棄体部（土圧計＋ガス注入管を含む）を設置する
- ⑩ 供試体のうち「D～G」部を 50 mm ずつ圧縮成型（全高：200 mm）する
- ⑪ 「頂部フランジ（土圧計 5 個・ポーラスメタルを含む）」部を組み立てる

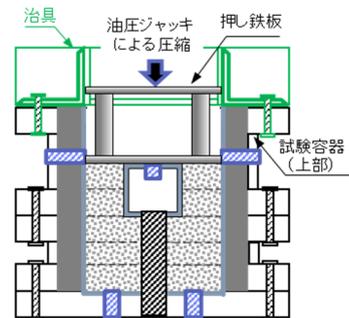
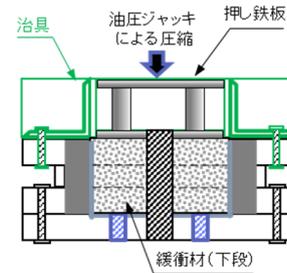
各手順における小規模モックアップ供試体の作製状況を図 1-3 に示す。



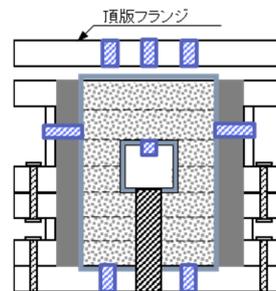
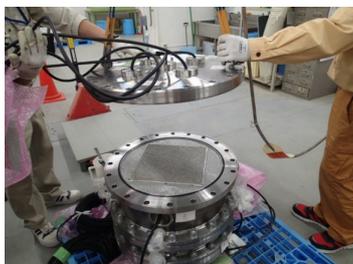
【手順①～③】 容器下部組立～ポーラスメタル・土圧計（底部の例）設置状況



【手順④・⑦】 裏込め材打設状況



【手順⑤・⑩】 供試体圧縮成形状況



【手順⑪】 頂部土圧計・フランジ組立状況

図 1-3 小規模モックアップ供試体作製状況

1.2.2 パイロット供試体の成型

パイロット供試体の成型手順を示す。

パイロット供試体の材料は小規模モックアップのものと同様とし、小規模モックアップ試験装置の注水系統と同等な機構を備えた 1/3 スケール程度の試験装置を用い、全 3 層に分けて圧縮成型する。なお、各層の材料も同様に、圧縮成型後に乾燥密度 1.6 Mg/m^3 、飽和度 95%となるよう計量・加水（イオン交換水）調整のうえ、予め準備しておくものとした。

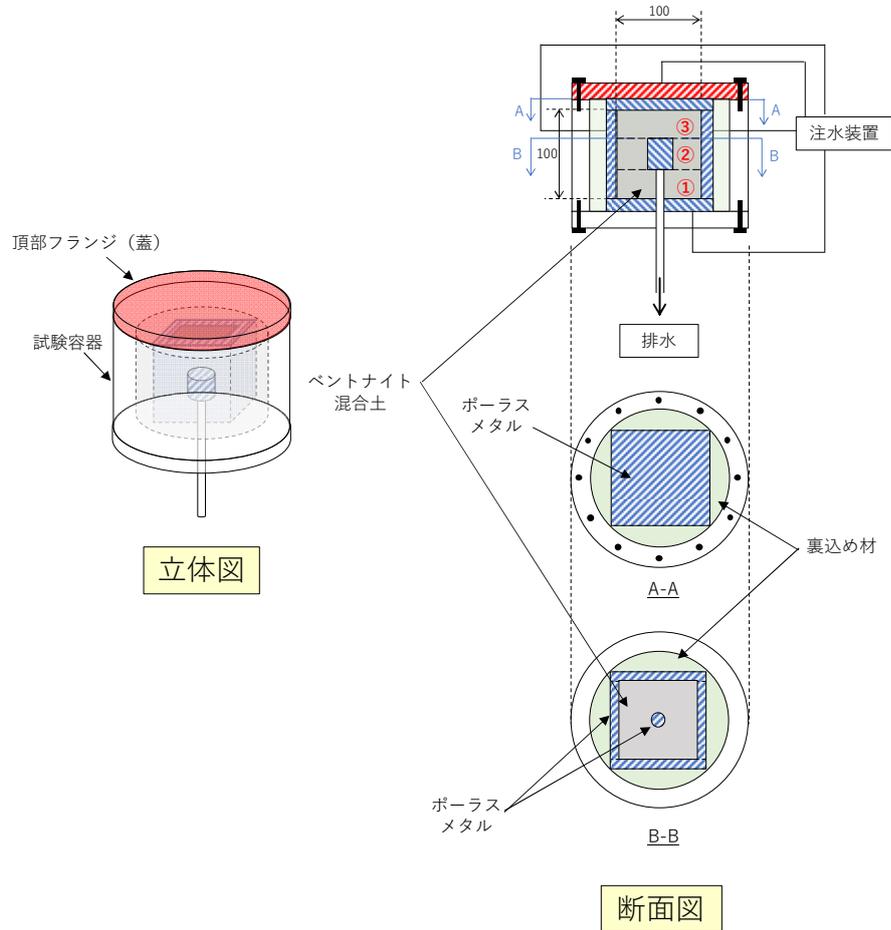


図 1-4 パイロット供試体の成型概要図（計画図）

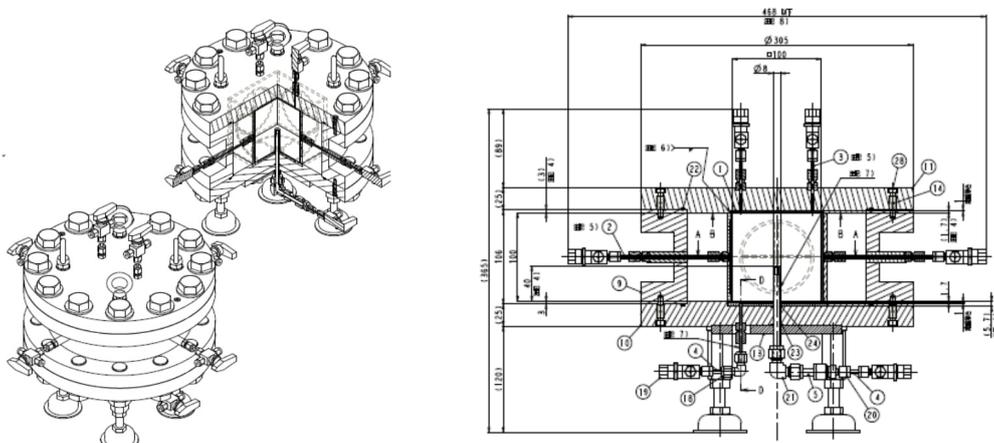
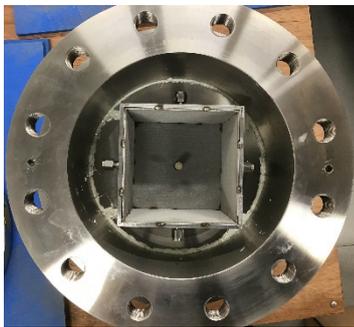


図 1-5 パイロット供試体の完成図

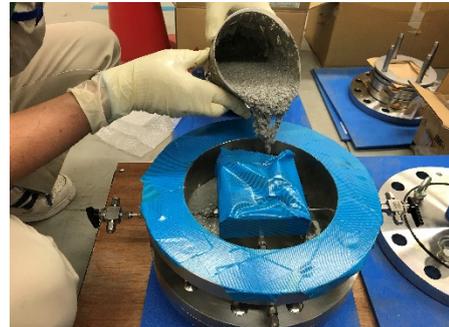
供試体の成型手順は以下の通りとした。

- ①「頂部フランジ」部を除く試験容器全体を組み立てる
- ②「頂部フランジ」部を除くポーラスメタルを設置する
- ③裏込め材（不透水・高強度エポキシ系材料）を打設する
- ④供試体のうち①（40 mm）部を圧縮成型する
- ⑤ポーラスメタル（内側）設置する
- ⑥供試体のうち②および③部を 30 mm ずつ圧縮成型（全高：60 mm）する
- ⑦「頂部フランジ（ポーラスメタルを含む）」部を組み立てる

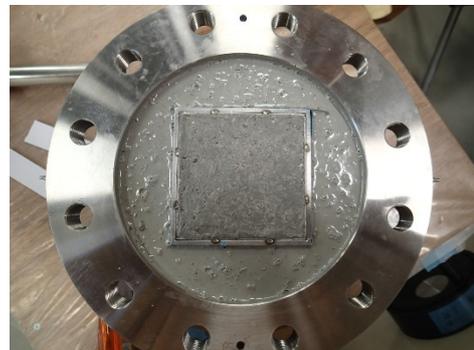
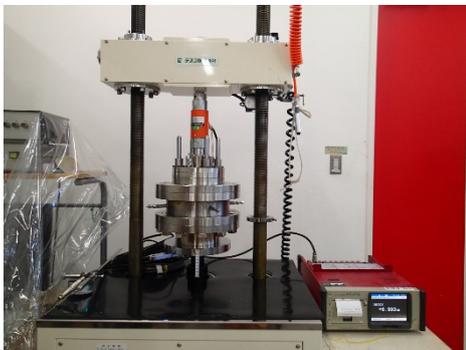
各手順におけるパイロット供試体の作製状況を図 1-6 示す。



【手順①～②】 容器組立～ポーラスメタル
設置状況



【手順③】 裏込め材打設状況



【手順④～⑥】 供試体圧縮成形状況

図 1-6 パイロット供試体作製状況

2. 長期変遷を考慮したガス移行場の状態設定評価

2.1 状態設定に係る緩衝材の化学変質試験

2.1.1 はじめに

本節においては、状態設定に係る緩衝材の化学変質試験において実施した、モンテカルロシミュレーションによるベントナイトの粒子構造の検討内容について記す。

2.1.2 既往の検討概要

本検討では、円板に近似されるモンモリロナイトと球に近似される二次鉱物の粒子凝集に伴う粒子構造（図 2-1）を数値計算モデルで表現し、モンモリロナイトの実効反応表面積とベントナイトの空隙構造をモデル化することを目的に、2018 年度は、ベントナイトの粒子構造がモンテカルロシミュレーションによる平衡状態の計算で再現できるかについて検討を行った。その結果、枯渇効果（図 2-2）によりモンモリロナイト粒子（円板状）の積層クラスタ形成が進行し、二次鉱物や随伴鉱物等の球状粒子による空隙の発達を確認された。さらに、この現象を説明する密度や二次鉱物量に支配される凝集平衡構造の相図が描ける可能性を示した(原環センター,2019)。ここでは、二次鉱物生成初期のような粒子充填率が小さく粒径も小さい系においても、モンモリロナイトの積層クラスタ化は球径が小さいときは特に低密度でも進行し、その結果空隙は広がり二次鉱物で占有される挙動が読み取れる（図 2-3）。粒径が大きい二次鉱物生成後期では、緩い積層クラスタを形成し、その結果やや縮小した空隙を大きな二次鉱物が充填するようになることが示された。

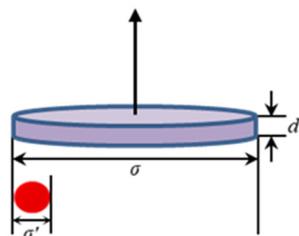


図 2-1 モンテカルロシミュレーションにおける円板状粒子と球状粒子

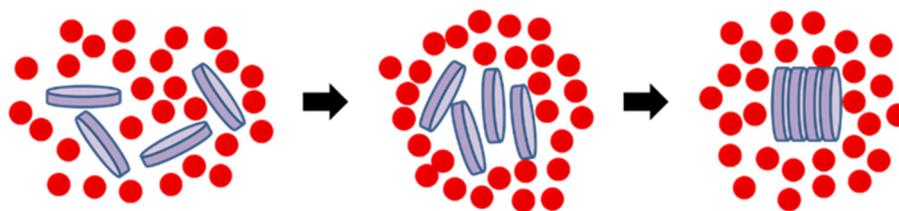
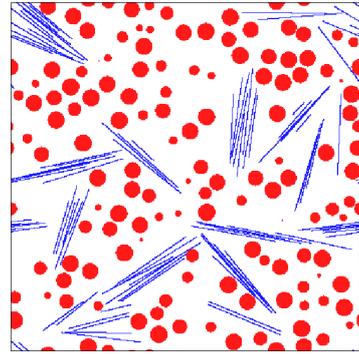
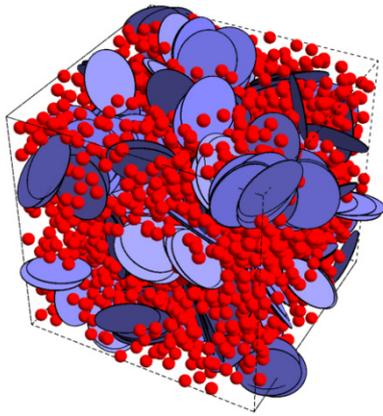
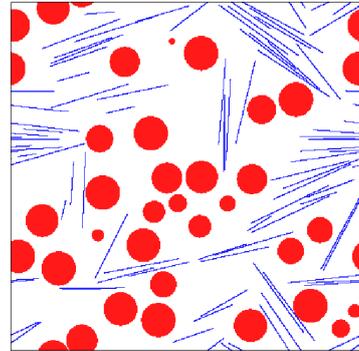
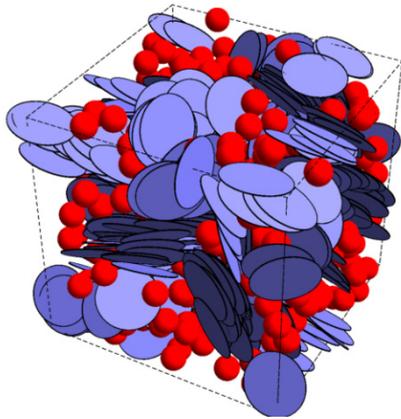


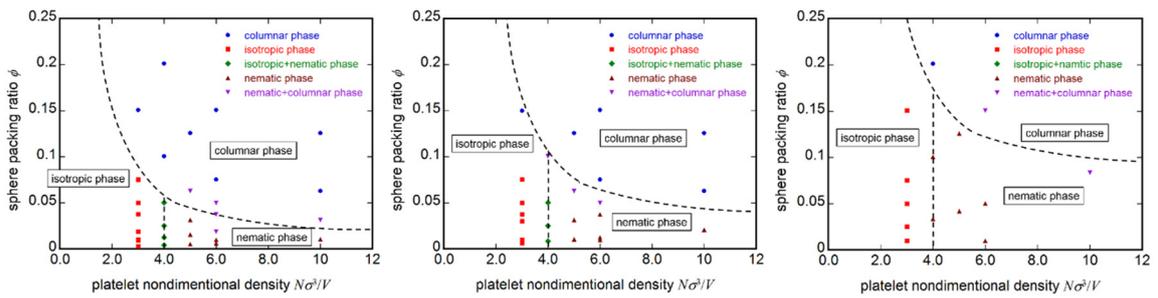
図 2-2 枯渇効果による積層クラスタ形成の概要



(a) 球の充填率 $\phi=0.15$ 、直径比 $\sigma/\sigma'=0.20$ 、円板の無次元数密度 $N\sigma^3/V=6.0$



(b) 球の充填率 $\phi=0.15$ 、直径比 $\sigma/\sigma'=0.40$ 、円板の無次元数密度 $N\sigma^3/V=6.0$



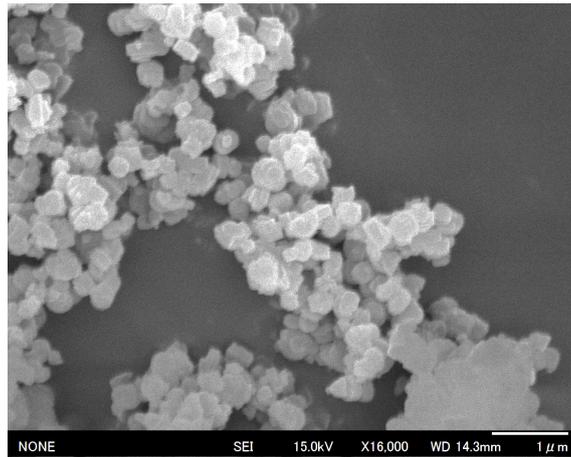
(c) 円板状粒子と球状粒子の混合系における平衡構造の相図
(左から右へ球/円板直径比増大)

図 2-3 球-円板系の凝集構造とその平衡相図

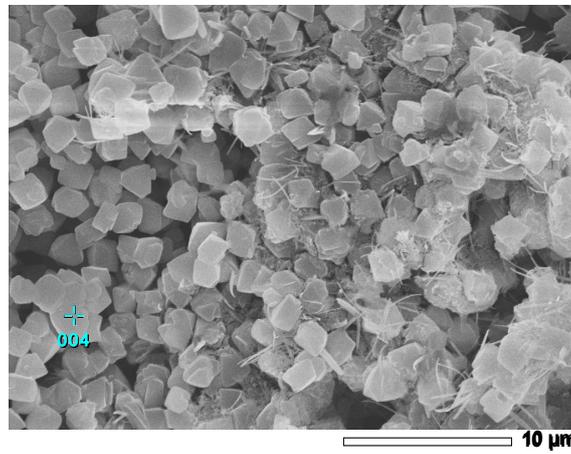
2.1.3 検討の手法

2019年度は、二次鉱物とモンモリロナイトの粒子サイズ等を考慮してモンテカルロシミュレーション解析で粒子の平衡構造及びそれに基づく空隙構造を確認した。この検討は、透水性や浸透性を評価する上で重要な知見となり、今後の化学力学解析の根幹をなすものとなる。

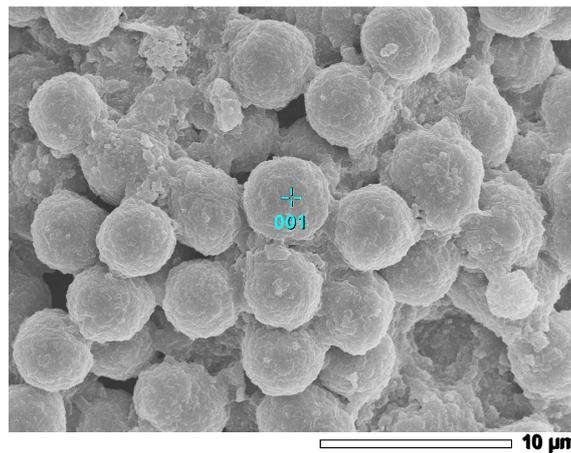
本検討でも、これまで検討してきた系と同様に、二次鉱物としてのゼオライトを球近似し、モンモリロナイトは円板近似した。これらの粒径はシミュレーション及び透水試験（室内試験）での条件を包括するように設定した。また、球充填率（球/円板体積比）もシミュレーション及び透水試験で共通の条件を設定した上で、シミュレーションではこれらの平衡構造を確認し、空隙構造を解析し、そこから推定される透水挙動を考察した。また透水試験としては、一定の粒径を有する合成ゼオライト（HSZ: high silica zeolite = 0.2 μm , FAU: faujasite = 2 μm , または ANA: analcime = 4 μm 、図 2-4）のうち、2019年度は最小粒径の HSZ とモンモリロナイト（Kunipia-F = 0.3 μm 、図 2-5）の適当な割合の 2 成分混合系人工ベントナイトを設定し、それを一定の密度に圧密して透水挙動を調べることで、ベンチマーク試験とした。モンテカルロシミュレーションと透水試験の結果を比較して考察した。表 2-1 には検討項目をまとめた。



HSZ: high silica zeolite (本年度使用)



Faujasite



合成 ANA: analcime

図 2-4 合成ゼオライトの FESEM 観察

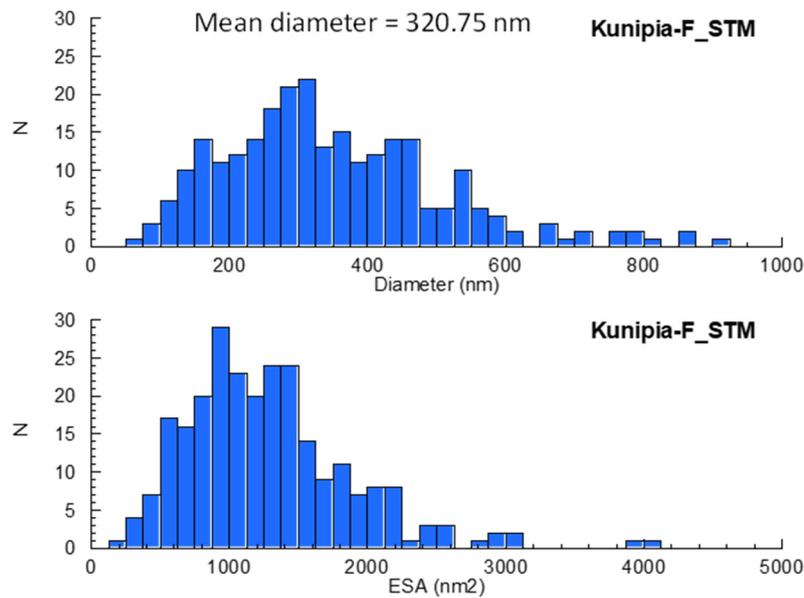


図 2-5 Kunipia-F の AFM 粒子測定データ

表 2-1 シミュレーション解析とそのベンチマーク試験の検討項目

試験	固相	液相	乾燥密度	固相組成 (D_D/D_S , V_D/V_S)	粒子構造 (凝集相図)	透水係数 (空隙率)
MC 粒子構造再現とその場の透水挙動解析	円板(クニピア F 相当) 球(添加ゼオライト相当)	H ₂ O	1.0 近傍	円板/球サイズ比 $D_D/D_S = 0.1-10$ 相当、体積比 $V_D/V_S = 5-50$	解析による再現	解析による計算値
通水式シリンジセルによる透水試験	クニピア F 合成ゼオライト	0.3 M Na-K-Cl (反応性のない系として)	1.0 近傍	$D/S = 1-10$ において、体積比 $V_D/V_S = 5-50$ (重量比では、 $M_D/M_S = 4-40$)	XCT 測定 EPMA	実測値(差圧と流速の実測)

2.1.4 円板-球混合系における空隙構造解析

TRU 廃棄物の地層処分における緩衝材領域に提案されているベントナイト系材料は、高密度に圧縮すると溶解速度が大幅に低下する。この原因の一つとして、ベントナイトの主成分である montmorillonite が、密度の増加に伴い粒子端部を他の粒子端部に遮蔽され、粒子の実効的な反応表面積が減少することが考えられる (マスキング効果)。

2017 年度までの検討では、マスキング効果による溶解速度の減少を説明するために、montmorillonite 粒子を円板状粒子に近似した Monte Carlo 解析を行ってきた。低密度条件 (～0.02 Mg/m³ 程度) では、粒子間相互作用に四重極ポテンシャルを仮定し、マスキング効果による実効比端面積の減少について調べた。四重極ポテンシャルは粘土粒子特有の面-端構造を適切に再現するが、モデルの性質上、電気二重層同士の干渉が生じるような高密度の条件では適用できないという問題がある。そこで、高密度条件では剛体ポテンシャルのみを仮定した Monte Carlo

解析を行い、TRU 廃棄物処分の緩衝材の条件に近い乾燥密度 1.2 Mg/m^3 程度までの平衡構造を求め、実効比端面積の試算を行った。初期粒子配置の依存性や粒子の多分散性の影響を考慮した解析を行った結果、初期配置条件によって平衡構造とは別の準安定状態のような構造を示す可能性があること、高密度条件では粒子の多分散性が実効比端面積に及ぼす影響は小さいことが示された。同時に、低-中密度条件における剛体ポテンシャルを仮定した Monte Carlo 解析を行い、得られた平衡構造が四重極ポテンシャルによる解析結果と整合的であるかを調べた。その結果、両ポテンシャルによる平衡構造は粒子の排除体積がオーバーラップするような密度条件 ($0.01 \sim 0.05 \text{ Mg/m}^3$ 程度) で類似した平衡構造を示すことが明らかになった。また、両ポテンシャルを仮定した平衡構造から算出した実効比端面積と AFM による montmorillonite 粒子の溶解速度実験の結果から算出した実効比端面積に良い一致が見られることがわかった。さらに、解析結果及び実験結果から montmorillonite 粒子の実効比端面積と乾燥密度の関係の定式化を行った。以上の結果から、montmorillonite 粒子の密度増加にともなう溶解速度低下は、粒子の端部が他の粒子に遮蔽されることによって実効的な反応表面積が減少する物理的マスキング効果が主要な原因であることが示唆された。

2018 年度の検討では、ベントナイトが montmorillonite 以外に silica 粒子のような不純物も含んでいることを考慮し、粘土粒子以外の他の粒子の存在がベントナイトの溶解性に与える影響について調べた。まず、一般的な円板状粒子と球状粒子の混合系における平衡構造を Monte Carlo 解析により求めた。さまざまな密度条件及び混合条件で解析を行った結果、円板が高密度の条件では球の添加によって円板が凝集し、球の存在する領域付近に大きな空隙構造（マクロポア）が発達する様子が確認された。また、得られた球-円板混合系の平衡構造から montmorillonite を想定した実効比端面積を算出した結果、純粋な円板系との差異はほとんど見られなかったことから、実効比端面積に対する球状粒子の存在の影響は小さいことが確認された。しかしながら、他の粒子の存在による空隙構造の変化は、系全体の透水性や物質移動性に大きな影響を及ぼし得ると推察され、その具体的な影響については未だ明らかではない。

そこで 2019 年度は、円板状粒子と球状粒子の混合系における平衡構造を Monte Carlo 解析により求め、球状粒子が混入することによって空隙構造がどのように変化するのかについて検討した。解析により得られた平衡構造に対して、空隙構造の可視化及び定量化を行うことによって空隙の平均サイズや連結性などについて調べ、球状粒子の存在による透水性への影響についての検討を行った。

(1) 解析手法

1) 解析の概要

Monte Carlo 法は、ある統計集団の微視的状态を出現確率に応じて乱数により生成させて平衡構造を求める手法であり、分子や粒子集団の熱力学的平衡構造の解析などに用いられる（神山ほか,1997、上田,2003）。

本手法はこれまで、球状粒子のような等方的な粒子間ポテンシャルを有するような系や、円板状粒子 (platelet) のような非等方的な粒子間ポテンシャルを有するような系の構造解析に用いられてきた。本検討では、剛体ポテンシャルを仮定した球-円板混合系に本手法を適用し、平衡構造の解析を行った。

2) 解析条件

図 2-6 に、本解析で仮定した円板状粒子と球状粒子の概要を示す。円板状粒子においては、厚みのない円板 (platelet) を仮定し、直径 σ は一定とした。ただし、空隙流路などの緒量を算出す

る際は円板状粒子を直径 $\sigma=320\text{nm}$ 、厚さ $d=1\text{nm}$ を有する単分散の montmorillonite 粒子と仮定して計算を行った。また、球状粒子の大きさにおいては、円板の直径 σ を一定とし、球-円板直径比 $\sigma/\sigma=0.67$ とした。

本検討では、全ての条件で円板状粒子の粒子数を $N=20000$ と固定し、円板の無次元数密度を $N\sigma^3/V=150$ と固定して解析を行った。それにともない、全ての方向に周期境界を仮定した計算領域は一辺の大きさを粒子直径の約5.1倍に固定した立方体とした。球状粒子に関しては、計算領域に対する球の体積率を変化させて解析を行った。

初期条件は一様乱数を用い円板の位置ベクトルと法線ベクトル、及び球の位置ベクトルを与え、交差判定により粒子同士がオーバーラップしないように配置した。円板が高密度であり、粒子が取り得る状態数は少なく粒子をランダムに配置することが困難であるため、円板の法線ベクトルに制限を設けることで円板を予め1方向に配向させて初期条件を設定した。Monte Carlo 解析では粒子の位置及び姿勢（球の場合は位置のみ）を乱数によって更新し、Metropolisの方法に基づく推移確率の計算により推移後の状態を求めた。本解析では、1 並進あたりの最大移動量 $\Delta r = 0.02\sigma$ 、法線ベクトルの各成分の変化量 $\Delta v = 0.02$ とした。

剛体ポテンシャルを仮定した解析では、粒子が交差しない場合のエネルギー差は0、交差した場合のエネルギー差は無限大となるため、系全体のエネルギーをモニタリングすることができない。過去の検討では、粒子層内の空隙の特性量を評価することにより平衡判定を行い、Monte Carlo step が600万回程度で平衡構造と判定されることが報告されている。したがって、本解析ではさらにその10倍のMonte Carlo step が6000万回に達した場合を平衡構造と判定した。

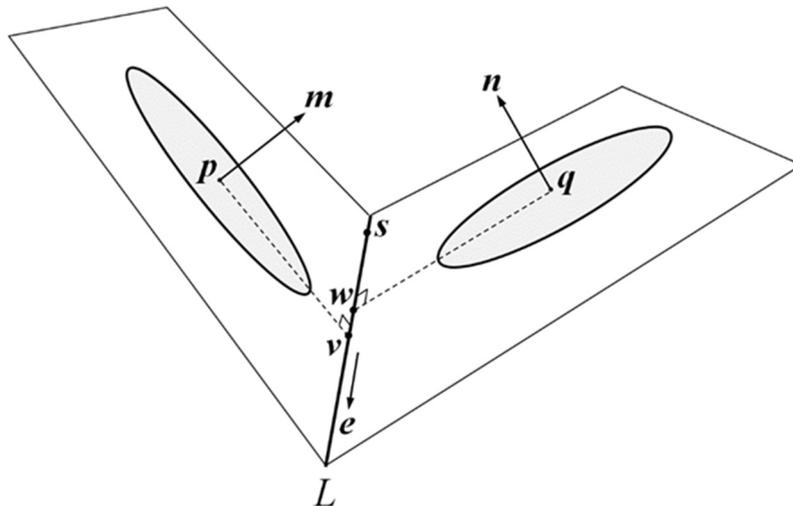


図 2-6 2つの円板状粒子の位置関係

(2) 交差判定

本解析では2粒子間（円板-円板、円板-球、球-球）の相対位置に関する幾何学的な計算から交差判定を行い、交差と判定された場合に過大なポテンシャルエネルギーを作用させることにより剛体ポテンシャルを導入した。以下に円板-円板、円板-球、球-球、それぞれの交差判定について示す。

1) 交差判定（円板-円板）

図 2-6 のように、厚みのない2つの円板状粒子の中心座標の位置ベクトルをそれぞれ p 及び q

粒子の法線ベクトルをそれぞれ \mathbf{m} 及び \mathbf{n} とする。それぞれの円板が含まれる平面を考え、その交線を L とすると、交線 L の方向ベクトル \mathbf{e} は次式で与えられる。

$$\mathbf{e} = \mathbf{m} \times \mathbf{n} \quad \text{or} \quad (e_x, e_y, e_z) = (m_y n_z - m_z n_y, m_z n_x - m_x n_z, m_x n_y - m_y n_x) \quad \text{式 2-1}$$

ただし、 \mathbf{e} は単位ベクトルではない。また各円板を含む 2 つの平面の方程式はそれぞれ次式で与えられる。

$$m_x x + m_y y + m_z z = d_m \quad \text{式 2-2}$$

$$n_x x + n_y y + n_z z = d_n \quad \text{式 2-3}$$

ここで d_m 及び d_n は定数である。 d_m 及び d_n は、それぞれの円板の中心が平面に含まれることから次のように求めることができる。

$$d_m = m_x p_x + m_y p_y + m_z p_z \quad \text{式 2-4}$$

$$d_n = n_x q_x + n_y q_y + n_z q_z \quad \text{式 2-5}$$

次に、交線 L 上の任意の点の位置ベクトル \mathbf{s} を求める。点 \mathbf{s} には任意性があり、例えば点 \mathbf{s} が平面 x - y 平面に存在すると仮定すると、式 2-2~式 2-5 から位置ベクトル \mathbf{s} の各成分はそれぞれ次のように求められる。

$$s_x = \frac{d_m n_y - d_n m_y}{m_x n_y - m_y n_x} = \frac{1}{e_z} (d_m n_y - d_n m_y) \quad \text{式 2-6}$$

$$s_y = \frac{d_m n_x - d_n m_x}{-(m_x n_y - m_y n_x)} = -\frac{1}{e_z} (d_m n_x - d_n m_x) \quad \text{式 2-7}$$

$$s_z = 0 \quad \text{式 2-8}$$

点 \mathbf{s} が x - y 平面に存在しない場合 ($e_z = 0$) は $s_y = 0$ として、

$$(s_x, s_y, s_z) = \left(-\frac{1}{e_y} (d_m n_z - d_n m_z), 0, \frac{1}{e_y} (d_m n_x - d_n m_x) \right) \quad \text{式 2-9}$$

さらに、 $e_y = 0$ 及び $e_z = 0$ の場合は、

$$(s_x, s_y, s_z) = \left(0, \frac{1}{e_x} (d_m n_z - d_n m_z), -\frac{1}{e_x} (d_m n_y - d_n m_y) \right) \quad \text{式 2-10}$$

として任意の点 \mathbf{s} を求めることができる。 e_x 、 e_y 及び e_z が全て 0 の場合は 2 つの円板は平行であり、交線は存在しない。次に、 $\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z)$ 及び $\mathbf{e} = (e_x, e_y, e_z)$ を用いて交線 L のパラメータ表示を行う。点 \mathbf{s} を始点とした場合、交線 L 上の任意の点の位置ベクトル $\mathbf{x} = (x, y, z)$ は次式で表される。

$$\mathbf{x} = \mathbf{s} + t\mathbf{e}, \quad \text{or} \quad (x, y, z) = (s_x + te_x, s_y + te_y, s_z + te_z) \quad \text{式 2-11}$$

ここで t は任意の定数である。片方の円板の中心 \mathbf{p} から交線 L 上の任意の点に向かうベクトル $\mathbf{s} + t\mathbf{e} - \mathbf{p}$ が交線 L の方向ベクトル \mathbf{e} と直交した場合、そのベクトルが点 \mathbf{p} から下ろした垂線の足 \mathbf{v} を表す。したがって 2 つのベクトルの内積からベクトル \mathbf{v} が次のように表される。

$$\mathbf{v} = \mathbf{s} + \frac{\mathbf{e} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{s})}{\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}} \mathbf{e} \quad \text{式 2-12}$$

円板の中心 \mathbf{p} と垂線の足 \mathbf{v} の間の距離が円板半径 R よりも大きければ、交線 L と円板 \mathbf{p} の表面は交わらない。したがって次式の条件が満たされれば、少なくとも 2 つの円板の交差は起こり得ないということがわかる。

$$|\mathbf{p} - \mathbf{v}| > R \quad \text{式 2-13}$$

同じように、もう 1 つの円板中心 \mathbf{q} から下ろした垂線の足を \mathbf{w} とすると、ベクトル \mathbf{w} は次式で表される。

$$\mathbf{w} = \mathbf{s} + \frac{\mathbf{e} \cdot (\mathbf{q} - \mathbf{s})}{\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}} \mathbf{e} \quad \text{式 2-14}$$

式 2-13 と同様に、円板 \mathbf{q} が交線 L と交差しない条件は次のようになる。

$$|\mathbf{q} - \mathbf{w}| > R \quad \text{式 2-15}$$

2 つの円板に対して、式 2-13 及び式 2-15 の両方の条件を満たさなかった場合は、交差が起こり得る。各円板が交線 L と交差する範囲は、交線 L 上のそれぞれの範囲である。

$$\mathbf{v} - \sqrt{R^2 - (\mathbf{p} - \mathbf{v})^2} \mathbf{e} < \mathbf{x} < \mathbf{v} + \sqrt{R^2 - (\mathbf{p} - \mathbf{v})^2} \mathbf{e} \quad \text{式 2-16}$$

$$\mathbf{w} - \sqrt{R^2 - (\mathbf{q} - \mathbf{w})^2} \mathbf{e} < \mathbf{x} < \mathbf{w} + \sqrt{R^2 - (\mathbf{q} - \mathbf{w})^2} \mathbf{e} \quad \text{式 2-17}$$

したがって、式 2-16 及び式 2-17 で示されるそれぞれの範囲がオーバーラップした場合に、2 つの円板が交差すると判定される。

2) 交差判定 (円板-球)

厚みのない円板状粒子の中心座標を \mathbf{p} 法線ベクトルを \mathbf{m} とし、球状粒子の中心座標を \mathbf{q} とする。円板を含む平面の方程式は次式で与えられる。

$$m_x x + m_y y + m_z z = d_m \quad \text{式 2-18}$$

ここで d_m は定数である。 d_m は、円板の中心が平面に含まれることから次のように求めることができる。

$$d_m = m_x p_x + m_y p_y + m_z p_z \quad \text{式 2-19}$$

次に、円板を含む平面を α として、球の中心 \mathbf{q} から平面 α に下ろした垂線の長さ l は次式で表される。

$$l = \frac{|\mathbf{m} \cdot \mathbf{q} - d_m|}{|\mathbf{m}|} \quad \text{式 2-20}$$

またこの垂線の足の座標を \mathbf{s} とすると、 \mathbf{s} は次のように求められる。

(I) 球が平面 α に対して法線ベクトルの向きと同じ側にある場合

$$\mathbf{s} = \mathbf{q} - dm \quad \text{式 2-21}$$

(II) 球が平面 α に対して法線ベクトルの向きと反対側にある場合

$$\mathbf{s} = \mathbf{q} + dm \quad \text{式 2-22}$$

円板の半径を R 、球の半径を R' とすると、球の中心 \mathbf{q} と垂線の足 \mathbf{s} の間の距離 l が球の半径 R' より大きければ、球と平面 α は交わらない。したがって次式の条件が満たされれば、少なくとも球と円板の交差は起こり得ないということがわかる。

$$l > R' \quad \text{式 2-23}$$

円板と球に対して、式2-23の条件を満たさなかった場合、球と平面 α は交わり、球と円板の交差は起こり得る。この場合、球と平面 α が交わってできる円の中心の座標は \mathbf{s} になっており、この円の半径 r は次式のように表される。

$$r = \sqrt{R'^2 - l^2} \quad \text{式 2-24}$$

この円と円板が交差する条件は次のようになる。

$$|\mathbf{p} - \mathbf{s}| < R + r \quad \text{式 2-25}$$

式2-25の条件が満たされた場合、円板と球が交差すると判定される。

3) 交差判定 (球-球)

2つの球状粒子の中心座標をそれぞれ \mathbf{p} 及び \mathbf{q} 半径を R とすると2つの球が交差する条件は次のようになる。

$$|\mathbf{p} - \mathbf{q}| < R \quad \text{式 2-26}$$

式2-26の条件が満たされた場合、球と球が交差すると判定される。

(3) 任意断面における 2 次元粒子構造の抽出

Monte Carlo 解析で得られた 3 次元粒子構造に対して、内部の粒子構造をより観察しやすくするために、任意の断面における 2 次元粒子構造の抽出を行う。一例として、図 2-7 に Monte Carlo 解析により得られた円板-球混合系の平衡構造(円板無次元数密度 $N\sigma^3/V=150$ 、球充填率 $\phi=0.35$ 、直径比 $\sigma'/\sigma=0.65$)、図 2-8 に 2 次元粒子構造を抽出した結果(例)を示す。このような 2 次元粒子構造は、全ての粒子の位置と姿勢(球については位置のみ)を用いて、粒子と任意の平面との交線を数学的に算出し、その平面に粒子の存在関数 $\rho(x, y) (= 0 \text{ or } 1)$ をマッピングすることによって得られる。本解析では 2 次元領域を 400×400 のセルに分割して存在関数をマッピングした。図 2-8 より、3 次元構造と比較して 2 次元断面の構造を観察した方が球と円板それぞれの凝集構造が判別しやすいことがわかる。

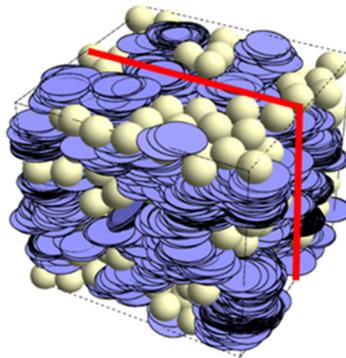


図 2-7 3 次元平衡構造

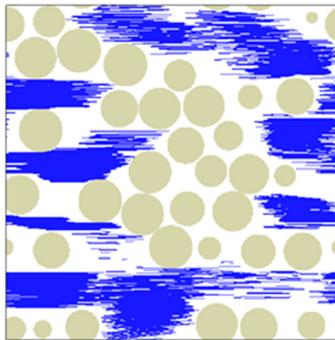


図 2-8 2 次元粒子構造の抽出例

(4) 空隙構造の評価

本検討では、Monte Carlo 解析により得られた円板-球混合系の平衡構造から空隙部分を抽出し、空隙サイズや連結性について定量的に評価を行う。しかしながら、透水性や物質移動性に関与するような有意なサイズの空隙のみを抽出するには、いくつかの工夫が必要である。そこで、ここでは、このような空隙の抽出方法及び空隙サイズや連結性の評価方法について記す。

1) 空隙構造の抽出

Monte Carlo 解析により得られた球-円板混合系の平衡構造から空隙部分を立体的に抽出した。球-円板系の平衡構造を格子状に分割し、分割したセルと球、分割したセルと円板のそれぞれに

ついて交差判定を行い、各セルにおける粒子存在関数 $\rho(x, y, z)$ ($= 0$ or 1) を算出した。交差判定では、各セルの形状を球と仮定することで、計算を簡略化した。本解析では、平衡構造を $80 \times 80 \times 80$ の計 512000 セルに分割した。算出した粒子存在関数 $\rho(x, y, z)$ に対して、重み関数を用いた局所平均化を行い、連続的な粒子の濃度場 $c(x, y, z)$ を算出した。この局所平均化操作により、圧密された円板と円板の間に存在するような透水性や物質移動性に関与しないマイクロな空隙を無視することが可能になる。本検討では重み関数として次式の Gauss 関数を用いた。

$$g(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi\lambda^2)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2 + z^2}{2\lambda^2}\right) \quad \text{式 2-27}$$

ここで λ は偏差パラメータであり、局所平均化の範囲（ぼかしの大きさ）を決めるパラメータである。上式を用いると、粒子濃度場 $c(x, y, z)$ は次のように求めることができる。

$$c(x, y, z) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x-x', y-y', z-z') \rho(x', y', z') dx' dy' dz' \quad \text{式 2-28}$$

一例として、図 2-9 に様々な偏差パラメータ λ を用いて 3 次元粒子構造から粒子濃度場を求めた結果を示す。図より、偏差パラメータの値が小さい場合は空隙は連続的に分布しているのに対して、値が大きい場合は空隙領域が閉じていることがわかる。抽出される空隙の特性は偏差パラメータ λ に大きく依存することから、このパラメータの選定は重要である。図 2-9 に示されている λ は円板直径 σ で無次元化されているが、本来 λ は長さの次元を持ち、重み関数（Gauss 関数）の裾野の広がりを表す代表量と考えられる。その選定に関してはさまざまな物理的仮定を想定することが可能であるが、本解析では $\lambda=0.03$ として解析を行った。この値は実際の距離でおよそ 10 nm 程度の長さに相当する。

局所平均化操作を行った後、粒子濃度 c がある値（cutoff と呼ぶ）以下のセルを空隙とみなし、その部分を抽出した。一例として、図 2-10 に、偏差パラメータ $\lambda=0.03$ で局所平均化を行って得られた粒子濃度場 $c(x, y, z)$ に対して、さまざまな cutoff 値を用いて空隙を抽出した結果を示す。図中の赤い点が空隙として抽出されたセルであり、cutoff 値が小さい場合には抽出される空隙部分が少ないのに対して、cutoff 値が大きい場合には過大に空隙部分が抽出されることがわかる。本解析では、cutoff = 0.6 として空隙の抽出を行った。この値は図 2-8 で示される粒子構造の 2 次元断面図と比較しても妥当な値であると考えられる。

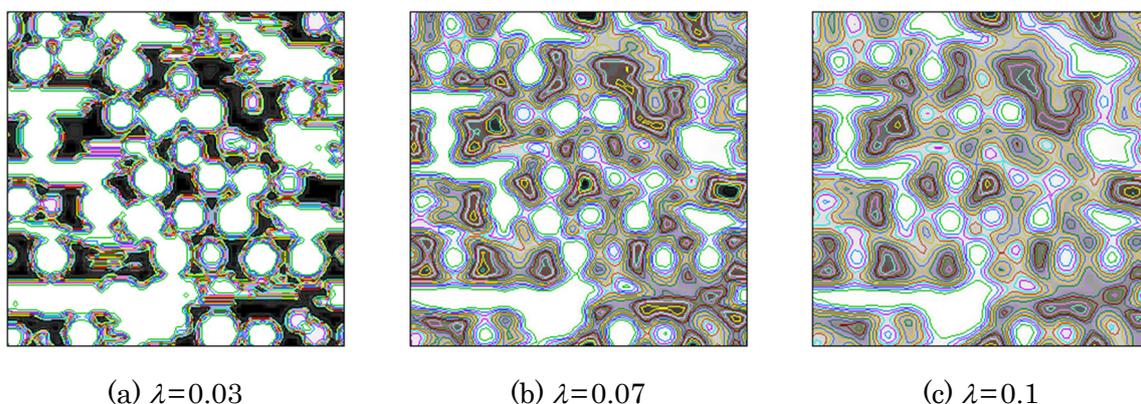


図 2-9 局所平均化操作による粒子濃度場の計算例

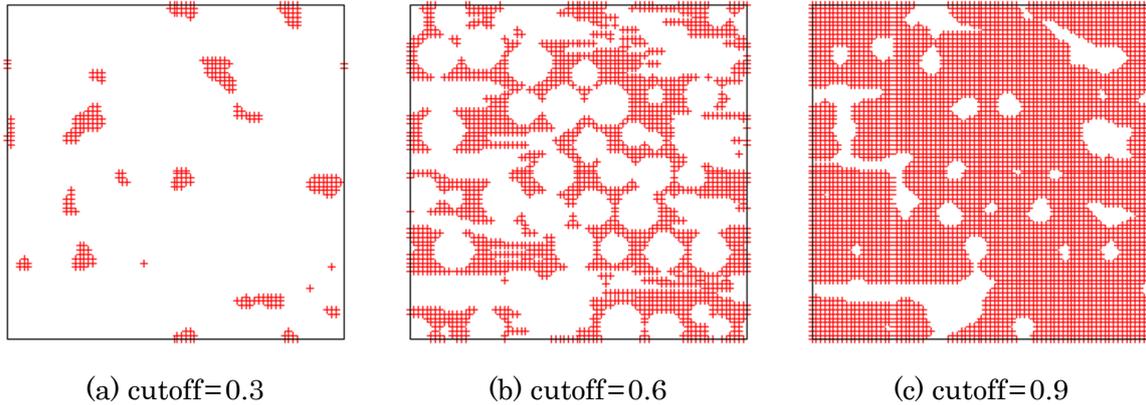


図 2-10 空隙抽出例

2) ボロノイ分割による空隙構造の可視化

本解析では、ボロノイ分割法を用いて空隙を球の集合とみなし、球同士を繋ぎ合わせることで空隙構造の抽出を行う。ボロノイ分割法は、主に平面や空間の領域分けに用いられる手法であり、2次元平面でのボロノイ分割では、隣り合う母点間を結ぶ直線に垂直二等分線を引き、各母点間の最近隣領域を分割する。一方、3次元空間のボロノイ分割は、母点間に垂直二等分面を引くことで領域分けをする。図 2-11 に、2次元平面のボロノイ分割の概念図を示す。図に示されるように、球状粒子の中心（母点）を結ぶ直線に対して垂直二等分線を引き、その交点を求める。それぞれの交点に大きさを持たせることで空隙を球（ボロノイ球）として表現する。ボロノイ球の中心をボロノイ頂点、母点を繋ぐ直線をボロノイ境界と呼ぶ。ボロノイ球の大きさが空隙のサイズ、ボロノイ境界が空隙の連結性を表す。

図 2-11 で示す例では球状粒子の中心を母点に設定しているが、非等方的な形状を有する円板では円板の中心に母点を設定するとボロノイ境界と円板が重なる可能性がある。これは円板を貫通して空隙が存在することになるため適切ではない。そこで本解析では、円板や球が存在しない空隙部分を立体的に抽出し、空隙部分の表面（空隙のエッジと呼ぶ）に複数の母点を設定しボロノイ分割を行った。図 2-12 に空隙のエッジを母点に設定した際のボロノイ分割の概念図を示す。

具体的な空隙部分の抽出方法及び母点の算出方法の詳細について述べる。上記の方法で設定した母点を用いてボロノイ分割を行うが、3次元では母点を結ぶ直線の垂直二等分面の交点を求めることは非常に困難となる。そのため、まず4点の母点から球を作成し、その球が実際の空隙と対応するかの判別を行うことにより空隙を同定する。まず母点4点の位置情報をもとに球を作成する。母点4点の座標（ x 座標, y 座標, z 座標）をそれぞれ (x_{11}, x_{12}, x_{13}) 、 (x_{21}, x_{22}, x_{23}) 、 (x_{31}, x_{32}, x_{33}) 、 (x_{41}, x_{42}, x_{43}) 、さらに、ボロノイ頂点の座標を (x_1, x_2, x_3) とすると、ボロノイ球に関する行列式は以下ようになる。

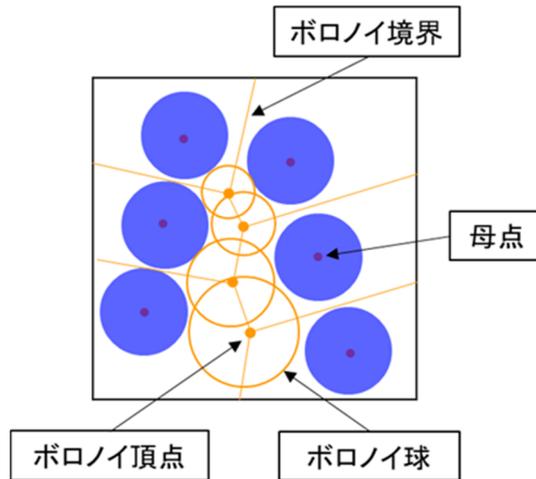


図 2-11 球状粒子間の空隙抽出例

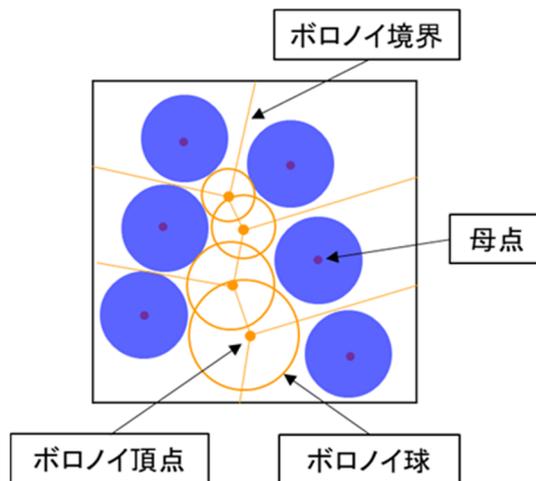


図 2-12 円板状粒子間の空隙抽出例

$$\begin{vmatrix}
 x_{11} & x_{12} & x_{13} & x_{11}^2 + x_{12}^2 + x_{13}^2 \\
 x_{21} & x_{22} & x_{23} & x_{21}^2 + x_{22}^2 + x_{23}^2 \\
 x_{31} & x_{32} & x_{33} & x_{31}^2 + x_{32}^2 + x_{33}^2 \\
 x_{41} & x_{42} & x_{43} & x_{41}^2 + x_{42}^2 + x_{43}^2 \\
 x_1 & x_2 & x_3 & x_1^2 + x_2^2 + x_3^2
 \end{vmatrix} = 0$$

式 2-29

一方、ボロノイ球に関する方程式は以下のように定義される。

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + Ax_1 + Bx_2 + Cx_3 + D = 0$$

式 2-30

行列式の展開式 (式 2-29) と 2 次方程式 (式 2-30) の係数を比較することで、未知数 A 、 B 、 C 、 D を求めることが可能となる。この場合、ボロノイ球の中心座標は以下のように表される。

$$(x_1, x_2, x_3) = \left(-\frac{A}{2}, -\frac{B}{2}, -\frac{C}{2} \right)$$

式 2-31

また、ボロノイ球の半径は以下のように表される。

$$r = \sqrt{\frac{A^2 + B^2 + C^2 - 4D^2}{4}} \quad \text{式 2-32}$$

ボロノイ球が空隙に相当するかどうかの判定は複数の条件がある。ボロノイ球の中心であるボロノイ頂点が計算領域内に存在していること、ボロノイ球の半径が正の実数であること、ボロノイ球の内部に球や円板に相当するセルや球を構成する母点以外の母点が含まれていないことである。これらの条件を全て満たした場合にボロノイ球を空隙であると判定する。

複数個のボロノイ球が連結しているための条件としては、ボロノイ球を作成した際の母点の情報を参照する。1つのボロノイ球の作成には、母点が4つもしくはそれ以上使用されるが、他のボロノイ球の母点と3つ以上の母点を共有する場合、それらのボロノイ球は連結していると判定する。連結したと判定される球を結ぶ線がボロノイ境界となり、これによって空隙構造の連結性を可視化することが可能となる。

(5) 透過特性の評価

本検討では球-円板混合系の平衡構造において、円板の密度を固定した場合に球の体積充填率によって水の透過特性がどのように変化するかを、透過率 (permeability) を算出することによって検討した。しかしながら解析結果から透過率の絶対値を直接算出することは困難であるため、ここではその変化の傾向のみについて調べた。以下にその詳細についてまとめた。

1) 粒子充填層中の透過流動

透過率は、砂層及び砂岩中の地下水流動の解析を目的として Darcy が実験的に算出した次式によって定義される (椿ほか,2016)。

$$u = k \frac{\Delta p}{\mu L} \quad \text{式 2-33}$$

ここで、 u は体積平均速度 [m/s]、 k は透過率 [m^2]、 Δp は圧力損失 [Pa]、 μ は流体粘度 [Pa · s] である。透過率は工学分野で良く用いられる透水係数と以下のような関係がある。

$$k_w = \frac{\rho_w g}{\mu_w} k \quad \text{式 2-34}$$

ここで、 k_w は透水係数 [m/s]、 ρ_w は水の密度 [kg/m^3]、 g は重力加速度 [m/s^2]、 μ_w は水の粘度 [Pa · s] である。

本解析で得られる空隙特性のみによって体積平均速度や圧力損失を求めることは不可能であるため、空隙特性に関係する3つの式を組み合わせることで透過率を算出する。1つ目は Kozeny による多孔質体中の流速に関する関係式である。これは図 2-13 のように粒子充填層中の空隙を均一な毛細管の集合とみなして流速を求めたものであり、次式で与えられる (椿ほか,2016)。

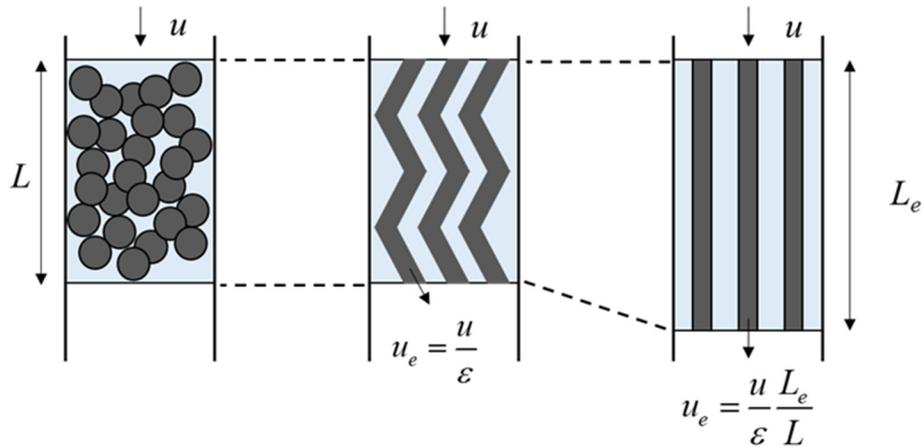


図 2-13 粒子層の流路モデル

$$u_e = \frac{u L_e}{\varepsilon L} \quad \text{式 2-35}$$

u_e は毛細管内の体積平均速度 [m/s]、 ε は空隙率 [-]、 L_e は見かけの流路長さ [m]、 L は流路長さ [m]である。ただし、Kozeny らは空隙径がある程度均一であり空隙は行き止まりがない充填層を仮定しており、本検討の球-円板混合系はこの仮定を必ずしも満たしてはいない。しかし、非等方的な形状を持つ固体充填層での透過率の評価は先行研究が非常に少ないため、今回は Kozeny らの式に基づき評価していく。

2つ目は、毛管内を流れる流体の流速を圧力損失と関係づける Hagen-Poiseuille の式であり、次式で与えられる。

$$u_e = \frac{d_e^2 \Delta p}{32 \mu L} \quad \text{式 2-36}$$

ここで d_e は毛細管の内径 [m]である。

3つ目は実効的な毛細管の大きさに関する式である。毛細管を円管と近似する場合、その内径は動水半径（空隙の体積を流体が接する表面積で除したもの）から算出できる。

$$r_h = \frac{\text{空隙の体積}}{\text{濡れ縁面積}} = \frac{\pi \left(\frac{d_e}{2}\right)^2 L}{\pi d_e L} \quad \text{式 2-37}$$

ここで r_h は動水半径 [m]である。

式 2-35 ~ 式 2-37 を組み合わせると次式のようになる。

$$u = \frac{\varepsilon}{2 \left(\frac{L_e}{L}\right)^2} r_h^2 \frac{\Delta p}{\mu L} \quad \text{式 2-38}$$

上式と透過率の定義式 (式 2-33) を比較すると、次のような関係が得られる。

$$k = \frac{\varepsilon}{2 \left(\frac{L_e}{L}\right)^2} r_h^2 \quad \text{式 2-39}$$

上の関係式を用いて、流体の透過率を対象とする系の空隙特性、すなわち空隙率 ε [-]、動水半径 r_h [m]、流路の拡張比 L_d/L [-]から算出することができる。

2) 透過率の算出

1)で、透過率を算出するためには対象とする系の空隙率、動水半径、及び流路の拡張比が必要であることを示した。そこで本検討では、円板-球混合系の平衡構造から前節で示した方法により抽出した空隙セルによってこれらの特性量の評価を行った。以下に具体的な手順を示す。ポロノイ分割と同様に球-円板の平衡構造を格子状に分割し、各セルと球、各セルと円板の交差判定を行い、粒子存在関数 $\rho(x, y, z)$ を算出した。本解析では $400 \times 400 \times 400$ の計64000000セルに空間を分割した。このように、ポロノイ分割の際よりも分割数を細かくすることで、よりマイクロな空隙の評価が可能になると同時に、計算領域内を貫通する空隙（実際の透水性に関係する空隙）を評価することができる。次に、ポロノイ分割と同様に連続的な空隙を算出するために Gauss 関数を用いて局所平均化を行い粒子濃度場を算出した。得られた粒子濃度場において、 $\text{cutoff} = 0.6$ 以下の濃度を有するセルを空隙とみなし抽出した。

本解析では、円板の配向に垂直な方向（ z 軸方向）の透過率を算出するために、 z 軸方向に対して連結している空隙（開いた空隙）と連結していない空隙（閉じた空隙）を判別し、流体が流れない閉じた空隙を排除した。その際、図 2-14 で示すように円板または球が存在するセルを 0、閉じた空隙のセルを 1、開いた空隙のセルを 2、開いた空隙のエッジのセルを 4 とラベリングした（番号については特別な意味を持たない）。

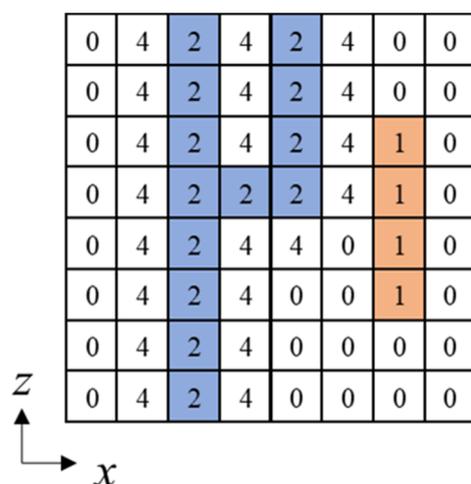


図 2-14 空隙セルの判別例

透過率の算出に必要な空隙率、動水半径はこれらのラベリングしたセル情報をもとに算出した。空隙率は系全体に対する有効空隙の割合であり、全セル数に対するセル 2 の合計割合を、導水半径は有効空隙の体積を濡れ縁面積（流体が流れた際に接する全表面積）で除したものであるため、2セルの体積を4セルに接する2セルの総表面積で割ることにより算出した。一方、流路の拡張比は、系の長さに対する流路の実効長の比で与えられるが、現時点ではセル情報から拡張比を求めることができなかった。そのため本解析では、流路の拡張比を $L_d/L=1$ に固定して透水性の評価を行った。

(6) 解析結果

1) 球-円板混合系における平衡構造

本検討では、円板状粒子と球状粒子の混合系における平衡構造を Monte Carlo 解析により求め、球状粒子の濃度変化による構造変化について考察を行った。図 2-15～図 2-17 に、円板の密度が一定の条件（無次元数密度 $N\sigma^3/V=150$ ）において、球の体積充填率 ϕ を変化させていった解析結果を示す。

図 2-15～図 2-17 において左が 3 次元平衡構造、右が任意断面における 2 次元断面構造を示しており、球の充填率が小さい条件では、円板中をそれぞれの球が孤立して存在することがわかる。球の充填率が大きくなると ($\phi=0.15$ 程度)、球が円板の配向方向に凝集構造を形成するため、球の周囲に比較的大きな空隙構造が形成されることが確認できる。これは平衡構造に近づくにつれて円板同士の間隙に存在していた球が円板間から排除され、枯渴効果により球と円板が局所的に分離したためであると考えられる。さらに球の充填率を大きくすると ($\phi=0.30$ 程度)、円板の配向方向に形成された球の凝集構造が垂直方向に連結する様子が確認される。

このように、円板-球混合系では、密度条件によって円板と球それぞれの構造が複雑に変化し、内部の空隙構造にも大きく影響を及ぼすことが確認された。

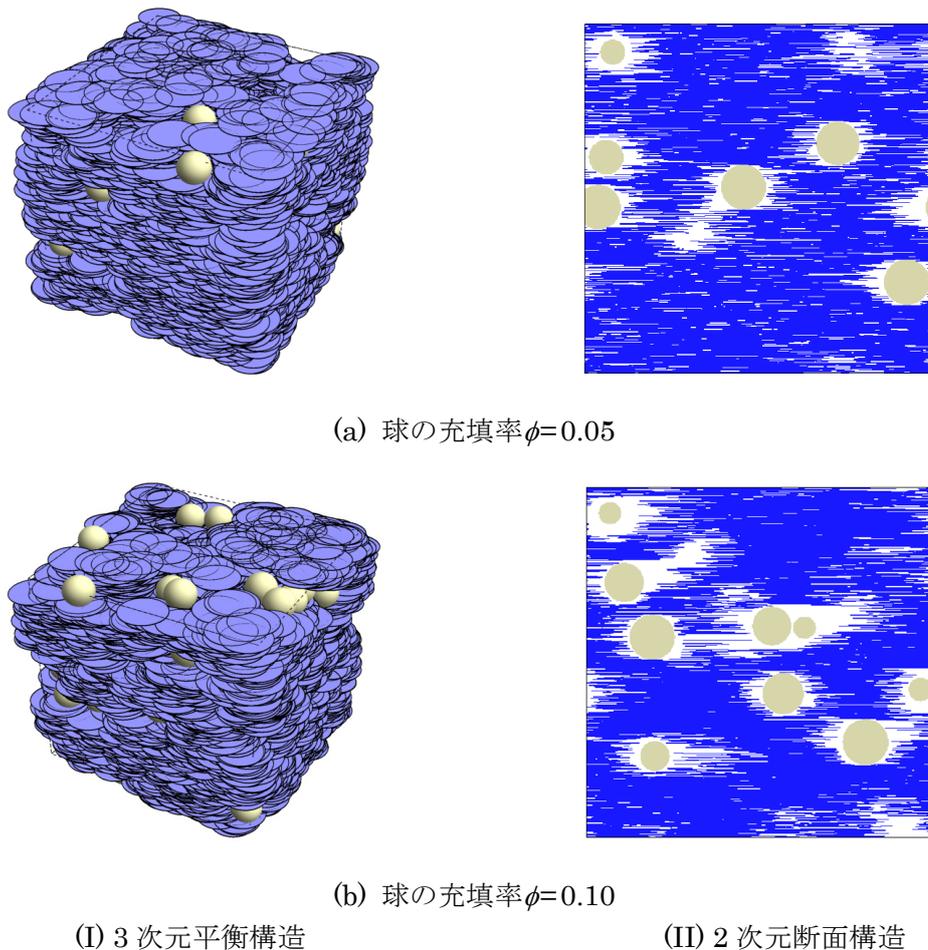
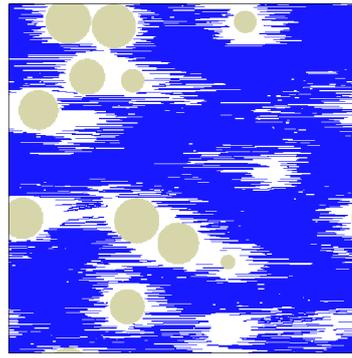
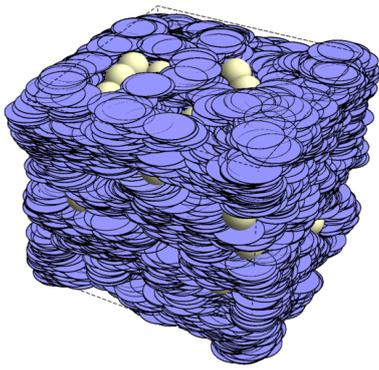
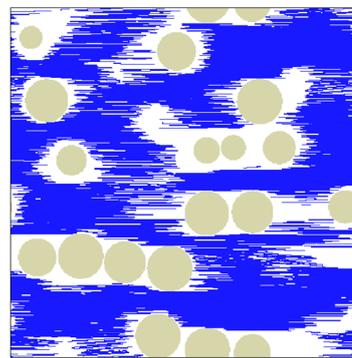
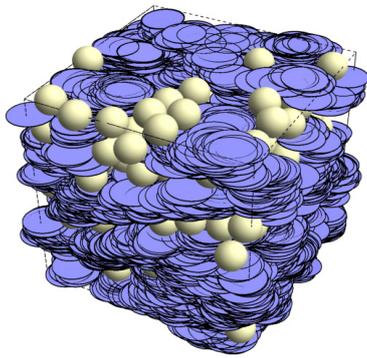


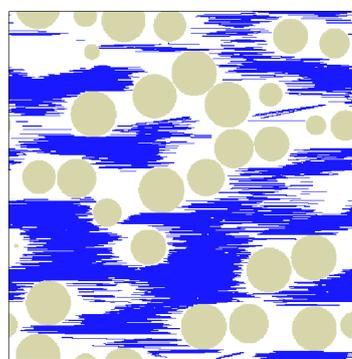
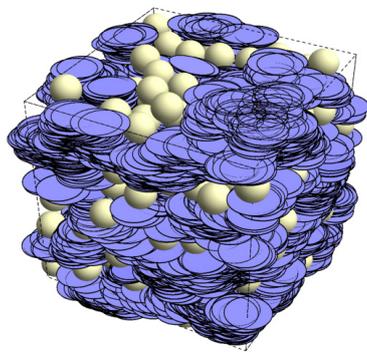
図 2-15 Monte Carlo 解析結果（その 1）
（球-円板直径比 $\sigma'/\sigma=0.67$ 、円板の無次元数密度 $N\sigma^3/V=150$ ）



(c) 球の充填率 $\phi=0.15$



(d) 球の充填率 $\phi=0.20$

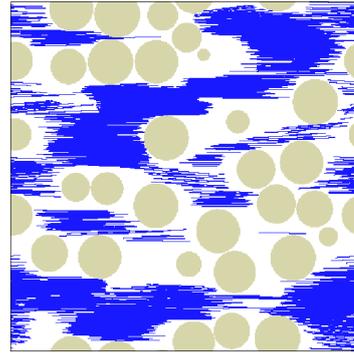
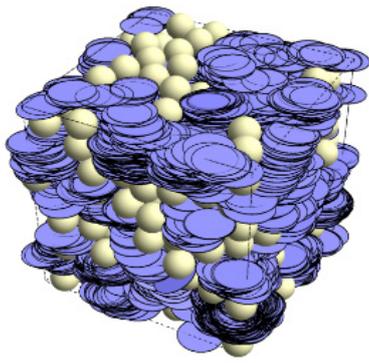


(e) 球の充填率 $\phi=0.25$

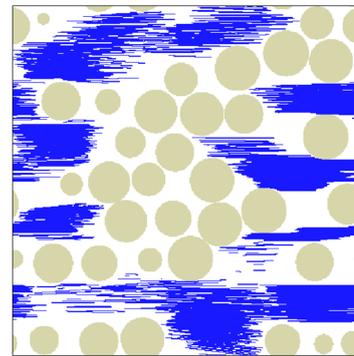
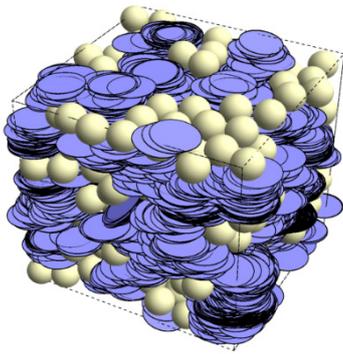
(I) 3次元平衡構造

(II) 2次元断面構造

図 2-16 Monte Carlo 解析結果 (その 2)
 (球-円板直径比 $\sigma'/\sigma=0.67$ 、円板の無次元数密度 $N\sigma^3/V=150$)



(f) 球の充填率 $\phi=0.30$



(g) 球の充填率 $\phi=0.35$

(I) 3次元平衡構造

(II) 2次元断面構造

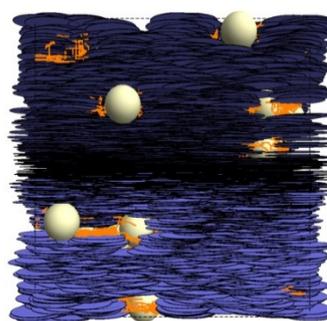
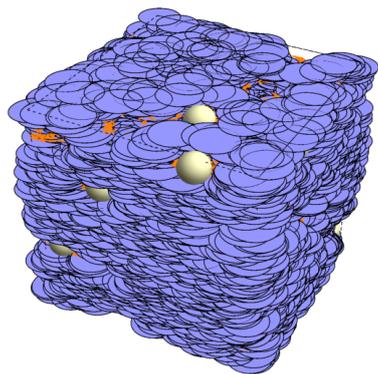
図 2-17 Monte Carlo 解析結果 (その 3)
(球-円板直径比 $\sigma'/\sigma=0.67$ 、円板の無次元数密度 $N\sigma^3/V=150$)

2) ボロノイ分割による空隙構造の可視化

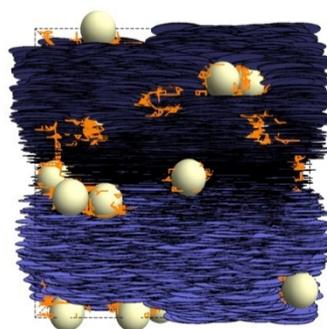
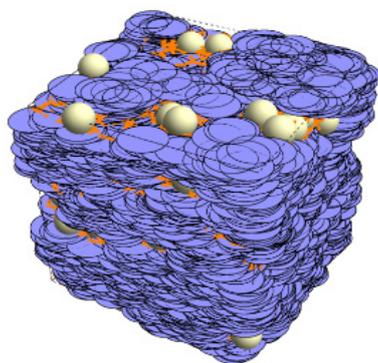
1)で示した球-円板混合系の平衡構造において、ボロノイ分割法を用いて内部の空隙構造の可視化を試みた。先に述べたように、本解析ではボロノイ分割により空隙を球の集合として抽出し、球同士の連結性をボロノイ境界により表現した。図 2-18~図 2-20 に空隙構造の可視化結果を示す。図中に示す橙色の線がボロノイ境界を表している。

図 2-18~図 2-20 より、球の充填率が小さい条件 ($\phi=0.05$) では、孤立した球の周囲のみに境界が存在することが確認できる。球の充填率を大きくすると ($\phi=0.15$ 程度)、ボロノイ境界の数が増加し、また球同士が接近することによってボロノイ境界同士が連結していることがわかる。このように、球の充填率が大きくなると、透水特性に関与するような互いに連結した大きな空隙が生じることが明らかになった。

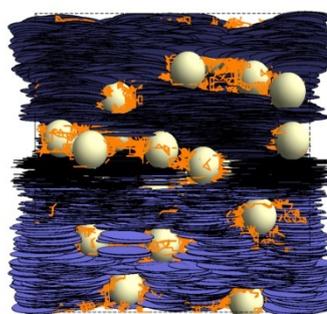
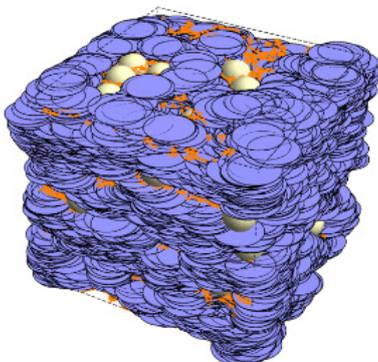
ここでは、ボロノイ分割法を用いた空隙構造の可視化により球の添加にともなう空隙構造の連結性の変化を定性的に示した。空隙特性の定量的な評価については 3)で述べる。



(a) 球の充填率 $\phi=0.05$



(b) 球の充填率 $\phi=0.10$

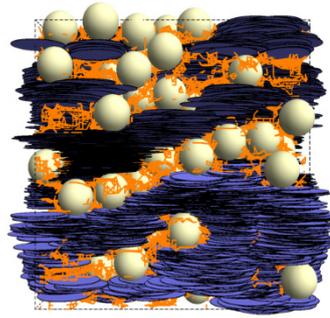
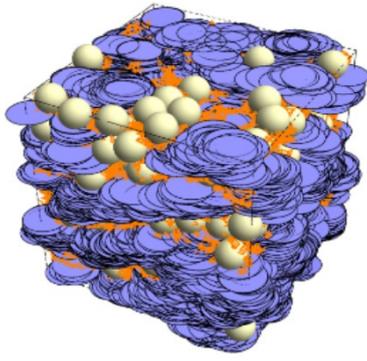


(c) 球の充填率 $\phi=0.15$

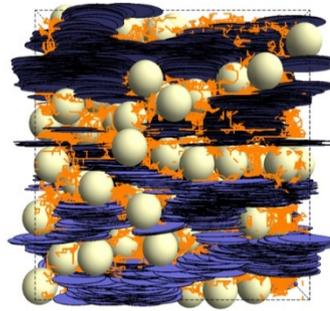
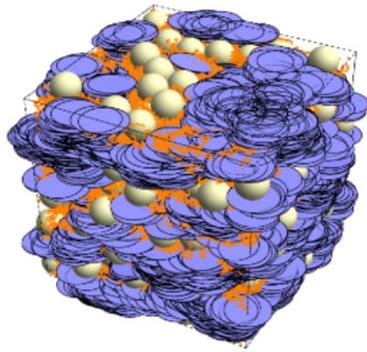
(I) ボロノイ分割(全体図)

(II) ボロノイ分割(正面図)

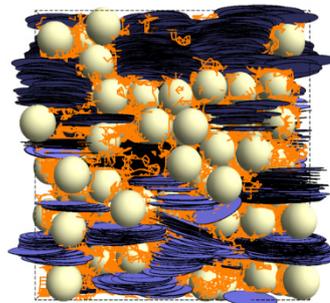
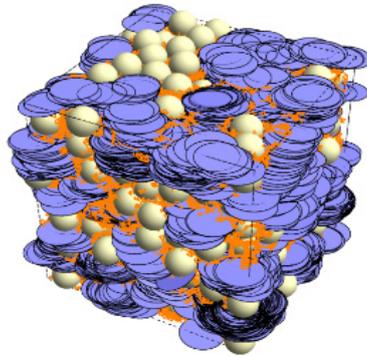
図 2-18 ボロノイ分割結果 (その 1)



(d) 球の充填率 $\phi=0.20$



(e) 球の充填率 $\phi=0.25$

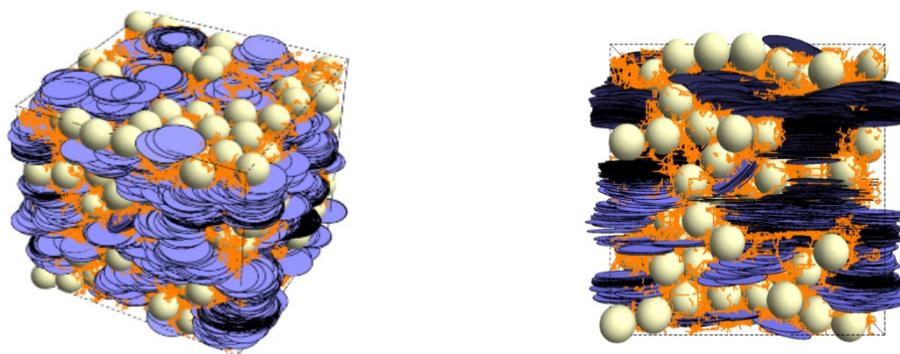


(f) 球の充填率 $\phi=0.30$

(I) ボロノイ分割(全体図)

(II) ボロノイ分割(正面図)

図 2-19 ボロノイ分割結果 (その 2)



(g) 球の充填率 $\phi=0.35$

(I) ボロノイ分割(全体図)

(II) ボロノイ分割(正面図)

図 2-20 ボロノイ分割結果 (その 3)

3) 空隙特性及び透水性の定量評価

2)では球の充填率の変化による空隙構造の変化をボロノイ分割により可視化した。本節ではさらに詳細なセル情報を用いて透過率の変化傾向について示す。

式 2-39 で示したように、透過率を算出するためには、対象とする系の空隙率、動水半径、及び流路の拡張比が必要である。ここでは最初に、それぞれの空隙特性量が球の充填率によりどのように変化するのかについて記す。

図 2-21 に、球の充填率変化にともなう空隙率の変化を示す。図に示されるように、球の充填率が小さい場合には空隙率は球の充填率と比例関係にある。これは、ボロノイ分割による空隙の可視化結果にも示されているように、球の充填率が小さい場合は空隙が球の近傍に局在しており、球の数に応じて空隙の割合が増加するためであると考えられる。一方、球の充填率が $\phi=0.20$ を超えると増加の程度は小さくなるのがわかる。これは充填率が大きくなるとそれぞれの空隙が重なり合うことが要因であると考えられる。本解析では、空隙率をセルの情報から算出しているため、セル分割の解像度により空隙率の値そのものは変動すると考えられるが、変化の傾向は実際の現象を現していると考えられる。

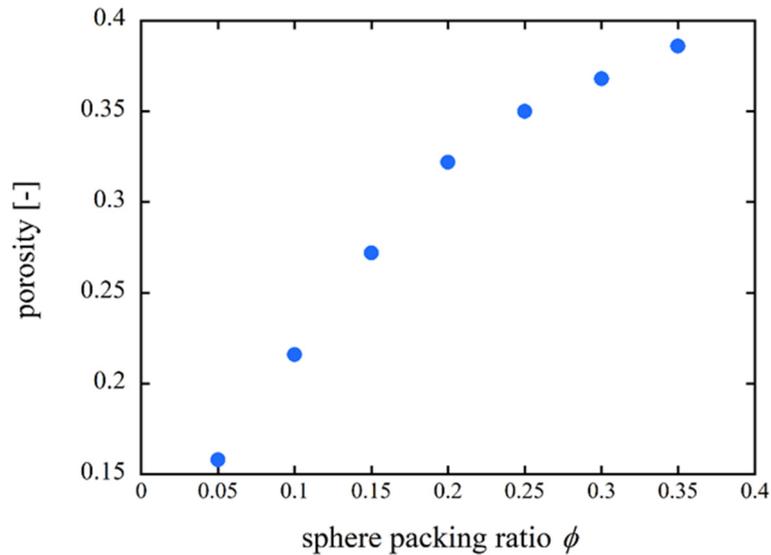


図 2-21 球の充填率と空隙率の関係

次に、球の充填率変化にともなう動水半径の変化について調べた。図 2-22 に、各充填率条件における動水半径の計算結果を示す。図に示されるように、動水半径は球の充填率におおよそ比例する。これは球の充填率が大きくなると、個々の空隙のサイズが平均的に大きくなることを示している。ただし、値そのものについては空隙率と同様にセル分割の解像度により変動する可能性がある。

今回算出した空隙を実際に水が流れると想定し、その空隙の大きさが妥当かどうかを検討するために、円板を montmorillonite 粒子と仮定して式 2-37 を用いて各条件での平均的な空隙径を算出した。その結果、球の充填率が一番小さい $\phi=0.05$ の条件では平均的な空隙径は約 13nm になった。これは水分子の大きさの約 30 倍に相当する。一方、粘土の電気二重層の大きさは最大で約 20~30nm と言われている。このような小さな流路を水が完全に連続体として運動するかどうかは現時点では明らかではない。しかしながら、球の充填率が $\phi=0.10$ を超えるとどの条件でも平均的な流路幅は 20nm より大きくなるため、本解析で評価しているような流体力学的な透水特性が妥当である可能性は大きくなる。

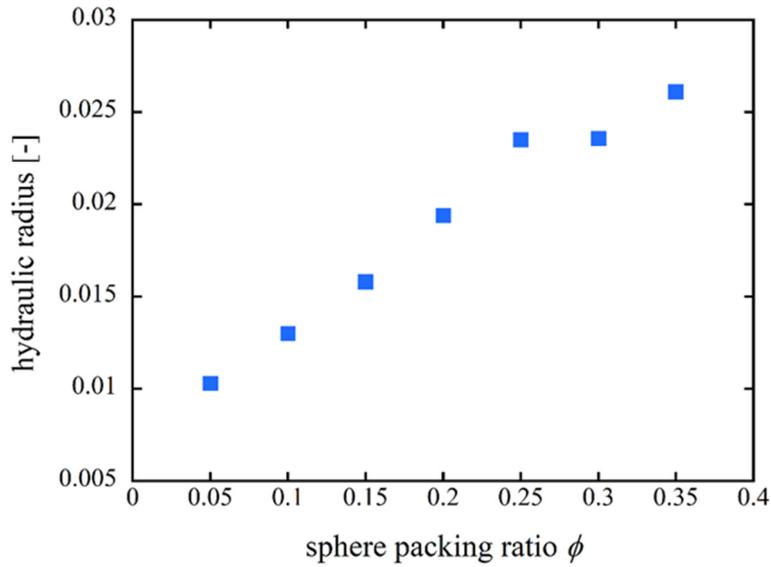


図 2-22 球の充填率と動水半径の関係

図 2-21 及び図 2-22 で示した空隙率及び動水半径を用いて透過率の算出を試みた。ただし前述したように、現時点では解析結果から流路の拡張比を評価することはできなかつたため、全ての条件で $L_d/L=1$ と固定した。図 2-23 にこれらの値を式 2-39 に代入して求めた透過率の結果を示す。ただし本解析で求めた空隙特性の絶対値に関しては信頼性が低いため、各条件間の相対値のみを示しており、図中の縦軸に数値は記載せず、変化の傾向のみを示している。

図 2-23 の結果より、球の充填率に応じて透過率は線形的に増加するが、球の充填率がおおよそ $\phi=0.10$ から $\phi=0.15$ の間で傾きが変わることがわかる。これは球の添加によって内部の構造が複雑に変化し、球の凝集構造が形成されることによって空隙の連結性が卓越するためであると推察される。

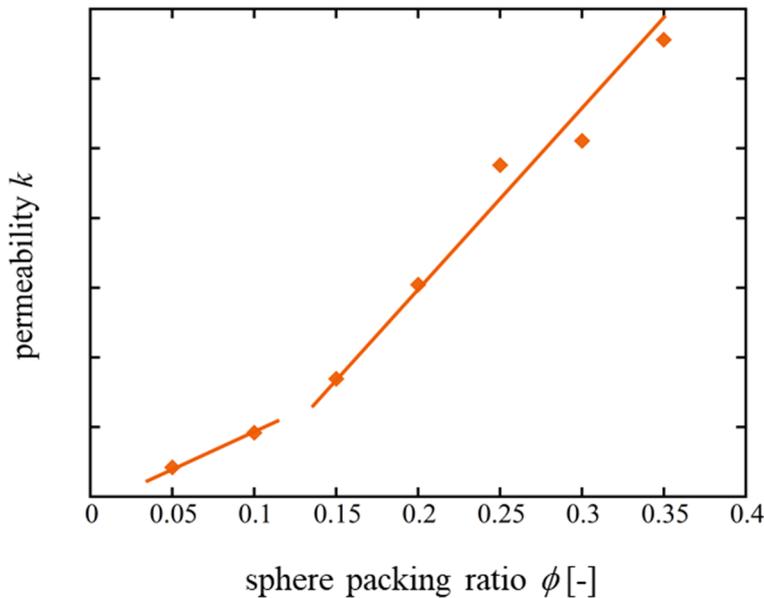


図 2-23 各充填率における透過率の試算結果（縦軸は任意）

なお、本解析で得られた動水半径から逆算した平均的な空隙径は、粘土の電氣的性質を考慮すると十分に流体力学的に水の移動が可能かどうかは判断できず、より正確な透過率の算出のためには今回算出できなかった流路の拡張比と併せて再検討が必要と考えられる。

2.1.5 球-円板混合系における透水試験

(1) 透水試験の条件

図 2-4 及び図 2-5 に示した実在試料を用いた球-円板混合系を作成し透水試験を実施した。透水試験では、クニピア F モンモリロナイト (KF、一部 KV1 ベントナイト使用) -ゼオライト (HSZ) で再現し、様々な密度と混合比でカラムに充填して透水係数を求めた。カラムの体積は直径 20mm、高さ 10mm の 3.14cm³ である。KF 系では、粘土の密度は 1 以下になるように、HSZ の組成は 52wt%以下に設定した。試験の条件を表 2-2～表 2-3 に示す。

表 2-2 モンモリロナイト-ゼオライト混合系の透水係数測定条件 (その 1)

Column	Solution (IS=0.5)	KF (2.70)	HSZ (2.12)	Volume (ml)
KF+HSZ_1	R-I_Cl	2.0878	2.3333	3.142
KF+HSZ_2	R-I_Cl	3.1265	0.0000	3.142
KF+HSZ_3	R-I_Cl	3.1258	0.6665	3.142
KF+HSZ_4	R-I_Cl	3.1260	1.3333	3.142
KF+HSZ_5	R-I_Cl	2.4808	1.8518	3.142
KF+HSZ_6	R-I_Cl	3.3118	0.9213	3.142
KF+HSZ_7	R-I_Cl	3.1258	0.5807	3.142
KF+HSZ_8	R-I_Cl	3.1260	0.2487	3.142
KV1+HSZ	R-I_Cl	1.3467	0.1679	3.142
KV1	R-I_Cl	1.5080	0.0000	3.142

表 2-3 モンモリロナイト-ゼオライト混合系の透水係数測定条件（その2）

Column	Density	Clay density	Zeolite density	Effective clay density	Zeolite wt.%	Zeolite vol.%
KF+HSZ_1	1.407	0.665	0.743	1.023	52.78	58.73
KF+HSZ_2	0.995	0.995	0.000	0.995	0.00	0.00
KF+HSZ_3	1.207	0.995	0.212	1.106	17.57	21.36
KF+HSZ_4	1.419	0.995	0.424	1.244	29.90	35.20
KF+HSZ_5	1.379	0.790	0.589	1.094	42.74	48.74
KF+HSZ_6	1.347	1.054	0.293	1.223	21.76	26.16
KF+HSZ_7	1.180	0.995	0.185	1.090	15.67	19.13
KF+HSZ_8	1.074	0.995	0.079	1.034	7.37	9.20
KV1+HSZ	0.482	0.214	0.053	0.239	5.87	13.70
KV1	0.480	0.240	0.000	0.263	0.00	0.00

(2) 透水試験の結果

透水試験は水頭差を、リリーフ弁にて圧力一定に調整した加圧溶液の通水で与え、透水した流量はチューブ配管したガラスキャピラリーと、その先に接続された遠沈管で捕集した溶液体積の測定で行った。得られた流速と断面積(3.14 cm²)から線形速度(m/s)が得られ、与えられた水頭差と流路長の比から得られる透水係数(m/s)を求めた。

これらの結果を、粘土密度、実効粘土密度、ゼオライト濃度(wt.%)に対して整理したものを図 2-24 に示す。粘土密度が小さくゼオライト濃度の高い系では、実効粘土密度に対して透水係数は低下する一般的な逆相関が見て取れるが、ゼオライト濃度が低い系では実効粘土密度の増加にも関わらず透水係数が増大する領域がある。ゼオライト濃度に対する透水係数プロットでは濃度 20 wt.%近傍で不連続が存在することが確認された。この原因については、モンテカルロシミュレーション結果(図 2-23)より考察(前述)したように、このゼオライト添加濃度以上で球の凝集構造が形成され、それによって空隙の連結性が卓越することが透水係数の増大に寄与していると考えられる。つまり、ゼオライト変質の進行は、ベントナイトの透水性を高めるが、変質量が 20 wt.%以上に達するとさらに透水性は大きくなってしまふ不連続な効果を伴うことが予想される。

表 2-4 モンモリロナイト-ゼオライト混合系の透水係数

Column	Solution (IS =0.5)	Density	Clay density	Zeolite density	Effective clay density	P (MPa)	Flow rate (ul/s)	Hydraulic cond. (m/s)
KF+HSZ_1	R-I_Cl	1.407	0.665	0.743	1.023	1.00	0.366941	1.192E-10
KF+HSZ_2	R-I_Cl	0.995	0.995	0.000	0.995	5.00	0.003743	2.432E-13
KF+HSZ_3	R-I_Cl	1.207	0.995	0.212	1.106	1.00	0.085019	2.761E-11
KF+HSZ_4	R-I_Cl	1.419	0.995	0.424	1.244	1.00	0.178946	5.812E-11
KF+HSZ_5	R-I_Cl	1.379	0.790	0.589	1.094	1.00	0.290303	9.429E-11
KF+HSZ_6	R-I_Cl	1.347	1.054	0.293	1.223	5.00	0.050788	3.299E-12
KF+HSZ_7	R-I_Cl	1.180	0.995	0.185	1.090	3.50	0.246565	2.288E-11
KF+HSZ_8	R-I_Cl	1.074	0.995	0.079	1.034	2.50	0.081631	1.061E-11
KV1+HSZ	R-I_Cl	0.482	0.214	0.053	0.239	2.60	0.012740	1.592E-12
KV1	R-I_Cl	0.480	0.240	0.000	0.263	2.70	0.008433	1.014E-12

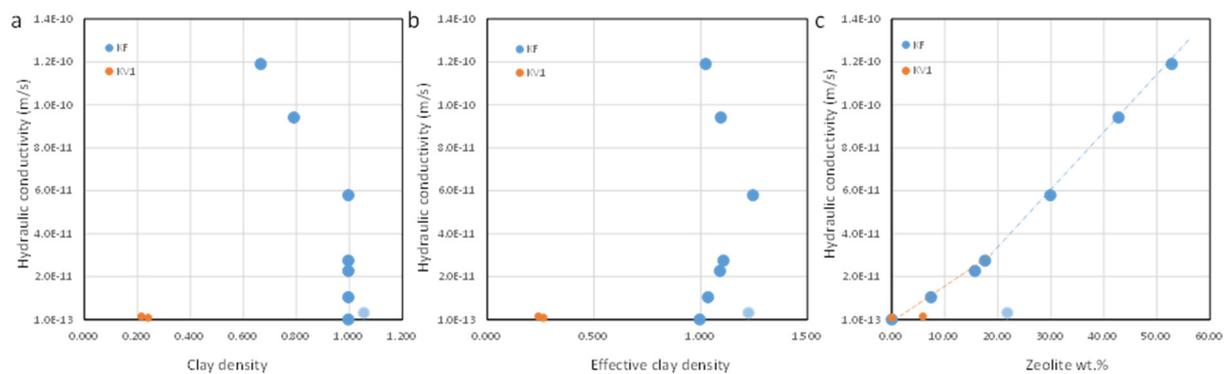


図 2-24 KF-HSZ 系の透水係数の粘土密度(a)、実効粘土密度(b)、ゼオライト濃度(c)依存性

2.2 状態設定に係る緩衝材の力学挙動試験

2.2.1 はじめに

本節においては、状態設定に係る緩衝材の力学挙動試験に際して実施した解析について、本編に記載していない解析条件の詳細と解析結果を記す。

2.2.2 供試体諸元

平成 31 年度は、平成 30 年度までの検討により得られた三軸 $\bar{C}\bar{U}$ 試験方法を用いて、モンモリロナイト含有率を変化させた試料についてせん断試験によりデータを取得する。ここでは本検討に用いた供試体についてまとめる。

供試体は、静的締固めで作製するが、ベントナイトのような粉体材料を締固めで作製すると供試体内部に密度分布が発生することが避けられない。飽和過程において密度分布はある程度解消されるが、締固め時の密度分布をある程度小さくしなければ均一な供試体になることは期待できない。

そこで、供試体作製方法として、1 回当たりの締固め層厚（仕上がり高さ）を、供試体高さの 1/10（4mm）以下とする。これは乾燥密度 1.6Mg/m^3 の供試体で 1 層当たりの撒き出すベントナイトの乾燥質量が 2g 程度である。

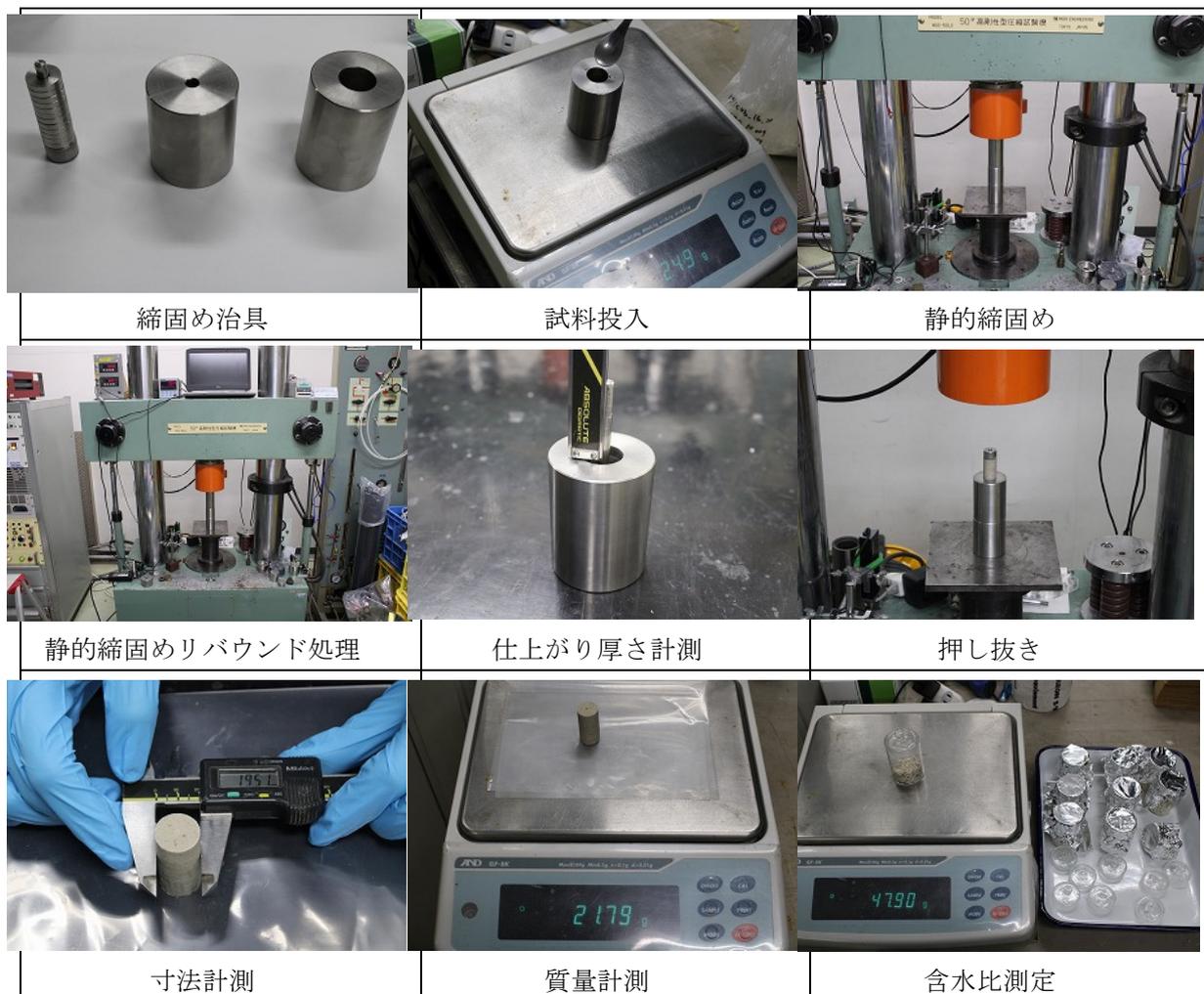


図 2-25 試供体作製手順

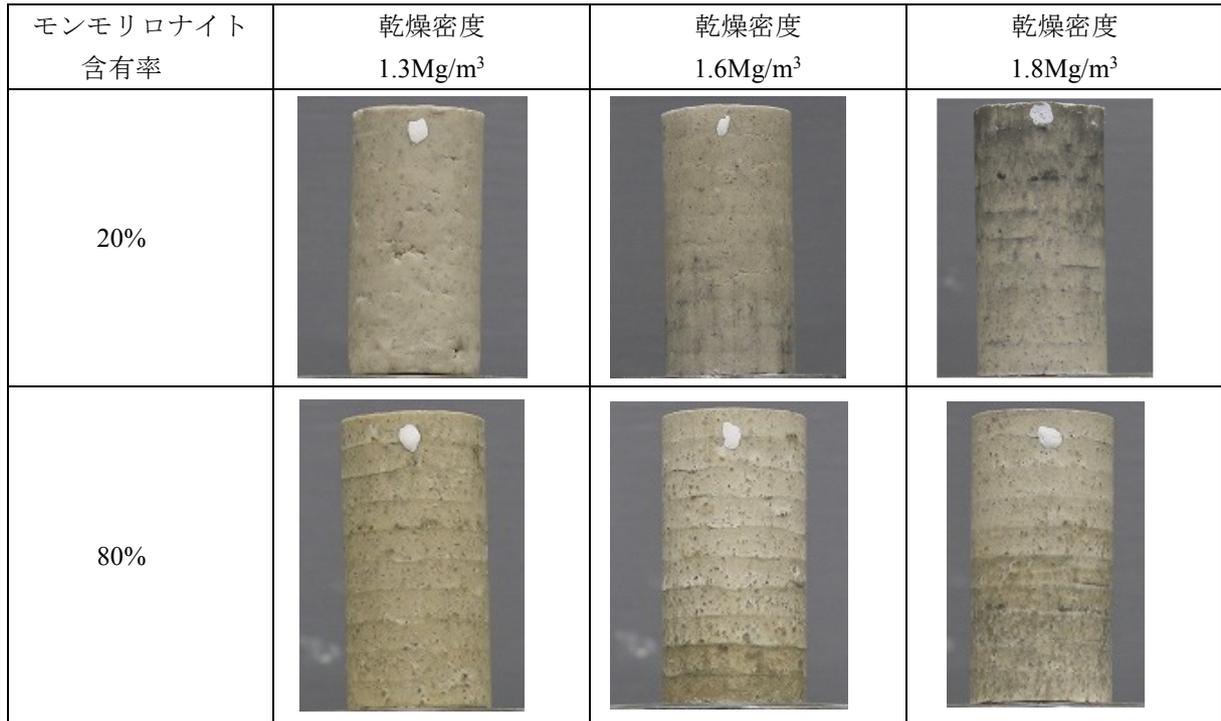


図 2-26 供試体の側面写真一覧

表 2-5 供試体諸元

Case	TCUb 13 20	TCUb 16 20	TCUb 18 20	TCUb 13 80	TCUb 16 80	TCUb 18 80
材料	人工ベントナイト	人工ベントナイト	人工ベントナイト	人工ベントナイト	人工ベントナイト	人工ベントナイト
	脱イオン水	脱イオン水	脱イオン水	脱イオン水	脱イオン水	脱イオン水
土粒子密度 (Mg/m ³)	2.730	2.730	2.730	2.730	2.730	2.730
設計乾燥密度 (Mg/m ³)	1.300	1.600	1.800	1.300	1.600	1.800
作成容器	内径 (cm)	1.950	1.950	1.950	1.950	1.950
	内高 (cm)	4.000	4.000	4.000	4.000	4.000
	体積 (cm ³)	11.946	11.946	11.946	11.946	11.946
設計値	乾燥密度 (Mg/m ³)	1.368	1.683	1.893	1.368	1.683
	飽和度 (%)	85.0	85.0	85.0	85.0	85.0
	間隙比 (---)	0.997	0.622	0.442	0.997	0.622
	含水比 (%)	31.03	19.37	13.76	31.03	19.37
作成直後供試体	直径 (cm)	1.950	1.950	1.950	1.955	1.954
	高さ (cm)	3.971	4.007	4.013	3.998	3.997
	平均w (%)	32.91	20.60	15.20	33.75	15.54
	乾燥密度 (Mg/m ³)	1.381	1.690	1.896	1.379	1.872
	間隙比 (---)	0.978	0.615	0.440	0.980	0.459
	飽和度 (%)	91.9	91.4	94.4	94.0	92.5
膨潤後供試体	直径 (cm)	2.009	2.012	2.009		2.010
	高さ (cm)	3.967	3.989	3.904		3.900
	乾燥密度 (Mg/m ³)	1.303	1.596	1.835		1.599
	間隙比 (---)	1.095	0.711	0.488		0.708

2.2.3 モンモリロナイト含有率をパラメータとした三軸CU 試験

平成 25 年度～29 年度の「人工バリア材料長期挙動評価・人工バリア評価の初期条件の設定」では、ベントナイトの圧密挙動と膨潤挙動について試験による挙動の把握とモデル化を検討したせん断挙動については、等体積一面せん断試験から得たデータからモデル化の方向性を確認した後、より有効なデータ取得が可能な三軸CU試験でのせん断挙動把握を実施すべく、適切な供試体寸法や試験手順等に関する基礎検討を実施した。

平成 30 年度は、今後、三軸CU試験でデータを取得するに当たり、試験方法の確立のため、試料の飽和の手順、及び、三軸CU 試験における適切なせん断速度を考慮して試験を実施し、結果をまとめた。

平成 31 年度は、昨年度の結果を踏まえて設定した以下の試験手順・条件でモンモリロナイト含有率をパラメータとした三軸CU試験を実施した。

表 2-6 モンモリロナイト含有率をパラメータとした三軸(CU)試験ケース一覧

Case	鉱物	間隙液組成	供試体直径 φ (mm)	供試体高さ	ケイ砂の含有率 (mass%)	初期乾燥密度 (Mg/m ³)	拘束圧	せん断速度 %/min	最大軸ひずみ %	N 数	備考
CUB13-20	人工ケイゲル V1	蒸留水	20	φ×2	30号+5号	1.3	膨潤圧相当	0.005	20	各1回	せん断過程まで実施 三軸膨潤圧試験まで実施
CUB16-20						1.6					
CUB18-20						1.8					
CUB13-80						1.3					
CUB16-80						1.6					
CUB18-80						1.8					

(1) 三軸膨潤圧試験

図 2-27 に三軸飽和セルによる供試体の飽和過程における供試体への浸潤量の経時変化を示す。浸潤量は、給水量から排水量と給水経路のデッドスペース体積（ポーラスメタルの空隙や経路の容積）を差し引いたものである。図から、給水初期に急激に浸潤量が増加しているが、これは、三軸飽和セルと供試体の間には、初期に若干の隙間があり、給水した水によって供試体が吸水膨潤した分だけ急激に浸潤量が増加しているものと考えられる。さらに、その後、一定勾配で浸潤量が増加している。

図 2-28 には、三軸飽和セルによる供試体の飽和過程における供試体の飽和度の経時変化を示す。供試体の飽和度は概ね計算上 100%を超えていることが分かる。モンモリロナイト含有率 20%と低いケースで乾燥密度の 1.3Mg/m³ と 1.6Mg/m³ のケースにおいて、飽和度の上昇が緩慢であったが、これは、膨潤性能が他のケースに比べて低く、破過し易いため、通水圧を低くしているためである。なお、モンモリロナイト含有率 20%と低いケースで乾燥密度の 1.3Mg/m³ のケースで、経過時間 50 日付近で急激に浸潤量が多くなっているが、破過の発生の可能性が高いと考えられたので、一時的に通水を止めて十分に膨潤させてから、通水を再開した。この結果、浸潤量の経時変化は破過前の勾配と同程度になったため、破過の影響は解消されたものと考えられる。

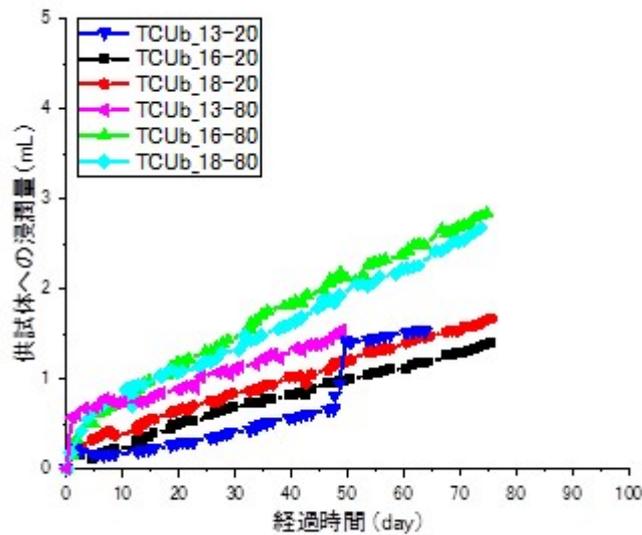


図 2-27 三軸飽和セルによる供試体の飽和過程（浸潤量の経時変化）

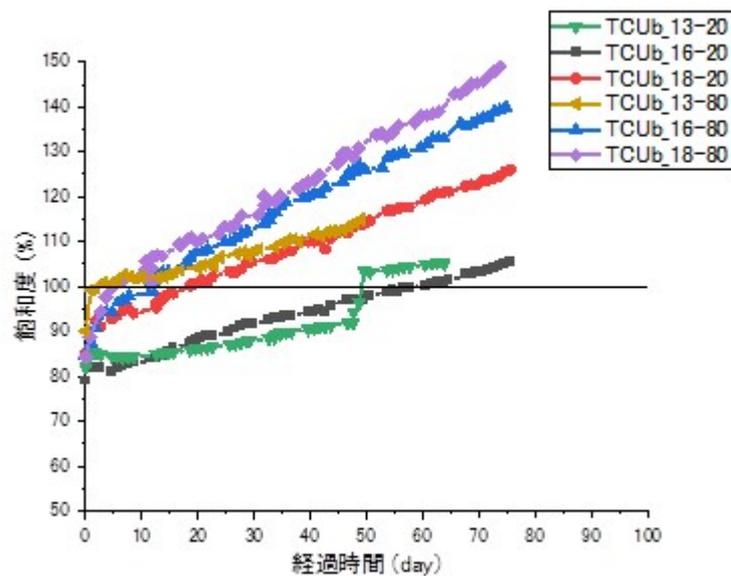


図 2-28 三軸飽和セルによる供試体の飽和過程（飽和度の経時変化）

図 2-29 には、モンモリロナイト含有率 20% で乾燥密度 1.3Mg/m^3 の膨潤圧の経時変化を示す。本ケースは、モンモリロナイト含有率と乾燥密度が低く、飽和が容易と考えられることから、2018 年度版の三軸飽和セルを用いて飽和過程に供しているため、下端面のロードセルの値がないことに注意が必要である。図から、上端面の膨潤圧(63kPa)と側面の膨潤圧(58kPa)が、概ね定常に至っており、かつ両膨潤圧が 60kPa 程度で、ほぼ同等の値となっていることが分かる。この場合の先行時の静止土圧係数 K_0 は、概ね 1.0 程度となり、供試体が等方材料と見なせる。

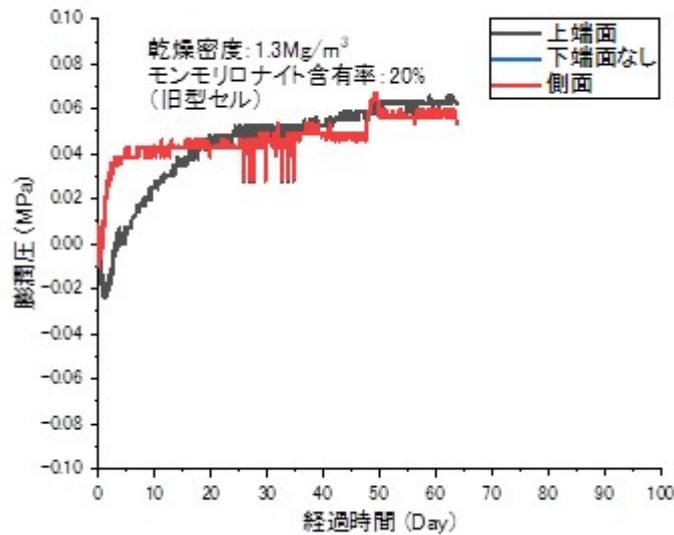


図 2-29 膨潤圧の経時変化（乾燥密度 1.3Mg/m³、モンモリロナイト含有率 20%）

図 2-30 には、モンモリロナイト含有率 20%で乾燥密度 1.6Mg/m³の膨潤圧の経時変化を示す。本ケースは、2019 年度版の三軸飽和セルを用いて飽和過程に供しているため、下端面のロードセルの値も併せて示している。図から、上端面の膨潤圧と側面の膨潤圧が、概ね定常に至っており、かつ両膨潤圧が 35.7kPa 程度で、ほぼ同等の値となっていることが分かる。この場合の静止土圧係数 K_0 は、概ね 1.0 程度となり、供試体が等方材料と見なせる。一方、下端面に配置したロードセルの値は増加傾向を示している。ロードセルによって計測される値は 158.7kPa 程度であるため、ロードセルの値を用いて算出した静止土圧係数 K_0 は、概ね 0.23 程度となり、異方材料となる。

上端面の光ファイバセンサの圧力計と下端面のロードセルで、どちらの値が採用すべき値かは、他のケースとの整合性などを勘案して判断する必要がある。なお、上端面の光ファイバセンサの圧力計よりも下端面のロードセルの値の方が大きいのは、供試体の側面の摩擦の影響が考えられる。両者の差が摩擦の影響だとすると、図 2-31 に示した摩擦力と摩擦角の関係から、材料の摩擦角が 40.7°と算出できる。モンモリロナイトが 20%しか含有していない材料の摩擦角としては妥当な値となった。なお、ここでは全応力で議論しているため、摩擦角も全応力でのものとなることに注意が必要である。

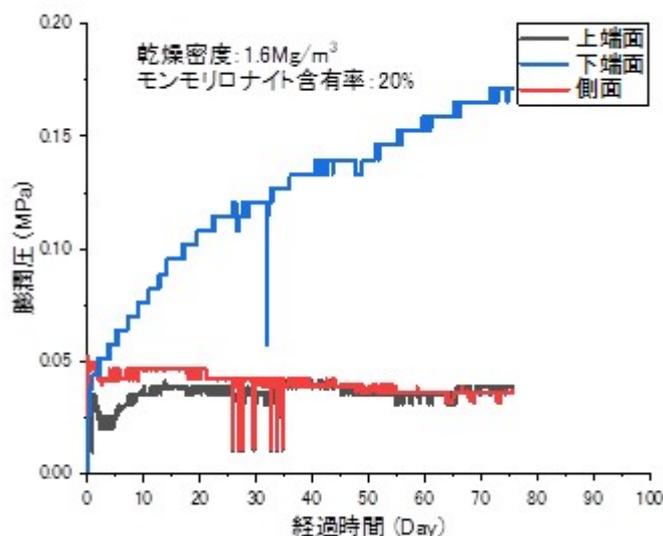


図 2-30 膨潤圧の経時変化（乾燥密度 1.6Mg/m³、モンモリロナイト含有率 20%）

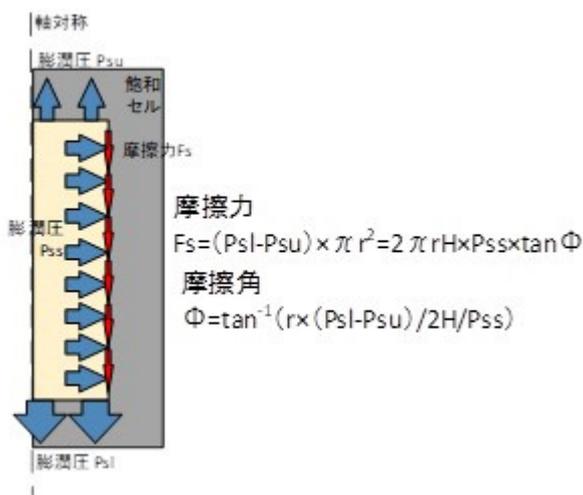


図 2-31 三軸膨潤圧試験の摩擦と摩擦角の算出方法

図 2-32 には、モンモリロナイト含有率 20%で乾燥密度 1.8Mg/m³の膨潤圧の経時変化を示す。本ケースは、2019 年度版の三軸飽和セルを用いて飽和過程に供しているため、下端面のロードセルの値も併せて示している。図から、上端面の膨潤圧と側面の膨潤圧が、概ね定常に至っており、かつ上面の膨潤圧が 155.1kPa 程度、側面の膨潤圧が 41.7kPa 程度であり、この場合の静止土圧係数 K_0 は、概ね 0.27 程度となり、供試体が異方材料と見なせる。一方、下端面に配置したロードセルの値は増加傾向を示している。ロードセルによって計測される値は 228.2kPa 程度であるため、ロードセルの値を用いて算出した静止土圧係数 K_0 は、概ね 0.18 程度となり、異方材料となる。上端面の光ファイバセンサの圧力計と下端面のロードセルで、どちらの値が採用すべき値かは、他のケースとの整合性などを勘案して判断する必要がある。なお、上端面の光ファイバセンサの圧力計よりも下端面のロードセルの値の方が大きいのは、供試体の側面の摩擦の影響が考

えられる。両者の差が摩擦の影響だとすると、図 2-31 に示した摩擦力と摩擦角の関係から、材料の摩擦角が 23.7° と算出できる。

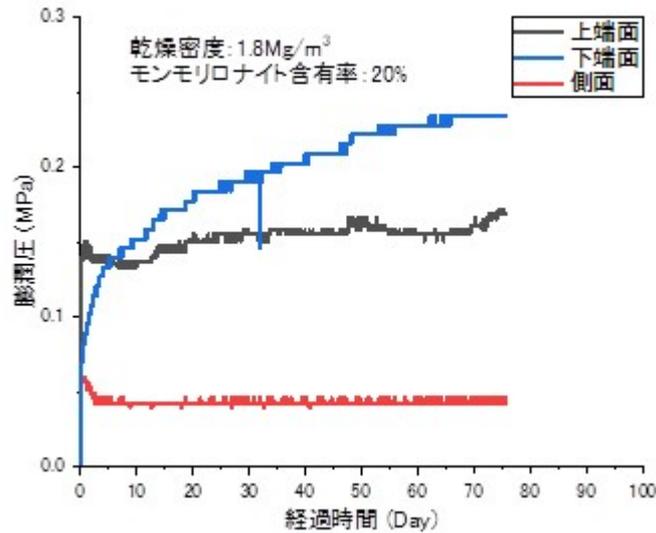


図 2-32 膨潤圧の経時変化（乾燥密度 1.8Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 20%）

図 2-33 には、モンモリロナイト含有率 80% で乾燥密度 1.3Mg/m^3 の膨潤圧の経時変化を示す。本ケースは、2019 年度版の三軸飽和セルを用いて飽和過程に供しているため、下端面のロードセルの値も併せて示している。図から、上端面の膨潤圧と側面の膨潤圧が、概ね定常に至っており、かつ上面の膨潤圧が 385.5kPa 程度、側面の膨潤圧が 267.3kPa 程度であり、この場合の静止土圧係数 K_0 は、概ね 0.69 程度となり、供試体が異方材料と見なせる。さらに、下端面に配置したロードセルの値は定常状態から減少傾向を示している。ロードセルによって計測される値は 412.4kPa 程度であるため、ロードセルの値を用いて算出した静止土圧係数 K_0 は、概ね 0.64 程度となり、異方材料となる。上端面の光ファイバセンサの圧力計と下端面のロードセルで、どちらの値が採用すべき値かは、他のケースとの整合性などを勘案して判断する必要がある。なお、上端面の光ファイバセンサの圧力計よりも下端面のロードセルの値の方が大きいのは、供試体の側面の摩擦の影響が考えられる。両者の差が摩擦の影響だとすると、図 2-31 に示した摩擦力と摩擦角の関係から、材料の摩擦角が 1.4° と算出できる。前述のモンモリロナイトが 20% しか含有していない材料に対して、モンモリロナイトを 80% 含有している材料の本ケースでは、摩擦角が小さくなることは妥当であると考えられる。

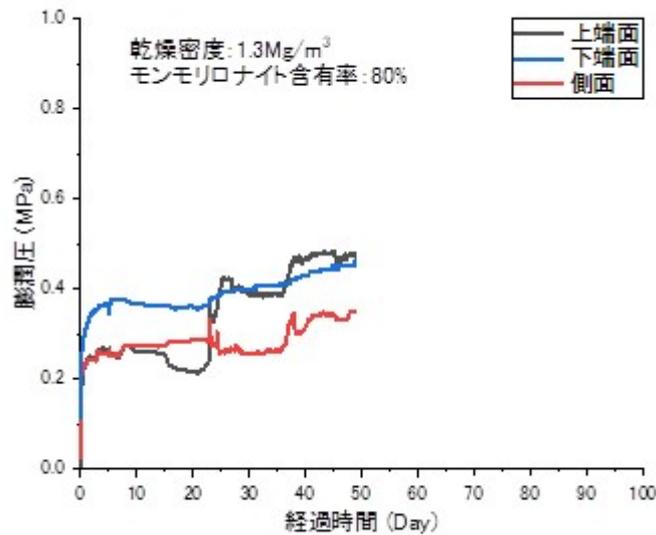


図 2-33 膨潤圧の経時変化 (乾燥密度 1.3Mg/m³、モンモリロナイト含有率 80%)

図 2-34 には、モンモリロナイト含有率 80%で乾燥密度 1.6Mg/m³の膨潤圧の経時変化を示す。本ケースは、2019 年度版の三軸飽和セルを用いて飽和過程に供しているため、下端面のロードセルの値も併せて示している。図から、上端面の膨潤圧が激しく振動しており、膨潤圧として採用するには不適切と考えられる。一方、側面の膨潤圧は、概ね定常に至っており、その値は 1.507MPa 程度であった。さらに、下端面に配置したロードセルの値も定常状態を示しており、その値は、1.840MPa 程度であるため、ロードセルの値を用いて算出した静止土圧係数 K_0 は、概ね 0.82 程度となり、等方材料となる。上端面の光ファイバセンサの圧力計が、正確に測れていないため、摩擦や摩擦角の議論は出来なかった。

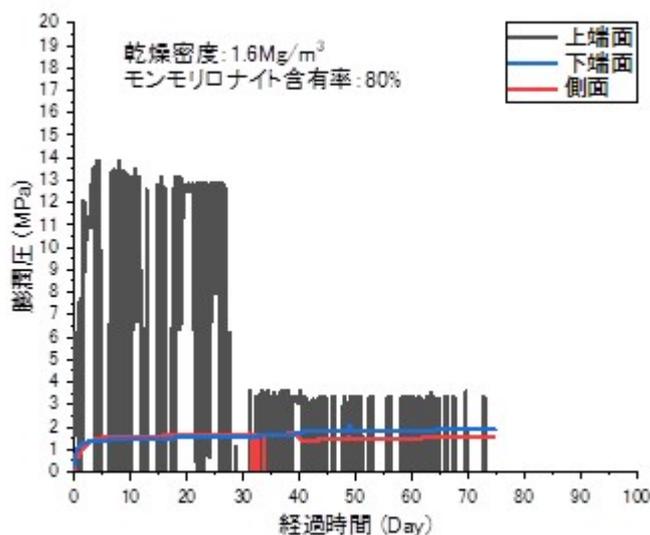


図 2-34 膨潤圧の経時変化 (乾燥密度 1.6Mg/m³、モンモリロナイト含有率 80%)

図 2-35 には、モンモリロナイト含有率 80%で乾燥密度 1.8Mg/m^3 の膨潤圧の経時変化を示す。本ケースは、2019 年度版の三軸飽和セルを用いて飽和過程に供しているため、下端面のロードセルの値も併せて示している。図から、上端面の膨潤圧と側面の膨潤圧が、概ね定常に至っており、かつ上面の膨潤圧が 2.716MPa 程度、側面の膨潤圧が 1.746MPa 程度であり、この場合の静止土圧係数 K_0 は、概ね 0.64 程度となり、供試体がほぼ異方材料と見なせる。さらに、下端面に配置したロードセルの値は定常状態から減少傾向を示している。ロードセルによって計測される値は 5.21MPa 程度であるため、ロードセルの値を用いて算出した静止土圧係数 K_0 は、概ね 0.34 程度となり、異方材料となる。上端面の光ファイバセンサの圧力計と下端面のロードセルで、どちらの値が採用すべき値かは、他のケースとの整合性などを勘案して判断する必要がある。なお、上端面の光ファイバセンサの圧力計よりも下端面のロードセルの値の方が大きいのは、供試体の側面の摩擦の影響が考えられる。両者の差が摩擦の影響だとすると、図 2-31 に示した摩擦力と摩擦角の関係から、材料の摩擦角が 19.7° と算出できる。前述のモンモリロナイトが 20%しか含有していない材料に対して、モンモリロナイトを 80%含有している材料の本ケースでは、摩擦角が小さくなることは妥当であると考えられる。

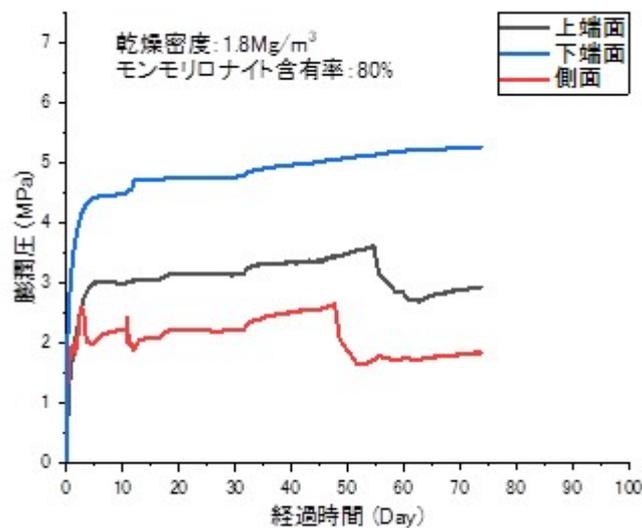


図 2-35 膨潤圧の経時変化（乾燥密度 1.8Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 80%）

(2) 三軸CU試験 圧密過程

前述の三軸膨潤圧試験による飽和後、供試体を飽和セルから脱型して、三軸試験にセットした。飽和セルからの脱型による除荷の影響を除去するために、通水と背圧の付与を行った。背圧付与後に三軸膨潤圧試験の結果を踏まえて、光ファイバセンサによる軸応力の計測値の 1.1 倍に既往の研究のベントナイトの K_0 値 0.6 を乗じたものを側圧の初期値とすることを基本とした。光ファイバセンサによる軸応力の計測値を 1.1 倍するのは、せん断試験を正規圧密状態で実施することを想定したためである。

乾燥密度 1.3Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 20%のケースでは、通水圧は 5kPa から 15kPa まで 5kPa 増分で増加させ、十分な通水量を確認した（図 2-36）。通水中では、軸変位が発生しないように載荷板によって供試体の変位を拘束した状態であったため、 120kPa 程度の軸応力が発生している。図 2-37 には、背圧付与時の軸応力と側圧の経時変化を示している。背圧は 1000kPa

Pa とした。図 2-38 に示すように、背圧付与後に圧密を行った。軸変位を固定した状態で側圧を 45kPa 付与した結果、圧密変形が発生したため、10 k Pa から 30kPa まで段階的に圧密圧力（側圧）を段階的に増加させた。その結果、圧密開始直前よりも 0.3cm³ 程度膨潤した状態となったが、せん断過程には大きな影響がないものと判断して B 値の測定を行った。

図 2-39 に B 値の測定結果を示す。図に示すように、側圧を 1030kPa 程度から 1020kPa まで下げた際の背圧の変化を計測し、B 値を算出した。その結果 B 値が 0.95 程度となり、十分に飽和していると判断した。

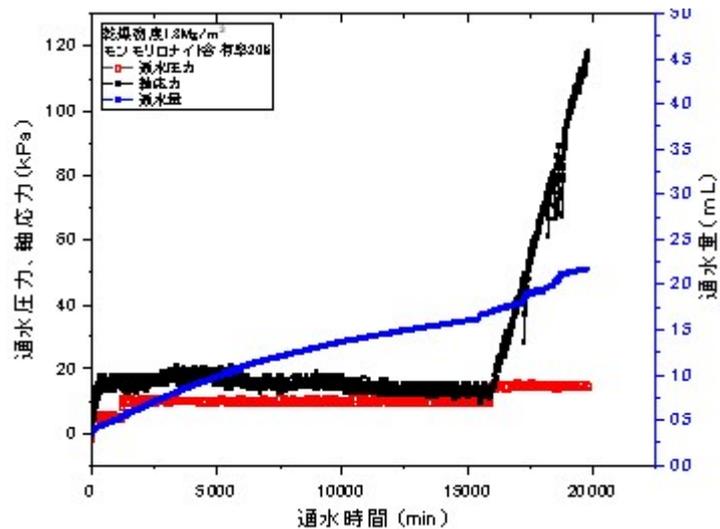


図 2-36 通水圧と通水量、軸応力の経時変化（乾燥密度 1.3Mg/m³、モンモリロナイト含有率 20%）

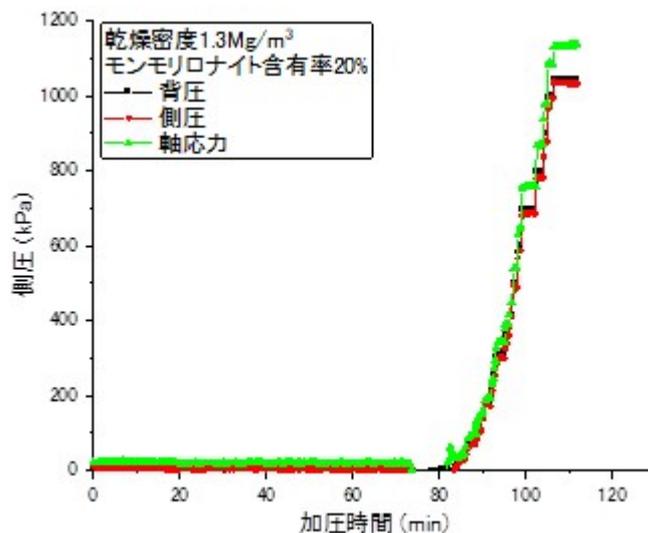


図 2-37 背圧付与時の側圧と軸応力の経時変化（乾燥密度 1.3Mg/m³、モンモリロナイト含有率 20%）

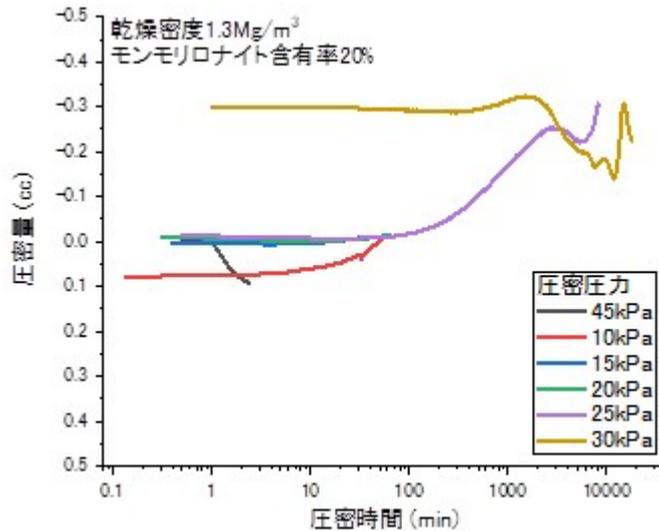


図 2-38 圧密曲線（乾燥密度 1.3Mg/m³、モンモリロナイト含有率 20%）

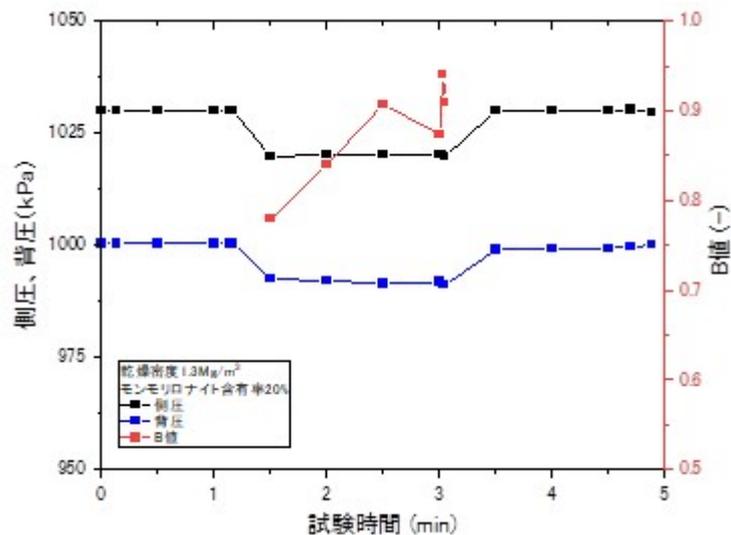


図 2-39 B 値の測定結果（乾燥密度 1.3Mg/m³、モンモリロナイト含有率 20%）

乾燥密度 1.6Mg/m³、モンモリロナイト含有率 20%のケースでは、通水圧は 30kPa として、十分な通水量を確認した（図 2-40）。通水中では、軸変位が発生しないように載荷板によって供試体の変位を拘束した状態であったため、380 kPa 程度の軸応力が発生している。図 2-41 には、背圧付与時の軸応力と側圧の経時変化を示している。背圧は 1000 kPa とした。図 2-42 に示すように、背圧付与後に圧密を行った。軸変位を固定した状態で側圧を 100kPa 付与した結果、若干の膨潤変形が発生したが、せん断過程には大きな影響がないものと判断して B 値の測定を行った。

図 2-43 に B 値の測定結果を示す。図に示すように、側圧を 1100kPa 程度から 1110kPa まで上げた際の背圧の変化を計測し、B 値を算出した。その結果 B 値が 0.9 程度となり、基準に照らして十分に飽和していると判断した。

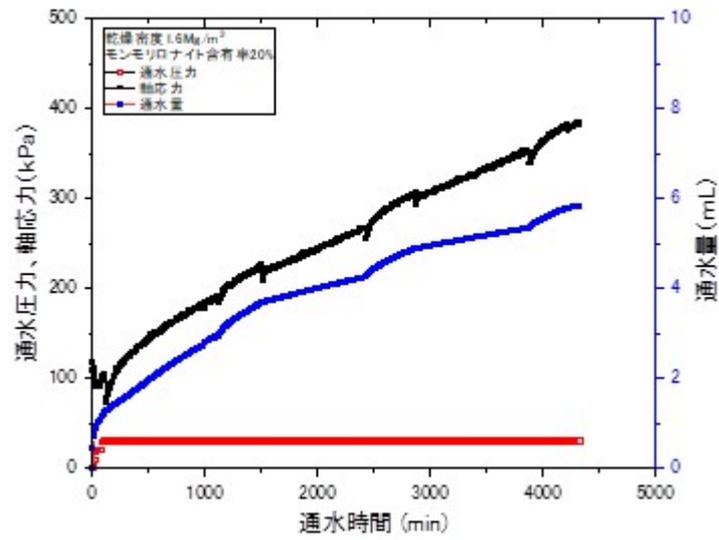


図 2-40 通水圧と通水量、軸応力の経時変化（乾燥密度 $1.6\text{Mg}/\text{m}^3$ 、モンモリロナイト含有率 20%）

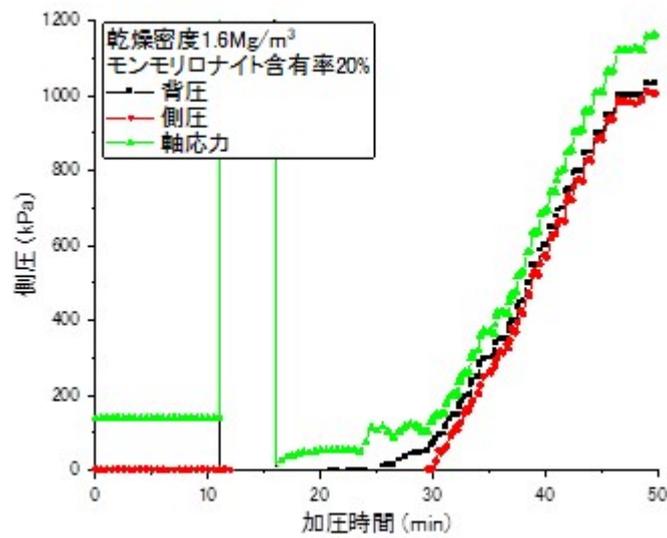


図 2-41 背圧付与時の側圧と軸応力の経時変化（乾燥密度 $1.6\text{Mg}/\text{m}^3$ 、モンモリロナイト含有率 20%）

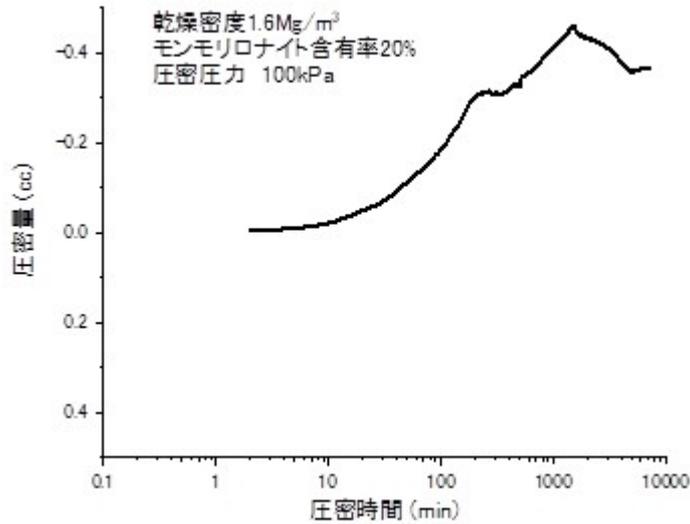


図 2-42 圧密曲線（乾燥密度 1.6Mg/m³、モンモリロナイト含有率 20%）

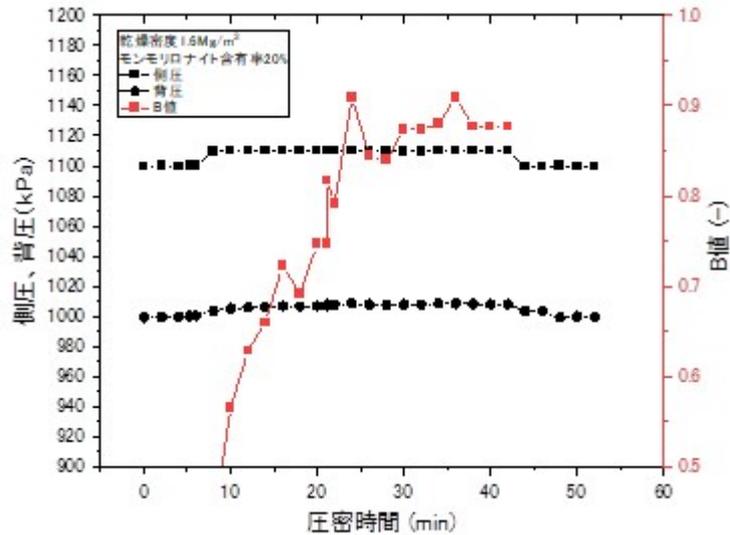


図 2-43 B 値の測定結果（乾燥密度 1.6Mg/m³、モンモリロナイト含有率 20%）

乾燥密度 1.8Mg/m³、モンモリロナイト含有率 20%のケースでは、通水圧は 50kPa として、十分な通水量を確認した（図 2-44）。通水中では、軸変位が発生しないように載荷板によって供試体の変位を拘束した状態であったため、250 kPa 程度の軸応力が発生している。図 2-45 には、背圧付与時の軸応力と側圧の経時変化を示している。背圧は 1200 kPa とした。図 2-46 に示すように、背圧付与後に圧密を行った。軸変位を固定した状態で側圧を 190kPa から調整して 227kPa 付与した結果、若干の膨潤変形が発生したが、せん断過程には大きな影響がないものと判断して B 値の測定を行った。

図 2-47 に B 値の測定結果を示す。図に示すように、側圧を 1227kPa 程度から 1237kPa まで上げた際の背圧の変化を計測し、B 値を算出した。その結果 B 値が 0.9 程度となり、基準に照らして十分に飽和していると判断した。

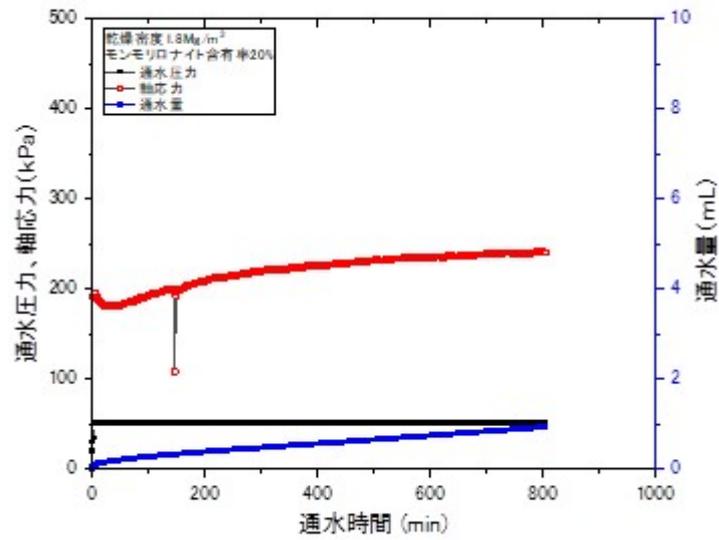


図 2-44 通水圧と通水量、軸応力の経時変化（乾燥密度 $1.8\text{Mg}/\text{m}^3$ 、モンモリロナイト含有率 20%）

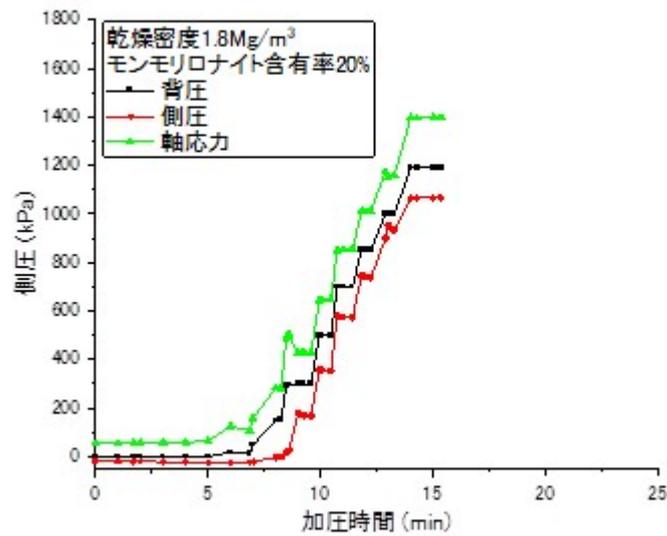


図 2-45 背圧付与時の側圧と軸応力の経時変化（乾燥密度 $1.8\text{Mg}/\text{m}^3$ 、モンモリロナイト含有率 20%）

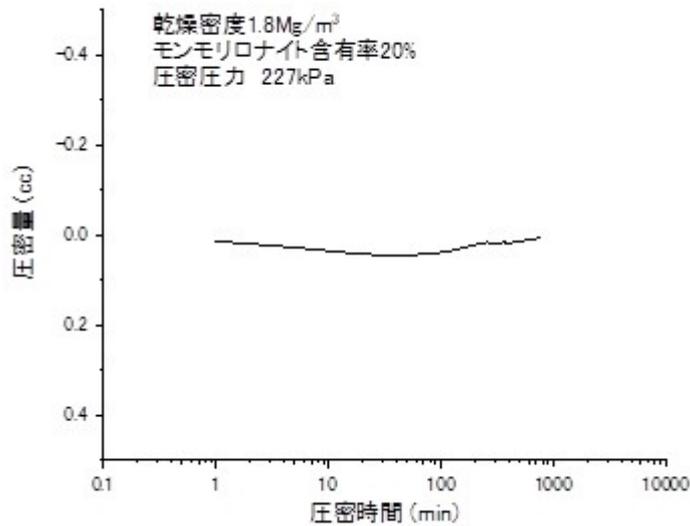


図 2-46 圧密曲線（乾燥密度 1.8Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 20%）

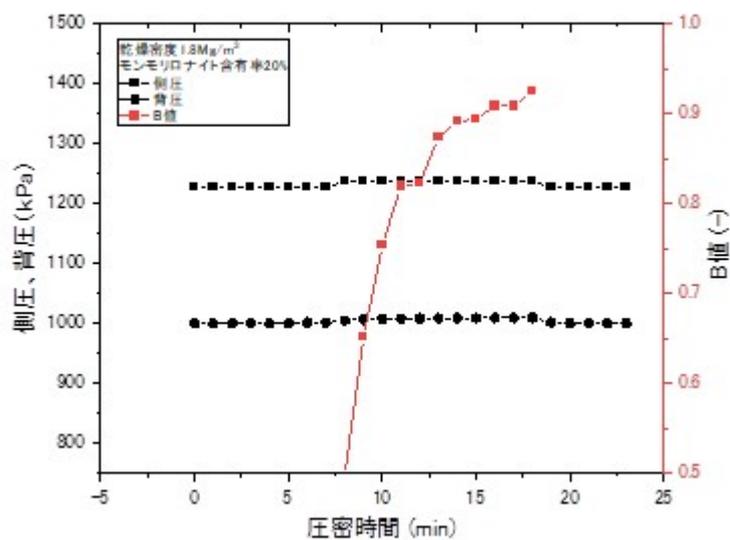


図 2-47 B 値の測定結果（乾燥密度 1.8Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 20%）

(3) 三軸CU試験 せん断過程

図 2-48 には、各ケースのせん断後の供試体の写真とその断面を示す。写真から、全てのケースで明確なせん断帯は見られず、比較的高次の破壊モードで残留状態に至っている状況が分かる。このため、前述の応力経路の軟化挙動は、破壊モードに起因しているのではなく、過圧密の応力履歴に起因する挙動であると考えられる。また、試験後の断面からは、不飽和領域が存在せず、内部まで均一に飽和していることが確認できた。

モンモリロナイト含有率：20%			
	乾燥密度：1.3Mg/m ³	乾燥密度：1.6Mg/m ³	乾燥密度：1.8Mg/m ³
0°			
90°			
180°			
270°			
断面			

図 2-48 せん断後の供試体の状況

2.2.4 ベントナイトのせん断挙動のモデル化

(1) 膨潤挙動のモデル化

式 2-40 には、クニピア F をモンモリロナイトとする様々なモンモリロナイト含有率の人工ベントナイトの完全飽和線を示す。この関係式を図示すると、図 2-49 のようになる。式中の $\bar{\rho}_d$ は、膨潤圧が 1 MPa となる乾燥密度であり、モンモリロナイト含有率が高いほど、 $\bar{\rho}_d$ は小さくなる。

$$p' = \exp\left(\frac{\rho_d - \bar{\rho}_d}{0.156}\right) \quad \text{式 2-40}$$

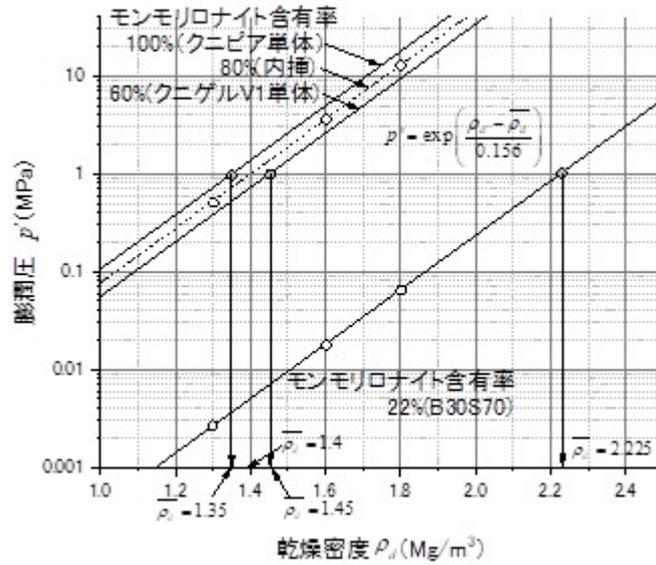


図 2-49 $\rho_d - \log P$ 平面における完全飽和線

さらに、式 2-41 には、式 2-40 の完全飽和線を無次元化して変形した $e - \log P$ 関係を示す。式中の $\sigma'_{v,max}$ は、 $e - \log P$ 関係の X 切片に相当する応力であり、間隙比 e がゼロ（乾燥密度が土粒子密度と一致）の時の応力である。これらを図示すると図 2-50 のようになる。式 2-40 と式 2-41 は、表記方法が異なるだけで、本質的には同じものである。

$$e = \frac{0.156 \ln \left(\frac{\sigma'_{v,max}}{\sigma'_v} \right)}{\rho_s - 0.156 \ln \left(\frac{\sigma'_{v,max}}{\sigma'_v} \right)} \quad \text{式 2-41}$$

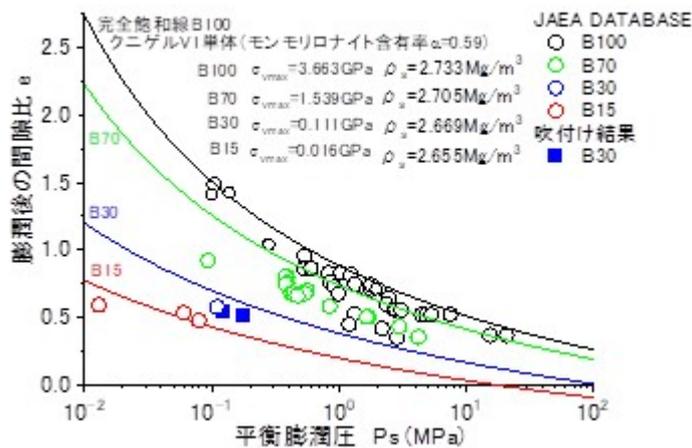


図 2-50 $e - \log P$ 平面における完全飽和線

ここで、図 2-49 に三軸膨潤圧試験結果中に計測された各膨潤圧（上下面、および側面）の最終値をプロットすると図 2-51 のようになる。図中の凡例 $D \circ \circ - M \Delta \Delta U/S/B$ は、 $\circ \circ$ は乾燥密度の小数点を除いたもの、 $\Delta \Delta$ はモンモリロナイト含有率、 U は上面の光ファイバセンサ、

Sは側面の光ファイバセンサで計測した膨潤圧、Bは底面のロードセルで計測した膨潤圧をそれぞれ示している。

図から、側方の膨潤圧は軸方向の膨潤圧に比べて小さい傾向にあることが分かる。これは、締め固め方向（軸方向）によるモンモリロナイトの配向の影響が考えられる。さらに、軸方向の膨潤変形に対して乾燥密度は反比例の関係にあるが、半径方向に対して乾燥密度は、膨潤変形の二乗に反比例することも、この結果の要因の一つと考えられる。

大局的に見ると、概ね、完全飽和線に整合的であるが、乾燥密度 1.3Mg/m^3 でモンモリロナイト含有率 20%のケースの結果の解釈が難しい。半径方向の膨潤圧に着目すると、乾燥密度が 1.6Mg/m^3 や 1.8Mg/m^3 のケースよりも高いという結果を示しており、乾燥密度が 1.6Mg/m^3 と 1.8Mg/m^3 の側圧を外挿して設定、もしくは、軸方向の膨潤圧の線形近似線を平行移動して設定するのが妥当ではないかと考えられる。

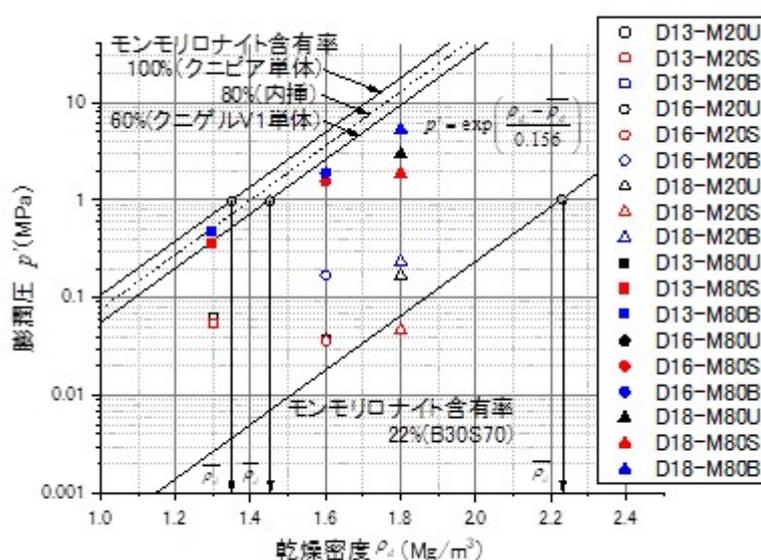


図 2-51 完全飽和線を用いた三軸膨潤圧試験結果の整理 ($\rho_d - \log P$ 平面)

(2) 三軸条件でのベントナイト系人工バリアの K_0 値の取得

図 2-52 には既往の研究（原環センター，2018b;2018c）の結果である K_0 値の経時変化を示す。この結果から、ベントナイト系人工バリアの K_0 値が概ね 0.6 と推定されている。これに対して、本検討の三軸試験の圧密過程から取得した K_0 値と乾燥密度の関係を図 2-53 に示す。図には、CUB13_0005、CUB16_0005、CUB18_0005 の結果を示す。図から、乾燥密度が 1.6Mg/m^3 以上であれば、 K_0 値は概ね、0.6 程度の値となることが分かる。一方、乾燥密度 1.3Mg/m^3 のケースでは、 K_0 値が 0.39 程度となった。

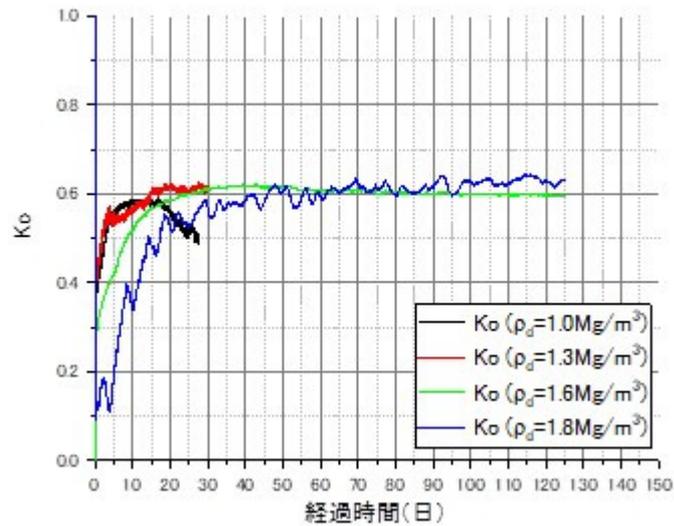


図 2-52 三軸膨潤圧試験から取得した K_0 値の経時変化
(既往の研究 (原環センター2018b;2018c))

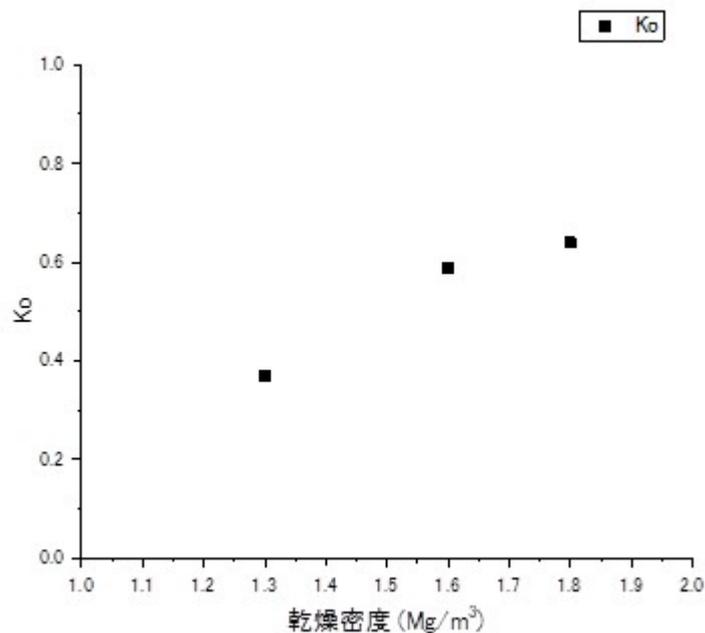


図 2-53 三軸試験の圧密過程から取得した K_0 値と乾燥密度の関係

図 2-54 には、三軸膨潤圧試験中の K_0 値の経時変化を示す。さらに、図 2-55 には、図 2-54 に示した K_0 値の経時変化の最終 100 点の平均値と乾燥密度の関係を示す。図には、図 2-52 に示した K_0 値の経時変化の最終 100 点の経時変化と図 2-53 の結果も併せて示す。

図から、 K_0 値と乾燥密度の関係は、概ね 0.6 程度で乾燥密度が小さくなるにつれて K_0 値が漸減する傾向を示していることが分かる。また、モンモリロナイト含有率 20% のケースがばらついているため定量的な評価をするためには、更なるデータの拡充が必要であるが、モンモリ

ロナイト含有率が高くなるほど K_0 値が大きくなる傾向があるように見える。 K_0 値が 1.0 となれば、材料はその力学挙動に異方性を持たなくなり、等方材料となる。モンモリロナイト含有率が高くなると各モンモリロナイトの一次粒子が膨潤し、ランダムな骨格構造を形成すると考えれば、妥当な結果だと考えられる。

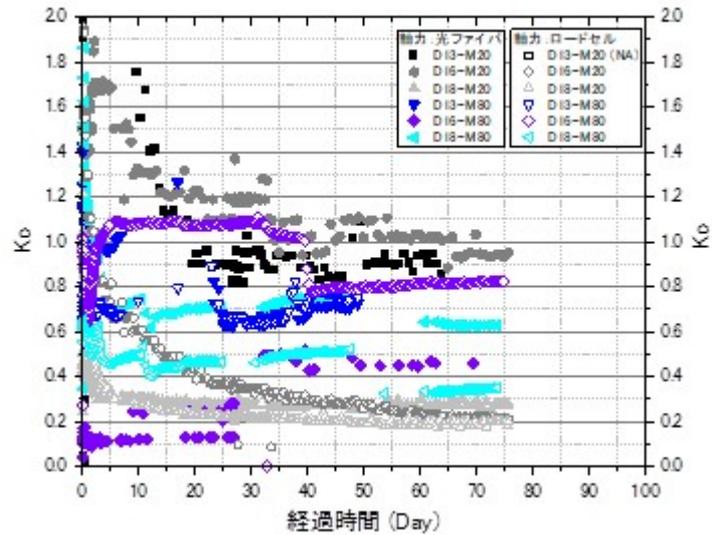


図 2-54 三軸膨潤圧試験中の K_0 値の経時変化

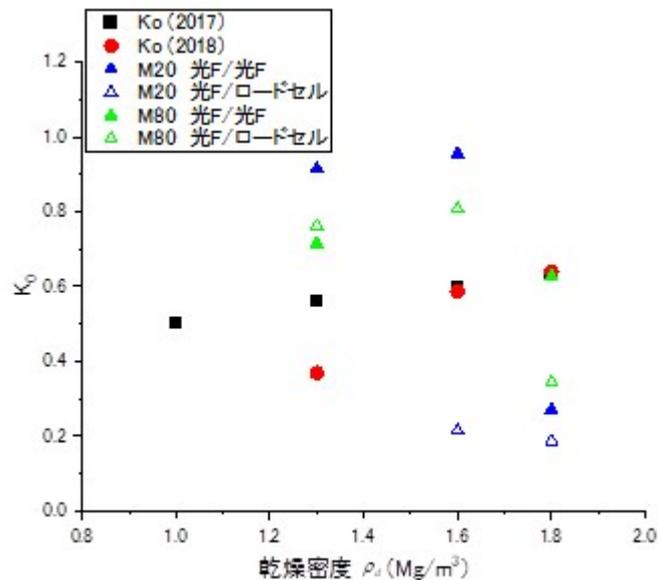


図 2-55 三軸試験の圧密過程から取得した K_0 値と乾燥密度の関係

図 2-56 には、図 2-55 に示した三軸試験の圧密過程から取得した K_0 値と乾燥密度の関係にモンモリロナイト含有率毎に K_0 値と乾燥密度の関係を線形近似したものを示す。図から、モンモリロナイト含有率毎に、同一の勾配を持ち、Y 切片が異なる近似線が得られた。さらに、図 2-56 の K_0 値と乾燥密度の関係に式 2-42 に示す Jaky 式 (Jaky, 1944) を適用すると図 2-57

に示した有効内部摩擦角 ϕ' と乾燥密度の関係が得られる。なお、この Jaky 式は、正規状態の地盤材料に対して経験的に提案されたものであり、その使用には注意を要する。さらに、有効内部摩擦角 ϕ' は、限界状態線の勾配である限界状態応力比 M と理論的に式 2-43 に示す関係があるため、限界状態応力比 M のモデル化も可能である。また、図 2-31 を用いた前述の内部摩擦角の議論に比べ、図 2-57 に示した有効内部摩擦角 ϕ' の方が大きめの値を示している。さらに乾燥密度が高いほど、有効内部摩擦角 ϕ' が小さくなっている。これは、図 2-56 の近似線を取得するのに必要な試験結果の数が十分ではないことや、図 2-57 が有効応力を仮定した Jaky 式を適用しているためだと考えられる。

$$K_0 = 1 - \sin \phi' \quad \text{式 2-42}$$

$$M = \frac{6 \sin \phi'}{3 - \sin \phi'} \quad \text{式 2-43}$$

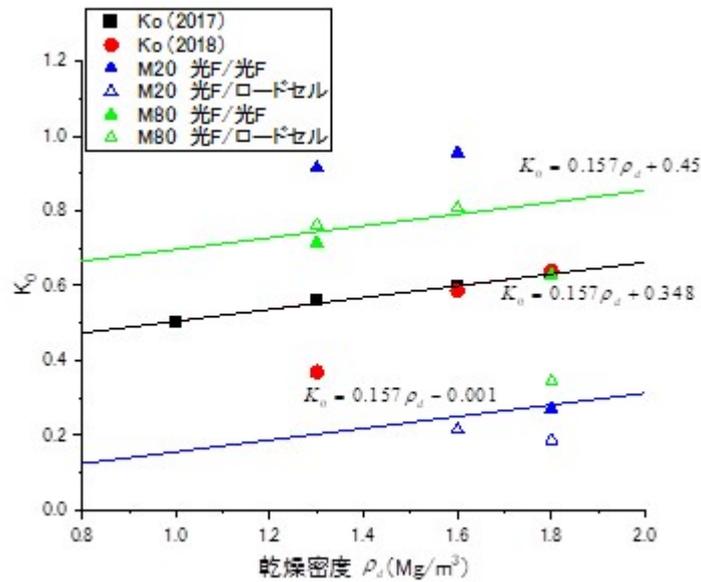


図 2-56 K_0 値と乾燥密度の関係のモデル化

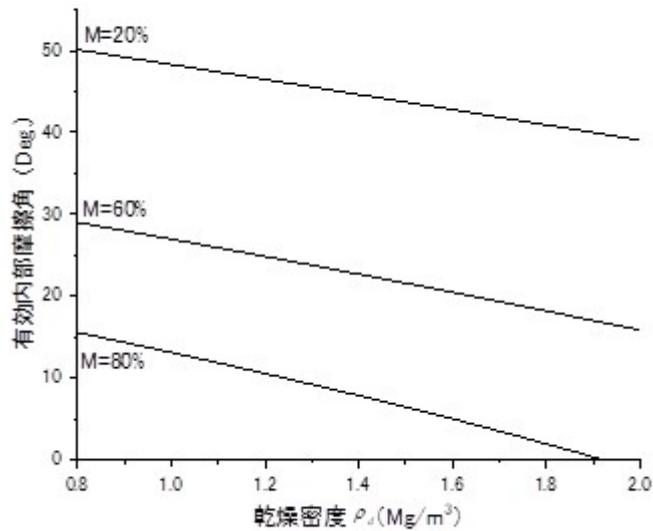


図 2-57 有効内部摩擦角と乾燥密度の関係のモデル化

(3) 限界状態線とモンモリロナイト含有率の関係

ここで、図 2-57 に示したモンモリロナイト含有率毎の有効内部摩擦角 ϕ' と乾燥密度の関係に式 2-43 を適用して、乾燥密度毎のモンモリロナイト含有率と限界状態応力比の関係を取得すると図 2-58 のようになる。既往の研究（原環センター，2018b;2018c）の比可逆比 Λ から経験式を援用して取得した限界状態応力比も併せてプロットしている。経験式としては軽部（1975）による式 2-44 の適用事例が多いが、この場合の比可逆比 Λ は、間隙比 e と $\log P$ の平面で直線を仮定した e - $\log P$ 関係の正規圧密線と膨潤線の勾配の比（圧縮指数 C_c と膨潤指数 C_s ）を用いて定義されており、本検討で使用している乾燥密度 ρ_d と $\log P$ の平面で直線を仮定した ρ_d - $\log P$ 関係の勾配の比としての比可逆比 Λ とは異なる。そのため、軽部（1975）による経験式の係数を式 2-45 に示すように変更して図 2-58 のモンモリロナイト含有率毎の有効内部摩擦角 ϕ' と乾燥密度の関係にフィッティングさせた。

$$M = 1.75\Lambda \quad \text{式 2-44}$$

$$M = 3.0\Lambda \quad \text{式 2-45}$$

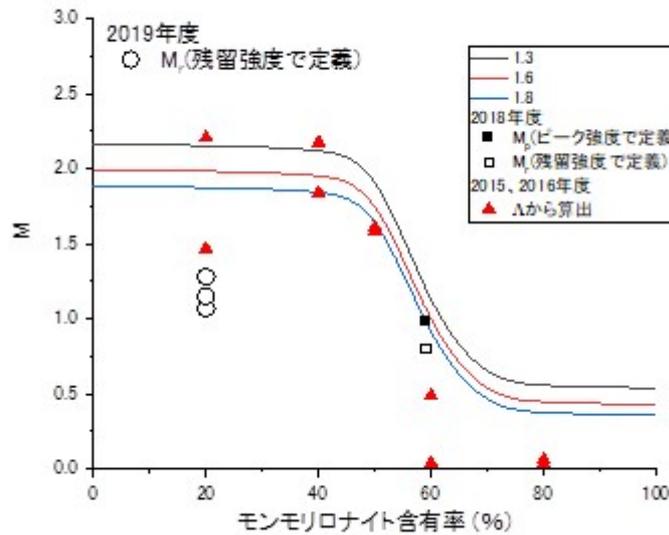


図 2-58 モンモリロナイト含有率とベントナイトの限界応力比の関係

2.3 HMC 連成解析によるガス移行場の状態設定の検討

2.3.1 はじめに

本節においては、HMC 連成解析によるガス移行場の状態設定の検討に際して実施した解析について、本編に記載していない解析条件の詳細と解析結果を記す。

2.3.2 HMC 連成解析の高度化の検討

(1) HMC 連成解析において受け渡される変数の検討

本節では、化学、力学、水理のそれぞれの解析において解かれる変数のうち、まず他解析に値を受け渡すものを整理する。次に、3つの解析のそれぞれにおいて、他解析から受け渡された変数の反映する方法を整理する。

1) 化学解析から受け渡される変数

① Ca 型化率

セメント系材料から Ca イオンや K イオンが供給される環境では、ベントナイトの主要成分であるモンモリロナイトのカルシウム型化 (Ca 型化) やカリウム型化 (K 型化) が生じる可能性がある。化学解析においては、全モンモリロナイトと Ca 型モンモリロナイトの比率である Ca 型化率を以下のように定義し、水理解析及び力学解析へと受け渡す。

$$\text{Ca 型化率} = \frac{C_{Ca-Mont}}{C_{Mont}}$$

ここで、 $C_{Ca-Mont}$ は Ca 型モンモリロナイトのモル濃度 [mol/L]、 C_{Mont} は全モンモリロナイトのモル濃度 [mol/L] である。

② モンモリロナイト含有率

全鉱物中のモンモリロナイトの含有率は、力学解析においてカムクレイモデルおよび修正カムクレイモデル中で表される粘性土に圧力を負荷あるいは除荷する際の粘性土の挙動に影響を及ぼ

す。化学解析では以下のようにモンモリロナイト含有率を定義し、力学解析へ受け渡す。

$$\text{モンモリロナイト含有率} = \frac{\rho_{Na-Mont}}{\rho_{solid}}$$

ここで、 $\rho_{Na-Mont}$ はNa型モンモリロナイトの質量密度[kg/m³]、 ρ_{solid} は全鉱物の質量密度[kg/m³]である。

③ 鉱物の溶解と析出

化学解析における鉱物の溶解反応や析出反応により、材料中の固相と液相の体積の割合が変化する。この変化は、力学解析や水理解析に影響を与えるため、間隙比または空隙率として以下のように定義し、水理解析及び力学解析へと受け渡す。

$$e = \frac{V_v}{V_s}$$

$$\varepsilon_p = \frac{V_v}{V_t}$$

$$\Delta e = (1 + e_0)\Delta V_v$$

ここで、 V_s は固体体積、 V_v は間隙体積、 V_t は全体体積、 ΔV_v は間隙体積の変化量、 ε_p は空隙比、 e は間隙比、 e_0 は初期の間隙比である。

2) 力学解析から受け渡される変数

力学解析においては、材料構成則に従って応力やひずみが決定される。例えば、間隙を含む粘性土を圧縮すると、間隙水が移動して間隙比が変化するが、力学解析において算出された体積ひずみと間隙比 e は次式のように対応する。

$$\varepsilon_v = \frac{\Delta V}{V} = \frac{(V_s + V_v + \Delta V_v) - (V_s + V_v)}{V_s + V_v} = \frac{\frac{V_v + \Delta V_v}{V_s} - \frac{V_v}{V_s}}{1 + \frac{V_v}{V_s}} = \frac{e - e_0}{1 + e_0}$$

$$e = (1 + e_0)\varepsilon_v + e_0$$

ここで、 ε_v は体積ひずみ、 V_s は初期の固体体積、 V_v は初期の間隙体積、 ΔV_v は間隙体積の変化量、 e_0 は初期の間隙比である。

3) 水理解析から受け渡される変数

水理解析においてはDarcy則に従って間隙水圧が決定される。このとき用いる透水係数は次式で与えられるKozeny-Carman則で決定される。表2-7にKozeny-Carman則の変数を示す。

$$k = \frac{1}{C} \frac{\rho g}{\mu} \frac{1}{S_v^2} \frac{e^3}{1 + e}$$

表 2-7 Kozeny-Carman 則の変数

変数	意味	単位
k	透水係数	m/s
C	土粒子の形状係数	-
ρ	間隙水の密度	kg/m ³
g	重力加速度	m/s ²
μ	粘性係数	Pa · s = $\frac{N \cdot s}{m^2} = \frac{kg}{m \cdot s}$
S_v	単位体積あたりの表面積(比表面積)	$\frac{m^2}{m^3} = \frac{1}{m}$
e	間隙比	-

4) 化学解析における他解析の反映方法

① 反応速度

化学解析におけるモンモリロナイトの溶解反応については、以下の反応速度式が提案されており、この溶解反応速度式を用いることでより現実的なモンモリロナイトの溶解の評価ができることが確認されている。表 2-8 に本溶解反応速度式で用いられる変数を示す。本溶解反応速度式には、鉱物の反応表面積が変数として含まれているが、この反応表面積は水理解析や力学解析により変化する空隙率の影響を受ける。

$$\text{Rate} = \left(4.74 \cdot 10^{-6} \cdot e^{\frac{-39.57}{RT}} \cdot \frac{177 \cdot e^{\frac{20.37}{RT}} \cdot a_{OH^-}}{1 + 177 \cdot e^{\frac{20.37}{RT}} \cdot a_{OH^-}} + 1.70 \cdot e^{\frac{-69.67}{RT}} \cdot \frac{0.0297 \cdot e^{\frac{23.53}{RT}} \cdot a_{OH^-}}{1 + 0.0297 \cdot e^{\frac{23.53}{RT}} \cdot a_{OH^-}} \right) \cdot A_{min} \cdot \{1 - \exp(-6 \cdot 10^{-10} \cdot (2 \cdot \Delta Gr / RT)^6)\}$$

$$A_{min}(\rho_d) = -0.6 \ln(\rho_d) + 0.2$$

表 2-8 溶解速度反応式の変数

変数	意味	単位
Rate	モンモリロナイト溶解速度	mol/s
A_{min}	鉱物の反応表面積	m ²
R	気体定数	kJ/K mol
T	絶対温度	K
a_{oh^-}	水酸化物イオンの活量	-
ΔGr	反応のギブス自由エネルギー変化	kJ/mol
A_{min}	実効露出端面積	m ² /g
ρ_d	乾燥密度	Mg/m ³

② 拡散

拡散速度は、鉱物中の空隙比によって変化することが知られている。化学解析における拡散係数については、以下の式に従うものとする。

$$D_e = \varepsilon_p^{\frac{3}{2}} D$$

ここで、 D_e は実効拡散係数、 D は空隙内拡散係数、 ε_p は空隙比である。

5) 力学解析における他解析の反映方法

① 間隙水圧

力学解析においては、外部から作用する外力と要素の内力との力のつりあいが満たされる配置が決定される。内力は、間隙水による圧力と、間隙でない土骨格に発生する有効応力からなる。このうち間隙水圧については水理解析により決定され、その値が力学解析に受け渡されてくる。力学解析では、間隙水圧と合わせて外力とのつりあいを満たす有効応力を材料構成側に基づいて決定する。

② 膨潤指数

粘性土の構成則として最もよく知られているモデルであるカムクレイモデル及び修正カムクレイモデルでは、粘性土に圧力を負荷あるいは除荷する際の粘性土の挙動について、空隙比と有効圧力の対数との間に線形関係を仮定している。

弾性状態： $e = -\kappa \times \ln p' + \text{const.}$

塑性状態： $e = -\lambda \times \ln p' + \text{const.}$

ここで、 λ と κ はそれぞれ圧縮指数と膨潤指数と呼ばれる量である。

一方、ベントナイトを対象とした過年度までの検討によると、乾燥密度と有効圧力の対数との間に線形関係が認められる。

弾性状態： $\rho_d = +C_\kappa \times \log_{10} p' + \text{const.} = C_\kappa \times \frac{1}{\ln 10} \ln p' + \text{const.}$

塑性状態： $\rho_d = +C_\alpha \times \log_{10} p' + \bar{\rho}_d = C_\alpha \times \frac{1}{\ln 10} \ln p' + \bar{\rho}_d$

これらの変数の対応関係については述べる。今年度は、過年度までの試験により明らかになっている挙動を反映する解析を行うため、 C_κ をモンモリロナイト含有率とモンモリロナイトのCa型化率の関数として扱った。

まず、モンモリロナイト含有率依存性について述べる。過年度に実施した実験データから、 C_κ はモンモリロナイト含有率の関数として次のようにモデル化した。 $0 < C_\kappa < C_\alpha$ を満たすように、関数形は3つのパラメータを含むシグモイド関数を選定した。

$$C_\kappa(x) = \frac{C_\alpha - d}{1 + \exp[-ax + c]} + d$$

ここで、 x はモンモリロナイト含有率、 a 、 c 、 d はフィッティングパラメータである。フィッティングパラメータの具体的な値を表 2-9 に示す。

次に、Ca型化率依存性について述べる。Na型モンモリロナイト及びCa型モンモリロナイトのそれぞれについて前述の回帰式を作成し、それらを線形補間することで、Ca型化率を考慮した C_κ を算出することとした。図 2-59 及び図 2-60 にNa型モンモリロナイト及びCa型モンモリロナイトのそれぞれについて C_κ のモンモリロナイト含有率依存性を示す。

表 2-9 回帰式のパラメータ

パラメータ	Na 型モンモリロナイトを含む ベントナイトの値	Ca 型モンモリロナイトを含む ベントナイトの値
a	34.9639	7.5436
c	19.0907	4.21576
d	0.128968	0.0639368

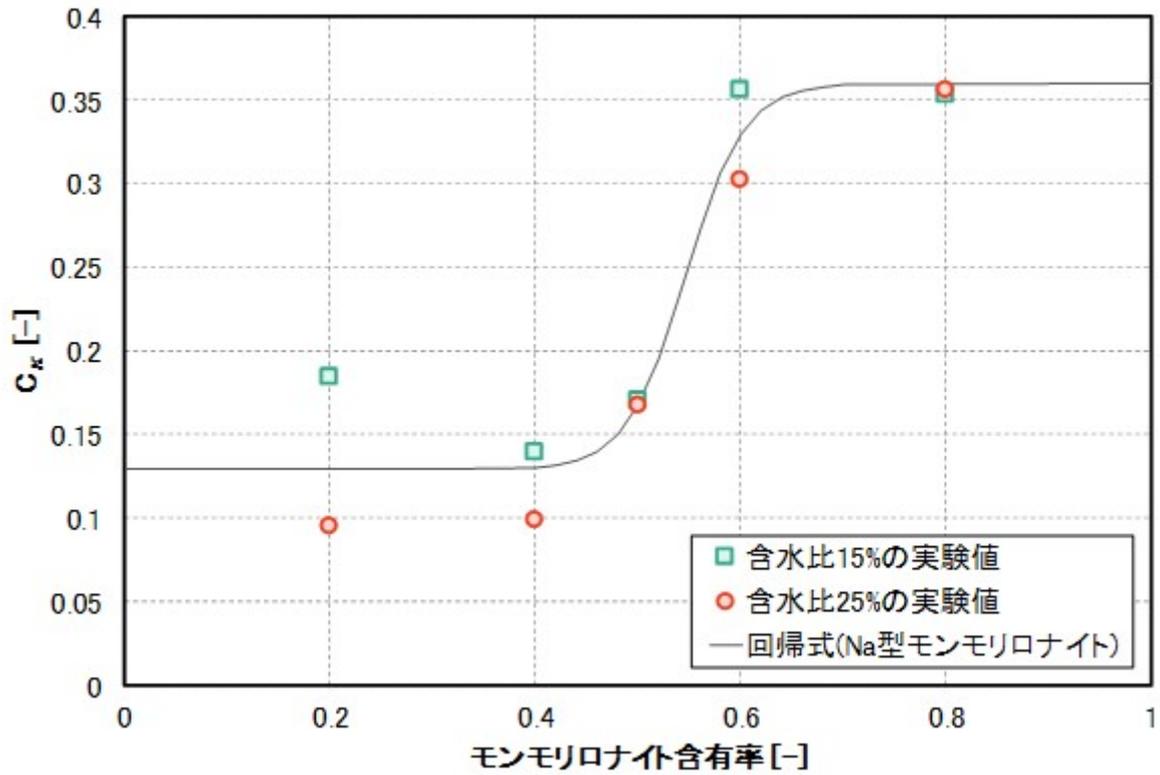


図 2-59 C_k のモンモリロナイト含有率依存性のモデル化 (Na 型モンモリロナイト)

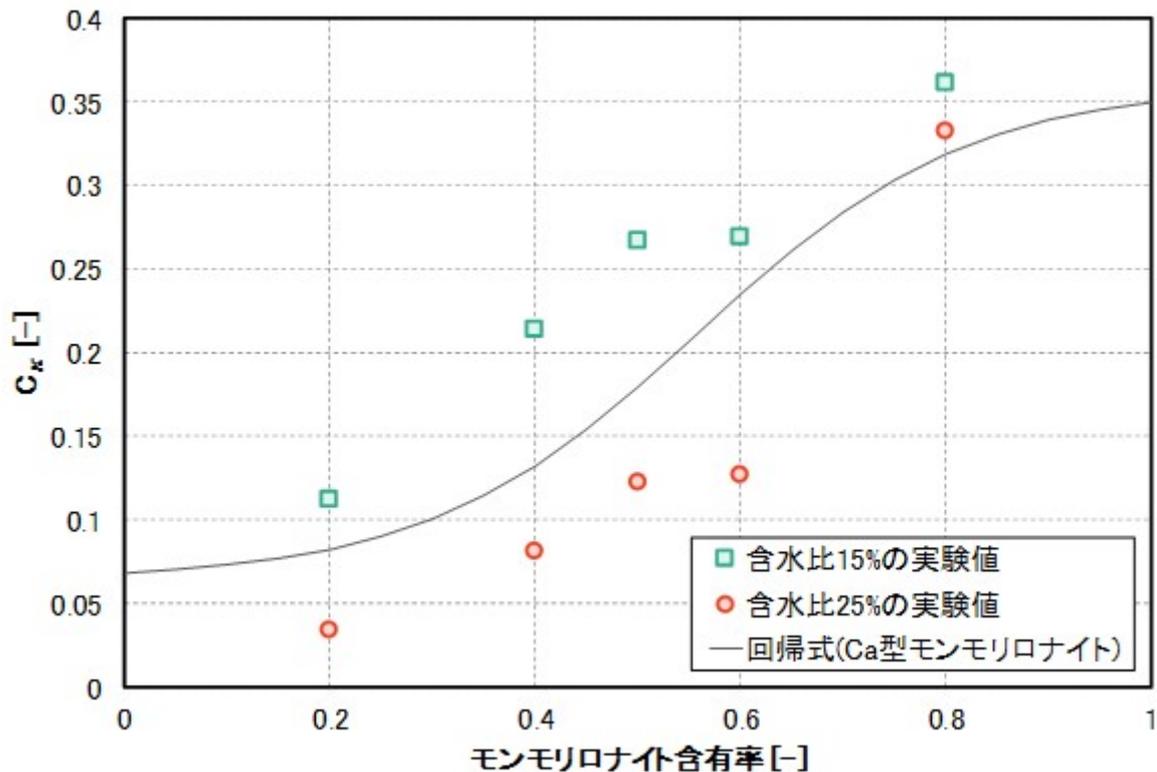


図 2-60 C_k のモンモリロナイト含有率依存性のモデル化 (Ca 型モンモリロナイト)

6) 水理解析における他解析の反映方法

① 透水係数

水理解析においては Darcy 則に従って間隙水圧が決定される。このとき用いる透水係数は次式で与えられる Kozeny-Carman 則で決定される。

$$k = \frac{1}{C} \frac{\rho g}{\mu} \frac{1}{S_v^2} \frac{e^3}{1+e}$$

表 2-10 に Kozeny-Carman 則の変数を示す。今年度は、形状係数 C と比表面積 S_v を間隙比、Ca 型化率、モンモリロナイト含有率の 3 変数を含む関数として設定し、水理解析と力学及び化学解析との連成を行った。次節以降に形状係数 C と比表面積 S_v について述べる。

表 2-10 Kozeny-Carman 則の変数

変数	意味	単位
k	透水係数	m/s
C	土粒子の形状係数	-
ρ	間隙水の密度	kg/m ³
g	重力加速度	m/s ²
μ	粘性係数	Pa · s = $\frac{N \cdot s}{m^2} = \frac{kg}{m \cdot s}$
S_v	単位体積あたりの表面積(比表面積)	$\frac{m^2}{m^3} = \frac{1}{m}$
e	間隙比	-

② 比表面積

過年度において、乾燥密度とモンモリロナイト含有率の関数として、次式に示すような比表面積のモデル化が検討された。比表面積の関数に係る変数を表 2-11 に示す。

$$S_v = 3.6 \times 10^9 \times w^* \times \rho_d$$

$$w^* = \frac{\chi_{mnt}}{c + a \times \chi_{mnt} \times \rho_d^{b\chi_{mnt}}}$$

表 2-11 比表面積に係る変数

変数	意味	単位
S_v	単位体積あたりの表面積(比表面積)	$\frac{m^2}{m^3} = \frac{1}{m}$
w^*	2 層膨潤含水比	-
ρ_d	乾燥密度	Mg/m ³
χ_{mnt}	モンモリロナイト含有率	-
a, b, c	フィッティングパラメータ	-

③ 形状係数

過年度において、乾燥密度とモンモリロナイトの Ca 型化率の関数として、次式に示すような形状係数のモデル化が検討された。形状係数の関数に係る変数を表 2-12 に示す。

$$C = \frac{\tau^2}{C^*}$$

$$\tau = 0.35 + 0.65 \exp[1.26 \times \rho_d]$$

$$C^* = a \left(1 + \frac{CR^e}{1 + \exp[b - c(\rho_d - d)]} \right)$$

表 2-12 形状係数に係る変数

変数	意味	単位
C	土粒子の形状係数	-
τ	屈曲度	-
ρ_d	乾燥密度	Mg/m ³
C^*	土粒子の形状係数	-
a, b, c, d, e	フィッティングパラメータ	
CR	Ca 型化率	-

(2) HMC 連成解析の高度化の検討

1) 1次元系での HMC 連成解析の検討

① 化学解析の条件

(a) パラメータ

連成解析において、空隙率、モンモリロナイト含有率、モンモリロナイトの Ca 型化率の変化といった化学変質の影響が正しく力学や水理解析に受け渡されるか調べる。モンモリロナイトの Ca 型化に係るパラメータを表 2-13 に、モンモリロナイトの溶解に係るパラメータを表 2-14 に示す。また、ここでは、溶解する代表的な鉱物であるカルセドニの溶解速度を大きくし、変化を促進させて化学変質の影響を調べやすくしている。

表 2-13 イオン交換分配係数

反応	logK
$\text{CaZ}_2 + 2\text{Na}^+ = 2\text{NaZ} + \text{Ca}^{2+}$	0.73
$\text{KZ} + \text{Na}^+ = \text{NaZ} + \text{K}^+$	1.34
$\text{MgZ}_2 + 2\text{Na}^+ = 2\text{NaZ} + \text{Mg}^{2+}$	2.59

表 2-14 モンモリロナイトの溶解に係るパラメータ

変数	意味	値	単位
R	ガス定数	0.0083145	kJ/K mol
T	絶対温度	293.15	K
K	モンモリロナイトの平衡定数	$10^{7.44}$	-
A_{min}	反応性表面の面積	7.0	m ² /g

(b) 反応式

本解析で導入したモンモリロナイトの溶解反応速度式を以下に示す。本溶解反応速度式は、第 2 次 TRU レポートで使用された式を用いた。

$$\text{Rate} = \left(4.74 \cdot 10^{-6} \cdot e^{\frac{-39.57}{RT}} \cdot \frac{177 \cdot e^{\frac{20.37}{RT}} \cdot a_{OH^-}}{1 + 177 \cdot e^{\frac{20.37}{RT}} \cdot a_{OH^-}} + 1.70 \cdot e^{\frac{-69.67}{RT}} \cdot \frac{0.0297 \cdot e^{\frac{23.53}{RT}} \cdot a_{OH^-}}{1 + 0.0297 \cdot e^{\frac{23.53}{RT}} \cdot a_{OH^-}} \right) \cdot A_{\text{reac}} \cdot \{1 - \exp(-6 \cdot 10^{-10} \cdot (2 \cdot \Delta Gr / RT)^6)\}$$

$$\Delta Gr = -RT \ln Q/K$$

$$A_{\text{reac}} = A_{\text{min}} \cdot 367 \cdot C_{\text{mont}}$$

ここで、Rate はモンモリロナイト溶解速度[mol/L/s]、 a_{OH^-} は水酸化物イオンの活量、 ΔGr は反応のギブス自由エネルギー変化[kJ/mol]、 Q はモンモリロナイト溶解反応のイオン積[mol/L]、 A_{reac} は鉱物の反応表面積[m²]、 C_{mont} はモンモリロナイトの濃度[mol/L]である。本解析で考慮する化学反応式を表 2-15 に示す。ここで、 K は平衡定数を表す。

表 2-15 化学反応式と平衡定数

反応式	logK
$\text{NaMgAl}_5\text{Si}_{12}\text{O}_{30}(\text{OH})_6 + 18\text{H}^+ + 12\text{H}_2\text{O} = \text{Mg}^{2+} + 5\text{Al}^{3+} + 12\text{H}_4\text{SiO}_4 + \text{Na}^+$	7.440
$\text{Na}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{NaCO}_3^-$	1.268
$\text{Na}^+ + \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{NaHCO}_3$	10.080
$\text{Al}^{3+} + \text{H}_2\text{O} = \text{AlOH}^{2+} + \text{H}^+$	-4.990
$\text{Al}^{3+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{Al}(\text{OH})_2^+ + 2\text{H}^+$	-10.100
$\text{Al}^{3+} + 3\text{H}_2\text{O} = \text{Al}(\text{OH})_3^+ + 3\text{H}^+$	-16.000
$\text{Al}^{3+} + 4\text{H}_2\text{O} = \text{Al}(\text{OH})_4^- + 4\text{H}^+$	-23.000
$\text{H}_4\text{SiO}_4 = \text{H}_2\text{SiO}_4^{2-} + 2\text{H}^+$	-23.141
$\text{H}_4\text{SiO}_4 = \text{H}_3\text{SiO}_4^- + \text{H}^+$	-9.810
$\text{SiO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} = \text{H}_4\text{SiO}_4$	-3.490
$\text{CaCO}_3 = \text{CO}_3^{2-} + \text{Ca}^{2+}$	-8.480
$\text{Mg}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \text{MgCO}_3$	2.981
$\text{Mg}^{2+} + \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{MgHCO}_3^+$	11.397
$\text{CO}_3^{2-} + \text{H}^+ = \text{HCO}_3^-$	10.327
$\text{CO}_3^{2-} + 2\text{H}^+ = \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	16.681
$\text{Ca}^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \text{CaOH}^+ + \text{H}^+$	-12.598
$\text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} + \text{H}^+ = \text{CaHCO}_3^+$	11.435
$\text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \text{CaCO}_3$	3.225
$\text{H}_2\text{O} = \text{OH}^- + \text{H}^+$	-14.000
$\text{CaZ}_2 + 2\text{Na}^+ = 2\text{NaZ} + \text{Ca}^{2+}$	0.73
$\text{KZ} + \text{Na}^+ = \text{NaZ} + \text{K}^+$	1.34
$\text{MgZ}_2 + 2\text{Na}^+ = 2\text{NaZ} + \text{Mg}^{2+}$	2.59

(c) 初期状態

モルタル層とベントナイト層を含む解析モデルでは、化学解析において解析が不安定にあることが確認されたことから、HMC 連成解析における化学解析では、モルタル層にもベントナイト層と同じ初期鉱物を設定した。初期鉱物組成を表 2-16 に、間隙水の初期イオン濃度を表 2-17 に示す。

表 2-16 初期鉱物組成

初期鉱物	表記	鉱物濃度 [mol/L_water]	
		ベントナイト層	モルタル層
モンモリロナイト	Na-Mont	3.8028	3.8028
カルセドニ	CHALCEDO	18.3878	18.3878
カルサイト	CALCITE	0.7553	0.7553
ポルトランドイト	PORTLAN	—	—
エトリンガイト	ETTRINGI	—	—
ブルーサイト	BRUCITE	—	—
C-S-H ゲル	CSH(1.8)	—	—

表 2-17 空隙水の初期イオン濃度

イオン種	モル濃度[mol/L]
H ⁺	1.0×10 ⁻⁷
OH ⁻	1.0×10 ⁻⁷

② 力学解析の条件

(a) パラメータ

力学解析のパラメータを表 2-18 と表 2-19 に示す。ベントナイト層は今年度検討した修正カムクレイモデルに基づく構成則を適用した。この構成則の詳細は 2.3.4 で後述する。モルタル層は線形弾性材料とした。

表 2-18 力学解析のパラメータ（ベントナイト層）

変数	意味	値	単位
ρ_s	土粒子密度	2.67	[Mg/m ³]
e_0	初期間隙比	0.66875	—
M	限界応力比	0.5	—
ν	ポアソン比	0.45	—
p_0	先行圧密応力	0.167	[MPa]

表 2-19 力学解析のパラメータ（モルタル層）

変数	意味	値	単位
E	ヤング率	17.5	[GPa]
ν	ポアソン比	0.2	—
e	間隙比	0.429	—

(b) 初期条件

すべての領域において有効応力が外力と釣り合っている状態を初期条件とした。具体的には、円筒状の解析領域に側圧として 0.167[MPa]を負荷し、有効応力はせん断成分が 0、圧力成分が 0.167[MPa]となる応力とした。

③ 水理解析の条件

(a) パラメータ

水理解析のパラメータを表 2-20 と表 2-21 に示す。ベントナイト層においては Kozeny-Carman 則に基づいて透水係数が決定されるものとした。モルタル層においては透水係数は定数とした。

表 2-20 Kozeny-Carman 則のパラメータ (ベントナイト層)

変数	意味	値	単位
μ	粘性係数	0.000890	[kg/(m · s)]

表 2-21 水理解析のパラメータ (モルタル層)

変数	意味	値	単位
k	透水係数	126.144	[m/year]

(b) 初期条件

解析初期において、解析対象となる全領域で間隙水圧は 0[Pa]とした。

2) 2次元断面での HMC 連成解析手法の検討

① 化学解析の条件

(a) パラメータ

本連成解析におけるモンモリロナイトの溶解に係るパラメータを表 2-22 に示す。また 1)と同様に、化学変質の影響を確認するため、溶解する代表的な鉱物であるカルセドニの溶解速度を大きく設定した。

表 2-22 モンモリロナイトの溶解に係るパラメータ

変数	意味	値	単位
R	ガス定数	0.0083145	kJ/(K · mol)
T	絶対温度	293.15	K
K	モンモリロナイトの平衡定数	$10^{7.44}$	-
A_{min}	反応性表面の面積	7.0	m ² /g
M	モンモリロナイトの分子量	367	g/mol

(b) 反応式

本解析で導入したモンモリロナイトの溶解反応速度式を以下に示す。本溶解反応速度式は、第 2 次 TRU レポートで使用された式を用いた。

$$\text{Rate} = \left(4.74 \cdot 10^{-6} \cdot e^{\frac{-39.57}{RT}} \cdot \frac{177 \cdot e^{\frac{20.37}{RT}} \cdot a_{OH^-}}{1 + 177 \cdot e^{\frac{20.37}{RT}} \cdot a_{OH^-}} + 1.70 \cdot e^{\frac{-69.67}{RT}} \cdot \frac{0.0297 \cdot e^{\frac{23.53}{RT}} \cdot a_{OH^-}}{1 + 0.0297 \cdot e^{\frac{23.53}{RT}} \cdot a_{OH^-}} \right) \cdot A_{\text{reac}} \cdot \{1 - \exp(-6 \cdot 10^{-10} \cdot (2 \cdot \Delta Gr / RT)^6)\}$$

$$\Delta Gr = -RT \ln Q/K$$

$$A_{\text{reac}} = A_{\text{min}} \cdot M \cdot C_{\text{mont}}$$

ここで、Rateはモンモリロナイト溶解速度[mol/(L・s)]、 a_{OH^-} は水酸化物イオンの活量、 ΔGr は反応のギブス自由エネルギー変化[kJ/mol]、 Q はモンモリロナイト溶解反応のイオン積[mol/L]、 A_{reac} は鉱物の反応表面積[m²]、 C_{mont} はモンモリロナイトの濃度[mol/L]である。

本解析で考慮する化学反応式を表 2-23 に示す。ここで、 K は平衡定数を表す。モンモリロナイトの Ca 型化に係る反応もイオン交換サイトをZとして、表 2-23 に含めた。

表 2-23 化学反応式と平衡定数

反応式	logK
$\text{NaMgAl}_5\text{Si}_{12}\text{O}_{30}(\text{OH})_6 + 18\text{H}^+ + 12\text{H}_2\text{O} = \text{Mg}^{2+} + 5\text{Al}^{3+} + 12\text{H}_4\text{SiO}_4 + \text{Na}^+$	7.440
$\text{Na}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{NaCO}_3^-$	1.268
$\text{Na}^+ + \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{NaHCO}_3$	10.080
$\text{Al}^{3+} + \text{H}_2\text{O} = \text{AlOH}^{2+} + \text{H}^+$	-4.990
$\text{Al}^{3+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{Al}(\text{OH})_2^+ + 2\text{H}^+$	-10.100
$\text{Al}^{3+} + 3\text{H}_2\text{O} = \text{Al}(\text{OH})_3^+ + 3\text{H}^+$	-16.000
$\text{Al}^{3+} + 4\text{H}_2\text{O} = \text{Al}(\text{OH})_4^- + 4\text{H}^+$	-23.000
$\text{H}_4\text{SiO}_4 = \text{H}_2\text{SiO}_4^{2-} + 2\text{H}^+$	-23.141
$\text{H}_4\text{SiO}_4 = \text{H}_3\text{SiO}_4^- + \text{H}^+$	-9.810
$\text{SiO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} = \text{H}_4\text{SiO}_4$	-3.490
$\text{CaCO}_3 = \text{CO}_3^{2-} + \text{Ca}^{2+}$	-8.480
$\text{Mg}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \text{MgCO}_3$	2.981
$\text{Mg}^{2+} + \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{MgHCO}_3^+$	11.397
$\text{CO}_3^{2-} + \text{H}^+ = \text{HCO}_3^-$	10.327
$\text{CO}_3^{2-} + 2\text{H}^+ = \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	16.681
$\text{Ca}^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \text{CaOH}^+ + \text{H}^+$	-12.598
$\text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} + \text{H}^+ = \text{CaHCO}_3^+$	11.435
$\text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \text{CaCO}_3$	3.225
$\text{H}_2\text{O} = \text{OH}^- + \text{H}^+$	-14.000
$\text{CaZ}_2 + 2\text{Na}^+ = 2\text{NaZ} + \text{Ca}^{2+}$	0.73
$\text{KZ} + \text{Na}^+ = \text{NaZ} + \text{K}^+$	1.34
$\text{MgZ}_2 + 2\text{Na}^+ = 2\text{NaZ} + \text{Mg}^{2+}$	2.59

(c) 初期条件

モルタル層とベントナイト層を含む解析モデルでは、2.3.3 で後述するように化学解析において解析が不安定であることが確認されたことから、HMC 連成解析における化学解析では、モルタル層にもベントナイト層と同じ初期鉱物を設定した。初期鉱物組成を表 2-24 に、間隙水の初

期イオン濃度を表 2-25 に示す。

表 2-24 初期鉱物組成

初期鉱物	表記	鉱物濃度 [mol/L_water]	
		ベントナイト層	モルタル層
モンモリロナイト	Na-Mont	3.66	3.66
カルセドニ	CHALCEDO	17.7	17.7
カルサイト	CALCITE	0.727	0.727

表 2-25 空隙水の初期イオン濃度

イオン種	モル濃度 [mol/L]
H ⁺	1.0×10 ⁻⁷
OH ⁻	1.0×10 ⁻⁷

② 力学解析の条件

(a) パラメータ

力学解析のパラメータを表 2-26 及び表 2-27 に示す。ベントナイト層は今年度検討した修正カムクレイモデルに基づく構成則を適用した。この構成則の詳細は 2.3.4 で後述する。モルタル層は線形弾性材料とした。

表 2-26 力学解析のパラメータ（ベントナイト層）

変数	意味	値	単位
ρ_s	土粒子密度	2.67	Mg/m ³
e_0	初期間隙比	0.66875	-
M	限界応力比	0.5	-
ν	ポアソン比	0.45	-
p_0	先行圧密応力	0.167	MPa

表 2-27 力学解析のパラメータ（モルタル層）

変数	意味	値	単位
E	ヤング率	17.5	GPa
ν	ポアソン比	0.2	-
e	間隙比	0.429	-

(b) 初期条件

すべての領域において有効応力が外力と釣り合っている状態を初期条件とした。具体的には、円筒状の解析領域に側圧として 0.167[MPa]を負荷し、有効応力はせん断成分が 0、圧力成分が 0.167[MPa]となる応力とした。

③ 水理解析の条件

(a) パラメータ

水理解析のパラメータを表 2-28 及び表 2-29 に示す。ベントナイト層においては(1) 3)で述べた Kozeny-Carman 則に基づいて透水係数が決定されるものとした。モルタル層における透水係数は定数とした。

表 2-28 Kozeny-Carman 則のパラメータ (ベントナイト層)

変数	意味	値	単位
μ	粘性係数	0.000890	kg/(m・s)

表 2-29 水理解析のパラメータ (モルタル層)

変数	意味	値	単位
k	透水係数	126.144	m/year

(b) 初期条件

解析初期において、解析対象となる全領域で間隙水圧は 0[Pa]とした。

2.3.3 化学解析手法の検討

(1) モンモリロナイトの Ca 型

1) 解析ケース 1

解析の概要を表 2-30 に示す。ここでは、2つの条件で比較を行った。本解析の目的は、COMSOL によるイオン交換反応を考慮した解析が可能であることを確認するためであり、いずれも単純な条件を用いた。

表 2-30 解析ケース 1 概要

解析ケース	解析内容	イオン交換条件
1-1	30mmol のイオン交換サイト X に Na ⁺ と K ⁺ がイオン交換する反応	X ⁻ : イオン交換サイト 30mmol 溶液中濃度 : Na ⁺ : 1 mmol/L K ⁺ : 0.2 mmol/L Cl ⁻ : 1.2 mmol/L
1-2	Ca ²⁺ と Na ⁺ がイオン交換していた 30mmol のイオン交換サイト X に、平衡にしたがって Na ⁺ 、K ⁺ 、Ca ²⁺ がイオン交換する反応	CaX ₂ : Ca ²⁺ と結合しているイオン交換サイト 20 mmol NaX : Na ⁺ と結合しているイオン交換サイト 10 mmol 溶液中濃度 : Na ⁺ : 1 mmol/L K ⁺ : 0.2 mmol/L Cl ⁻ : 1.2 mmol/L

① 解析ケース 1-1 の解析条件

解析ケース 1-1 で設定した反応式、平衡定数、初期値の条件を表 2-31 に示す。PHREEQC では、Na⁺と X の反応の平衡定数を 1 として、他のイオン交換に関する平衡定数はその相対比として与えているため、COMSOL の設定もこれに従った。初期値として与えた Na イオンと K イオンの濃度は変化しないものとした。

表 2-31 解析ケース 1-1 の解析条件

項目	内容
反応式	Na ⁺ + KX ↔ NaX + K ⁺
平衡定数	$K_{eq} = \frac{[Na^+][KX]}{[K^+][NaX]} = \frac{k_1}{k_2}$ $k_1 = \frac{[Na^+][X^-]}{[NaX]} = 10^0$ $k_2 = \frac{[K^+][X^-]}{[KX]} = 10^{0.7}$
初期値	NaX : 30.0 mmol/L KX : 0.0 mmol/L Na ⁺ : 1.0 mmol/L (濃度固定) K ⁺ : 0.2 mmol/L (濃度固定)

② 解析ケース 1-2 の解析条件

解析ケース 1-2 で設定した反応式、平衡定数、初期値の条件を表 2-32 に示す。ここで E は陽イオン交換容量である。初期値として与えた Na イオンと K イオンの濃度は変化しないものとした。

表 2-32 解析ケース 1-2 の解析条件

項目	内容
反応式	$\text{KX} + \text{Na}^+ \leftrightarrow \text{NaX} + \text{K}^+$ $\text{CaX}_2 + 2\text{Na}^+ \leftrightarrow \text{Ca}^{2+} + 2\text{NaX}$ $\text{CaX}_2 + 2\text{K}^+ \leftrightarrow \text{Ca}^{2+} + 2\text{KX}$
平衡定数	$K_{eq1} = \frac{k_1}{k_2}, \quad K_{eq2} = \frac{k_1^2}{4k_3E}, \quad K_{eq3} = \frac{k_2^2}{4k_3E}$ $k_1 = \frac{[\text{Na}^+][\text{X}^-]}{[\text{NaX}]} = 10^0$ $k_2 = \frac{[\text{K}^+][\text{X}^-]}{[\text{KX}]} = 10^{0.7}$ $k_3 = \frac{[\text{Ca}^{2+}][\text{X}^-]^2}{[\text{CaX}_2]} = 10^{0.8}$ $E: 50.0$
初期値	NaX : 10.0 mmol/L CaX ₂ : 20.0 mmol/L KX : 0.0 mmol/L Na ⁺ : 1.0 mmol/L (濃度固定) K ⁺ : 0.2 mmol/L (濃度固定)

2) 解析ケース 2

解析の概要を表 2-33 に示す。本解析は、COMSOL を用いた人工バリアの長期挙動を評価する解析において、イオン交換反応を考慮できることを確認することが目的であり、本解析条件は「平成 29 年度高レベル放射性廃棄物等の地層処分に関する技術開発事業 処分システム工学確証技術開発 報告書(第 2 分冊), 2018d」に記載されている「陽イオン交換挙動の理解のための PHREEQC による数値解析」で用いられた解析条件である。ここでは、液相を変えた 2 つの条件で比較を行った。また、本解析においてはモンモリロナイトのイオン交換反応については、イオン交換サイトを Z とすることで、モンモリロナイトとは別の変数として解析を行っている。これは過年度の PHREEQC を用いた解析においても同様である。

表 2-33 解析ケース 2 概要

解析例	解析次元	考慮する現象	初期固相	液相	検証内容
2-1	0 次元	化学反応	ベントナイト	NaCl	液相のイオン濃度 イオン交換サイトの比率
2-2	0 次元	化学反応	ベントナイト	CaCl ₂	液相のイオン濃度 イオン交換サイトの比率

解析に必要とされるパラメータ、反応式、初期条件を以下に示す。

① パラメータ

本解析で必要とされるパラメータを表 2-34 に示す。

表 2-34 解析ケース 2 イオン交換分配係数

反応	logK
$\text{CaZ}_2 + 2\text{Na}^+ = 2\text{NaZ} + \text{Ca}^{2+}$	0.73
$\text{KZ} + \text{Na}^+ = \text{NaZ} + \text{K}^+$	1.34
$\text{MgZ}_2 + 2\text{Na}^+ = 2\text{NaZ} + \text{Mg}^{2+}$	2.59

② 反応式

本解析で考慮する化学反応式を表 2-35 に示す。ここで、K は平衡定数を表す。

表 2-35 解析ケース 2 化学反応式と平衡定数

反応式	logK
$\text{NaMgAl}_5\text{Si}_{12}\text{O}_{30}(\text{OH})_6 + 18\text{H}^+ + 12\text{H}_2\text{O} = \text{Mg}^{2+} + 5\text{Al}^{3+} + 12\text{H}_4\text{SiO}_4 + \text{Na}^+$	7.440
$\text{Na}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{NaCO}_3^-$	1.268
$\text{Na}^+ + \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{NaHCO}_3$	10.080
$\text{Al}^{3+} + \text{H}_2\text{O} = \text{AlOH}^{2+} + 1.0\text{H}^+$	-4.990
$\text{Al}^{3+} + 2.0\text{H}_2\text{O} = \text{Al}(\text{OH})_2^+ + 2.0\text{H}^+$	-10.100
$\text{Al}^{3+} + 3.0\text{H}_2\text{O} = \text{Al}(\text{OH})_3 + 3.0\text{H}^+$	-16.000
$\text{Al}^{3+} + 4.0\text{H}_2\text{O} = \text{Al}(\text{OH})_4^- + 4.0\text{H}^+$	-23.000
$\text{H}_4\text{SiO}_4 = \text{H}_2\text{SiO}_4^{2-} + 2\text{H}^+$	-23.141
$\text{H}_4\text{SiO}_4 = \text{H}_3\text{SiO}_4^- + \text{H}^+$	-9.810
$\text{SiO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} = \text{H}_4\text{SiO}_4$	-3.490
$\text{K}^+ + \text{SO}_4^{2-} = \text{KSO}_4^-$	-0.851
$\text{Mg}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \text{MgCO}_3$	2.981
$\text{Mg}^{2+} + \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{MgHCO}_3^+$	11.397
$\text{Mg}^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \text{MgOH}^+ + \text{H}^+$	-11.794
$\text{CaCO}_3 = \text{CO}_3^{2-} + \text{Ca}^{2+}$	-8.480
$\text{CO}_3^{2-} + \text{H}^+ = \text{HCO}_3^-$	10.327
$\text{CO}_3^{2-} + 2.0\text{H}^+ = \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	16.681
$\text{Ca}^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \text{CaOH}^+ + \text{H}^+$	-12.598
$\text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} + \text{H}^+ = \text{CaHCO}_3^+$	11.435
$\text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \text{CaCO}_3$	3.225
$\text{H}_2\text{O} = \text{OH}^- + 1.0\text{H}^+$	-14.000

③ 初期条件

鋇物やイオン交換サイト、空隙水の初期濃度を表 2-36 から表 2-38 に示す。本解析では初期鋇物としてモンモリロナイト、カルセドニ、カルサイトを考慮し、二次鋇物については考慮しないものとした。

表 2-36 解析ケース 2 ベントナイトの初期鉱物組成

初期鉱物	表記	鉱物濃度 [mol/L_water]
モンモリロナイト	Na-Mont	3.8028
カルセドニ	CHALCEDO	18.3878
カルサイト	CALCITE	0.7553

表 2-37 解析ケース 2 初期イオン交換サイト量

陽イオン交換サイト	サイト量 [mol/L_water]
NaZ	1.2439
CaZ ₂	0.3366
KZ	0.0172
MgZ ₂	0.0314

表 2-38 解析ケース 2 空隙水の初期濃度

	NaCl	CaCl ₂
Na	4.40E-01	1.40E-04
K	1.30E-06	3.00E-05
Ca	7.20E-07	1.40E-01
Mg	2.20E-06	2.20E-06
Al	2.60E-06	5.60E-07
S	7.90E-06	1.40E-05
Cl	4.60E-01	3.20E-01
Si	1.10E-07	5.30E-07

(2) 二次鉱物の析出

本節で行う解析ケースを表 2-39 に示す。ここでは、検証内容を変更した 3 ケースを対象とした解析を行う。

表 2-39 解析ケース

解析ケース	解析次元	考慮する現象	初期固相	液相	検証内容
解析ケース 1	0 次元	化学反応	ゲーサイト	純水	液相のイオン濃度 ゲーサイトの溶解量
解析ケース 2	0 次元	化学反応	ゲーサイト	純水	液相のイオン濃度 ゲーサイトの析出量
解析ケース 3	0 次元	化学反応	ベントナイト	純水	液相のイオン濃度 ベントナイトの溶解量 二次鉱物の析出量

1) 解析ケース 1

単純な系に対する鉱物の溶解量を PHREEQC の結果と比較することで、鉱物溶解における COMSOL の計算手法の妥当性を確かめることを目的とする。また、解析ケース 2 と合わせて鉱物の双方向の反応（溶解・析出）を適切に表現できる手法であることを確かめる。設定した反応式、初期条件を以下に示す。

① 解析モデル

純水にゲーサイトを 0.001 [mol/L] 添加して反応させた際のゲーサイトの溶解量、液相イオン濃度を計算する。解析次元は 0 次元である。

② 反応式

本解析で考慮する化学反応式を表 2-40 に示す。ここで K は平衡定数を表す。

表 2-40 解析ケース 1 化学反応式と平衡定数

反応式	logK
$\text{FeOOH} + 3\text{H}^+ = \text{Fe}^{3+} + 2\text{H}_2\text{O}$	0.491
$\text{Fe}^{3+} + \text{H}_2\text{O} = \text{FeOH}^{2+} + \text{H}^+$	-2.187
$\text{Fe}^{3+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{Fe}(\text{OH})_2^+ + 2\text{H}^+$	-4.594
$\text{Fe}^{3+} + 3\text{H}_2\text{O} = \text{Fe}(\text{OH})_3 + 3\text{H}^+$	-12.56
$\text{Fe}^{3+} + 4\text{H}_2\text{O} = \text{Fe}(\text{OH})_4^- + 4\text{H}^+$	-21.588
$2\text{Fe}^{3+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{Fe}_2(\text{OH})_2^{4+} + 2\text{H}^+$	-2.854
$3\text{Fe}^{3+} + 4\text{H}_2\text{O} = \text{Fe}_3(\text{OH})_4^{5+} + 4\text{H}^+$	-6.288

③ 初期条件

鉱物と空隙水の初期濃度を表 2-41 と表 2-42 に示す。

表 2-41 鉱物の初期濃度

鉱物		濃度[mol/L_water]
	表記	
ゲーサイト	goethite	0.001

表 2-42 空隙水の初期元素濃度

	組成[mol/L]
	純水 (Purewater)
温度	25°C
pH	7.0
Fe	—

2) 解析ケース 2

本解析は、単純な系に対する鉱物の析出量を PHREEQC の結果と比較することで、鉱物の析出における COMSOL の計算手法の妥当性を確かめることを目的とする。また、解析ケース 1 と合わせて鉱物の双方向の反応（溶解・析出）を適切に表現できる手法であることを確かめる。設定した反応式、初期条件を以下に示す。

① 解析モデル

pH7.0 の溶液に Fe(III)が溶解していた場合のゲーサイトの析出量、液相のイオン濃度を計算する。解析次元は 0 次元である。

② 反応式

本解析で考慮する化学反応式は、解析ケース 1 と同じである。

③ 初期条件

鉱物と空隙水の初期濃度を表 2-43 と表 2-44 に示す。

表 2-43 鉱物の初期濃度

鉱物		濃度[mol/L_water]
	表記	
ゲーサイト	goethite	—

表 2-44 空隙水の初期元素濃度

	組成 [mol/L]
	純水 (Pure water)
温度	25°C
pH	7.0
Fe	0.001

3) 解析ケース 3

本解析は、ベントナイトの溶解量と、関連する二次鉱物の析出量を PHREEQC の結果と比較することで、COMSOL における鉱物の計算手法がベントナイトに対して適応可能であることを確かめることを目的とする。人工バリアの緩衝材としても使用されるベントナイトは、構成する元素の種類が多く、ベントナイトの溶解に伴う溶液平衡に関連する化学反応が多い。そのため、COMSOL の計算手法がベントナイトに対して適応可能であることを確かめ、ベントナイトを含む人工バリア相当の解析の見通しを得る。設定した反応式、初期条件を以下に示す。

① 解析モデル

ベントナイトに純水が流入してきた場合のベントナイトの溶解量、二次鉱物の析出量、液相のイオン濃度を計算する。溶液が平衡に達するのに十分な量のベントナイトを初期値に設定する。解析次元は0次元である。

② 反応式

本解析で考慮する化学反応式を表 2-45 に示す。ここで、K は平衡定数を表す。

表 2-45 解析ケース 3 化学反応式と平衡定数

反応式	logK
$MgAl_5Si_{12}O_{30}(OH)_6 + 18H^+ + 12H_2O = Mg^{2+} + 5Al^{3+} + 12H_4SiO_4 + Na^+$	7.440
$Na^+ + CO_3^{2-} = NaCO_3^-$	1.268
$Na^+ + H^+ + CO_3^{2-} = NaCO_3$	10.080
$Al^{3+} + H_2O = AlOH^{2+} + H^+$	-4.990
$Al^{3+} + 2H_2O = Al(OH)_2^+ + 2H^+$	-10.100
$Al^{3+} + 3H_2O = Al(OH)_3^+ + 3H^+$	-16.000
$Al^{3+} + 4H_2O = Al(OH)_4^- + 4H^+$	-23.000
$H_4SiO_4 = H_4SiO_4^{2-} + 2H^+$	-23.141
$H_4SiO_4 = H_3SiO_4^- + H^+$	-9.810
$SiO_2 + 2H_2O = H_4SiO_4$	-3.490
$K^+ + SO_4^{2-} = KSO_4^-$	-0.851
$Mg^{2+} + CO_3^{2-} = MgCO_3$	2.981
$Mg^{2+} + H^+ + CO_3^{2-} = MgHCO_3^+$	11.397
$Mg^{2+} + H_2O = MgOH^+ + H^+$	-11.794
$CaCO_3 = CO_3^{2-} + Ca^{2+}$	-8.480
$CO_3^{2-} + H^+ = HCO_3^-$	10.327
$CO_3^{2-} + 2H^+ = CO_2 + H_2O$	16.681
$Ca^{2+} + H_2O = CaOH^+ + H^+$	-12.598
$Ca^{2+} + CO_3^{2-} + H^+ = CaHCO_3^+$	11.435
$Ca^{2+} + CO_3^{2-} = CaCO_3$	3.225
$H_2O = OH^- + H^+$	-14.000

③ 初期条件

鉱物と空隙水の初期濃度を表 2-46 と表 2-47 に示す。

表 2-46 鉱物の初期濃度

鉱物		濃度(mol/L_water)
	表記	
モンモリロナイト	Na-Mont	3.56
カルサイト	CALCITE	0.707
カルセドニ	CHALCEDO	17.2
ローモンタイト	LAUMONTI	—
セピオライト	SEPIOLIT	—

表 2-47 空隙水の初期元素濃度

	組成[mol/L]
	純水 (Pure water)
温度	25°C
pH	7.0
Na	—
Ca	—
K	—
Mg	—
Al	—
C	—
S	—
Cl	—
Si	—

(3) モンモリロナイトの溶解

1) COMSOL を用いた解析

COMSOL を用いて、単純な系におけるモンモリロナイトの溶解反応を解析する。ここでは、溶液中にモンモリロナイトが存在すると想定して、後述するモンモリロナイトの溶解反応速度式を導入し、本溶解反応速度式に従った溶解反応を対象とした解析を実施する。設定したパラメータ、反応式、初期条件、境界条件を以下に示す。

① 解析モデル

解析モデルの概要を図 2-61 に示す。溶液中に固相のモンモリロナイトが存在し、溶解反応速度式に従って溶解することを想定するが、拡散や移流などは考慮せず、0 次元の系として設定した。COMSOL では図 2-62 に示す 1 次元の解析モデルを用いたが、拡散を考慮しないことで、0 次元相当の解析を行った。

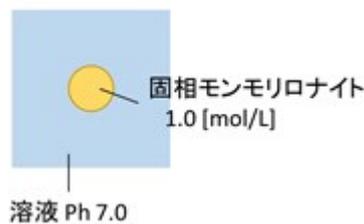


図 2-61 解析モデルの概要

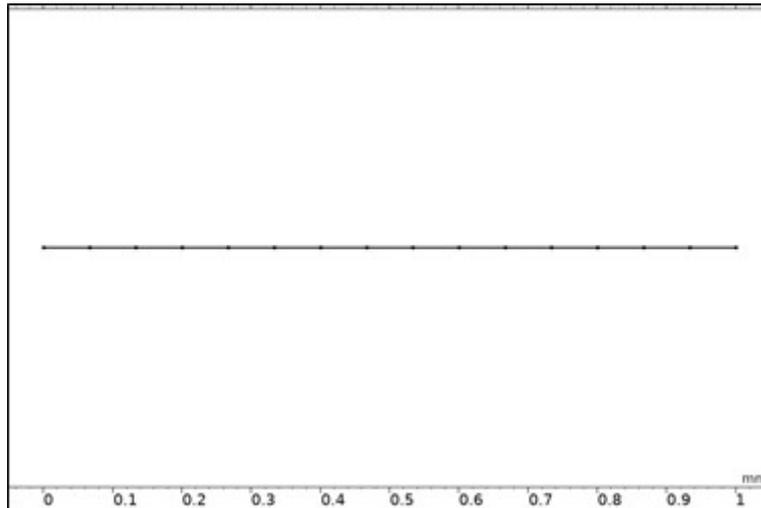


図 2-62 COMSOL 解析モデル

② パラメータ

解析ケース 1 で用いたパラメータを表 2-48 に示す。0 次元の系を想定するため、拡散は考慮しない。本パラメータの多くは、モンモリロナイトの溶解反応速度式において使用される。

表 2-48 パラメータ

変数	意味	値	単位
D_{eff}	拡散係数	0	m^2/s
R	ガス定数	0.0083145	$\text{kJ}/(\text{K} \cdot \text{mol})$
T	絶対温度	293.15	K
K	モンモリロナイトの平衡定数	$10^{7.44}$	-
A_{min}	反応性表面の面積	7.0	m^2/g
M	モンモリロナイトの分子量	367	g/mol

③ 反応式

本解析で導入したモンモリロナイトの溶解反応速度式を以下に示す。本溶解反応速度式は、第 2 次 TRU レポートで使用された式を用いた。

$$\text{Rate} = \left(4.74 \cdot 10^{-6} \cdot e^{\frac{-39.57}{RT}} \cdot \frac{177 \cdot e^{\frac{20.37}{RT}} \cdot a_{\text{OH}^-}}{1 + 177 \cdot e^{\frac{20.37}{RT}} \cdot a_{\text{OH}^-}} + 1.70 \cdot e^{\frac{-69.67}{RT}} \cdot \frac{0.0297 \cdot e^{\frac{23.53}{RT}} \cdot a_{\text{OH}^-}}{1 + 0.0297 \cdot e^{\frac{23.53}{RT}} \cdot a_{\text{OH}^-}} \right) \cdot A_{\text{reac}} \cdot \{1 - \exp(-6 \cdot 10^{-10} \cdot (2 \cdot \Delta Gr / RT)^6)\}$$

$$\Delta Gr = -RT \ln Q/K$$

$$A_{\text{reac}} = A_{\text{min}} \cdot M \cdot C_{\text{mont}}$$

ここで、Rate はモンモリロナイト溶解速度 [$\text{mol}/(\text{L} \cdot \text{s})$]、 a_{OH^-} は水酸化物イオンの活量、 ΔGr は

反応のギブス自由エネルギー変化[kJ/mol]、 Q はモンモリロナイト溶解反応のイオン積[mol/L]、 A_{react} は鉱物の反応表面積[m²]、 C_{mont} はモンモリロナイトの濃度[mol/L]である。

続いて、本解析で考慮した化学反応式を以下に示す。本解析では、水の電離とモンモリロナイトの溶解反応のみを考慮した。モンモリロナイトの溶解反応は不可逆反応であり、溶解速度は前述の式で求めた **Rate** の値を用いた。

表 2-49 化学反応式（平衡反応）と平衡定数

反応式	logK
$\text{H}_2\text{O} = \text{OH}^- + \text{H}^+$	-14.0

表 2-50 化学反応式（不可逆反応）

反応式
$\text{NaMgAl}_5\text{Si}_{12}\text{O}_{30}(\text{OH})_6 + 18\text{H}^+ + 12\text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{Mg}^{2+} + 5\text{Al}^{3+} + 12\text{H}_4\text{SiO}_4 + \text{Na}^+$

④ 初期条件

鉱物及び溶液の初期濃度を表 2-51 と表 2-52 に示す。ここでは、モンモリロナイトの初期濃度を 0.2[mol/L] ずつ変化させ、対応する溶解反応速度を確認するものとした。

表 2-51 鉱物の初期濃度

鉱物	濃度[mol/L]
モンモリロナイト	0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0

表 2-52 溶液の初期濃度

イオン種	濃度[mol/L]
H^+	1×10^{-7}
OH^-	1×10^{-7}
Na^+	1×10^{-2}
Ca^+	1×10^{-2}
K^+	1×10^{-2}
Mg^{2+}	1×10^{-2}
Al^{3+}	1×10^{-2}
H_4SiO_4	1×10^{-2}

2) Excel を用いた解析

Excel を用いてモンモリロナイトの溶解反応速度 $\text{Rate}[\text{mol}/(\text{L} \cdot \text{s})]$ を計算した。ここでは時間変化は考慮せず、初期条件における溶解反応速度を計算した。計算の条件は 1) と同様である。

(4) 平成 27 年度試験（文献）を対象とした解析結果の比較

本節で行う解析ケースを表 2-53 に示す。ここでは、通水液を変更した 2 つのケースを対象とする。

表 2-53 解析ケース

解析ケース	解析次元	考慮する現象	初期固相	間隙水	検証内容
解析ケース 1	1 次元	化学反応 物質移行	クニピア F	NaCl	モンモリロナイトの溶解
解析ケース 2	1 次元	化学反応 物質移行	クニピア F	NaOH	モンモリロナイトの溶解

1) 解析ケース 1

解析ケース 1 の解析モデルの概要を図 2-63 に示す。ここでは物質移行は拡散のみを想定した。



図 2-63 解析モデルの概要

また、モンモリロナイトの溶解速度については、第 2 次 TRU レポートで使用された以下の式に従うものとした。

$$\text{Rate} = \left(4.74 \cdot 10^{-6} \cdot e^{-\frac{39.57}{RT}} \cdot \frac{177 \cdot e^{\frac{20.37}{RT}} \cdot a_{OH^-}}{1 + 177 \cdot e^{\frac{20.37}{RT}} \cdot a_{OH^-}} + 1.70 \cdot e^{-\frac{69.67}{RT}} \cdot \frac{0.0297 \cdot e^{\frac{23.53}{RT}} \cdot a_{OH^-}}{1 + 0.0297 \cdot e^{\frac{23.53}{RT}} \cdot a_{OH^-}} \right) \cdot A_{min} \cdot \{1 - \exp(-6 \cdot 10^{-10} \cdot (2 \cdot \Delta Gr / RT)^6)\}$$

- Rate : モンモリロナイト溶解速度 [mol/s]
- A_{min} : 鉱物の反応表面積 [m²]
- R : 気体定数 [kJ/K mol]
- T : 絶対温度 [K]
- a_{OH^-} : 水酸化物イオンの活量
- ΔGr : 反応のギブス自由エネルギー変化 [kJ/mol]

$$A_{min}(\rho_d) = -0.6 \ln(\rho_d) + 0.2$$

- A_{min} : 実効露出端面積 [m²/g]
- ρ_d : 乾燥密度 [Mg/m³]

解析に必要とされるパラメータ、反応式、初期条件を以下に示す。

① パラメータ

本解析で必要とされるパラメータを表 2-54 に示す。

表 2-54 各種パラメータ

項目	値
試料長さ	5 [mm]
初期乾燥密度	1.6 Mg/m ³
拡散係数	1.2×10 ⁻¹⁰ [m ² /s]
鉱物の反応表面積	7 [m ² /g]

② 反応式

本解析で考慮する化学反応式を表 2-55 に示す。ここで、K は平衡定数を表す。

表 2-55 化学反応式と平衡定数

反応式	logK
$\text{NaMgAl}_5\text{Si}_{12}\text{O}_{30}(\text{OH})_6 + 18\text{H}^+ + 12\text{H}_2\text{O} = \text{Mg}^{2+} + 5\text{Al}^{3+} + 12\text{H}_4\text{SiO}_4 + \text{Na}^+$	7.440
$\text{Na}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{NaCO}_3^-$	1.268
$\text{Na}^+ + \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{NaHCO}_3$	10.080
$\text{Al}^{3+} + \text{H}_2\text{O} = \text{AlOH}^{2+} + 1.0\text{H}^+$	-4.990
$\text{Al}^{3+} + 2.0\text{H}_2\text{O} = \text{Al}(\text{OH})_2^+ + 2.0\text{H}^+$	-10.100
$\text{Al}^{3+} + 3.0\text{H}_2\text{O} = \text{Al}(\text{OH})_3 + 3.0\text{H}^+$	-16.000
$\text{Al}^{3+} + 4.0\text{H}_2\text{O} = \text{Al}(\text{OH})_4^- + 4.0\text{H}^+$	-23.000
$\text{H}_4\text{SiO}_4 = \text{H}_2\text{SiO}_4^{2-} + 2\text{H}^+$	-23.141
$\text{H}_4\text{SiO}_4 = \text{H}_3\text{SiO}_4^- + \text{H}^+$	-9.810
$\text{SiO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} = \text{H}_4\text{SiO}_4$	-3.490
$\text{K}^+ + \text{SO}_4^{2-} = \text{KSO}_4^-$	-0.851
$\text{Mg}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \text{MgCO}_3$	2.981
$\text{Mg}^{2+} + \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{MgHCO}_3^+$	11.397
$\text{Mg}^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \text{MgOH}^+ + \text{H}^+$	-11.794
$\text{CaCO}_3 = \text{CO}_3^{2-} + \text{Ca}^{2+}$	-8.480
$\text{CO}_3^{2-} + \text{H}^+ = \text{HCO}_3^-$	10.327
$\text{CO}_3^{2-} + 2.0\text{H}^+ = \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	16.681
$\text{Ca}^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \text{CaOH}^+ + \text{H}^+$	-12.598
$\text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} + \text{H}^+ = \text{CaHCO}_3^+$	11.435
$\text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \text{CaCO}_3$	3.225
$\text{H}_2\text{O} = \text{OH}^- + 1.0\text{H}^+$	-14.000
$\text{Si}_2\text{NaAlH}_2\text{O}_7 + \text{H}_2\text{O} + 4\text{H}^+ = 2\text{H}_4\text{SiO}_4 + \text{Na}^+ + \text{Al}^{3+}$	6.95
$\text{CSH}_{10} + 2\text{H}^+ = \text{Ca}^{2+} + \text{H}_4\text{SiO}_4 + 0.0833\text{H}_2\text{O}$	14.515
$\text{Al}_2\text{Mg}_4\text{H}_{20}\text{O}_{17} + 14\text{H}^+ = 17\text{H}_2\text{O} + 2\text{Al}^{3+} + 4\text{Mg}^{2+}$	73.78

③ 初期条件

鉱物及びイオン交換サイト、通水前の初期濃度、通水液の初期濃度を表 2-56 から表 2-58 に示す。

表 2-56 ベントナイトの初期鉱物組成

初期鉱物	表記	鉱物濃度 [mol/L_water]
モンモリロナイト	Na-Mont	1.2676
カルセドニ	CHALCEDO	0.077
カルサイト	CALCITE	0.7553

表 2-57 初期イオン交換サイト量

陽イオン交換サイト	サイト量 [mol/L_water]
NaZ	1.2439
CaZ ₂	0.3366
KZ	0.0172
MgZ ₂	0.0314

表 2-58 解析ケース 1 通水液の初期濃度

	NaCl
Na	1.00E-01
K	1.30E-06
Ca	7.20E-07
Mg	2.20E-06
Al	2.60E-06
S	7.90E-06
Cl	4.60E-01
Si	1.10E-07

2) 解析ケース 2

パラメータや反応式については、1)と同様である。通水液として設定した 0.1M の NaOH 水溶液の初期濃度[mol/L]について、表 2-59 に示す。

表 2-59 解析ケース 2 通水液の初期濃度

	NaOH
H	1.0E-11
OH	1.0E-3
Na	1.0E-3
K	0
Ca	0
Mg	0
Al	0
S	0
Cl	0
Si	0

(5) 人工バリア相当の解析結果との比較

本節で行う解析ケースを表 2-60 に示す。まず、拡散を考慮しない仮想的な 0 次元場でモデルの計算結果を確認し、ベントナイト層、モルタル層それぞれで初期間隙水と鉱物の平衡が正しく計算されていることを確認する。次に、溶液の混合（拡散）を考慮した場において、析出する二次鉱物の種類を減らすなど解析条件を単純化し、鉱物の溶解速度を、設定した pH に近づくと遅くなるように上限を設けた解析を行う。これは、モルタル層の鉱物が溶解すると pH が高くなり、鉱物境界で濃度勾配が大きくなることで計算が発散することを防ぐためである。どの程度の鉱物の溶解速度であれば安定した解析が実施できるかを調査する。最後に、安定した解析が可能となる条件において、可能な限り現実に即した条件を計算し、HMC 連成解析で使用する条件とする。

表 2-60 解析ケース

解析ケース	解析次元	考慮する現象		
		鉱物の溶解	二次鉱物	拡散
解析ケース 1	0 次元	溶解速度を制限しない	考慮しない	考慮しない
解析ケース 2-1	1 次元	溶解速度を制限 pH 9 を上限	一部を考慮	拡散係数一定値
解析ケース 2-2	1 次元	溶解速度を制限 pH 10 を上限	一部を考慮	拡散係数一定値
解析ケース 2-3	1 次元	溶解速度を制限 pH 11 を上限	一部を考慮	拡散係数一定値

1) 解析ケース 1

解析ケース 1 では、拡散を考慮しない仮想的な 0 次元場で、ベントナイト層、モルタル層それぞれで初期間隙水と鉱物の平衡を計算した。設定したパラメータ、反応式、初期条件を以下に示す。

① 解析モデル

解析モデルの概要を図 2-64 に示す。セメント系材料と緩衝材の接点を含む人工バリア内部の構造を簡略化した一次元体系である。緩衝材の素材はベントナイトであり、人工バリア外部に面している。セメント系材料はモルタルであり、廃棄体側に位置する。拡散は考慮しないため、物質移行のない仮想的な 0 次元場である。境界条件は対称境界であり境界での物質移行はない。

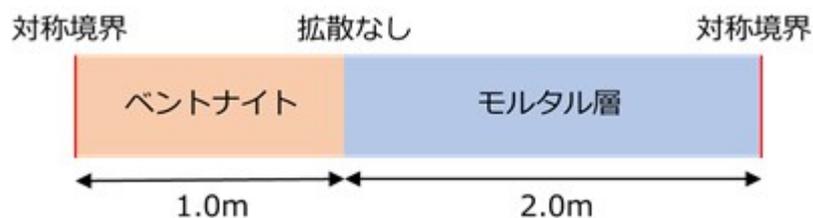


図 2-64 解析モデルの概要

② パラメータ

本解析で必要とされるパラメータを表 2-61 に示す。

表 2-61 パラメータ

変数	意味	値	単位
D_{eff}	拡散係数	0	m^2/s
R	ガス定数	0.0083145	$\text{kJ}/(\text{K} \cdot \text{mol})$
T	絶対温度	293.15	K

③ 反応式

本解析で考慮する化学反応式を以下に示す。ここで、 K は平衡定数を表す。

表 2-62 化学反応式（平衡反応）と平衡定数

反応式	logK
$\text{Na}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{NaCO}_3^-$	1.268
$\text{Na}^+ + \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{NaCO}_3$	10.080
$\text{Al}^{3+} + \text{H}_2\text{O} = \text{AlOH}^{2+} + \text{H}^+$	-4.990
$\text{Al}^{3+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{Al(OH)}_2^+ + 2\text{H}^+$	-10.100
$\text{Al}^{3+} + 3\text{H}_2\text{O} = \text{Al(OH)}_3 + 3\text{H}^+$	-16.000
$\text{Al}^{3+} + 4\text{H}_2\text{O} = \text{Al(OH)}_4^- + 4\text{H}^+$	-23.000
$\text{H}_4\text{SiO}_4 = \text{H}_4\text{SiO}_4^{2-} + 2\text{H}^+$	-23.141
$\text{H}_4\text{SiO}_4 = \text{H}_3\text{SiO}_4^- + \text{H}^+$	-9.810
$\text{K}^+ + \text{SO}_4^{2-} = \text{KSO}_4^-$	-0.851
$\text{Mg}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \text{MgCO}_3$	2.981
$\text{Mg}^{2+} + \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{MgHCO}_3^+$	11.397
$\text{Mg}^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \text{MgOH}^+ + \text{H}^+$	-11.794
$\text{CO}_3^{2-} + \text{H}^+ = \text{HCO}_3^-$	10.327
$\text{CO}_3^{2-} + 2\text{H}^+ = \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	16.681
$\text{Ca}^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \text{CaOH}^+ + \text{H}^+$	-12.598
$\text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} + \text{H}^+ = \text{CaHCO}_3^+$	11.435
$\text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \text{CaCO}_3$	3.225
$\text{H}_2\text{O} = \text{OH}^- + \text{H}^+$	-14.000
$\text{SO}_4^{2-} + \text{H}^+ = \text{HSO}_4^-$	1.982
$\text{Ca}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} = \text{CaSO}_4$	2.309
$\text{Mg}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} = \text{MgSO}_4$	2.225
$\text{Na}^+ + \text{SO}_4^{2-} = \text{NaSO}_4^-$	0.700
$\text{K}^+ + \text{SO}_4^{2-} = \text{KSO}_4^-$	0.850
$\text{Al}^{3+} + \text{SO}_4^{2-} = \text{AlSO}_4^+$	3.020
$\text{Al}^{3+} + 2\text{SO}_4^{2-} = \text{Al(SO}_4)_2^-$	4.920

表 2-63 化学反応式（不可逆反応）

反応式	logK
$\text{NaMgAl}_5\text{Si}_{12}\text{O}_{30}(\text{OH})_6 + 18\text{H}^+ + 12\text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{Mg}^{2+} + 5\text{Al}^{3+} + 12\text{H}_4\text{SiO}_4 + \text{Na}^+$	7.440
$\text{CaCO}_3 \Rightarrow \text{CO}_3^{2-} + \text{Ca}^{2+}$	-8.480
$\text{SiO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{H}_4\text{SiO}_4$	-3.490
$\text{CaH}_2\text{O}_2 + 2\text{H}^+ \Rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + \text{Ca}^{2+}$	22.71
$\text{Al}_2\text{Ca}_6\text{S}_3\text{H}_{64}\text{O}_{50} + 12\text{H}^+ \Rightarrow 38\text{H}_2\text{O} + 2\text{Al}^{3+} + 6\text{Ca}^{2+} + 3\text{SO}_4^{2-}$	58.25
$\text{MgH}_2\text{O}_2 + 2\text{H}^+ \Rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + \text{Mg}^{2+}$	16.3
$\text{CaO}(\text{SiO}_2)_{0.556} + 1.047\text{H}_2\text{O} + 2\text{H}^+ \Rightarrow \text{Ca}^{2+} + 0.556\text{H}_4\text{SiO}_4 + 0.935\text{H}_2\text{O}$	17.597

モンモリロナイトの溶解速度については、第 2 次 TRU レポートで使用された以下の式に従うものとした。ただし、本解析では pH の最大値を制限していることからモンモリロナイトがほとんど溶解しないことが考えられる。モデルの妥当性を検討する際に、モンモリロナイトの溶解量

がある程度大きい場合の挙動を確認する必要があるため、ここでは ΔGr に実際よりも大きな値を与え、モンモリロナイトの溶解速度を速くした。

$$\text{Rate} = \left(4.74 \cdot 10^{-6} \cdot e^{\frac{-39.57}{RT}} \cdot \frac{177 \cdot e^{\frac{20.37}{RT}} \cdot a_{OH^-}}{1 + 177 \cdot e^{\frac{20.37}{RT}} \cdot a_{OH^-}} + 1.70 \cdot e^{\frac{-69.67}{RT}} \cdot \frac{0.0297 \cdot e^{\frac{23.53}{RT}} \cdot a_{OH^-}}{1 + 0.0297 \cdot e^{\frac{23.53}{RT}} \cdot a_{OH^-}} \right) \cdot A_{min} \cdot \{1 - \exp(-6 \cdot 10^{-10} \cdot (2 \cdot \Delta Gr / RT)^6)\}$$

モンモリロナイトを以外の鉱物の溶解速度は、参考文献「平成 27 年度地層処分技術調査等事業 処分システム評価確証技術開発 報告書」を参考に、溶解度が 1 に近づくと溶解速度が 0 に近づくような以下の式に従うものとした。

$$r = A \cdot k \cdot (1 - 10^{\ln(\frac{Q}{\bar{K}})})$$

ここで、 r は鉱物の溶解速度[mol/(L・s)]、 Q は鉱物の溶解反応のイオン積、 A は鉱物の反応表面積[m²]、 k は鉱物の溶解速度定数[mol/(L・m²・s)]である。

④ 初期条件

鉱物の初期濃度を表 2-64 に示す。間隙水の初期濃度は表 2-65 に示した降水系高 pH 型地下水である。

表 2-64 初期鉱物組成

初期鉱物	鉱物濃度 [mol/L]	
	ベントナイト系材料	モルタル層
モンモリロナイト	3.8028	—
カルセドニ	18.3878	—
カルサイト	0.7553	—
ポルトランドライト	—	9.98
エトリンガイト	—	0.212
ブルーサイト	—	0.946
C-S-H ゲル	—	16.4

表 2-65 解析に用いた地下水の組成

	組成 [mol/L]
	降水系高 pH 型地下水
pH	8.5
Na	3.4E-3
Ca	1.1E-4
K	6.2E-5
Mg	5.0E-5
Al	3.4E-7
C	3.5E-3
S	1.1E-4
Cl	1.5E-5
Si	3.4E-4

2) 解析ケース 2-1、2-2、2-3

解析ケース 2 では、一次元拡散と一部の二次鉱物の析出を考慮した場において、鉱物の溶解速度に制限をかけた解析を行う。これは、鉱物の溶解速度が解析の安定性に大きく影響することから、どの程度の鉱物の溶解速度であれば安定して解析が実施可能であるかについて調査するためである。本解析で設定したパラメータ、反応式、初期条件、時間設定を以下に示す。

① 解析モデル

解析モデルの概要を図 2-65 に示す。セメント系材料と緩衝材の接点を含む人工バリア内部の構造を簡略化した一次元体系である。緩衝材の素材はベントナイトであり、人工バリア外部に面している。セメント系材料はモルタルであり、廃棄体側に位置する。物質移行は拡散のみを考慮する。ベントナイト側の境界条件は地下水濃度境界、モルタル層側の境界条件は対称境界とする。

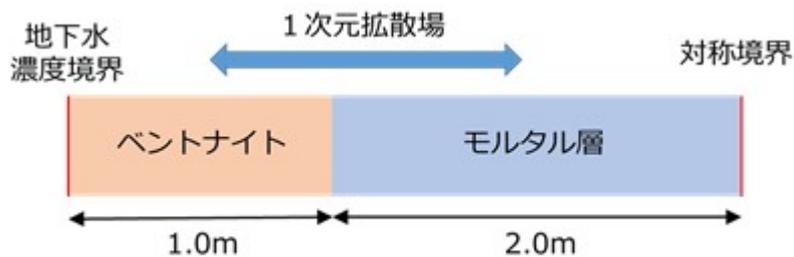


図 2-65 解析モデルの概要

② パラメータ

本解析で必要とされるパラメータを表 2-66 に示す。

表 2-66 パラメータ

変数	意味	値	単位
R	ガス定数	0.0083145	kJ/(K・mol)
T	絶対温度	293.15	K

③ 反応式

本解析で考慮する化学反応式を以下に示す。ここで、 K は平衡定数を表す。

表 2-67 化学反応式（平衡反応）と平衡定数

反応式	logK
$\text{Na}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{NaCO}_3^-$	1.268
$\text{Na}^+ + \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{NaCO}_3$	10.080
$\text{Al}^{3+} + \text{H}_2\text{O} = \text{AlOH}^{2+} + \text{H}^+$	-4.990
$\text{Al}^{3+} + 2\text{H}_2\text{O} = \text{Al(OH)}_2^+ + 2\text{H}^+$	-10.100
$\text{Al}^{3+} + 3\text{H}_2\text{O} = \text{Al(OH)}_3 + 3\text{H}^+$	-16.000
$\text{Al}^{3+} + 4\text{H}_2\text{O} = \text{Al(OH)}_4^- + 4\text{H}^+$	-23.000
$\text{H}_4\text{SiO}_4 = \text{H}_4\text{SiO}_4^{2-} + 2\text{H}^+$	-23.141
$\text{H}_4\text{SiO}_4 = \text{H}_3\text{SiO}_4^- + \text{H}^+$	-9.810
$\text{SiO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} = \text{H}_4\text{SiO}_4$	-3.490
$\text{K}^+ + \text{SO}_4^{2-} = \text{KSO}_4^-$	-0.851
$\text{Mg}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \text{MgCO}_3$	2.981
$\text{Mg}^{2+} + \text{H}^+ + \text{CO}_3^{2-} = \text{MgHCO}_3^+$	11.397
$\text{Mg}^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \text{MgOH}^+ + \text{H}^+$	-11.794
$\text{CaCO}_3 = \text{CO}_3^{2-} + \text{Ca}^{2+}$	-8.480
$\text{CO}_3^{2-} + \text{H}^+ = \text{HCO}_3^-$	10.327
$\text{CO}_3^{2-} + 2\text{H}^+ = \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	16.681
$\text{Ca}^{2+} + \text{H}_2\text{O} = \text{CaOH}^+ + \text{H}^+$	-12.598
$\text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} + \text{H}^+ = \text{CaHCO}_3^+$	11.435
$\text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} = \text{CaCO}_3$	3.225
$\text{H}_2\text{O} = \text{OH}^- + \text{H}^+$	-14.000
$\text{SO}_4^{2-} + \text{H}^+ = \text{HSO}_4^-$	1.982
$\text{Ca}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} = \text{CaSO}_4$	2.309
$\text{Mg}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} = \text{MgSO}_4$	2.225
$\text{Na}^+ + \text{SO}_4^{2-} = \text{NaSO}_4^-$	0.700
$\text{K}^+ + \text{SO}_4^{2-} = \text{KSO}_4^-$	0.850
$\text{Al}^{3+} + \text{SO}_4^{2-} = \text{AlSO}_4^+$	3.020
$\text{Al}^{3+} + 2\text{SO}_4^{2-} = \text{Al(SO}_4)_2^-$	4.920

表 2-68 化学反応式 (不可逆反応)

反応式	logK
$\text{NaMgAl}_5\text{Si}_{12}\text{O}_{30}(\text{OH})_6 + 18\text{H}^+ + 12\text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{Mg}^{2+} + 5\text{Al}^{3+} + 12\text{H}_4\text{SiO}_4 + \text{Na}^+$	7.440
$\text{Ca}(\text{OH})_2 + 2\text{H}^+ \Rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + \text{Ca}^{2+}$	22.71
$\text{Al}_2\text{Ca}_6\text{S}_3\text{H}_{64}\text{O}_{50} + 12\text{H}^+ \Rightarrow 38\text{H}_2\text{O} + 2\text{Al}^{3+} + 6\text{Ca}^{2+} + 3\text{SO}_4^{2-}$	58.25
$\text{Mg}(\text{OH})_2 + 2\text{H}^+ \Rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + \text{Mg}^{2+}$	16.3
$\text{CaO}(\text{SiO}_2)_{0.556} + 1.047\text{H}_2\text{O} + 2\text{H}^+ \Rightarrow \text{Ca}^{2+} + 0.556\text{H}_4\text{SiO}_4 + 0.935\text{H}_2\text{O}$	17.597

解析モデルにおける鉱物内部に水の流れはなく、イオンは拡散により間隙内部を移動する。各材料の拡散係数は第二次 TRU レポートにおける次の式に従う。

モルタル層の拡散係数

$$D_e = D^* \varepsilon^{3.05}$$

ベントナイト系材料の拡散係数

$$D_e = 2.27 \times 10^{-9} \varepsilon^n$$

$$n = 2.02 f_b^{0.13} + 1$$

D^* は自由水中の拡散係数、 ε は間隙率、 f_b はベントナイト混合割合である。 ε は鉱物の溶解や析出、力学過程により変化する変数であり、 f_b は鉱物の溶解、析出により変化する変数である。 D^* は一定値である。拡散係数を一定値とした解析では、各部材における初期間隙率、初期ベントナイト混合割合をもとに求めた拡散係数を用いる。

解析に考慮した二次鉱物を表 2-69 に示す。

表 2-69 考慮した二次鉱物

二次鉱物
カルセドニ
カルサイト

鉱物の溶解速度は、モンモリロナイトの溶解速度 Rate と、その他の鉱物の溶解速度 r のそれぞれについて、pH の値により 0 から 1 の値をもつ変数を乗じたものを用いる。

$$\text{Rate}' = \text{Rate} \cdot \text{pH}_{\text{lim}}$$

$$r' = r \cdot \text{pH}_{\text{lim}}$$

ここで、 pH_{lim} は 0 から 1 の値をもつ、pH に依存する変数である。解析ケース 2-1 では、pH が 9 に近づくと pH_{lim} が 0 に近づき、解析ケース 2-2 では、pH が 10 に近づくと pH_{lim} が 0 に近づき、解析ケース 2-3 では、pH が 11 に近づくと pH_{lim} が 0 に近づき、pH が低いときに pH_{lim} は 1 に近い値を持つ。

④ 初期条件

鉱物の初期濃度を表 2-70 に示す。間隙水の初期濃度は、表 2-71 に示した降水系高 pH 型地下水である。間隙率の初期値を表 2-72 に示す。ベントナイト系材料のベントナイト混合割合の初

期値は 0.7 である。

表 2-70 初期鉱物組成

初期鉱物	鉱物濃度 [mol/L]	
	ベントナイト	モルタル層
モンモリロナイト	3.8028	—
カルセドニ	18.3878	—
カルサイト	0.7553	—
ポルトランダイト	—	9.98
エトリンガイト	—	0.212
ブルーサイト	—	0.946
C-S-H ゲル	—	16.4

表 2-71 解析に用いた地下水の組成

	組成[mol/L]
	降水系高 pH 型地下水
pH	8.5
Na	3.4E-3
Ca	1.1E-4
K	6.2E-5
Mg	5.0E-5
Al	3.4E-7
C	3.5E-3
S	1.1E-4
Cl	1.5E-5
Si	3.4E-4

表 2-72 初期間隙率

ベントナイト	モルタル層
0.4	0.19

2.3.4 力学解析手法の検討

人工バリアの長期変遷、とりわけ地下水の流れの変遷を予測するには、人工バリアを構成するベントナイト系緩衝材や地下水の力学的挙動を把握し、HMC 連成を考慮した解析を行うことが重要である。人工バリアにおいて、ベントナイト系緩衝材は他の部材と比べて複雑な力学的挙動を示すため、ベントナイト系緩衝材の挙動を表現できる構成則を構築する必要がある。平成 31 年度は、一般的な粘性土の構成則である修正カムクレイモデルをベースとしつつ、過年度までに得られているベントナイトの挙動に関する試験結果を反映させることで、ベントナイト系緩衝材の挙動を模擬する構成則を構成する検討を行った。

(1) 過年度の試験結果を反映した構成則の検討

粘土の構成則として最もよく知られているモデルの1つに修正カムクレイモデルがある。修正カムクレイモデルの降伏関数は以下の式で表される。

$$f = q^2 + M^2 p'^2 - M^2 p_c p'$$
$$p' = -\frac{1}{3} \text{trace}(\sigma')$$
$$q^2 = \frac{3}{2} \sum_{i,j=1}^3 s_{ij} s_{ij}$$
$$s_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{3} \text{trace}(\sigma') \delta_{ij} \quad i, j = 1, 2, 3$$
$$M = \frac{\lambda - \kappa}{D(1 + e_0)}$$

- p' : 平均有効応力
- q : せん断応力
- M : 限界応力比
- p_c : 圧密降伏応力
- λ : 圧縮指数
- κ : 膨潤指数
- e_0 : 先行間隙比

修正カムクレイモデルやオリジナルカムクレイモデルでは、粘性土に圧力を負荷あるいは除荷する際の粘性土の挙動について、間隙比と有効圧力の対数との間に線形関係を仮定している。

弾性状態 : $e = -\kappa \times \ln p' + \text{const.}$

塑性状態 : $e = -\lambda \times \ln p' + \text{const.}$

一方、ベントナイトを対象とした過年度までの検討によると、乾燥密度と有効圧力の対数との間に線形関係が認められる。

弾性状態 : $\rho_d = +C_\kappa \times \log_{10} p' + \text{const.} = C_\kappa \times \frac{1}{\ln 10} \ln p' + \text{const.}$

塑性状態 : $\rho_d = +C_\alpha \times \log_{10} p' + \bar{\rho}_d = C_\alpha \times \frac{1}{\ln 10} \ln p' + \bar{\rho}_d$

ここで、 $\bar{\rho}_d$ は $p'=1$ (単位は例えば[MPa]) のときの乾燥密度である。以降は、間隙比と有効圧力の対数との関係を e -logP 関係あるいは e -logP 曲線、乾燥密度と有効圧力の対数との関係を ρ_d -logP 曲線あるいは ρ_d -logP 曲線と呼ぶ。

今年度は、修正カムクレイモデルに対して、弾性状態においては過年度の検討結果を取り入れることとした。すなわち、乾燥密度と有効応力の対数が線形関係になるようにした。一方、塑性状態においては、修正カムクレイモデルの考え方をそのまま用いた。に3通りの考え方を示す。

今年度の具体的な処理について述べる。まず、間隙比と乾燥密度には次の関係が成り立つ。

$$\rho_d = \frac{\frac{m_s}{V_s}}{1 + \frac{V_v}{V_s}} = \frac{\frac{m_s}{V_s}}{1 + e} = \frac{\rho_s}{1 + e}$$

$$e = \frac{\rho_s}{\rho_d} - 1$$

この関係式から、塑性状態での e-logP 曲線の傾きλは、次式により C_α から変換する。

$$\lambda(p') = -\frac{de}{d \ln p'} = \frac{\rho_s \times C_\alpha \times \frac{1}{\ln 10}}{\left(C_\alpha \times \frac{1}{\ln 10} \ln p' + \bar{\rho}_d\right)^2} \rightarrow (1\text{MPa 付近}) \rightarrow \frac{\rho_s \times C_\alpha \times \frac{1}{\ln 10}}{\bar{\rho}_d^2}$$

弾性状態では、 $\rho_d - \log P$ で傾き一定とする。 C_κ を応力に依らない定数とし、 κ は **External Material** が呼ばれるごとに p' の値を反映して算出する。(有効圧力, 乾燥密度) = $(p', \rho_{d,r})$ の状態から除荷したとする。このとき、乾燥密度は応力の関数として

$$\rho_d = +C_\kappa \times \log_{10} \frac{p'}{p'_r} + \rho_{d,r} = C_\kappa \times \frac{1}{\ln 10} \times \ln \frac{p'}{p'_r} + \rho_{d,r}$$

で定まることになる。これより、間隙比は

$$e = \frac{\rho_s}{C_\kappa \times \frac{1}{\ln 10} \times \ln \frac{p'}{p'_r} + \rho_{d,r}} - 1$$

となるので、各応力 p' における e-logP 曲線の傾きは

$$\kappa(p') = -\frac{de}{d \ln p'} = \frac{\rho_s \times C_\kappa \times \frac{1}{\ln 10}}{\left(C_\kappa \times \frac{1}{\ln 10} \times \ln \frac{p'}{p'_r} + \rho_{d,r}\right)^2}$$

となる。

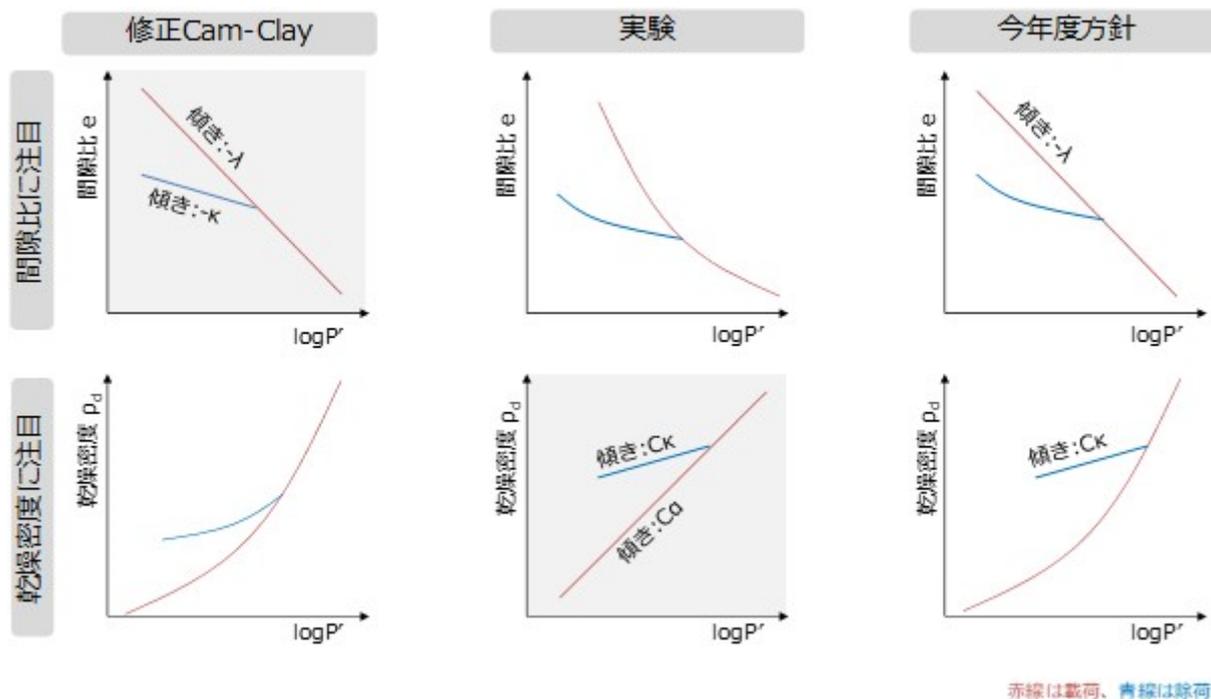


図 2-66 修正 Cam-Clay モデル、過年度の試験結果、平成 31 年度検討した構成則の性質

(2) COMSOL の動作確認

前述の考え方を External Material 機能を用いて実現した。本節では、作成した External Material の動作確認について述べる。動作確認条件を表 2-73 に示す。動作確認においては、有効応力 p' を 0.1[MPa] から 1[MPa] まで上昇させ、次いで 0.001[MPa] まで減少させ、再度 1[MPa] まで上昇させ、最後に 1.5[MPa] までさらに上昇させた。このような载荷及び除荷過程において、External Material を用いて COMSOL で算出される間隙比と、Microsoft Excel® を用いて算出される間隙比とを比較した。e-LogP 曲線の比較結果を図 2-67 に示す。COMSOL で算出した値は Microsoft Excel® で算出した値とおおむね一致しており、External Material 機能を用いることで COMSOL を用いて今年度検討した構成則を考慮した計算が可能であることを確認した。

表 2-73 動作確認条件

パラメータ	値
土粒子密度	2.8 [Mg/m ³]
C_α	0.36
C_κ	0.1
$p'=1\text{MPa}$ のときの乾燥密度	1.5 [Mg/m ³]
限界応力比 M	1.2

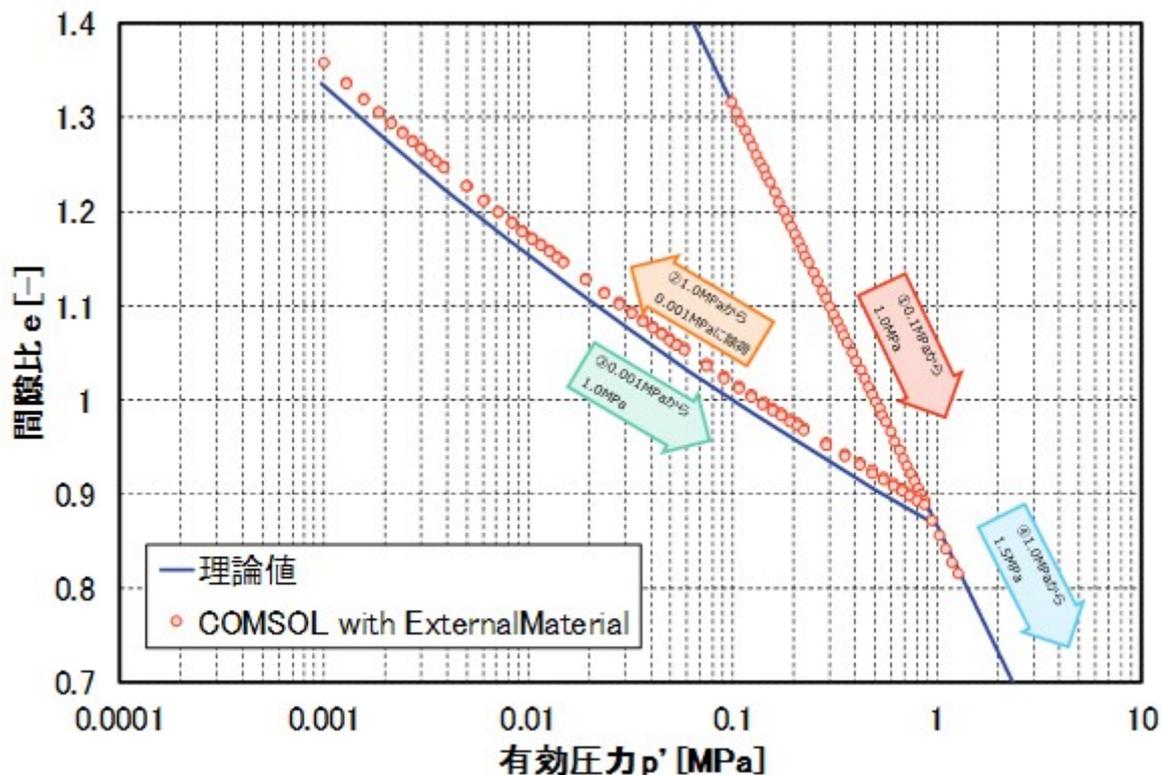


図 2-67 平成 31 年度変更した External Material を用いた圧密解析結果

(3) 構成則の変更による解析結果への影響

本節では、構成則に関する今年度の検討結果が解析結果に与える影響について考察する。今年度は修正カムクレイモデルについて、弾性状態の e - $\log P$ 曲線が曲線、すなわち e - $\log P$ 関係が非線形関係となるような構成則を検討した。この構成則と修正カムクレイモデルとの差を定量化するため、これら 2 つの構成則を用いて、圧密及び除荷を想定した解析を行った。

物性値等の解析条件は基本的には前節と同様である。ただし、本解析では 0.1MPa から 1.0MPa まで載荷し、1.0MPa から 0.001MPa まで除荷するのみであり、前節における再載荷は省略した。また、修正カムクレイモデルにおいては、膨潤指数 κ は有効応力に依らない定数であるため、除荷開始時の 1MPa における値を採用した。これにより、2 つの構成則による違いは除荷時のみ現れることになる。

解析結果を図 2-68 に示す。想定した通り、0.1MPa から 1.0MPa までの載荷時には、2 つの構成則の差は現れておらず、除荷開始時もほぼ同様な e - $\log P$ 曲線が得られている。しかし、除荷が進むにつれて、今年度検討した構成則では膨潤指数の有効応力に対する依存性が現れ、修正カムクレイモデルが示す直線的な e - $\log P$ 関係との差が広がる。

なお、今回は除荷開始時の膨潤指数が一致するように修正カムクレイモデルの膨潤指数を設定したが、修正カムクレイモデルの膨潤指数を大きく設定すれば、今年度検討した構成則よりも修正カムクレイモデルのほうが大きな間隙比を示すこととなる。

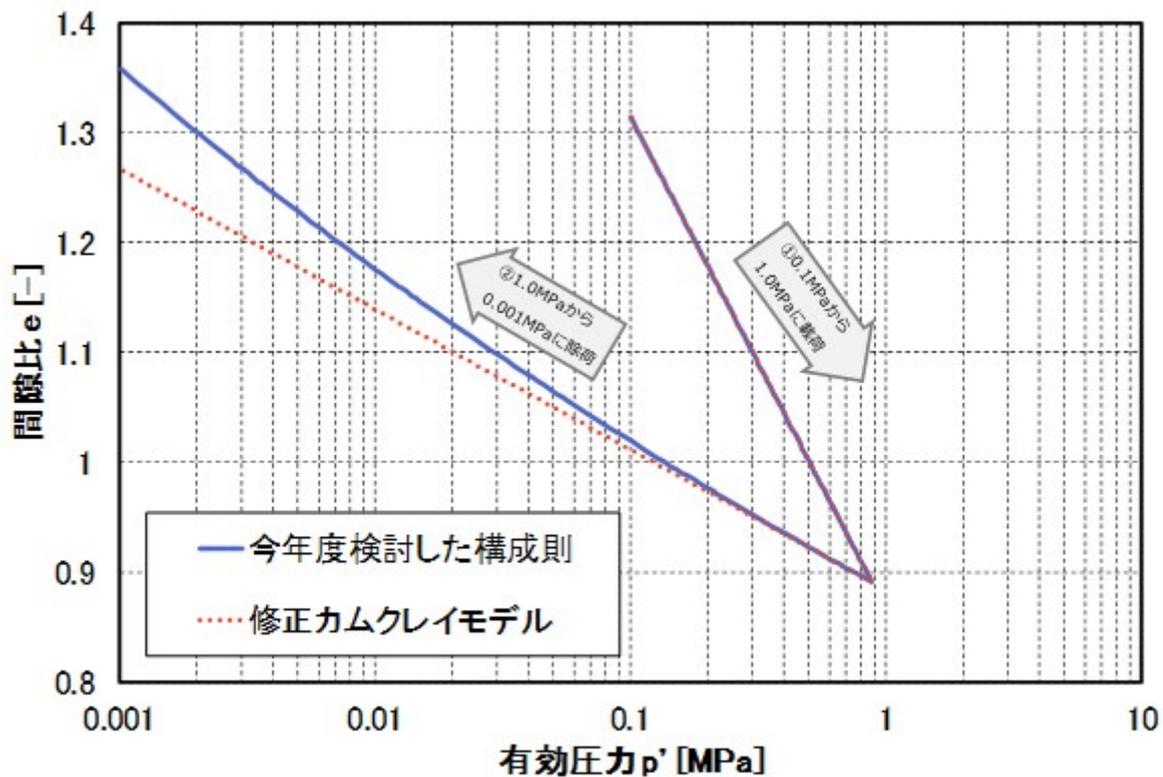


図 2-68 平成 31 年度検討した構成則と修正カムクレイモデルの差

(4) 力学解析手法の検討の今後の課題

今年度の検討においては弾性状態における e -Log P 関係について試験結果を反映させたが、塑性進行状態への反映や、そもそも修正カムクレイモデルでは表現できない挙動を考慮した構成則を検討することは今後の課題である。

3. 核種移行を考慮したガス移行影響評価モデルの構築のための検討

3.1 ガス発生挙動の定量評価

表 3-1 本検討におけるガス発生挙動評価のための評価条件の設定方針の整理（原環センター，2019）

項目	既往検討における評価条件		本検討における評価条件の設定方針
	TRU-2※1 (FEPC/JNC 2005※2) NUMO TR10-03 (NUMO, 2011) RWMC 2017 (原環センター, 2017)	NUMO TR14-03 (NUMO, 2014)	
インベントリ	実施主体の廃棄物受取後 (t=25y) (TRU-2※1 4-90) 旧インベントリ (TRU-2※1 P4-8)	実施主体の廃棄物受取後 (t=25y) (TR14-03 P3-21)	廃棄物発生後 (t=0y) 最新のインベントリ
容器(廃棄体)／パッケージ内でのガス発生量の評価条件	金属腐食においてパッケージ容器が考慮されていない (TRU-2※1 P4-106) 容器(廃棄体)／パッケージ容器は閉鎖直後に開口 (TRU-2※1 P4-132)	金属腐食においてパッケージ容器を考慮容器(廃棄体)／パッケージ容器は閉鎖後500年で開口 (TR14-03 P6-8)	金属腐食においてパッケージ容器を考慮容器(廃棄体)／パッケージ容器の寿命(開口時期)はそれぞれ独立に可変的に設定可能
ガス発生開始	(おそらく) 処分場閉鎖時	実施主体の廃棄物受取時 (t=25y) (TR14-03 P6-8)	廃棄物発生時 (t=0y)
人工バリア構成と形状	TRU-2※1 当時のもの (TRU-2※1 P4-9)	レベル3 (TR10-03 P6-24～) 当時のもの (TR14-03 P3-47～)	最新の情報に更新可能 (NUMO-TR-18-03 P4-59, 同付属書4-36など)
水	閉鎖後直ちに開口し、地下水が常に豊富に存在	開口するまでは、廃棄体内部の水のみを消費してガス発生反応が進行	開口するまでは、廃棄体内部の水のみを消費してガス発生反応が進行
パッケージ外での放射線分解によるガス発生の方	γ線による透過効果を考慮していない (透過せず全てパッケージ内での豊富な水の放射線分解に消費)	γ線による透過効果を考慮していない (透過せず全てパッケージ内での豊富な水の放射線分解に消費)	γ線による透過効果を考慮 (進へい計算を実施)
金属の腐食速度	一定の長期腐食速度 (TRU-2※1 P4-106, 109)	好気性金属腐食ではガスは発生しない。嫌気性金属腐食では、一定の長期腐食速度を考慮 (TR14-03 6-37～) (短期／長期腐食速度 SMOGG 内蔵データ)	好気性金属腐食ではガスは発生しない。嫌気性金属腐食では、より現実的な金属腐食速度に更新 (例えば、原環センター, 2018b参照)
セメント中の水の放射線分解	地下水が常に豊富に存在するとして評価	G値を補正し、セメント中の水として評価 (G値はSMOGG内蔵データ)	廃棄体特性に応じて、セメント中の自由水／構造水の違いを考慮して評価 (構造水はガス発生に寄与しない) (電中研報告書L11020参照)
G値	TRU-2 ※ 当時のもの (TRU-2 ※ P4-97-107)	更新された設定値 (TR14-03 P6-35) (SMOGG内蔵データ)	更新された設定値 (評価方法に応じて設定値を見直す)
ツール	GAMMON	SMOGG	上記改善内容を組み込むと同時に、条件変更があった場合でも柔軟に対応可能なツール

※1 TRU-2:第2次TRUレポート, ※2 FEPC/JNC 2005:電気事業連合会／核燃料サイクル機構, 2005 を、それぞれ略称として記載

表 3-2 単位壊変あたりの α 線/ β 線/ γ 線の放出エネルギー (ICRP, 2008)

放射性核種	半減期	放出エネルギー [MeV/decay]			放射性核種	半減期	放出エネルギー [MeV/decay]			放射性核種	半減期	放出エネルギー [MeV/decay]		
		α	β	γ			α	β	γ			α	β	γ
H-3	12.32y	0	0.00567	0	Tl-206	4.200m	0	0.53982	0.0001	Ra-225	14.9d	0	0.10496	0.01446
C-14	5.70E+3y	0	0.04945	0	Hg-206	8.15m	0	0.42109	0.12154	Ra-226	1600y	4.8602	0.00391	0.00739
Cl-36	3.01E+5y	0	0.27319	0.00014	Tl-207	4.77m	0	0.49517	0.00235	Ac-227	21.772y	0.0692	0.01502	0.00105
Mn-54	312.12d	0	0.0042	0.836	Tl-208	3.053m	0	0.61134	3.36025	Th-227	18.68d	5.9882	0.07547	0.13174
Fe-55	2.737y	0	0.00416	0.00166	Pb-209	3.253h	0	0.19744	0	Th-228	1.9116y	5.4955	0.02101	0.0036
Ni-59	1.01E+5y	0	0.00453	0.00236	Tl-209	2.161m	0	0.68754	2.14263	Ac-228	6.15h	0	0.44945	0.86714
Co-60	5.2713y	0	0.09686	2.50384	Po-210	138.376d	5.4074	0	0	Ra-228	5.75y	0	0.01319	0.00306
Ni-63	100.1y	0	0.01742	0	Bi-210	5.013d	0	0.3889	0	Th-229	7.34E+3y	4.9576	0.12174	0.09705
Se-79	2.95E+5y	0	0.05292	0	Pb-210	22.20y	0	0.04039	0.00534	Th-230	7.538E+4y	4.7538	0.01459	0.00177
Y-90	64.10h	0	0.9331	0	Tl-210	1.30m	0	1.26989	2.76317	Th-231	25.52h	0	0.1622	0.02686
Sr-90	28.79y	0	0.19572	0	Po-211	0.516s	7.586	0.00018	0.00817	Pa-231	3.276E+4y	5.0586	0.0538	0.04495
Nb-93m	16.13y	0	0.02944	0.002	Bi-211	2.14m	6.6756	0.01003	0.04726	Th-232	1.405E10y	4.0688	0.01261	0.00148
Zr-93	1.53E+6y	0	0.01941	0	Pb-211	36.1m	0	0.45425	0.06441	Pa-233	26.967d	0	0.21505	0.22291
Mo-93	4.0E+3y	0	0.00555	0.0107	Po-212	2.99E-7s	8.9541	0	0	U-233	1.592E+5y	4.9012	0.0059	0.00129
Nb-94	2.03E+4y	0	0.1684	1.55813	Bi-212	60.55m	2.2163	0.50456	0.10376	U-234	2.455E+5y	4.843	0.01365	0.00201
Tc-99	2.111E+5y	0	0.10125	0	Pb-212	10.64h	0	0.17663	0.14503	Pa-234m	1.17m	0	0.81712	0.01623
Ru-106	373.59d	0	0.01003	0	Po-213	4.2E-6s	8.5369	0	0.00003	Pa-234	6.70h	0	0.40371	1.47182
Rh-106	29.80s	0	1.41114	0.20606	Bi-213	45.59m	0.1245	0.44404	0.12773	Th-234	24.10d	0	0.06223	0.01051
Pd-107	6.5E+6y	0	0.00958	0	Po-214	1.643E-4s	7.8333	0	0.00008	U-235m	26m	0	0.00007	0
Ag-108	2.37m	0	0.60708	0.01855	Bi-214	19.9m	0.0011	0.66313	1.47933	U-235	7.04E+8y	4.4689	0.053	0.16686
Ag-108m	418y	0	0.01591	1.62088	Pb-214	26.8m	0	0.29482	0.25328	U-236	2.342E+7y	4.5591	0.01137	0.00178
Te-125m	57.40d	0	0.10907	0.03598	Po-215	1.781E-3s	7.5261	0	0.00017	Np-237	2.144E+6y	4.8493	0.0681	0.03495
Sb-125	2.75856y	0	0.10098	0.43731	Bi-215	7.6m	0	0.66935	0.25343	U-237	6.75d	0	0.19907	0.14424
Sb-126m	19.15m	0	0.63215	1.5483	Po-216	0.145s	6.9063	0	0.00001	Pu-238	87.7y	5.5802	0.01068	0.00205
Sb-126	12.35d	0	0.35449	2.75524	At-217	3.23E-2s	7.2008	0.00008	0.00024	U-238	4.468E+9y	4.2584	0.00917	0.00143
Sn-126	2.30E+5y	0	0.13802	0.05685	Rn-218	3.5E-2s	7.2618	0.00001	0.00075	Np-238	2.117d	0	0.25191	0.58789
I-129	1.57E+7y	0	0.06507	0.02517	At-218	1.5s	6.8041	0.00109	0	Pu-239	2.411E+4y	5.2357	0.00745	0.00107
Cs-134	2.0648y	0	0.16388	1.55508	Po-218	3.10m	6.1134	0.00001	0	Np-239	2.3565d	0	0.2623	0.1846
Cs-135	2.3E+6y	0	0.08938	0	Rn-219	3.96s	6.8801	0.00683	0.05859	Pu-240	6564y	5.2434	0.01051	0.00193
Ba-137m	2.552m	0	0.06534	0.59631	At-219	56s	6.1342	0	0	Am-241	432.2y	5.5712	0.0373	0.02933
Cs-137	30.1671y	0	0.18836	0	Rn-220	55.6s	6.404	0.00001	0.00062	Pu-241	14.35y	0.0001	0.00523	0
Nd-144	2.29E+15y	1.9051	0	0	Fr-221	4.9m	6.4198	0.0089	0.02941	Cm-242	162.8d	6.204	0.00955	0.00198
Pr-144m	7.2m	0	0.04746	0.01335	Rn-222	3.8235d	5.5898	0.00001	0.00038	Pu-242	3.75E+5y	4.9738	0.00895	0.00173
Pr-144	17.28m	0	1.20843	0.02885	Ra-223	11.43d	5.7701	0.07809	0.14126	Am-242	16.02h	0	0.18061	0.01881
Ce-144	284.91d	0	0.09162	0.01936	Fr-223	22.00m	0.0003	0.38287	0.05825	Am-242m	141y	0.0238	0.04389	0.00562
Sm-151	90y	0	0.01997	0.00001	Ra-224	3.66d	5.7765	0.00232	0.01039	Am-243	7.37E+3y	5.3583	0.02337	0.05852
Eu-154	8.593y	0	0.27301	1.24929	Ac-225	10.0d	5.8919	0.02476	0.01708	Cm-244	18.10y	5.8915	0.00793	0.00171
										Cm-245	8.5E+3y	5.4473	0.08239	0.1084

※ 黄色い網掛け部は、 $0 < E < 0.0001$ の場合に、0と表示したもの

参考文献

- COMSOL Multiphysics® v. 5.5. www.comsol.com. COMSOL AB, Stockholm, Sweden.
- 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取りまとめ—, FEPC TRU-TR2-2005-02, JNC TY1400 2005-013, 2005a.
- 原子力発電環境整備機構 包括的技術報告書: わが国における安全な地層処分の実現—適切なサイトの選定に向けたセーフティケースの構築— レビュー版, NUMO-TR-18-03, 2018.11
- 原子力環境整備促進・資金管理センター: 平成 27 年度高レベル放射性廃棄物等の地層処分に関する技術開発事業 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発 報告書 (第 4 分冊) —人工バリア材料長期挙動評価・人工バリア評価の初期条件の設定—平成 28 年 3 月, 2016
- 原子力環境整備促進・資金管理センター, 平成 28 年度 地層処分技術調査等事業 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発報告書 (第 4 分冊) —人工バリア材料長期挙動評価・人工バリア評価の初期条件の設定— 平成 29 年 3 月, 2017
- 原子力環境整備促進・資金管理センター, 平成 29 年度 高レベル放射性廃棄物等の地層処分に関する技術開発事業 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発 平成 25 年度～29 年度取りまとめ 報告書 平成 30 年 3 月, 2018b
- 原子力環境整備促進・資金管理センター, 平成 29 年度 高レベル放射性廃棄物等の地層処分に関する技術開発事業 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発 報告書 (第 4 分冊) —人工バリア材料長期挙動評価・人工バリア評価の初期条件の設定— 平成 30 年 3 月, 2018c
- 原子力環境整備促進・資金管理センター, 平成 29 年度 高レベル放射性廃棄物等の地層処分に関する技術開発事業 処分システム工学確証技術開発 報告書 (第 2 分冊) 平成 30 年 3 月, 2018d
- 原子力環境整備促進・資金管理センター, 平成 30 年度 高レベル放射性廃棄物等の地層処分に関する技術開発事業 TRU 廃棄物処理・処分に関する技術開発 報告書 平成 31 年 3 月, 2019
- ICRP, Nuclear Decay Data for Dosimetric Calculations, ICRP Publication 107, Annals of the ICRP Vol. 38 No.3, 2008
- Jaky, J.: The coefficient of earth pressure at rest, *J. Soc. Hung. Eng. Arch. (Magyar Mernok es Epitesz-Egylet Kozlonye)*, pp.355–358, 1944.
- 神山新一, 佐藤明: モンテカルロ・シミュレーション, 朝倉書店, 1997
- 軽部大蔵: 規格以外の三軸圧縮試験方法とその問題点, 第20回土質工学シンポジウム, pp.45-60, 1975.
- Morodome. S: On swelling behavior of montmorillonite with various exchangeable cations and structure of montmorillonite –water systems –In situ observation and numerical simulation of X-ray diffraction and small angle X-ray scattering method, Doctoral thesis of Tokyo Institute of Technology, 2008.
- 日本原子力研究開発機構: 平成 27 年度地層処分技術調査等事業 処分システム評価確証技術開発 報告書 平成 28 年 3 月, 2016
- 所千晴: 初心者のための PHREEQC による反応解析入門, 2017
- 椿淳一郎, 鈴木道隆, 神田良照: 粒子・粉体工学, 日刊工業新聞社, 2016
- 上田顕: 分子シミュレーション, 裳華房, 2003

委員会議事録など

委員会議事録など

1. 平成 31 年度 第 1 回 TRU 廃棄物処理・処分技術開発検討委員会

1.1 日時

2019 年 7 月 31 日(水) 13:30～17:00

1.2 場所

原環センター 会議室

1.3 議事

- (1) 開会
- (2) 全体概要
- (3) TRU 廃棄物に対する閉じ込め機能の向上
 - ① 廃棄体パッケージの閉じ込め性能に係る試験と評価
 - ② 陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発
- (4) 閉鎖前安全性の評価技術整備
- (5) 地層処分システムの状態設定のための現象解析モデルの高度化
 - ① 廃棄体からの核種溶出モデルの高度化
 - ② ニアフィールド構成要素の現象解析モデルの構築・高度化
 - ③ 廃棄体由来の発生ガスに関する現象解析モデルの妥当性検討
 - ④ 有機物の影響評価モデルの高度化
 - ⑤ 硝酸塩の現象解析モデルの妥当性検討

1.4 配布資料

- | | |
|---------|--|
| 資料 1-1 | 平成 30 年度第 2 回 TRU 廃棄物処理・処分技術開発検討委員会議事録 |
| 資料 1-2 | 全体概要 |
| 資料 1-3 | 廃棄体パッケージの閉じ込め性能に係る試験と評価 |
| 資料 1-4 | 陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発 |
| 資料 1-5 | 閉鎖前安全性の評価技術整備 |
| 資料 1-6 | 廃棄体からの核種溶出モデルの高度化 |
| 資料 1-7 | ニアフィールド構成要素の現象解析モデルの構築・高度化 |
| 資料 1-8 | 廃棄体由来の発生ガスに関する現象解析モデルの妥当性検討 |
| 資料 1-9 | 有機物の影響評価モデルの高度化 |
| 資料 1-10 | 硝酸塩の現象解析モデルの妥当性検討 |

1.5 出席者

【委員】 出光主査、佐々木委員、半井委員、福土委員、若杉委員

【技術アドバイザー：NUMO】 石田、小川

【オブザーバー】 向井（JAEA 安全研究センター）、守屋（JNFL）、中林殿（電中研）、林（電事連）

【事務局：JAEA】 本田、三原、三ツ井、小田、阿部、野中、北村、紀室、瀬田、洞

【事務局：RWMC】 田中^後、大和田、藤井、植田、林、櫻木、西村、長谷川、佐藤、川久保、玉井

1.6 議事録

(1) 開会

本事業の実施にあたり、RWMC 田中、JAEA 本田から挨拶の後、当委員会の主査として出光委員が承認された。その後、出光主査から挨拶があった。

(2) 全体概要

本事業の概要（目的、研究開発項目、実施体制）について説明した。

(3) TRU 廃棄物に対する閉じ込め機能の向上

① 廃棄体パッケージの閉じ込め性能に係る試験と評価

- ・ 応力腐食割れ (SCC) で溶接後熱処理要しない条件として母材 38mm 以下の処分容器溶接規格 (WES7901) が示されているが、ここでは容器の厚さ 50mm を変えることを考えるのか、溶接部の問題になるのか。
 - 基本的には母材の厚さ 50mm は変えない。蓋の構造等も考慮して溶接部がこのような基準に収まる方法がないか検討する。
 - WES7901 は SCC を考慮せず力学的な観点から決められた規格であると思われるので、SCC 除去の後熱処理の必要性との違いを考慮した上で検討いただきたい。
- ・ 溶接部の残留応力の幅がどの程度に収まるか等、溶接部の品質管理の観点も踏まえて検討を進めてほしい。
- ・ 残留応力解析について、アーク溶接はオーバーパックのモデルやパラメータを利用可能だが、レーザー溶接は入熱の仕方によって変わるためパラメータの取得等が必要で、LAH（レーザーアークハイブリッド溶接）の場合もそのあたりが難しいという点を踏まえて検討いただきたい。
- ・ 内部充填材の施工確認の試験において、実際の組立工程で製作・施工が実現可能なものになっているかということと、水素発生抑制の為に乾燥させる目的は明確だが、それ以外に収縮の抑制が課題となった場合、充填材にどのような性能を求めているかという観点で評価するかということも合わせて整理してほしい。
- ・ 内部充填材の乾燥条件に関して、120°Cの温度のセメントの変質等への影響については、水和物の熱分解まではいかないが、自由水を十分放出する温度条件であるために乾燥過程で大きく収縮してひび割れが生じることや、水和物の組成や構造が変化することがある。

② 陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発

- ・ これまでのモデル化で 10 万年を目標にしていたことについても説明が必要である。
 - 当初の目標は 10 万年程度としてきたが、現在の要求は、何が何でも 10 万年というわけでは無い。
- ・ BPI ガラスの計画に書かれている、ベントナイト接触系での浸出試験の位置付けは。
 - これまでの液固比が高い条件での浸漬試験に対して、実際の処分環境を想定し、ベントナイトに直接ガラスを埋め込むような試験を想定している。
- ・ NUMO の設計と、固化体採用時に考えられる処分坑道の設計については。
 - 特に BPI ガラスはアルカリに弱いので、セメント系材料を使わないような処分概念と組み合わせで代替技術として提案する。
- ・ ナチュラルアナログとしての青銅器を調べていると、鉛は結構土中に広がっている。BPI ガ

ラスからの鉛の放出は環境影響として問題ないのか。

- BPI ガラスの試験評価では、鉛は表面変質層等に残留していること、及び、液相の鉛濃度は高くないが、そのような課題の認識はある。
- AgI の還元によってヨウ素が瞬時に放出されるという概念の理解は受け入れ難いが、安全評価のリファレンスでの取扱いということはひとまず理解した。

(4) 閉鎖前安全性の評価技術整備

- 本事業のスコープ外であるが、津波や洪水、地震など、一般的に操業安全で考えるべきシナリオの検討についても今後検討が必要である。
- 廃棄体パッケージの温度制限 195℃について、どのような条件を想定しているのか。
→ 閉鎖後を想定した評価から得られたものである。そのため、閉鎖前を想定した評価を改めて実施する必要がある。固化体の発熱速度モデルの適用性を確認するとともに、適切な熱影響を設定する必要がある。また、充填材にセメントを使用した場合には、熱によるセメントの脱水による影響など、全体の熱的状況は、非常に複雑になると考えられる。まずは、保守的な条件設定による制限値のようなものを求める必要がある。
- 閉鎖前の火災として車両火災が想定されているのであれば、国外の火災曲線が参考にはどうか。
→ 既に国外のトンネル火災に関する情報や火災曲線を参考にしており、これらの情報を用いて検討を進めていく。
- 少量のサンプルを用いた試験データから検討されたモデルが、実際の評価(マクロスケール)に適用できることを確認する必要がある。例えば、異なる組成比の試料によるデータなどを取得し、予期しない反応の進展などの可能性を検討する必要がある。

(5) 地層処分システムの状態設定のための現象解析モデルの高度化

① 廃棄体からの核種溶出モデルの高度化

- C-14 の化学形態の評価が最も重要と考えるが、廃棄体中に存在する時と、放出時のいずれも分かっていないということか。
→ 金属中の炭素の形態は、合金成分との炭化物などが想定はできるが、観察事例などのエビデンスが無い状態。また、C-14 は窒素起源であり、もともと存在する安定炭素と同じと考えて良いかどうかはわからない。
- 溶出する際の化学形で、特に C-14 と C-12 でも結果が異なるのか。
→ CAST プロジェクトで複数の機関がトライしたが、統一された結果やコンセンサスは得られていない。その基本的な要因として、放出される炭素量が極めて少なく分析が困難であること、処分環境が異なること、金属種もいろいろあることなどがある。
- エンドピースの核種分布を評価する際に ORIGEN 計算を用いるとあるが、十分な精度を確認しながら進める必要がある。
- エンドピースの選定には、代表性などの観点もあって重要なので、選定のロジック・説明性などを確保しながら慎重に進める必要がある。
- ホットの試験や分析の作業手順については、品質管理や今後に向けた知見の観点から、まとめて記録しておいてほしい。
- ハル等廃棄体に含まれる燃料部品としては、スペーサーも重要である。

② ニアフィールド構成要素の現象解析モデルの構築・高度化

- ・ 昨年度、高液固比で HFSC の水和が進行しなかったことから今年度は液固比を低くしているが、液固比 5 でも標準的な配合より 10 倍水が多い。従来のように標準的な配合で十分固化させて、実際の物により近い水和物にしてから変質を見た方がいいのではないかと。
→ 粉砕によってフライアッシュも粉砕され、再び反応してしまうことや、乾燥によって水和物が変わってしまう可能性があることから、乾燥・粉砕を実施しない方法を検討した。従来の試験結果との違いを比較しながら進めたいと思う。
- ・ 乾燥方法にも色々ある。例えば相対湿度 11%であればほとんど水和物に影響ない。乾燥方法を工夫することも検討してほしい。
- ・ 低アルカリセメントを使うのがポイントなのだと思うが、普通セメントとベントナイトの研究は既にかかなり行われていると思うので、改めて試験を行わなくてもパラメータを置き換えて計算できるのではないかと。
→ 解析結果が確かなのか検証するためにも試験が必要。また HFSC に含まれるフライアッシュにはアルミニウムが含まれる。C-S-H の研究は進んでいるが、アルミニウムを含む C-A-S-H はまだ十分ではない。
- ・ 複雑な現象を分解してそれぞれの素過程を一つずつ明らかにして行くように示してほしい。また一から試験をやり直しているような印象を受ける。
- ・ 普通セメントと低アルカリセメントでは反応速度も違い、計算を実証する試験は必要。化学的な知見を示してわかりやすくしてほしい。
- ・ ナチュラルアナログ (NA) で M-S-H というと地質的に苦鉄質のところだからできるという印象に感じ、そのような特殊な地質環境での現象を処分場の緩衝材のアナログに想定するということが。最初にセッティングが違うのではないかと印象を持ってしまっているのだが。
→ パラワンのサイトはベントナイトではないので指摘の通り初期のセッティングは異なる。ただ、ルソン島とパラワン島の両方のアナログサイトでアルカリ溶液から Fe, Mg に富むスメクタイトができており、(ルソン島では) そのような鉱物のクロッキングでベントナイトの変質を抑制している。パラワンはベントナイトそのものを見るシステムのアナログでなく、アルカリからスメクタイトがどのように生成するプロセスのアナログと位置付けている。
- ・ スメクタイトは様々なバリエーションがあり、生成される環境条件も異なる。パラワンで見られる 3 八面体のスメクタイトは普遍的にできるものなのか。
→ なぜ (ルソン島で見られる) ベントナイトでもアルカリによって Fe, Mg に富むサポナイトやスチーブンスサイトができるのかを明らかにしたい、ということである。ただし、(アルカリ溶液が枯れている) ルソン島では情報が限定されるため、現在もアルカリが湧いているパラワン島でスメクタイト生成について調べたい。Fe, Mg の存在は処分場の条件でも珍しくないが、このような環境でのスメクタイトの生成を現状のモデルでは再現が難しく、そのための知見を得ることも期待している。

③ 廃棄体由来の発生ガスに関する現象解析モデルの妥当性検討

- ・ 前回のコメントに基づいて、不均質性も考慮して検討されていると理解した。
- ・ ガスと力学の連成評価がこの研究の重要な課題であると思うので、出来るだけ評価が可能となるように検討を進めてほしい。
→ 今後も検討を進める。

④ 有機物の影響評価モデルの高度化

- ・ 核種はアニオンになって ISA と錯形成するのか。

- pH 12 程度までは核種は中性の化学形で ISA と錯形成することが多いため、アニオンになるわけではないと理解している。
- 様々な元素と ISA との錯生成について網羅的にデータを取得してはどうか。
→ 本事業に割けるリソースが限られているため、網羅的にデータを取得する是非については慎重に検討する必要があるが、最終的にはどんな元素との錯生成も予測もできるようにしていきたい。
 - イソサッカリン酸の分子構造において、どの部分が錯生成に寄与するのか。
→ 現時点で正確にはわかっていない。放射光分析の活用可能性も含めて今後検討を進めていく。

⑤ 硝酸塩の現象解析モデルの妥当性検討

- pH > 9 条件下では NH_3 に平衡が進む現象はどのように計算しているか。資料の分布で示されているのは $\text{NH}_4^+/\text{NH}_3$ のトータルの値であると捉えてよいか。
→ PHREEQC ベースによって計算されており、トータルの値と捉えて問題ない。本来であれば気液平衡するはずであるが、そこまでは計算していない。処分場の中にはセメントの影響により液性がアルカリ側にシフトするが、処分場の外に出ると中性に近づいていくと考えられることから、このコードを開発したときには重要視していなかった。金属と高 pH 条件下で反応した反応物(未反応の硝酸および反応生成物である $\text{NH}_4^+/\text{NH}_3$ 含む)が処分場の外側へ出てきて、岩盤中を高レベル処分施設側へ移行していく際、どのように化学形態が変化していくかを検討したものであり、処分場の外側は地下水と同じ設定としている。
- 硝酸と鉱物との反応は酸性条件下でしかおこりえないのか。
→ 高 pH 条件における実験を過去に行ったが、反応生成物が十分に確認できなかった。そこで反応が起こりやすい pH の低い条件で、かつ温度を上げてようやく確認できた。温度と pH の傾向から高 pH 側に外挿し計算している経緯がある。
- この内容は離間距離など工学的対策にも影響する。硝酸影響の大きさによっては廃棄体から硝酸を除外することも視野に入れる必要がある。まずは評価手法を確立することが重要である。

2. 平成 31 年度 第 2 回 TRU 廃棄物処理・処分技術開発検討委員会

2.1 日時

2019 年 11 月 19 日(水) 10:00～13:00

2.2 場所

原環センター 会議室

2.3 議事

- (1) 開会
- (2) TRU 廃棄物に対する閉じ込め機能の向上
 - ① 廃棄体パッケージの閉じ込め性能に係る試験と評価
 - ② 陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発
- (3) 閉鎖前安全性の評価技術整備
- (4) 地層処分システムの状態設定のための現象解析モデルの高度化
 - ① 廃棄体からの核種溶出モデルの高度化
 - ② ニアフィールド構成要素の現象解析モデルの構築・高度化
 - ③ 廃棄体由来の発生ガスに関する現象解析モデルの妥当性検討
 - ④ 有機物の影響評価モデルの高度化
 - ⑤ 硝酸塩の現象解析モデルの妥当性検討

2.4 配布資料

- | | |
|--------|--|
| 資料 2-1 | 平成 31 年度第 1 回 TRU 廃棄物処理・処分技術開発検討委員会議事録 |
| 資料 2-2 | 廃棄体パッケージの閉じ込め性能に係る試験と評価 |
| 資料 2-3 | 陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発 |
| 資料 2-4 | 閉鎖前安全性の評価技術整備 |
| 資料 2-5 | 廃棄体からの核種溶出モデルの高度化 |
| 資料 2-6 | ニアフィールド構成要素の現象解析モデルの構築・高度化 |
| 資料 2-7 | 廃棄体由来の発生ガスに関する現象解析モデルの妥当性検討 |
| 資料 2-8 | 有機物の影響評価モデルの高度化 |
| 資料 2-9 | 硝酸塩の現象解析モデルの妥当性検討 |

2.5 出席者

【委員】 出光主査、桐島委員、佐々木委員、半井委員、望月委員、若杉委員

【技術アドバイザー：NUMO】 石田、後藤^考

【オブザーバー】 山田（原子力規制庁）、向井（JAEA 安全研究センター）、石塚（JNFL）、中林（電中研）、林（電事連）

【事務局：JAEA】 亀井、三原、三ツ井、小田、阿部、野中、北村、紀室、瀬田、洞、ウォーカー

【事務局：RWMC】 田中^俊、大和田、藤井、植田、林、櫻木、西村、長谷川、佐藤、江守、川久保、玉井

2.6 議事録

(1) 開会

本事業の中間報告にあたり、RWMC 田中、JAEA 亀井、出光主査から挨拶があった。

(2) TRU 廃棄物に対する閉じ込め機能の向上

① 廃棄体パッケージの閉じ込め性能に係る試験と評価

- ・ 低レベルを見ればセメント系材料を使用しているが、地層処分においても充填材にセメント系材料を使わないといけない理由、工学的要件はあるのか。
 - 廃棄体を固定できるのであればセメント系材料でなくてはいけないということはない。セメント系材料には、内部の廃棄体が搬送定置時に動かないようにすること、明確な要件とされているわけではないが空隙を低減すること、核種の収着性といったところが期待されている。
- ・ 水素ガス発生を気にするのであれば、スペーサーをかませるなどして固定する方法なども考えられる。地層処分でセメント系材料を使わないといけない工学的要件をもう少し整理したほうがいいのではないか。
 - まず、セメント系材料はかなり保守的に考えられ長期の機能を期待しないともいわれているが、そんなにやわな材料ではないというところがある。一番の問題としてガス発生量の低減があるが、パッケージ B は 300 年密閉されるため内部の水分量の低減のみを考えればよく、セメント系材料の水分量を減らすことでガス発生量を低減できるのであれば、難しい工学的対策をとらなくても十分という考え方があり、そこを目指している。一方で、セメント系材料以外で内部の廃棄体を固定する考えもあるので、両方を見ながら整理、検討を進めていきたい。
- ・ 容器内部にセメント系材料に水分がある場合、中からの腐食は考えなくていいのか。
 - アルカリ条件なので腐食はしにくいと考える。実際腐食試験を行っているが、腐食の進行はかなり遅い。
- ・ セメントで充填して空隙を減らしたいというところで、空隙の存在をどこまで許すのか、どのくらいであればいいのか。製作した試験体の一部にジャンカができてしまった箇所もあったということなので、セメントの施工後の状態の良し悪しを含めて判断基準の検討が必要ではないか。また、完全に空間がなくなると容器内部の圧力が高くなるので、緩衝となる空間も必要だと考えられ、そのあたりのどれだけ以上どれだけ未満といった目安となるものも必要ではないか。
 - 実際に作製してみて、(プレキャストの場合は)物が入るかどうかといったところもあるので、そういうところと併せて検討したい。

② 陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発

- ・ 10 万年は持たせたいが、あまり期間が長すぎると良くない（浸出が無い場合リスクが下がらないので、ある程度希釈しながらリスクを下げて行くというコンセプト）という難しい固化体の開発である。諸外国ではヨウ素は大気放射しているもので、それよりは高次元のコンセプトとなっている（時間軸を設けて 4 次元で希釈するコンセプト）。
 - 特に HIP 固化体の場合には、固化体の構造そのものが性能に効いてくるので、その面でもうひと工夫有るかなという感覚である。
- ・ 粒径依存性でコントロールできるという工夫もあったように思うがどうか。
 - アルミナ原料を粉碎して混合した試験体では、AgI を完全にくるむ構造となって、アル

ミナの溶解律速になると考えていたが、実際には粒界がヨウ素の放出機構に絡んでいるため、そのようにならなかった。こうなると、AgI の溶解が律速過程となるので、環境に依存してしまう。

- AgI の連結性等も効いてくるので、AgI の割合や長期的な挙動としてみたときにはどうなるかという検討は出来ないか。
- ガラスの検討で内部の亀裂では水がよどんでいるような場合には、どこかで溶出が止まるような評価になる。そのようなことは考えられないか。
→ 以前別の検討 (H21 年度までの炭素 14 の閉じ込め用コンクリート容器の検討 (原環センター, 2018)) でパーコレーション理論に基づく物質移動の解析を実施しており、そのときの結果では、3D で空隙がランダムに分布している場合、空隙率が 5% を下回ると物質の移動がとまるという理論解を得ている。HIP 固化体の空隙率はアルミナを 90% 加えることで 5% を大きく下回っているが、今実験できている範囲で止まるという現象を見られていない。
- それは、実験時間が短いということか、それとも固化体の構造による物か。
→ 時間をかければ止まる可能性がないとは言えないが、資料の 8~10 ページのような状態を見てしまうと、固化体の構造由来 (空隙がランダム配置になっていない) であることを否定できないので、何らかの対策が必要と考えている。
- 方法として、新たな添加物を加えるのか、作り方を考えるのか。
→ 新たな添加物を加えると、評価が複雑になる可能性がある。すでにアルミナ (工業原料) を 90% 添加していることを考えると、マトリックスとして添加する材料を変更することを考えても良いかも知れない。
- 加えているアルミナ粉末の粒径は。
→ 2 次粒径は顆粒状にまとまっている (*) が、1 次粒径は工業原料なのでミクロンオーダーかサブミクロンである。(* 窯業用のアルミナ原料は、プレス成形時の圧縮性、成形性を付与する目的で、顆粒状に加工されている場合がある)
- 添加するアルミナの粒径を代えることで、理論密度に近づく可能性はあるのでは無いか。アルミナだけの HIP での密度はどのくらい行くか。
→ 今回の材料では実施していないが、工業原料を HIP した場合、もちろん 100% にはならないが、99% には達する。
- SEM-EDX の写真を見ると、まだ空隙が大きいのが、これをなくすように出来れば良いのでは無いか。
→ 厳密に検討したことがあるわけでは無いが、これまでの試験を見ていくと、銀吸着材そのものが非常に焼結性が悪く、その周辺が空隙になりやすいので、材料の問題ではないかと考えている。
- HS 濃度が高い領域で実験しているのが、容器の外側で 10 万年間で下げるという考え方は撮れないのか。(外側の緩衝材領域でケミカルバッファを置いて) 全体として放出する濃度を下げるような巧い材料、というものは無いのか。
→ すぐに実験してと言うわけにはいかないが、なるべくシンプルな方法で可能であれば検討する意味があると思う。
- 硫黄析出で空隙が広がっていくので、それを抑制するような膨張性のもので水みちを埋めるようなことは考えられないか。
→ 膨張しすぎると膨張圧で固化体を破壊してしまうことも考えられるので、「ほどほど感」がある材料を選定出来るか、という点で難しい。
- HIP の今年度の試験はこの 1 点だけか。

- 他にもあり、現在分析中であり、最終委員会では寿命評価も含めて報告する。合わせて、モデル化の部分も報告する。
- ・ pH が低いときの結果もあるのか。
 - pH が低い場合には、アルミナの溶解が抑制されるため、これらの結果よりは放出は遅くなる。
- ・ BPI ガラスの分子構造について、RMC 法による計算結果と、XAFS 等の実験結果とはどのくらいあうのか。
 - BPI ガラスの 3 次元構造は、RMC 方で作った構造モデルなので、XAFS 等ガラス配位構造分のデータとはほぼ整合するように組み立てられている。
- ・ 初期条件は実験結果に基づいているということか。
 - その通りである。ただし、そのまま RMC 方で作成した構造モデルでは、鉛に対する酸素 2 配位や 5 配位など、あり得ない（不安定と考えられる）構造が含まれているので、より現実的にしないと、最後の量子計算に耐えない（収束しない）可能性が高い。
- ・ 最初の実験（XAFS、XPS などで測定している構造因子）では、そのような構造は出ないのか。
 - 検出されない。そのくらいの構造にしないと、量子計算には耐えない。

(3) 閉鎖前安全性の評価技術整備

- ・ 試料と接触可能な空気量(酸素量)を、昨年度に比べて大幅に増やした条件での熱量測定においては、発熱が生じる温度が低温側へシフトしていることや発熱曲線の形状が変化していることなど、酸素の影響によると思われる違いが見られている。酸素がアスファルト固化体の熱特性に与える影響について、検討する必要がある。
 - 今後、熱量測定データを蓄積し、昇温速度依存性も含め、空気雰囲気(酸素が存在する環境)におけるアスファルト固化体の熱特性に関する検討を進める。
- ・ アスファルト成分の分析結果は、重量割合(wt%)であることに留意した上で、反応によるアスファルト成分の変化を検討する必要がある。
 - 分析方法や加熱による試料の重量減少などを考慮して検討を行う。

(4) 地層処分システムの状態設定のための現象解析モデルの高度化

① 廃棄体からの核種溶出モデルの高度化

- ・ 特定の燃焼集合体に対してインベントリを取得・整備できるというものであれば、JNFL で再処理した集合体の情報が、廃棄物毎にしっかりと受け渡されている必要があるが。そのような体制や情報のやりとりは JNEL と NUMO の間で確立されているのか。
 - NUMO としてはその重要性を認識しており、どれだけ細かい情報があるのかという点はあるが、現状、JNFL と調整しているところである。JNFL としても、プラントの運転や安全性という観点からそのような情報の取得が必要なので、情報が全くないというわけではない。
- ・ JNFL 側でどこまで情報が得られるかというのと、こちらの研究をどこまで精密にやるかをリンクさせるべきである。
- ・ TRU2 レポート（電気事業連合会／核燃料サイクル開発機構, 2005a）等の現状の安全評価でインベントリは ORIGEN 解析で設定しているので、その精度、違いを認識するのがまず始めの目標ではないか。もしくは、どの程度インベントリの分布幅があるのかなど。再処理する燃料の情報との直接的な紐付けまではできないのではないか。
 - このプロジェクトで実際の廃棄体確認のようなことまでは行わないが、まずは ORIGEN

解析の精度の MCNP 等による確認や、合理的な解析評価手法の提示を行いたいと考えている。

- そういう意味で、ハル・エンドピースに関して、中性子フラックスの不均一性の影響はどこが一番カギになる部分なのか。エンドピースは全体の中で何割くらいで、そこでの中性子フラックスの不均一性によってどれくらいばらつくのかを最初に把握しておくべきである。
→ 下部のエンドピースにおける中性子フラックスはおよそ 1/4 と言われているが、MCNP の計算結果と比較する。全体インベントリのうち、ハルあるいはエンドピースにそれぞれどれくらいあるのかは計算しているので、そこからエンドピースの分析の重要性は示せる。ハルについては、何ケースかすでに破壊分析してインベントリを評価している。
- ハルあるいはエンドピースのインベントリの割合は以前より示されている。ここでは実測データを得て、そのキャリブレーションと理解。もし大幅にずれるのであれば、安全評価においては保守的に設定せざるを得ないが、それがどこまで現実的に落とせるのかということ。
→ NUMO としては、ある程度の分布幅を仮定してグループ 2 のインベントリを設定していくことを目指して、より精緻な評価をしているものと理解している。
- 浸漬（溶出）試験のサンプルの表面処理について、表面積を増やすためには、薄膜化するだけでなく、細粒化するなども考えられるのではないかと。表面積を見積もる方法はいろいろある。
 - 一 腐食速度と溶出核種の量の関係・比較（調和溶出モデル）も重要なので、表面状態を整えた状態で試験を行いたい。しかし、どうしても核種溶出量が不十分であるなら、細粒化もひとつの方策である。一方で、少ない溶出量ならば、現状の液体シンチレーションカウンタによる C-14 分析では検出感度が不十分なので、高感度である AMS（加速器質量分析）を導入して分析できるようにすれば解決できるとも考えている。ただし、AMS 利用については現計画には含めていない。

② ニアフィールド構成要素の現象解析モデルの構築・高度化

- 接触試験体におけるセメントペースト側におけるセルと試料の固定はどのように実施しているのか。
→ セメントペースト硬化体を多角形柱に切り出し、アクリルセルとの隙間をエポキシ樹脂で固めている。
- 薄片形状のセメントペースト硬化体の浸漬試験については、試験後、セメントペースト硬化体中の構成成分の分布を調べておく必要がある。
→ （拝承）
- NA 分析において、先見性をもって都合の良いデータだけを見るということはしないよう注意してほしい。
→ （拝承）

③ 廃棄体由来の発生ガスに関する現象解析モデルの妥当性検討

- モックアップガス注入試験において、移行パスができるかできないか、できた場合の進展状況等については、その移行パスの空間ボリュームに対して、飽和状態（実際の空隙量）の関係を考慮する必要があると思う。そのため、注水試験中の様々な飽和確認手法については、どの程度の精度で飽和であることが言えるのかを押さえておく必要があると考えられる。
→ 指摘の通り、飽和状態、特に空隙の形成状態は移行パスに大きく影響すると考えられる。現状、個々の飽和確認手法の精度についての評価は難しいが、これまでの経験上、100%飽和

は難しいが 98～99%程度の飽和状態になると想定しており、ガス侵入挙動も厳密な意味での不飽和の影響を受けると思われる。現時点での注水試験経過（応力状態）からは、概ね均質に飽和が進展していると推定される。この場合空隙もある程度均質な分布とも考えられるが、今後実施するガス注入試験においては、選択的な経路の形成の可能性やその位置について、十分注意してデータのモニタリングを行いたい。

- ガス発生挙動評価について、条件として設定しようとしているデータには不確実性があると思われる。G 値については、古いデータと見受けられる。また、放出エネルギーについては、実際は経時変化するのだろうと思う。実際に起こりうる現象とここでの設定についての整理をされたい。
→（拝承）（なお、G 値については、先ずはオーソライズされているデータによる評価を行うこととしているが、今後は、同事業で実施している廃棄体パッケージ閉じ込め性能に係る検討で実施している G 値に関する検討結果を踏まえた現実的な値を取り入れることも視野に入れて検討を進めたいと考えている。また、放出エネルギーの評価については、ICRP 2008（ICRP, 2008）のデータを参照しており、経時変化を考慮した検討を進めることとしている。）

④ 有機物の影響評価モデルの高度化

- パラジウムの溶解度試験において、固相の分析を実施するのか。
→XRD だけになるかもしれないが、固相の分析を実施予定である。
- Pd が ISA のカルボキシル基に配位しているのであれば、Pd の加水分解種が-4 になるとくっ付きにくいという説明はつきやすそうである。
- ISA の母溶液でカルシウムが残っているか、ICP-MS で一度調べておくと良い。
→（拝承）

⑤ 硝酸塩の現象解析モデルの妥当性検討

- アンプル試験において、硫酸イオンを生成するために必要となる酸素は硝酸根に含まれる酸素が使われる。この試験における硝酸塩の量で生成される硫酸イオンは分析したときに検出できるのか。
→ 硫酸イオンの分析は試測定としての意味合いで行う。

3. 平成 31 年度 第 3 回 TRU 廃棄物処理・処分技術開発検討委員会 書面審議

3.1 期間

2020 年 3 月 6 日(金) ～3 月 19 日(木)

3.2 実施方法

内閣官房新型インフルエンザ等対策室の「新型コロナウイルス感染症対策の基本方針」に基づき、会議形式での委員会の中止し、書面審議に変更した。

2020 年 3 月 6 日に審議用説明資料を委員、技術アドバイザー等関係者に送付し、3 月 19 日起源で資料に記載した本年度の成果等についてのコメントを依頼した。

【高レベル放射性廃棄物等の地層処分に関する技術研究開発事業 TRU 廃棄物処理・処分に関する技術開発】

- (1) TRU 廃棄物に対する閉じ込め機能の向上
 - ① 廃棄体パッケージの閉じ込め性能に係る試験と評価
 - ② 陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発
- (2) 閉鎖前安全性の評価技術整備
- (3) 地層処分システムの状態設定のための現象解析モデルの高度化
 - ① 廃棄体からの核種溶出モデルの高度化
 - ② ニアフィールド構成要素の現象解析モデルの構築・高度化
 - ③ 廃棄体由来の発生ガスに関する現象解析モデルの妥当性検討
 - ④ 有機物の影響評価モデルの高度化
 - ⑤ 硝酸塩の現象解析モデルの妥当性検討

3.3 送付資料

- | | |
|--------|--|
| 資料 3-1 | 平成 31 年度第 2 回 TRU 廃棄物処理・処分技術開発検討委員会議事録 |
| 資料 3-2 | 廃棄体パッケージの閉じ込め性能に係る試験と評価 |
| 資料 3-3 | 陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発 |
| 資料 3-4 | 閉鎖前安全性の評価技術整備 |
| 資料 3-5 | 廃棄体からの核種溶出モデルの高度化 |
| 資料 3-6 | ニアフィールド構成要素の現象解析モデルの構築・高度化 |
| 資料 3-7 | 廃棄体由来の発生ガスに関する現象解析モデルの妥当性検討 |
| 資料 3-8 | 有機物の影響評価モデルの高度化 |
| 資料 3-9 | 硝酸塩の現象解析モデルの妥当性検討 |

3.4 書面審議を依頼した関係者

【委員】出光主査、桐島委員、佐々木委員、半井委員、福士委員、望月委員、若杉委員

【技術アドバイザー：NUMO】藤崎、石田、鈴木覚、小川

【オブザーバー】山田（原子力規制庁）、向井（JAEA 安全研究センター）、小澤（JNFL）、守屋（JNFL）、藤田（電中研）、林（電事連）

【資源エネルギー庁】江橋、石橋、岩田、青柳

3.5 頂いたコメントとその対応

- (1) TRU 廃棄物に対する閉じ込め機能の向上

① 廃棄体パッケージの閉じ込め性能に係る試験と評価

- 溶接時の容器内部の温度履歴に関連して、アスファルト固化体の ROT (熱反応暴走開始温度: Runaway Onset Temperature) は、引用する JAEA の報告書の年度によって異なるので、参考文献情報を必ず記載すること。また、蓋をした状態 (無酸素条件) と有酸素条件では、ROT が異なるので、JAEA に確認すること。
→ ROT の出典は、平成 28 年度 地層処分技術調査等事業 処分システム評価確証技術開発報告書 (原子力機構, 2016) であり、同報告に記載の「体系全体が温度一定である状態を初期状態とする」(p3-16) 場合の ROT であり、無酸素条件のデータであることを確認した。
- 腐食試験では、HLA と EB を適用したと書いてあるが、溶接試験 (二重蓋容器) では、TIG になっている。試験条件の記載の間違いか。
→ 腐食試験は昨年度検討に基づいて全厚溶接の有力候補である LAH と EBW の溶接部の試験片に対する腐食試験について述べています。一方、今年度の溶接試験では、溶接厚さを再設定した 2 重蓋構造に対して、溶接方法を再選定した結果 TIG 溶接を選定して試験を実施しています (全厚溶接の平蓋構造では LAH 溶接を実施)。
- 平蓋容器及び二重蓋容器の残留応力の低減を実測したことは評価できるが、熱処理履歴の温度計測ポイントは、どこか。または、廃棄体パッケージ全体を均一に熱処理したということか。その場合、廃棄体相当の部分の温度履歴はどうなっているか。
→ 熱処理履歴の温度計測ポイントは、報告書の図 2.1-51 及び図 2.1-55 に記載しています。熱処理は、廃棄体パッケージ全体ではなく、部分焼鈍 (局所加熱) を実施しています。廃棄体相当の部分の温度履歴は、1/4 スケールの試験で模擬困難なため、取得しておらず、解析で評価しています。
- 平蓋容器及び二重蓋容器の母材部の残留応力測定部は溶接近傍のようだが、溶接部から離れた母材部での残留応力測定値はないか。応力計測結果を見る限り、溶接部近傍の局所加熱と考えられるが、温度勾配の付く可能性のある、溶接部より少し離れた部分での残留応力にも着目できないか。また、そのような温度勾配が付く場所を解析により求めることはできないか。
→ 溶接部から離れた母材部での計測値はとってないです。残留応力確認試験を実施する前に、局部焼鈍 (局所加熱) をシミュレートした残留応力解析によって、特異点がないことを確認しており、溶接部近傍の母材部の残留応力を測定しました。
- SR 時の電熱解析で示した容器内部の温度の実測値はないのか。ヒーターの設定位置が図の上でわからないので、報告書ではわかるようにしてほしい。最高温度を示すのではなく、廃棄体の相当位置での温度が何度になったかを示すべき。
→ ヒーターの設定位置 (加熱部) を報告書に記載します。指摘のとおり、コンター図で図示している対象は、廃棄体 ($\Phi 620\text{mm} \times 890\text{mm}$) 部を抜き出しています。
- SR 時の電熱解析では空気層が大きいほうが断熱効果があり、内部充填材を隙間なく充填する場合と比較して廃棄体の温度は低くなるように考えられるが、今回の結果では逆の結果となっているのはなぜか。
→ ふく射の効果が大きかったと判断しています。
- セメント系材料の自由水と結合水の定義について、より厳密には、自由水を、「常温から 105°C の環境・・・」とするか、結合水を「105°C から 600°C の間の環境・・・」とすべきではないか。
→ (拝承)。報告書を修正します。
- 水素ガス発生量と自由水量及び全水分量の関係について、結合水量の影響を直接的に確認で

きる絶乾試料からの水素ガス発生量の別データがあるのかどうか分からないが、水分量と水素ガス発生量の関係（報告書図 2.1-61）から説明するとすれば、論点は以下の 2 点が必要ではないでしょうか。①自由水量と水素ガス発生量には比例関係がある（単に線形であることに加えて、原点を通る）。②結合水量と水素ガス発生量には相関がない（2つの図から推定できる結論ですが、横軸を結合水量とするとより明確になるのでは）。

→ 絶乾試料を用いた水素ガス発生量の測定も行っています。報告書にその結果を追記するとともに、結論及び考察を修正しました。

- ・ 「粗大なひび割れ」という表現を見たことはありません。「過大なひび割れ」というものはいくつもあります。より厳密には「幅の広いひび割れ」かと思います。いずれにしても、測定した最小のひび割れ幅を明記する必要があるように思います。また、無筋供試体で観察されたものは、網目状の収縮ひび割れですが、微細なものでないかと想像されるので、粗大ひび割れと言えるのかどうか気になります。また、鉄筋は、ひび割れの発生そのものには寄与せずに、ひび割れ発生後に力を分担して受け持ち、ひび割れの幅が大きくなることを防ぐとともに、ひび割れを分散させることに効果があります。今回の観察事実を否定しませんが、今後、メカニズムの説明が必要になると思います。

→ 報告書の記載を幅の広いひび割れに修正しました。全てのひび割れ幅を確認できている訳ではありませんが、目立ったひび割れについては、クラックスケールで測定しており、測定した範囲での最小ひび割れ幅は、0.05mm でした。また、ひび割れ幅は最大でも 0.1mm 程度でした。

- ・ 内部充填材のセメント系材料からの水素ガス発生量の評価において、熱的影響はどのように考慮されているのか。廃棄体パッケージ内の線量、温度などを変数とした廃棄体パッケージ内圧力の関数が求められれば、廃棄物から放出される線量・発熱量の経時変化を考慮しながら、廃棄体パッケージの健全性、さらにはプレナム部で適切に圧力をバッファー出来るかどうかを検討することが可能になると思われます。熱に関して言えば、TRU 廃棄物内の温度は、セメント系材料の上限値である 80℃を超えないように設計され、温度は処分後 5～10 年で最大となり（TRU 2 熱解析）、その後時間の経過と共に徐々に低下します。熱は圧力と負の相関がありますが、総吸収線量は時間と共に増大するので圧力は増大し、最終的にはこれらの相互作用により圧力がどう変化するのが重要となります。このような検討の全体像を示しておくことが必要と思います。

→ 本検討は、圧力は上がり続けるのではなく、ある程度の圧力で平衡となることを想定して、これに関して、実験的に現象を確認したいと思っています。よって、今回は、温度影響を考えずに試験を実施していますが、熱影響については考慮していく必要があると考えています。ご指摘の通り、実際の内部充填材では、廃棄体からの熱により温度が上昇することが推定され、どの程度の温度上昇が見込まれるかにより水素ガス発生に及ぼす影響が異なり、反応も複雑であることが考えられます。よって、廃棄体パッケージ内の温度条件やその熱影響によって発生する水素ガス量に及ぼす影響などを整理する必要があると考えます。その温度影響を考慮した上で、充填材から発生する水素ガス量を評価する手法を検討していくことが望ましいと考えています。

→ 本年度のエンドピースの中性子輸送解析は三次元形状中の核種生成量の空間分布を把握するための試解析と位置づけているため、まずはエンドピースの三次元形状の模擬に主眼を置き、中性子ソースについては実際のサンプル条件を基に一部を簡略化した条件としています。

今回の解析では、中性子の発生条件を時間変化のない定常状態と仮定し、中性子束はサン

ル条件の平均中性子束と一致する値としています。また、中性子の発生範囲は単一バンドルが隣接する条件とすることで、複数のバンドルからのエンドピースへの中性子照射を再現しています。次年度以降に、中性子束およびスペクトルの時間変化の影響を評価するために、燃焼履歴を反映していく予定です。

最終的な解析結果としてはインベントリの観点からマスでの評価が重要となると考えられますが、現状では解析精度の評価のために照射サンプルの濃度の実測値と比較を行っていることから、濃度を中心に評価しております。また、エンドピースは位置により厚さ等の形状変化があるため、空間分布を評価する場合は実体の量であるマスより規格化された濃度の方が適していると考えております。今後、位置依存性の評価には濃度、合計生成量の評価にはマスを利用する等の使い分けを検討していきます。

- TRU 等廃棄体パッケージの性能に対する信頼性向上のために、取り組みが必要と考えている、①溶接部の残留応力の低減、②廃棄体パッケージ内充填材からの水素ガス発生量の抑制、および③廃棄体パッケージの強度向上（鉄筋入りの充填材の施工試験など）に着実に取り組み、好ましい成果が得られているといえます。この後も、さらなる信頼性の向上を目指して、技術開発に臨んでいただきたいと思っております。さらなる取り組みが必要と考えられるのは以下の2点です。

①に関しては、連続製造を考慮した熱処理条件の最適化

②と③の対策を組み合わせた場合の施工性、対策の有効性

→（拝承）

② 陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発

- BPI ガラスのリン酸影響の浸出試験の XRD で表面析出物（報告書の図 2.2-38）が、混合物ではなく固溶体であるとした根拠が分かりにくいいため、補足説明を検討されたい。

→ 詳細を報告書に記載することとします。 $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH})$ （水酸アパタイト）と $\text{Pb}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH})$ （水酸パイロモルファイト）、さらにこれらの OH を Cl で置き換えた鉱物がすべて同じ系統の鉱物（広義のアパタイト）に属しており、全率固溶することが知られています。XRD のパターンは水酸パイロモルファイトのパターンとほぼ一致しており、水酸アパタイトのそれとは異なっています（水酸アパタイトは、Ca のイオン半径が小さいことに起因して単斜晶系、一般的なアパタイトは六方晶系に属しています。XRD のパターンは全体に水酸アパタイトでは高角側にシフトします）。一方で、委員会資料では示していませんが、SEM-EDX の結果からは析出物にカルシウムが含まれることが示されています。これらに基づけば、パイロモルファイトの Pb の一部を Ca で置換していることが推察されます。

混合物であった場合には、水酸アパタイトとパイロモルファイトの双方のパターンの重ねあわせとなるため、各ピークの分離が見られるはずですが、XRD からは明確には観察されていません。

厳密には固溶体であることを確定させるには、薄膜析出物を TEM で観察するなどして、Pb と Ca の空間分布がナノレベルで一致することを示す必要がありますが、ここでは、上述の事実から固溶体であると推定しています。

- HIP 固化体の構造モデルについて、なぜオートセルマトン法で予測可能なのかが分かりません。諸パラメータの設定が根拠不明なため、シミュレーション結果が適切かどうか不明です。使用方法等につき十分な説明をお願いします。

→ 昨年度以前の成果であるため詳述していませんが、書面審議資料の p12 の左上の写真に赤く色を付けた部分（粒間と粒界）を表面から徐々に浸漬水が浸透していき、なおかつ浸漬

水と接した部分に存在する AgI と浸漬水に含まれる HS⁻とが反応して、その先にあらたな浸透経路が形成されるものとし、写真の下にあるようにアルミナを混合した固化体と、していない固化体とをそれぞれモデル化 (AgI とアルミナとの比がことなる) して解析しています (解析では、仮の設定として粒界の溶解速度を結晶粒のアルミナの溶解速度の 1/100 と仮定しています)。

結果、非常に単純化したモデルであるものの、液の浸透にともなうヨウ素放出量の絶対値は表現できていない (AgI の溶解や浸透経路に於ける硫黄、ヨウ素の拡散などのパラメータが適当に入っているためと考えられます) が、放出のトレンドは表現できていると考えています。

この解析で、「放出の予測が出来る」との結論を出しているのではなく、トレンドだけは表現できていることから、「粒界を含めた放出経路を考慮することが必要であることを示すもの」と考えています。

もし、粒界を考えないのであれば、空隙率が 5%未満の固化体では、いずれ放出がほぼ止まり、(2 次鉱物として析出する量も考慮して) アルミナの溶解量とヨウ素の放出量とが調和的になるはずですが、当初考えていたよりも深部まで浸漬液に含まれる硫黄が到達していることを考えると、やはり粒界を考慮すべきと現在は考えています。

一方、ヨウ素の放出がほぼ一定値に近づいているため、初期の連通した空隙からのヨウ素の放出がやっと収まり、これからより長期に浸漬を続ければ、当初のもくろみのようにアルミナマトリックスで制限された放出になるのではないかと、とのご意見も頂いており、すでに浸漬している固化体については浸漬を継続し、放出挙動を見ていくこととしています。

解析の詳細な条件等については、過年度の成果でも御座いますため、本年度報告書では、Appendix において過年度の報告書を引用することとします。

- BPI ガラスのヨウ素放出挙動のモデル化について、この研究のゴールとして、溶出モデルを作成しようとしているのか？何をしたいのかが分からないので、ゴールを明示的に説明してください。(例：結合パラメータの妥当性を突き詰めて何がしたいのか。)
- MD の結果が豊富だが、これが何を指して、成果としてゴールにどのようなつながるのかが不明ですので説明してください。

→ ゴールは、経験論・現象論で組み立てた溶解モデルで用いたフィッティングパラメータに根拠を与え、長期的に同じモデルで溶解を表現できることを示すことです。

以下に流れを説明します。

過年度の成果なので今回示していませんが、これまでに、経験論・現象論で組み立てた溶出モデル (リバースモンテカルロ法で構築した構造モデルに基づいて、各結合に結合パラメータを仮定し、水和にともなって結合が切断されてそれぞれの元素が放出されるよう組み立てたモンテカルロシミュレーションによって放出挙動を表現した解析モデル) で、結合パラメータをフィッティングパラメータとすることで、浸漬試験 (800 日) におけるヨウ素、ホウ素及び鉛等の規格化浸出率及び表面変質層の厚みの経時変化を再現できることを確認しています。(報告書では過年度の成果を引用したく思います)。

しかし、このモデルでは試験結果を再現するために結合パラメータを逆解析により決定しており、その理論的な根拠が必ずしも十分ではありません。一方で、ガラスの溶解については、結晶のように一定の単位がないため、いわゆる「溶解度」に当たる概念を設定するのが難しいことや、溶解速度を設定するにしても、ユニットセルという概念がないので、式の左辺 (固相の組成) を明確に設定することが難しいという問題があります。

そこで、結合パラメータの設定を理論値に近い形で出来ないか、というアプローチを採ろう

としています。しかし、純粋に Quantum にガラスの水和と溶解を解析するのは現状ではかなりハードルが高いのも事実です。現在、各結合の結合パラメータの強弱だけでも推定できないか、その方法を模索しているところです。ここで、結合の強弱だけでも表現可能になれば、上述のモンテカルロシミュレーションのフィッティングに根拠を（弱くはありますが）持たせることが出来、表面の析出層のすぐ下のガラス表面での溶解挙動までは再現出来るモデルになると考えています。ここで、Quantum に結合の強弱を計算するためには、その構造が「尤もらしい」ことが必要ですが、XAFS や XPS の実測値のみに基づいて推定したガラスの構造には、資料でも示しているとおりの「非現実的な」構造を含んでいるため、解析が収束しないことが容易に推測されます。そこで、まずは尤もらしい（確からしい or Quantum な解析に耐える）ガラスの構造を求めています。

BPI ガラスからの長期的なヨウ素の放出挙動を再現するためには、それらに加えて表面の析出層の影響も含める必要があります。

炭酸系での表面の析出層は、HLW でのそれと同様に拡散障壁として考えられます。ほとんどの場合地下水には炭酸が含まれていること、BPI ガラスでは緩衝材の設置を考慮しており、随伴鉱物の炭酸塩の影響を受けることを考えると、まずガラス表面の挙動をモデル化し、その上で析出層の形成による鉛の消費(ヨウ素の放出)、析出層での拡散障壁をモデル化できれば、長期的な放出挙動を表現するためのパーツは全て揃うと考えて進めています。

(2) 閉鎖前安全性の評価技術整備

- ・ 熱量測定結果では、脱ガス影響により大きなノイズを含むデータではあるが、H30 実施の窒素雰囲気下での発熱挙動とは大きく異なることが確認できた。より低温側で発熱が始まるという事実の確認は重要であり、これは一定の進展である。より低温（300℃付近）で発熱ピークらしきものが確認されており、今後さらに研究を進めることを期待する。
- ・ 反応に伴う発熱量評価をより現実的に行うために、酸素影響を考慮した空気フロー実験を実施したことは評価できる。
- ・ 酸素影響を定量的に評価するために、例えば、H30 に実施したような封入系の実験を、複数の酸素濃度で封入した試料を用いて実施してみてもどうか。このような実験の結果であれば、「4.2 発熱速度モデルの見直し及び妥当性の確認」に使えるのではないかと。
→ 拝承。アスファルト固化体の発熱特性に与える酸素の影響を定量的に評価するためには、複数の酸素濃度（酸素量）による測定データが必要と考えております。平成 30 年度及び平成 31 年度の成果を踏まえ、測定データの拡充を考えております。
- ・ 熱量測定における試料雰囲気と比較に「7 万倍の酸素」とあるが、ピンホールでは外気の交換速度が律速になる（それほど早くない）可能性があるため、それを踏まえた解釈が必要ではないかと。
→ 指摘のとおり、ピンホールを介した場合、サンプルパン内部と外部のガス交換が律速となり、アスファルト固化体の発熱特性に与える酸素の影響を過小評価してしまう可能性があります。しかし、高温条件の場合、試料からはガスが発生します。そのため、ピンホール数を増やすとガス交換速度は速くなると考えられますが、反応などにより生じた成分が揮発し易くなり、この成分が揮発の際に反応熱を奪うことで測定される発熱量が少なくなることも予想され、こちらも過小評価につながります。そこで、予備的な測定として、ピンホール数 1~5 及び蓋なしの測定を実施し、いずれのピンホール数でも平成 30 年度の結果と比較して発熱量 (J/g) が増加していること、及びピンホール数の増加に伴い発熱量 (J/g) が減少する傾向にあることを確認しました。そこで、“平成 31 年度は酸素の影響を確認する”こと第

- 1に考え、ピンホール数を1としました(平成31年度の報告書3-8~3-9ページ)。ピンホールによるガス交換が律速となっている可能性については、今後、確認していきたいと思いません。例えば、ガス交換速度が十分であると仮定した場合、試料量を1/2にすると得られるDSC曲線の結果も1/2になると考えられますので、このような測定の実施を検討したいと思う。
- ・ 発熱速度モデルの係数と試験条件の関係(昇温速度など)などは、今後、このモデルを実用化する上で重要なプロセスと思います。硝酸含有量への依存性など、さまざまな条件に対して係数のデータベース化が進むことを望みます。
 - 指摘のとおり、塩含有率や接触可能な酸素量などについて、補正係数をデータベース化することにより、使用者が使いやすいものになると思います。最終的にはそのようなまとめ方を念頭に、先ずは、測定データの拡充を進めたいと思います。
 - ・ アスファルトの最大の発熱ピークが300℃辺りにあるので、そこに着目するのは必然なのですが、処分場の操業環境を考慮すると、200℃未満、さらに言うと100℃未満の発熱ピークも重要です。低温側の熱測定も評価いただきたいと思います。
 - 指摘のとおり、評価においては、低温側の発熱特性(発熱開始直後の特性)が重要となります。測定装置や条件を検討し、200℃未満における熱特性データの拡充も進めたいと思います。

(3) 地層処分システムの状態設定のための現象解析モデルの高度化

① 廃棄体からの核種溶出モデルの高度化

- ・ エンドピースの試料1、3、5は元々残材の材質・化学組成は同じものを用いているのか。
 - 試料1、3、5は同一のタイププレート(鋳造品)から採取しているため、元々の材質・化学組成は同一と考えおりました。
 - 一方で、試料1、3、5のCo-59濃度分析結果に差(元素分布)があったため、化学組成が不均質である可能性が示唆されました。材質・化学組成の均一性は今後の課題として認識しています。
- ・ エンドピースの放射性核種濃度分析が複雑なため、幾つかの主要な分析誤差を伴うと考えられる。値の誤差に言及することが望ましいと考える。
 - 分析操作における変動は非放射性元素による収率確認を行っています。誤差評価は放射線計測に伴うものと考えており、個別の評価が必要ですが、おおよそ範囲としては数%以下となっています。
- ・ インベントリの評価に関して、対象親元素として希土類元素が含まれている。一方分析でフッ硝酸液を用いるとの記載があるが、これを用いると希土類がフッ化物沈殿を生じる可能性がある。対象とすることと、分析とに関連はあるか。
 - 必ずしも対象すべてを分析しているわけではないが、希土類(Sm, Eu)は分析対象としています。
 - フッ化物沈殿ですが、溶解時の酸濃度が高く、沈殿が生成しない条件と考えられます。(過去の溶解操作も含め)溶解液はクリアで目視での沈殿は確認されておりません。溶解度の操作で酸濃度が低下しますが、それでも沈殿は確認できず、実際の希土類濃度は溶解度に達するほど高くないと考えられます。
- ・ 試験および分析の手順を文書に残す(手順書の作成)ことを目標成果物として明示して頂くことを強く希望します。
 - 基本的な手順は報告書に記載しております。詳細なものは、別途文書を作成し残しておくことを検討いたします。ただし、ここで実施した手順はあくまで研究として行ったもので

あり、最適化や一般化を経た手順書や標準法とは異なることに留意が必要となります。

- 分析対象試料の妥当性を説明していただくことを強く希望します。
 - 分析対象試料のエンドピースについては、昨年度に調査・選定しており、昨年度報告書において「エンドピース試料は、放射能分布が軸方向に広い下部タイププレートの中から選定することとし、今後の試験などにて使用可能であることを考慮しながら、現状のBWR発電所からの廃棄物発生量の多い燃料タイプ(STEP III)を対象に、運転履歴が明確で、かつ試料採取が容易である下部タイププレートを選定した。」と記載しています。ただし、実際のところは、使用可能なものが少数に限られている中からの選定となっていることは否定できません。本研究の目的は、評価手法の整備であると考えられ、事業者が実廃棄物の特性を評価する際に本研究の成果を利用されるものと期待します。従って、分析対象の妥当性としては、評価手法の検討のためのモデル化に必要な情報(燃焼履歴や形状情報)が十分に信頼できる情報として利用可能であることが最も重要と考えました。ただし、それらの情報は電力やメーカーから提供頂いた機微情報となり、報告書には記載していません。
 - エンドピースの3次元中性子輸送解析では、単一のエンドピースについて評価が行われていますが、中性子のソース、境界条件などは、実際のサンプルを模擬したものになっているのでしょうか？あるいは、この解析は生成量の空間分布を概略的に把握するための試解析なののでしょうか？また、水平方向の濃度分布が示されていますが、インベントリの観点からは濃度よりもマスの方が重要であるので、これを指標とした表示の方が分かりやすいと思います。
 - 本年度のエンドピースの中性子輸送解析は三次元形状中の核種生成量の空間分布を把握するための試解析と位置づけているため、まずはエンドピースの三次元形状の模擬に主眼を置き、中性子ソースについては実際のサンプル条件を基に一部を簡略化した条件としています。今回の解析では、中性子の発生条件を時間変化のない定常状態と仮定し、中性子束はサンプル条件の平均中性子束と一致する値としています。また、中性子の発生範囲は単一バンドルが隣接する条件とすることで、複数のバンドルからのエンドピースへの中性子照射を再現しています。次年度以降に、中性子束およびスペクトルの時間変化の影響を評価するために、燃焼履歴を反映していく予定です。
- 最終的な解析結果としてはインベントリの観点からマスでの評価が重要となると考えられますが、現状では解析精度の評価のために照射サンプルの濃度の実測値と比較を行っていることから、濃度を中心に評価しております。また、エンドピースは位置により厚さ等の形状変化があるため、空間分布を評価する場合は実体の量であるマスより規格化された濃度の方が適していると考えております。今後、位置依存性の評価には濃度、合計生成量の評価にはマスを利用する等の使い分けを検討していきます。

② ニアフィールド構成要素の現象解析モデルの構築・高度化

- HFSC 水和物とイオン交換水 (IEW)及び NaCl 溶液の反応試験結果とモデル計算値との比較図中のモデル計算値の線が滑らかでない理由。計算はどのような条件で行われたか、補足が望ましい。
 - HFSC と地下水との反応試験のモデル化は、PHREEQC コードを用いて実施しています。1kgのHFSCを液固比2で反応させた後、液相の量を添加することで、平衡計算を実施しています。液の量が増えることで、セメント水和物が溶解・沈澱し、計算値(液相のpHや元素濃度)が変化します。その結果として、計算値の線は滑らかにはなっていません。計算条件については、報告書に記載しました。

- ・ ナチュラルアナログに関して、取得した情報を用いてモデルの妥当性の確認に用いるとのことですが、これを実現するために必要な実施事項をお示しいただきたい。
→ 本事業でモデルの妥当性の確認まではできませんが、そのために必要な情報として変質プロセス(反応時間も含む)とそれに影響を与える環境条件をまとめたいと考えています。ナチュラルアナログによるモデルの妥当性確認のためには、初期状態、変質プロセスを経た現状の状態、置かれた環境と時間は少なくとも示す必要があり、初期状態については、これまで取得した地質環境に係る情報から地質学的に推測可能と考えています。

③ 廃棄体由来の発生ガスに関する現象解析モデルの妥当性検討

- ・ HMC 連成手法の実施内容が非常に重要です。結果を説明ください。1次元での人工バリア体系での長期挙動評価への適用性をどのように確認したのかを具体的に記載してください。
→ 人工バリアの変質現象としてモンモリロナイトの溶解、二次鉱物の生成およびCa型化等を対象とし、COMSOLを用いた解析の結果について他の解析コードの解析結果、過去の試験結果等と比較し検証を実施しました。いずれの変質現象に関する解析結果もPHREEQCやExcelの解析結果と一致し、COMSOLの人工バリア体系での長期挙動評価への適用性を確認しました。
- ・ ガス発生量評価におけるハルとエンドピースの厚さが同じである根拠を教えてください。エンドピースとハルも形状は全く異なります。TRU-2が根拠となっていますが、なぜ、それが根拠とできるのか、議論したうえで引用が必要です。上記の設定の結果、エンドピースの影響は9000年弱でなくなるという結果ですが、これが本当に正しいのか保証ができません。
→ ハルの厚さの記述が間違っていました。正しくは0.71mm(原子力安全協会 2013 参照)となります。
エンドピースの厚さ(340 μ m)につきましては、TRU-2に記載の、ステンレス鋼の等価腐食速度(2 \times 10⁻⁸m/y)およびグループ2の金属のうちステンレス鋼からの核種の浸出期間8500年を引用して算出した値となっております(0.02 μ m \times 8500 \times 2面)。
9000年弱(8500年+25年または+325年)でなくなるとの結果は、この8500年の浸出期間からくるものとなっております。
実際の廃棄物のうちステンレス鋼につきましてはエンドピース以外も含まれていることから、TRU-2編纂時におそらくですが、それらのうち最も薄いと想定される廃棄物に合わせて設定されたものと思われます(単位時間当たりのガス発生量が多く、保守的となるように)。
今回の発生量算出の試行では、現在エンドピースの形状が確定的でないことからTRU-2の検討を引用したものであり、今後のガス発生量の検討に際しては、これからの調査研究の進捗を踏まえて、NUMO殿と協議をさせていただき、新たな情報や知見を取り入れていきたいと考えております。
- ・ 廃棄体グループ2の各廃棄体の単位重量当たりの放射能の出典を記載願います。
→ NUMO TR-10-04 頁(付4.1-1)表4-1廃棄体ごとの核種の放射能濃度(Bq/t)1/4に示されている値を参考に図化したものです。
- ・ 他の核データではなく、ICRP.Pub.107を使用してよい理由を説明ください。例えばICRPでは、ベータ先の制動放射を考慮したガンマ線エネルギーの算出が困難なはずだったかと思えます。
→ ICRP.Pub.107では、 β 線の制動放射によるX線の効果は「 β 線」の項に含まれて整理されています。したがって、今回の評価では、ソース部のように、 $\alpha/\beta/\gamma$ を全て見込む評価では、制動放射による効果も含まれています。

EBS 部材のように透過 γ 線を対象にした評価では、制動放射による効果は含まれないこととなりますが、制動放射のX線による効果は、透過 γ 線による効果に比較して十分小さいと考えます。

- ・ ガス移行挙動の評価について、「ガス移行による緩衝材の変形→空隙構造の変化→透気特性の変化」という連成現象を取り入れたモデルの構築が必須と考えます。本現象のモデルへの取り込みを開発目標として明示して頂くことを強く希望します。

→ 力学連成評価では、「ガス移行による緩衝材の変形→空隙構造の変化→透気特性の変化」という一連の現象のひとつである、ガスの流路が拡幅する現象（緩衝材が不連続体となる現象）を破過と定義した場合、破過の直前（緩衝材が不連続体とならない時点まで）の現象を評価します。破過現象およびその後のガス移行場の状態については、例えば力学連成解析では破過直前までのガス移行場の密度分布の解析結果や、破過後の供試体の解体調査結果（密度分布測定結果）などから予測することとなります。

以上を踏まえ、「ガス移行による緩衝材の変形→空隙構造の変化→透気特性の変化」という連成現象評価についての検討は、過年度よりこれまでに実施してきているところです。これらのモデル（ここでは現象モデルや構成則を意味するものと理解しております）については、力学連成解析コードに組み込まれており、今後も必要なデータを用いて得た力学連成解析による評価結果と試験結果とを比較することで、力学連成解析による評価手法としての妥当性の確認を進めてまいります。また解析コードや現象モデルが更新された場合は、それらを反映したうえで、同様に評価手法としての妥当性の確認を行ってまいります。

- ・ モックアップ試験の土圧計の値について、底面の圧力値が他の位置に取り付けられた測定器の値に比べて低いこと、上部に複数設置された土圧計の値にばらつきが見られることから、内部の緩衝材が均質に膨潤していない可能性が考えられます。これらの測定結果のばらつきについては、水-応力の連成解析等により検証することが好ましいと考えます。

→ 相対的に底面の膨潤圧下低いことの理由として、①供試体作製時の撒き出し各層にてジャッキ転圧の際、押し鉄板側で直接転圧される各層上側で、下側と比較してより高い密度となった（転圧方向に密度分布が生じた）可能性、②モックアップ供試体の撒き出し層のうち底面側のA～C層は各層4cmであり、中上面のD～G層は各層5cmであることから、中上面の転圧面（押し鉄板接触面）により高い転圧力が必要となったことによる可能性を考えました（Appendix VII 頁 (VII-5) 図 1-3 参照）。

ご助言いただきましたように、力学的な作用により飽和度や密度が上下方向で変化することで水の移動（飽和膨潤）に影響が生じた可能性も考えられるため、水-応力の連成解析等による検証につきましては、今後、実施を予定しております。

- ・ ガス発生量の評価がどのようなシナリオで行われているのかがわかりにくいです。放射線分解によるガス発生が支配的であるなら、どの領域でどれくらいのインベントリの核種が水と接触しているのかが重要ですが、廃棄体パッケージ寿命後のこれらの想定がどうなっているのかがわかりませんでした。（配布資料 3-7 p36,p37 の補足スライドを最初に示していただけるとより分かりやすいと感じました）また、p36 に核種漏洩に伴う放射線場の経時変化は考慮しないとありますが、一方でエンドピースの溶解寿命 8600 年でガス発生が終わっています

→ （持承）。書面審議資料 3-7 p19、補足スライドの p36,37 が基本となります。また、以下に補足説明をさせていただきます。

廃棄物が発生し、容器（キャニスタ）に封入された時点を、本評価の基準点とし、 $T=0y$ としました。原則的には、この時点でガスが発生する条件が整っていれば、ガスが発生するも

のとなりました。ただし、本検討のように評価対象を廃棄体グループ 2 とした場合、キャニスタ内にはガス発生に必要となる水が存在していないため、この時点でははまだガスは発生しません。

次に、中間貯蔵が終了し、廃棄物発生者から地層処分の実施主体に廃棄体が引き渡され、実施主体によって処分用に廃棄体パッケージ化（廃棄体パッケージ B）されるのを、 $T=25\text{ y}$ としました。NUMO 包括的技術報告書よりパッケージ内にはキャニスタ 4 本を収納し、キャニスタ間の空間はセメント充填されると設定しました。また、この時点でキャニスタは開口しており、保守的な設定においては、廃棄体パッケージ内の水（モルタル中の自由水）は、キャニスタ内でも利用可能となっているものとなりました。ガス発生に必要な水は、この時点で初めて供給されるため、 $T=25\text{ y}$ がソース領域における実質的なガス発生開始となります（保守的な設定以外に、パッケージ寿命に合わせた時期に自由水がキャニスタ内に流入するより現実的なケースも検討しております）。

次に、廃棄体パッケージ周囲に EBS が構築され、処分場が閉鎖されるのを、 $T=50\text{ y}$ としました。すなわち、EBS 領域におけるガス発生開始は、 $T=50\text{ y}$ 以降となります。評価上は、処分場閉鎖後直ちに再冠水が終息し、この時点で既に EBS 領域では、地下水が自由に利用可能となっているものとなりました。ただし、廃棄体パッケージが開口するまでは、その内部への地下水の流入はなく、内部でのガス発生は初期の含水量を消費しながら進行します。

次に、廃棄体パッケージの寿命は 300 年をデフォルト設定とし、廃棄体パッケージが開口して、その内部に地下水が流入するのを、 $T=325\text{ y}$ としました。

TRU 廃棄物の地層処分システムの過渡的な変遷については、化学的な変遷を除く諸現象の多くは、500 年頃までにはほぼ定常状態となることが示唆されている（NUMO, 2014 など）ことから、ガス発生量の評価期間は、 $T=10,000\text{ y}$ までとしました。

エンドピースの寿命につきましては、スライド P22 の上の表から、エンドピース厚さ：340 $\mu\text{ m}$ 、腐食速度：0.02 $\mu\text{ m/y}$ より、 $340/0.04$ （2 面で腐食）＝8500 年で消失となります。

還元腐食開始が $T=25\text{ y}$ ～の場合（自由水がパッケージ化後すぐにキャニスタに流入する場合）8525 年で、 $T=325\text{ y}$ ～の場合（自由水がパッケージの寿命と同時にキャニスタに流入する場合）、8825 年でエンドピースが消失します（P28 上段のグラフが間違っており、正しくは上記のようになります 8662→8525）

④ 有機物の影響評価モデルの高度化

- ISA 共存下の Tc(IV)の溶解度実験での「ISA による顕著な溶解度の上昇は確認できず。」との解釈に関して、0.45 $\mu\text{ m}$ 以下で 10kDa フィルターに捕獲される、Tc 水酸化物コロイドを水酸化物固相の分散状態と解釈し、10 kDa フィルターを固液境界として、溶解度を定義してはどうか。そうすると、どちらの pH の実験でも ISA の錯生成効果で上昇していると言えるのではないか。
 - ご指摘の通り、10 kDa の限外ろ過フィルターに捕獲される Tc 水酸化物コロイドを固相とすると、特に pH 10.5 における Tc の溶解度が上昇する結果が示されたため、文中の記述を修正しました。
- 着実な進展が見られている。平衡後の pH や Eh 値が抜けているところが見られるので、生データはできれば残して頂きたい。
 - 生データを残すよう留意いたします。
- なぜ Pd のデータを優先的に取得しているのかの説明をしていただけますようお願いいたします。その際、他の元素の検討の必要性、優先順位の記載も加えてください。

→ 金属イオンの移行挙動に及ぼすイソサッカリン酸 (ISA) の影響については、アクチニド元素を中心に種々の元素で調べられているものの、核分裂生成物などでは必ずしも調べられていません。平成 30 年度に文献調査を行い、情報が不足している元素で ISA 影響が大きくなりそうな元素として、Pd, Tc, Sn, Nb などが挙げられると考えました。このうち Pd と Sn について平成 30 年度に予備的な試験を実施したところ、Pd 溶解度に顕著な ISA 影響が確認されたことから、Pd のデータ取得を優先的に進めております。以上の内容につきましては、4.4.1 に簡単に記載してありますし、平成 30 年度報告書にその詳細を記載してありますので、追記は不要と考えます。

Pd については、現状の TRU 廃棄物処分の性能評価ではさほど重要度が高くありませんが、ISA 影響が大きいと溶解度が高くなったり K_d が低くなったりして、重要度が上がる恐れがあるのではないかと懸念してデータ取得を行っております。

⑤ 硝酸塩の現象解析モデルの妥当性検討

- NEON による硝酸イオン変遷の解析結果で処分施設上流において硝酸イオン濃度が低下する（濃度のピークがある）理由は。
 - NEON では、金属の反応、黄鉄鉱の反応、微生物の反応による、硝酸イオンの変遷挙動をモデル化しています。このうち、微生物反応を考慮して解析を実施すると、ご指摘の処分施設上流において、硝酸イオンの濃度が低下する解析結果が得られます。微生物の反応モデルは、微生物の増殖に用いる有機物と硝酸イオンがともに存在することで反応が起きる設定となっており、処分施設内の有機物が硝酸イオンとともに周辺岩盤中（処分施設内では、高アルカリ性であり、微生物反応を考慮していない）に移行することより、微生物の脱窒反応が処分施設周辺で生じ、硝酸イオン濃度が低下します。
- 感度解析を実施するにあたって、水理場の設定の適切性が重要かと思っておりますので、母岩の移行媒体モデルは、均質な多孔質媒体モデルなのか、DFN モデルなのかを採用した理由とともに、記載いただけますようお願いいたします。
 - 今回の感度解析では、硝酸イオンの変遷モデル (NEON) の信頼性向上のために、解析結果に与える影響が大きなパラメータを抽出し、データ取得に反映させることを目的としています。亀裂媒体の母岩であっても使用している解析コードの制限を考慮して簡略的に均質多孔質媒体近似して解析を行っています。

参考文献

- 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取りまとめ－, FEPC TRU-TR2-2005-02, JNC TY1400 2005-013, 2005a.
- 原子力環境整備促進・資金管理センター, 平成 21 年度 TRU 廃棄物処分技術 ヨウ素・炭素処理・処分技術高度化開発報告書－C-14 の長期閉じこめ技術の高度化－, 2010.
- ICRP, Nuclear Decay Data for Dosimetric Calculations, ICRP Publication 107, Annals of the ICRP Vol. 38 No.3, 2008.
- 日本原子力研究開発機構, 平成 27 年度 地層処分技術調査等事業 処分システム評価確証技術開発報告書, 2016.