

令和 2 年度

高レベル放射性廃棄物等の
地層処分に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

Appendix

令和 3 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

令和 2 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・処分技術高度化開発 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 廃棄体パッケージ内充填材の仕様の検討	I-1
2.2 廃棄体パッケージの構造健全性評価.....	I-124

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. BPI ガラス固化体の製造とその均質性の確認	II-1
2.1 BPI ガラス固化体の製造.....	II-1
2.2 浸漬試験用の試験片の作製と均一性の確認.....	II-3
3. BPI ガラスからのヨウ素放出挙動に関するモデル化の考え方（詳細）	II-5
3.1 溶解モデルの全体像	II-5
3.2 主要元素の溶解.....	II-7
3.3 ヨウ素放出現象モデルの検討のための浸漬試験（詳細）	II-11
4. おわりに	II-21

Appendix III 地球化学モデリングのための熱力学データベース

1. 熱力学データベースの更新.....	III-1
2. 参考文献	III-21
3. 更新したデータベース（PHREEQC フォーマット）	III-32

Appendix IV セメントーベントナイト接触試験を対象とした解析のパラメータ設定

1. 鉱物設定	IV-1
1.1 緩衝材	IV-1
1.2 セメント.....	IV-2
2. 二次鉱物の設定	IV-4
3. 初期間隙水設定	IV-4
4. 解析設定	IV-5
4.1 物質輸送特性	IV-5
4.2 鉱物の溶解速度式.....	IV-5
4.3 鉱物の比表面積.....	IV-9

Appendix V セメントーベントナイト接触試験を対象とした化学反応ー物質輸送解析の結果

1. 解析結果	V-1
1.2 初期状態.....	V-2
1.3 各ケースの結果.....	V-2

AppendixVI ナチュラルアナログに係る補足資料

1. パラワン島 Narra 地区の調査サイト及びその周辺の地質環境.....	VI-1
1.1 地質概要.....	VI-1
1.2 地下水の地球化学特性.....	VI-3
2. 分析試料.....	VI-6
3. XRD 分析.....	VI-6
3.1 分析条件.....	VI-6
3.2 分析結果.....	VI-8
4. XRF 分析.....	VI-14
4.1 分析条件.....	VI-14
4.2 分析結果.....	VI-14
5. ナチュラルアナログ試料の微細構造の観察.....	VI-18
5.1 分析条件.....	VI-18
5.2 分析結果.....	VI-19

AppendixVII 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. 廃棄体由来の発生ガスに関する現象妥当性検討に係る補足資料.....	VII-1
1.1 ガス移行場の状態を考慮した解析条件の設定.....	VII-1
1.2 感度解析の実施結果.....	VII-6
2. 状態設定に係る緩衝材の力学挙動試験に係る補足資料.....	VII-19
2.1 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.....	VII-19
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に係る補足資料.....	VII-33
3.1 ガス発生量のケーススタディ.....	VII-33

AppendixVIII 委員会議事録など

1. 令和2年度 第1回 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発検討委員会.....	VIII-1
1.1 日時.....	VIII-1
1.2 場所.....	VIII-1
1.3 議事.....	VIII-1
1.4 配布資料.....	VIII-1
1.5 出席者.....	VIII-1
1.6 議事録.....	VIII-2
2. 令和2年度 第2回 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発検討委員会 中間評価.....	VIII-6
2.1 (2-1) 廃棄体パッケージの閉じ込め性能に係る試験と評価.....	VIII-6
2.2 (2-2) 放射性廃棄物の特性、放射性核種の移行・反応に係る検討.....	VIII-9
2.3 (2-3) 人工バリア等処分場の機能への影響に係る検討.....	VIII-11
3. 令和2年度 第3回 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発検討委員会.....	VIII-15
3.1 日時.....	VIII-15
3.2 場所.....	VIII-15
3.3 議事.....	VIII-15
3.4 配布資料.....	VIII-15
3.5 出席者.....	VIII-15

3.6 議事録 VIII-16

目 次

【Appendix I】

図 2.1-1	骨材の XRD チャート	I-3
図 2.1-2	セメントペースト試料の XRD チャート	I-9
図 2.1-3	コンクリートの XRD チャート	I-9
図 2.1-4	モルタルの XRD チャート (乾燥条件の差異)	I-10
図 2.1-5	モルタルの XRD チャート (細骨材量、細骨材種類の差異)	I-10
図 2.1-6	モルタルの XRD チャート (セメント種類の差異)	I-10
図 2.1-7	OPC ペーストの TG-DTA 曲線	I-11
図 2.1-8	OPC コンクリートの TG-DTA 曲線	I-11
図 2.1-9	モルタル試料の TG-DTA 曲線 (OPC モルタル、砕砂使用)	I-12
図 2.1-10	モルタル試料の TG-DTA 曲線 (OPC モルタル、珪砂使用)	I-12
図 2.1-11	モルタル試料の TG-DTA 曲線 (混合セメントモルタル、砕砂使用)	I-13
図 2.1-12	細孔径分布の測定結果	I-14
図 2.1-13	測定試料の累積空隙径の比較	I-15
図 2.1-14	モルタル試料の水分量 (材齢 28 日データのみ)	I-16
図 2.1-15	名古屋大学コバルト 60 γ 線照射室での照射試験状況	I-18
図 2.1-16	コンクリート試料からの水素ガス発生量の測定試験照射イメージ	I-18
図 2.1-17	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でのコン クリートの照射試験状況	I-19
図 2.1-18	モルタル試料からの水素ガス発生量の測定試験照射イメージ	I-19
図 2.1-19	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でのペレ ット状モルタルの照射試験状況-1	I-20
図 2.1-20	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でのペレ ット状モルタルの照射試験状況-2	I-20
図 2.1-21	試料温度測定用に熱電対を埋め込んだ OPC モルタル試料 ($\phi 6.5\text{mm} \times 13\text{mm}$)	I-21
図 2.1-22	真空システム系統図	I-21
図 2.1-23	γ 線照射時の圧力変化 (1)-①、 $\phi 60\text{mm} \times 150\text{mm}$ 試料)	I-23
図 2.1-24	γ 線照射時の圧力変化 (1)-②、粉碎後試料)	I-23
図 2.1-25	温度 22 $^{\circ}\text{C}$ に補正した圧力値の経時変化	I-23
図 2.1-26	モルタル試料の水分量と水素発生量 ($\mu\text{mol/g/kGy}$) の関係	I-27
図 2.1-27	セメント種類ごとの自由水量と水素発生量の関係	I-29
図 2.1-28	平成 30 年度～令和 2 年度のペレット試料の水分量と水素発生量の関係	I-30
図 2.1-29	平成 30～令和 2 年度のペレット試料の自由水量と水素発生量の関係 (拡大)	I-31
図 2.1-30	平成 31～令和 2 年度のペレット試料の水分量と G 値の関係	I-35

図 2.1-31	硬化過程のすき間充填材からの水素ガス発生量の確認試験の練り混ぜ・充填状況	I-40
図 2.1-32	硬化過程のすき間充填材からの水素ガス発生量の確認試験照射実施状況.....	I-40
図 2.1-33	照射時間と単位線量、試料重量あたりの水素発生量 ($\mu\text{mol/g/kGy}$) との関係	I-43
図 2.1-34	照射時間と試料重量あたりの水素発生量 ($\mu\text{mol/g}$) との関係.....	I-43
図 2.1-35	圧力測定装置イメージ.....	I-45
図 2.1-36	常時測定に用いた試験装置の概略.....	I-46
図 2.1-37	試料のガス置換実施状況	I-47
図 2.1-38	ステンレス製圧力容器及びガス取り出しタンク.....	I-47
図 2.1-39	圧力上昇確認のための照射試験の様子	I-48
図 2.1-40	1 回目の圧力検討試験時の常時測定の結果 (圧力の温度補正無し)	I-50
図 2.1-41	2 回目の圧力検討試験時の常時測定の結果 (圧力の温度補正無し)	I-50
図 2.1-42	圧力検討試験時の常時測定の結果 (25°Cの圧力値に補正)	I-51
図 2.1-43	実照射線量と容器内圧力の上昇との関係.....	I-52
図 2.1-44	容器内圧力の上昇と容器内ガス濃度との関係	I-53
図 2.1-45	想定する廃棄体パッケージの形状.....	I-59
図 2.1-46	アクリル製型枠への充填性作業状況	I-61
図 2.1-47	スランブ測定の状況.....	I-61
図 2.1-48	モックアップの寸法図.....	I-63
図 2.1-49	型枠の外観	I-63
図 2.1-50	スランブ及び空気量の測定状況 (モックアップ製作時)	I-64
図 2.1-51	型枠への充填作業状況.....	I-65
図 2.1-52	脱枠後のモックアップの外観.....	I-65
図 2.1-53	乾燥によるモックアップの質量変化.....	I-66
図 2.1-54	乾燥後モックアップへのドラム缶収納状況.....	I-66
図 2.1-55	60cm 角コンクリート試験体 (水粉体比 27%) の乾燥工程における質量減少測定 (平成 31 年度製作・測定)	I-67
図 2.1-56	充填材にモルタルを用いた場合の平蓋構造の伝熱解析モデル.....	I-72
図 2.1-57	伝熱解析結果.....	I-72
図 2.1-58	乾燥前後の圧縮強度の比較.....	I-82
図 2.1-59	乾燥前後の静弾性係数の比較.....	I-82
図 2.1-60	封緘養生 28 日の含水率.....	I-83
図 2.1-61	乾燥試験結果.....	I-84
図 2.1-62	残存含水率	I-85
図 2.1-63	10*10*40 試験体における水分逸散性状のフィッティング結果.....	I-86
図 2.1-64	フィッティングで得られた係数	I-86

図 2.1-65	D ₁ に与える水セメント比の影響	I-86
図 2.1-66	D ₁ に与える温度の影響	I-87
図 2.1-67	試験体 A、B、B-seal の実験結果と解析結果の比較	I-88
図 2.1-68	割裂した試験体の一例	I-90
図 2.1-69	OPC モルタル硬化体の長さ変化率	I-98
図 2.1-70	FAC15 モルタル硬化体の長さ変化率	I-98
図 2.1-71	FAC30 モルタル硬化体の長さ変化率	I-99
図 2.1-72	SC10 モルタル硬化体の長さ変化率	I-99
図 2.1-73	OPC ペースト硬化体の XRD 測定結果	I-103
図 2.1-74	FAC15 ペースト硬化体の XRD 測定結果	I-104
図 2.1-75	FAC30 ペースト硬化体の XRD 測定結果	I-105
図 2.1-76	FAC30 硬化体ペーストの 2 θ =5°~35°の XRD パターン	I-106
図 2.1-77	SC10 ペースト硬化体の XRD 測定結果	I-107
図 2.1-78	20°C試料の Ca(OH) ₂ 含有量の経時変化	I-108
図 2.1-79	加速試験の XRD 結果 (OPC ペースト硬化体)	I-113
図 2.1-80	加速試験の XRD 結果 (FAC15 ペースト硬化体)	I-114
図 2.1-81	加速試験の XRD 結果 (FAC30 ペースト硬化体)	I-115
図 2.1-82	加速試験の XRD 結果 (SC10 ペースト硬化体)	I-116
図 2.1-83	セメントペーストの TG-DTA 曲線	I-118
図 2.1-84	コンクリートの TG-DTA 測定結果	I-120
図 2.2-1	破壊モードと強度評価方法	I-125
図 2.2-2	弾完全塑性モデルの応力・ひずみ曲線における塑性崩壊の考え方	I-126
図 2.2-3	2倍勾配法	I-126
図 2.2-4	解析結果 ($t_c = 10$ mm、 $H_c = 1250$ mm、 $\mu = 0$)	I-127
図 2.2-5	Mises 応力分布 (外圧 6.4 MPa、 $t_c = 10$ mm、 $H_c = 1250$ mm、 $\mu = 0$)	I-128
図 2.2-6	Mises 応力分布 (内圧 0.12 MPa、 $t_c = 10$ mm、 $H_c = 1250$ mm、 $\mu = 0$)	I-129
図 2.2-7	要素分割の影響 ($t_c = 10$ mm、 $H_c = 1250$ mm、 $\mu = 0$)	I-131
図 2.2-8	有限要素分割 (Coarse、 $t_c = 10$ mm、 $H_c = 1250$ mm)	I-132
図 2.2-9	有限要素分割 (Medium、 $t_c = 10$ mm、 $H_c = 1250$ mm)	I-133
図 2.2-10	有限要素分割 (Very fine、 $t_c = 10$ mm、 $H_c = 1250$ mm)	I-134
図 2.2-11	内圧負荷時の境界条件 (当初設定した条件)	I-135
図 2.2-12	鉛直界面の接触の考慮の影響 ($t_c = 10$ mm、 $H_c = 1250$ mm、 $\mu = 0$)	I-136
図 2.2-13	亀裂前縁の位置	I-137
図 2.2-14	モード I の応力拡大係数 ($t_c = 10$ mm、 $H_c = 1250$ mm、 $\mu = 0$)	I-138
図 2.2-15	一体型 2重蓋構造の廃棄体パッケージの形状 (分離したシール板を使用)	I-139
図 2.2-16	応力拡大係数 (内圧 1 MPa 負荷、 $H_c = 1250$ mm、 $\mu = 0$)	I-140

図 2.2-17	応力拡大係数（内圧 1 MPa 負荷、 $H_c = 1250$ mm、 $\mu = 0$ ）	I-141
図 2.2-18	応力拡大係数（外圧 1 MPa 負荷、 $H_c = 1250$ mm、 $\mu = 0$ ）	I-142
図 2.2-19	応力拡大係数（外圧 1 MPa 負荷、 $H_c = 1250$ mm、 $\mu = 0$ ）	I-143
図 2.2-20	崩壊荷重に及ぼす摩擦の影響（ $t_c = 10$ mm）	I-145
図 2.2-21	応力拡大係数に及ぼす摩擦の影響（ $t_c = 10$ mm）	I-146

【Appendix II】

図 3.1-1	BPI ガラス溶融パイロット試験装置の全景及び溶融炉内部	II-2
図 3.1-2	溶融及び出湯の状態	II-3
図 3.1-3	アニール後の BPI ガラスの外観	II-3
図 3.1-4	作製した BPI ガラスの XRD	II-4
図 3.2-1	実規模固化体（ホウケイ酸ガラス）の観察例	II-7
図 3.2-2	モックアップ試験におけるアニーリング後の BPI ガラスの概観	II-7
図 3.2-3	BPI ガラスの微細構造におけるホウ素	II-9
図 3.2-4	XPS 分析結果に基づく BPI ガラス中のヨウ素の存在状態の類推	II-10
図 3.3-1	マイクロリアクタ通水試験後の BPI ガラスの断面の SEM 画像	II-14
図 3.3-2	マイクロリアクタ通水試験後の BPI ガラスの XRD	II-15
図 3.3-3	ベントナイト平衡水に浸漬した BPI ガラスの TEM 画像（静的浸漬試験）	II-15
図 3.3-4	マイクロリアクタ通水試験後の BPI ガラスの TEM 画像	II-15
図 3.3-5	静的浸漬試験とマイクロリアクタ通水試験の変質層の厚みの比較	II-16
図 3.3-6	マイクロリアクタ通水試験後の BPI ガラスの STEM-EDS マッピング	II-16
図 3.3-7	降水系地下水に浸漬した BPI ガラスの XRD	II-17
図 3.3-8	降水系地下水に浸漬した BPI ガラスの SEM-EDS	II-17
図 3.3-9	NaCl 0.55M に浸漬した BPI ガラスの SEM 画像	II-18
図 3.3-10	NaCl 0.55M に浸漬した BPI ガラスの EDS	II-19
図 3.3-11	NaCl 0.55M に浸漬した BPI ガラスの EDS による組成マッピング	II-19
図 3.3-12	NaCl 0.55M に浸漬した BPI ガラスの XRD	II-20
図 3.3-13	NaCl 0.55M に浸漬した BPI ガラスの STEM-EDS による組成マッピング	II-20

【Appendix V】

図 1-1	鉱物組成図における凡例	V-1
図 1-2	解析初期における鉱物組成分布	V-2

【Appendix VI】

図 1-1	パラワンオフィオライトの定置	VI-2
-------	----------------	------

図 1-2	パラワンオフィオライトの風化	VI-2
図 1-3	パラワンオフィオライトの浸食－破砕－運搬－堆積による砕屑性堆積物の形成	VI-3
図 1-4	砕屑性堆積物中に浸透する高アルカリ地下水との相互作用	VI-3
図 1-5	Narra 地区の調査サイトの模式層序学的断面図と地下水（湧水）の水質	VI-5
図 3-1	分析試料一覧	VI-7
図 3-2	PWT07-17-Rh-009 の不定方位 XRD 分析結果	VI-11
図 3-3	PWT07-17-Rh-C03 の不定方位 XRD 分析結果	VI-11
図 3-4	PWT07-17-Rh-C04 の不定方位 XRD 分析結果	VI-12
図 3-5	PWT07-17-Rh-C05 の不定方位 XRD 分析結果	VI-12
図 3-6	PWT07-17-Rh-009 の定方位 XRD 分析結果（赤：EG 処理後）	VI-13
図 3-7	PWT07-17-Rh-C03 の定方位 XRD 分析結果（赤：EG 処理後）	VI-13
図 4-1	各試料の XRF 分析結果（酸化物表記、CO ₂ を含む）	VI-17
図 4-2	各試料の XRF 分析結果（酸化物表記、CO ₂ を含まず）	VI-17
図 5-1	研磨片の一覧	VI-18
図 5-2	鏡面研磨薄片の一覧	VI-18
図 5-3	PWT07-17-Rh-009 の FIB 加工過程	VI-19
図 5-4	PWT07-17-Rh-C03 の偏光顕微鏡像（火山灰由来の堆積物）	VI-21
図 5-5	火山ガラス周辺の FIB 加工過程	VI-22
図 5-6	PWT07-17-Rh-C03 の偏光顕微鏡像（蛇紋岩由来の岩片など）	VI-23
図 5-7	PWT07-17-Rh-C03 蛇紋岩岩片周囲の二次鉱物の FIB 加工過程	VI-24
図 5-8	PWT07-17-Rh-C04 構成鉱物の偏光顕微鏡像	VI-25
図 5-9	PWT07-17-Rh-C05 構成鉱物の偏光顕微鏡像	VI-26
図 5-10	PWT07-17-Rh-C05 構成鉱物の SEM-EDS 元素マッピング	VI-26

【Appendix VII】

図 1-1	相対浸透率と毛細管圧力曲線（廃棄体・コンクリート）	VII-4
図 1-2	相対浸透率と毛細管圧力曲線（緩衝材）	VII-5
図 1-3	相対浸透率と毛細管圧力曲線（埋め戻し）	VII-5
図 1-4	ガス発生速度の時間変化	VII-6
図 1-5	ケース 1、2 の埋め戻しにおけるガス相圧力、水相圧力、水相飽和度の時間変化	VII-7
図 1-6	ケース 1、2 の上部緩衝材におけるガス相圧力、水相圧力、水相飽和度の時間変化	VII-8
図 1-7	ケース 1、2 の下部緩衝材におけるガス相圧力、水相圧力、水相飽和度の時間変化	VII-9
図 1-8	ケース 1、2 の廃棄体におけるガス相圧力、水相圧力、水相飽和度の時間変化	VII-10
図 1-9	ケース 1、2 のガス相圧力分布の時間変化（50 年～200 年）	VII-11

図 1-10	ケース 1、2 のガス相圧力分布の時間変化 (300 年～10000 年)	VII-12
図 1-11	ケース 1、2 の水相飽和度分布の時間変化 (50 年～200 年)	VII-13
図 1-12	ケース 1、2 の水相飽和度分布の時間変化 (300 年～10000 年)	VII-14
図 1-13	ケース 3 の埋め戻し、上部緩衝材におけるガス相圧力、水相圧力、水相飽和度の時間変化	VII-15
図 1-14	ケース 3 の下部緩衝材、廃棄体におけるガス相圧力、水相圧力、水相飽和度の時間変化	VII-16
図 1-15	ケース 3 のガス相圧力分布の時間変化 (50 年～1000 年)	VII-17
図 1-16	ケース 3 の水相飽和度分布の時間変化 (50 年～1000 年)	VII-18
図 2-1	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	VII-19
図 2-2	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 80%)	VII-20
図 2-3	圧密曲線 (乾燥密度 1.3Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 80%)	VII-20
図 2-4	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 80%)	VII-21
図 2-5	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 80%)	VII-22
図 2-6	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 80%)	VII-22
図 2-7	圧密曲線 (乾燥密度 1.6Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 80%)	VII-23
図 2-8	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 80%)	VII-23
図 2-9	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 80%)	VII-24
図 2-10	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 80%)	VII-24
図 2-11	圧密曲線 (乾燥密度 1.8Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 80%)	VII-25
図 2-12	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 80%)	VII-25
図 2-13	せん断応力、平均有効主応力、過剰間隙水圧の経時変化 (乾燥密度 1.3Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 80%)	VII-26
図 2-14	せん断応力、平均有効主応力、過剰間隙水圧の経時変化 (乾燥密度 1.6Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 80%)	VII-27
図 2-15	せん断応力、平均有効主応力、過剰間隙水圧の経時変化 (乾燥密度 1.8Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 80%)	VII-27
図 2-16	軸ひずみとせん断応力の関係 (乾燥密度 1.3Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 80%)	VII-28
図 2-17	軸ひずみとせん断応力の関係 (乾燥密度 1.6Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 80%)	VII-28

図 2-18	軸ひずみとせん断応力の関係 (乾燥密度 1.8Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 80%)	VII-29
図 2-19	有効応力経路 (乾燥密度 1.3Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 80%)	VII-30
図 2-20	有効応力経路 (乾燥密度 1.6Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 80%)	VII-30
図 2-21	有効応力経路 (乾燥密度 1.8Mg/m ³ 、モンモリロナイト含有率 80%)	VII-31
図 2-22	せん断後の供試体の状況	VII-32
図 3-1	ケース 0A における最終評価結果 (1,000 年まで)	VII-36
図 3-2	ケース 0A における最終評価結果 (1,000~10,000 年まで)	VII-36
図 3-3	ケース 0B における最終評価結果 (1,000 年まで)	VII-36
図 3-4	ケース 0B における最終評価結果 (1,000~10,000 年まで)	VII-36
図 3-5	廃棄体グループ 2 の処分坑道の温度の経時変化予測と金属の腐食速度の設定	VII-37
図 3-6	金属腐食速度設定の違い (ジルカロイ)	VII-38
図 3-7	金属腐食速度設定の違い (ステンレス鋼)	VII-38
図 3-8	金属腐食速度設定の違い (炭素鋼)	VII-38
図 3-9	ケース 2A における最終評価結果 (1,000 年まで)	VII-39
図 3-10	ケース 2A における最終評価結果 (1,000~10,000 年まで)	VII-39
図 3-11	ケース 2B における最終評価結果 (1,000 年まで)	VII-39
図 3-12	ケース 2B における最終評価結果 (1,000~10,000 年まで)	VII-39
図 3-13	廃棄体パッケージ内でのモルタル自由水の消費 (ケース 3-1A)	VII-41
図 3-14	廃棄体パッケージ内でのモルタル自由水の消費 (ケース 3-1B)	VII-42
図 3-15	ケース 3-1A における最終評価結果 (1,000 年まで)	VII-43
図 3-16	ケース 3-1A における最終評価結果 (1,000~10,000 年まで)	VII-43
図 3-17	ケース 3-1B における最終評価結果 (1,200 年まで)	VII-43
図 3-18	ケース 3-1B における最終評価結果 (1,000~10,000 年まで)	VII-43
図 3-19	ケース 3-2 における最終評価結果 (1,000 年まで)	VII-44
図 3-20	ケース 3-2 における最終評価結果 (1,000~10,000 年まで)	VII-44
図 3-21	再冠水評価の解析モデル	VII-46
図 3-22	ケース 4A における最終評価結果 (1,000 年まで)	VII-48
図 3-23	ケース 4A における最終評価結果 (1,000~10,000 年まで)	VII-48
図 3-24	ケース 4B における最終評価結果 (1,000 年まで)	VII-48
図 3-25	ケース 4B における最終評価結果 (1,000~10,000 年まで)	VII-48

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	使用材料.....	I-3
表 2.1-2	試料の条件（試料の大きさによる水素発生量の差異の確認）.....	I-4
表 2.1-3	試料の条件（コンクリート配合による水素発生量への影響確認、モルタル）.....	I-4
表 2.1-4	モルタル調製時の練混ぜ 1 バッチ当たりの材料使用量.....	I-5
表 2.1-5	試料の条件（コンクリート配合による水素発生量への影響確認、コンクリート）.....	I-5
表 2.1-6	試料の条件（温度による水素発生量の差異の確認）.....	I-6
表 2.1-7	試料の化学組成分析結果（単位：mass%）.....	I-8
表 2.1-8	鉱物相の解析結果.....	I-9
表 2.1-9	Ca(OH) ₂ 含有量及び CaCO ₃ 含有量.....	I-11
表 2.1-10	セメントペースト試料の水分量の測定結果.....	I-15
表 2.1-11	コンクリート試料の水分量の測定結果.....	I-15
表 2.1-12	モルタル試料の水分量の測定結果.....	I-16
表 2.1-13	分析するガス成分.....	I-22
表 2.1-14	ガスクロマトグラフィー装置の仕様（名古屋大学コバルト 60y 線照射室での照射試験	I-22
表 2.1-15	ガスクロマトグラフィー装置の仕様（量子科学技術研究開発機構（QST）高崎量子 応用研究所コバルト棟での照射試験）.....	I-22
表 2.1-16	試験データ（試料の大きさによる水素ガス発生量の差異の確認）.....	I-24
表 2.1-17	ガス分析結果（試料の大きさによる水素ガス発生量の差異の確認）.....	I-24
表 2.1-18	照射試験測定結果（試料の大きさによる水素ガス発生量の差異の確認）.....	I-24
表 2.1-19	照射試験測定結果（コンクリート配合による水素発生量への影響確認、コンクリ ート）.....	I-25
表 2.1-20	照射試験測定結果（コンクリート配合による水素発生量への影響確認、モルタル）	I-26
表 2.1-21	照射試験測定結果（温度による水素発生量の差異の確認）.....	I-29
表 2.1-22	試料の水分量と G 値.....	I-34
表 2.1-23	試料の条件（すき間充填材からの水素発生量の確認）.....	I-38
表 2.1-24	すき間充填材の配合比（水材料比）と練混ぜ時の計量値.....	I-39
表 2.1-25	フレッシュ性状試験の概略.....	I-39
表 2.1-26	すき間充填材のフレッシュ性状の測定結果.....	I-41
表 2.1-27	すき間充填材の化学組成（単位：mass%）.....	I-41
表 2.1-28	すき間充填材の水分量の測定結果.....	I-42

表 2.1-29	照射時間と水素発生量との関係	I-42
表 2.1-30	すき間充填材の G 値.....	I-44
表 2.1-31	冷却前後の照射後圧力の比較.....	I-49
表 2.1-32	圧力測定検討試験における圧力変化（常時測定試料は除く）	I-51
表 2.1-33	ガス濃度の測定結果.....	I-52
表 2.1-34	水素発生量の測定結果.....	I-53
表 2.1-35	圧力測定に用いたセメントペースト試料の G 値.....	I-54
表 2.1-36	プレキャスト方式の概略工程.....	I-57
表 2.1-37	内部充填材の設計・製作の基本的な考え方.....	I-59
表 2.1-38	使用材料.....	I-60
表 2.1-39	内部充填材のコンクリート配合	I-60
表 2.1-40	アクリル製型枠への充填結果.....	I-61
表 2.1-41	モックアップ製作における使用材料.....	I-62
表 2.1-42	モックアップ製作における配合	I-62
表 2.1-43	JIS A 0202 における繊維系断熱材に係る用語.....	I-69
表 2.1-44	JIS A 0202 における多孔質系断熱材に係る用語.....	I-70
表 2.1-45	JIS A 0202 における発泡系断熱材に係る用語.....	I-71
表 2.1-46	伝熱解析の条件.....	I-72
表 2.1-47	断熱材の代表的な種類.....	I-73
表 2.1-48	断熱材料として使用される主な無機繊維材料	I-74
表 2.1-49	ケイ酸カルシウム材料の特長.....	I-74
表 2.1-50	配合.....	I-81
表 2.1-51	乾燥開始から乾燥集口湯までの間に実施する測定項目及び試験方法.....	I-82
表 2.1-52	乾燥工程の有無による水分浸透の比較試験における配合	I-89
表 2.1-53	水分浸透深さの測定結果.....	I-91
表 2.1-54	モルタル硬化体の定温度試験条件.....	I-95
表 2.1-55	質量測定結果.....	I-96
表 2.1-56	長さ変化の測定結果.....	I-97
表 2.1-57	ペースト硬化体の定温度試験条件.....	I-100
表 2.1-58	EPMA 測定条件.....	I-101
表 2.1-59	TG-DTA 測定結果.....	I-108
表 2.1-60	ポロシメータ測定結果.....	I-111
表 2.1-61	ペースト硬化体を用いた加速試験条件	I-112
表 2.2-1	適用したメッシュ分割.....	I-130

【Appendix II】

表 3.1-1	切り出した各部分の平均密度.....	II-3
表 3.1-2	BPI ガラス固化体のヨウ素含有量測定結果.....	II-4
表 3.2-1	ホウケイ酸ガラスと BPI ガラスの評価上のモデル比較.....	II-6
表 3.3-1	炭酸塩影響試験条件.....	II-11
表 3.3-2	浸漬液の分析結果.....	II-11
表 3.3-3	これまでに実施した固相分析結果の一覧.....	II-13

【Appendix III】

表 1-1	JAEA TDB (2020)における主な更新内容.....	III-1
表 1-2	JAEA TDB (2020)で追加されたセレ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-3
表 1-3	JAEA TDB (2020)で追加された酢酸及び酢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-3
表 1-4	JAEA TDB (2020)で追加されたマグネシウムイオン及びマグネシ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 1-5	JAEA TDB (2020)で追加された鉄イオン及び鉄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 1-6	JAEA TDB (2020)で追加された臭素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 1-7	JAEA TDB (2020)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-7
表 1-8	JAEA TDB (2020)で追加されたセレン含有鉱物の固相及びガスの熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t=25^{\circ}\text{C}$ and $P=1\text{ bar}$).....	III-8
表 1-9	JAEA TDB (2020)で追加されたマグネシウム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 1-10	JAEA TDB (2020)で追加された鉄 (III) 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-15
表 1-11	JAEA TDB (2020)で追加された臭素 (I) 含有液体、鉱物及びガスの熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t=25^{\circ}\text{C}$ and $P=1\text{ bar}$).....	III-18
表 1-12	JAEA TDB (2020)で追加された鉄 (II) 含有ケイ酸塩の熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t=25^{\circ}\text{C}$ and $P=1\text{ bar}$).....	III-18
表 1-13	JAEA TDB (2020)で追加されたフライアッシュガラスの熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t=25^{\circ}\text{C}$ and $P=1\text{ bar}$).....	III-19
表 1-14	JAEA TDB (2020)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-19

【Appendix IV】

表 1-1	Kunigel V1 の初期鉱物組成.....	IV-1
表 1-2	OPC クリンカーの化学組成.....	IV-3
表 1-3	OPC クリンカーの鉱物組成.....	IV-3
表 1-4	OPC の初期水和物組成.....	IV-4
表 2-1	二次鉱物の設定.....	IV-4
表 3-1	モンモリロナイトのイオン交換選択係数.....	IV-4
表 3-2	初期間隙水組成として入力した値.....	IV-5
表 4-1	(3) 式を用いる場合の溶解速度式中の定数.....	IV-6
表 4-2	モンモリロナイトの溶解速度式中の定数.....	IV-7
表 4-3	炭酸を含む鉱物の溶解速度式中の定数.....	IV-7
表 4-4	石英の溶解速度式中の定数.....	IV-8
表 4-5	C/S 比に依存した C-S-H ゲルの速度定数.....	IV-8
表 4-6	(11) 式を用いる場合の溶解速度式中の定数.....	IV-9
表 4-7	鉱物の初期比表面積.....	IV-10

【Appendix V】

表 1-1	ケース 1 の解析結果.....	V-3
表 1-2	ケース 2 の解析結果.....	V-4
表 1-3	ケース 3 の解析結果.....	V-5
表 1-4	ケース 4 の解析結果.....	V-6
表 1-5	ケース 5 の解析結果.....	V-7
表 1-6	ケース 6 の解析結果.....	V-8
表 1-7	ケース 7 の解析結果.....	V-9
表 1-8	ケース 8 の解析結果.....	V-10

【Appendix VI】

表 1-1	ナチュラルアナログ調査地点（パラワン島及びルソン島）の水質分析結果.....	VI-5
表 2-1	分析試料一覧.....	VI-6
表 3-1	分析条件（不定方位）.....	VI-8
表 3-2	XRD 分析条件（定方位）.....	VI-8
表 3-3	不定方位 XRD 分析結果一覧.....	VI-10
表 3-4	定方位 XRD 分析におけるエチレングリコール（EG）処理前後の スメクタイト d(001) ピーク移動量.....	VI-10

表 4-1	XRF 分析条件	VI-14
表 4-2	XRF 分析による定量結果（酸化物表記、CO ₂ 含む）	VI-15
表 4-3	XRF 分析による定量結果（酸化物表記、CO ₂ 含まず）	VI-16
表 5-1	火山ガラスの化学組成	VI-22

【Appendix VII】

表 1-1	水理物性一覧	VII-3
表 1-2	相対浸透率曲線を表現する構成モデル	VII-4
表 1-3	毛細管圧力曲線を表現する構成モデル	VII-4
表 2-1	関口・太田モデルの降伏曲面のパラメータ	VII-31
表 3-1	解析ケースの一次案	VII-33
表 3-2	解析ケースの全体像	VII-33
表 3-3	解析ケース 2：より現実的な金属の腐食速度における条件設定	VII-37
表 3-4	考え方による容器寿命の相違	VII-40
表 3-5	解析ケース 3：容器寿命の代替設定	VII-40
表 3-6	解析ケース 4：より現実的な過渡変遷における条件設定	VII-45

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閉じ込め性能に係る試験と評価	
2.1 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
2.2 廃棄体パッケージの構造健全性評価	2.1.4 廃棄体パッケージの構造健全性評価

2. 廃棄体パッケージの製作技術の整備

2.1 廃棄体パッケージ内充填材の仕様の検討

2.1.1 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。

2.1.2 水素ガスの発生抑制及び発生量の見積もり方法に関する検討

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。

- ・ 内部充填材のセメント系材料からの水素発生量に関する検討
- ・ すきま充填材からの水素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

(1) 内部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 年度に、内部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、セメントペースト試料を用いて水素発生量を測定した。その結果、試料中に含まれる水分量を少なくすることで水素発生量を低減できること、そのためには乾燥が有効な手段の一つであることが明らかになった。一方で、試料中の水の存在状態（自由水や結晶水等）や水以外の成分（高炉スラグに含まれる硫化物等の共存元素等）が水素ガス発生に影響を及ぼすことも明らかとなった。

平成 31 年度は、内部充填材のセメント系材料からの水素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発生量の関係を検討した。また、そのデータから、内部充填材からの水素発生量 G 値の見積り方法について検討した。その結果、水素発生量は自由水量に支配される（結合水は自由水に比べてその寄与は小さい）こと、試料質量あたりの G 値 ($G_{H_2(All)}$) と水量との間に一定の傾向が見られることを確認した。

一方で、これまでの検討はセメントペーストを主体に、一部モルタルを用いて実施してきたが、実際の内部充填材の候補材料であるコンクリートでは骨材割合が多く、骨材に含まれる水による水素ガス発生への影響が顕在化する可能性がある。このことから、コンクリート配合における水素発生量を検討する必要がある。また、発生した水素ガスはセメント系材料内を拡散により移動して外部に放出されるため、試料の大きさにより水素ガスの発生量に差異が生じる可能性を検討する必要がある。さらに、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、内部充填材の温度条件による水素発生量への影響を整理する必要がある。

以上を踏まえ、令和 2 年度は以下を実施した。

- 1) 試料の大きさによる水素発生量の差異の確認
- 2) コンクリート配合による水素発生量への影響確認
- 3) 温度による水素発生量の差異の確認

なお、セメント硬化体に含まれる水の放射線分解による水素発生とは、まず、セメント硬化体の内部で水素が生成し、次いで、生成した水素がセメント硬化体の外部に放出されるという過程を経ると考えられる。廃棄体パッケージの構造健全性に影響するのは、セメント硬化体外部へ放出された水素である。そこで、本 Appendix においては、「水素生成」はセメント硬化体内部での水素の生成、「水素生成量」はセメント硬化体内部で生成した水素量、「水素発生」はセメント硬化体外部への水素の放出、「水素発生量」はセメント硬化体外部に放出された水素量と、それぞれ定義する。

1) 試験水準及び試料

① 使用材料

試験試料の作製に用いた使用材料を表 2.1-1 に示す。また、使用した細骨材の XRD チャートを図 2.1-1 に示す。令和 2 年度に細骨材として使用した砕砂には、粘土鉱物 (Muscovite、

Clinochlore) が含まれていた。

表 2.1-1 使用材料

材 料	仕 様
普通ポルトランドセメント (OPC)	セメントペースト及びモルタル: 一般社団法人セメント協会, 研究用セメント コンクリート: 太平洋セメント(株)社製 普通ポルトランドセメント
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4240cm ² /g)
粗骨材	茨城県桜川産碎石 (粗骨材最大寸法: 13mm)
細骨材	砕砂: 静岡県掛川市産山砂 (モルタル用は、1.2mmアンダーに調製) 珪砂: 5号珪砂(山川産業社掛津産)
化学混和剤 (コンクリートのみ使用)	AE減水剤: BASFジャパン株式会社製 マスターグレニウムSP8SV (ポリカルボン酸系 高性能AE減水剤 標準型 I 種) AE助剤: BASFジャパン株式会社製 マスターエア 303(AE剤 I 種)
練混ぜ水	セメントペースト及びモルタル: イオン交換水 コンクリート: 上水道水

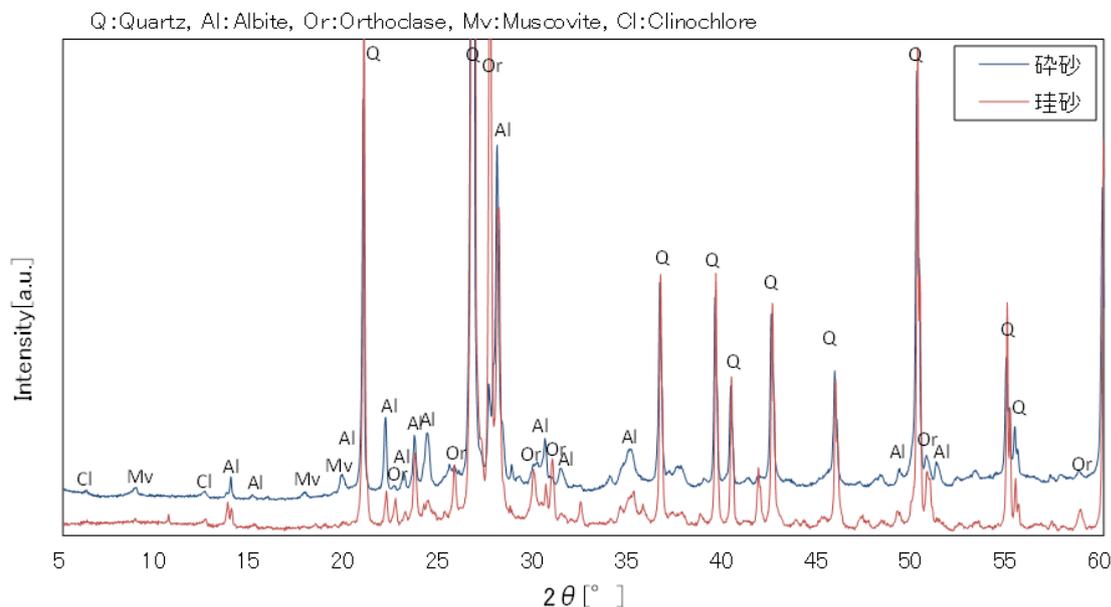


図 2.1-1 骨材のXRDチャート

② 試料の水準

(a) 試料の大きさによる水素発生量の差異の確認

平成 31 年度に実施した、「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」の確認試験においては、水素発生量が「内部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」の結果から見積もられた量より少なかった。この試験においてはφ60mm×150mmのセメントペースト試料(バルク試料)を用いていた。一方、「内部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」における水素発生量の測定においては、φ6.7mm×13mmのペレット状のセメントペースト試料を用いていた。γ線照射によりバルク試料内で生成した水素ガスは、系内を拡散により移動して外部に放出されるため、試料の大きさにより水素ガスの発生量に差異が生じる可能性があり得る。そこで、本検討においては、異なる大きさの試料を用いて水素発生量の差異が生じるかを確認した。

試料の条件を表 2.1-2 に示す。φ60mm×150mm の OPC ペースト硬化体を 2 本作製した。1 本はそのままの状態、もう 1 本は 6.7mm 以下に粉碎した後に γ 線照射を実施した。

表 2.1-2 試料の条件（試料の大きさによる水素発生の変異の確認）

試験 No.	試料名	試料条件				
		試料形状	セメント(C)	W/C	養生・材齢	乾燥条件
1)-①	OPCペースト	φ60mm×150mm の円柱	OPC	0.45	20°C、封緘 4W	表乾
1)-②	OPCペースト	6.7mmアンダー の塊状 (φ60mmを粉碎)	OPC	0.45		表乾

(b) コンクリート配合による水素発生量への影響確認

平成 31 年度まではセメントペーストを主体に、一部モルタルを用いて水素発生量を検討してきたが、実際の内部充填材は、含水率の低減の観点からコンクリートが有望な材料と考えられている。その場合、内部充填材中の骨材割合が多くなり、骨材に含まれる水が水素ガス発生に及ぼす影響が顕在化する可能性がある。そこで、本検討ではコンクリート配合による水素発生量への影響について検討した。本検討ではコンクリート試料を用いた試験に加え、比較的単純な系で個々の要因の影響を明確化すること、及び、過去のセメントペースト試料の試験と比較することを勘案し、骨材種類、骨材量、セメント種類及び乾燥条件が水素発生に及ぼす影響を、ペレット状のモルタル試料を用いて検討した。試料の水準を表 2.1-3 に示す。また、試料調製の際の、練混ぜ 1 バッチ当たりの材料の使用量を表 2.1-4 に示す。

表 2.1-3 試料の条件（コンクリート配合による水素発生量への影響確認、モルタル）

試験 No.	試料名	試料条件							
		セメント(C)	骨材	W/C	S/C	養生・材齢	乾燥条件	試料形状	
2)-①	OPCコンクリート	OPC	表 2.1-5 参照			20°C、封緘 4W	表乾	φ60mm ×150mm 円柱状	
2)-②	OPCコンクリート	OPC					80°C 1W		
2)-③	OPCコンクリート	OPC					20°C、封緘 8W		表乾
2)-④	OPCコンクリート	OPC					表乾		
2)-⑤	OPC-モルタル	OPC	砕砂	0.45	2	20°C、封緘 4W	表乾		φ6.5mm ×13mm 円柱状ペレット
2)-⑥	OPC-モルタル	OPC	砕砂	0.45	2		50°C 6h		
2)-⑦	OPC-モルタル	OPC	砕砂	0.45	2	4W	80°C 6h		
2)-⑧	OPC-モルタル	OPC	砕砂	0.45	2	80°C 24h	表乾		
2)-⑨	OPC-モルタル	OPC	砕砂	0.60	3	20°C、封緘 4W	表乾		
2)-⑩	OPC-モルタル	OPC	珪砂	0.45	2	20°C、封緘 4W	表乾		
2)-⑪	OPC-モルタル	OPC	珪砂	0.60	3	4W	表乾		
2)-⑫	FAC-モルタル	OPC:FA=7:3	砕砂	0.45	2	20°C、封緘 4W	表乾		
2)-⑬	BFSC-モルタル	OPC:BF=3:7	砕砂	0.45	2		表乾		

※モルタルに用いる細骨材は、砕砂は表乾、珪砂は絶乾。

表 2.1-4 モルタル調製時の練混ぜ 1 バッチ当たりの材料使用量

試験 No.	試料名	セメント(C)	骨材	W/C	S/C	使用量					
						単位	W	OPC	FA	BFS	S
2)-⑤	OPC-モルタル	OPC	砕砂	0.45	2	g	360	800	-	-	1,600
						ml	360	253	-	-	625
2)-⑥	OPC-モルタル	OPC	砕砂	0.45	2	g	360	800	-	-	1,600
						ml	360	253	-	-	625
2)-⑦	OPC-モルタル	OPC	砕砂	0.45	2	g	360	800	-	-	1,600
						ml	360	253	-	-	625
2)-⑧	OPC-モルタル	OPC	砕砂	0.45	2	g	360	800	-	-	1,600
						ml	360	253	-	-	625
2)-⑨	OPC-モルタル	OPC	砕砂	0.60	3	g	360	600	-	-	1,800
						ml	360	190	-	-	703
2)-⑩	OPC-モルタル	OPC	珪砂	0.45	2	g	360	800	-	-	1,600
						ml	360	253	-	-	625
2)-⑪	OPC-モルタル	OPC	珪砂	0.60	3	g	360	600	-	-	1,800
						ml	360	190	-	-	703
2)-⑫	FAC-モルタル	OPC:FA=7:3	砕砂	0.45	2	g	360	560	240	-	1,600
						ml	360	177	106	-	625
2)-⑬	BFSC-モルタル	OPC:BFS=3:7	砕砂	0.45	2	g	360	240	-	560	1,600
						ml	360	76	-	192	625

後述する内部充填材として想定される配合のコンクリート試料を用いて、異なる乾燥状態のコンクリートへγ線を照射した際の水素発生量を評価した。コンクリートの配合を表 2.1-5 に示す。コンクリート試料の大きさは、φ60mm×150mm とした。

また、モルタル試料による水素発生量の確認では、骨材は粘土鉱物等の水分を含む鉱物を含むことがあることから、骨材に含まれる水分の水素発生への影響を、表乾状態の砕砂と絶乾状態の珪砂を用いて検討した。また、骨材量については、砕砂、珪砂ともに S/C=2 と 3 の 2 水準とした。セメント種類については、OPC モルタルに加え、FAC モルタル及び BFSC モルタルを検討した。モルタル試料の大きさはφ6.5mm×13mm のペレット状とした。

表 2.1-5 試料の条件（コンクリート配合による水素発生量への影響確認、コンクリート）

試験No.	目標スランブ (cm)	目標空気量 (%)	W/C (%)	s/a (%)	単位量 (kg/m ³)				混和剤添加率*1	
					W	C	S	G	SP (C×%)	AE*2
2)-①～ 2)-④	18±2.5	4.5 ±1.5	45.0	43.8	170	378	752	984	0.10	0.0015

注記) ※1：混和剤は練混ぜ水の一部として用いた。

※2：レオビルド SP8SV を使用。

※3：マスターエア 303 を使用（添加率 (A) は、A=P×0.003%）。

(c) 温度による水素発生量の差異の確認

廃棄体グループ 2 やグループ 4H では廃棄体の発熱量が高いために、廃棄体設置後の廃棄体パッケージ内部の温度は高いと推定される。内部充填材の温度条件が異なると、水素ガスの発生反応及び拡散による外部への放出挙動に影響する事が考えられる。そこで、本検討においては、試料温度を高くした場合にセメント系材料からの水素発生量が変化するかの確認を行った。

令和 2 年度は試料にモルタルを使用し、温度を、第 2 次 TRU レポート p3-33 表 3.2.2.2-4 の熱解析の結果にある廃棄体中心温度と同程度の 80℃とした（電気事業連合会、核燃料サイクル開発機構、2005）。

表 2.1-6 試料の条件（温度による水素発生量の差異の確認）

試験 No.	試料名	試料条件							γ線照射時の温度
		セメント(C)	骨材	W/C	S/C	養生・材齢	乾燥条件	試料形状	
3)-①	OPCモルタル	OPC	砕砂	0.45	2	20℃、封緘 4W	表乾	φ6.5mm ×13mm 円柱状 ペレット	80℃
2)-⑤※	OPC-モルタル	OPC	砕砂	0.45	2		表乾		室温

※コンクリート配合の影響確認用試料のうち、材料、養生・材齢、乾燥条件が同一の試料と比較した

2) 照射試験試料の基本特性

① 試料の分析

γ線照射試験に供した試料の基礎物性を確認するための分析を実施した。大きさによる水素発生量の差異の確認に用いたセメントペースト試料 1)-①及び 1)-②については、同じバッチで練混ぜたセメントペーストの一部を分取して封緘養生したものを分析した。

コンクリート配合による水素発生量への影響確認に用いたコンクリート試料 2)-①～2)-④については、それらと同じバッチで練混ぜたコンクリートを用いて測定した。コンクリート試料についてはいずれも配合及び練混ぜバッチが同一であることから、表乾試料（2)-①、2)-③、2)-④に相当）のみ分析した項目では便宜的に試料名を 2)-①と表記する。

コンクリート配合による水素発生量への影響確認のうち、骨材種類、骨材量、セメント種類などの個々の要因の影響確認、及び、温度による水素発生量の差異の確認に用いたモルタル試料については、各水準の検討用に作成したペレット状試料を分取して分析に供した。以下に、各分析項目について記す。

(a) 化学組成分析

試料に対する吸収線量を求めるため、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。また、強熱減量 (ig.loss) の測定には、JIS R 5202 を準用した。

なお、蛍光 X 線分析には乾燥試料を供したため、2)-⑥～⑧及び 3)-①は乾燥条件や照射試験時の温度条件が異なるが 2)-⑤と同配合であることから、これらについては 2)-⑤で代表した。

(b) 粉末 X 線回折 (XRD) による鉱物の同定

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。コンクリートについては、表乾試料のみを分析した。モルタルについては、乾燥条件の違いによる鉱物組成の差異を確認するため、全試料を測定した。

測定には、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 $2\theta = 5 \sim 60^\circ$ ，
ソーラースリット 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： $0.0167^\circ / \text{step}$

(c) TG-DTA

試料に含有する $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 量及び CaCO_3 量を測定するため、TG-DTA 測定を実施した。コンクリートについては、表乾試料のみを分析した。

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℃付近の TG 曲線より $\text{Ca}(\text{OH})_2$ を、650℃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°C/min 測定温度範囲：室温～1000°C，測定雰囲気：N₂ ガス
リファレンス：α-Al₂O₃，試料量：約 30mg

(d) 細孔径分布

セメント系材料中の水の放射線分解による水素ガス発生メカニズムに関連して、試料中の細孔の壁面が水素ガス発生に影響を与える可能性があるため、細孔径分布を測定した。

なお、細孔径分布の測定には乾燥試料を供したため、2)-⑥～⑧及び 3)-①は乾燥条件や照射試験時の温度条件が異なるが 2)-⑤と同配合であることから、これらについては 2)-⑤で代表した。

細孔径分布の測定には水銀圧入式ポロシメータ（micromeritics 社製、AutoPoreIV 9520）を使用した。測定には 3～5 mm程度の塊状試料を用いた。測定セルのキャピラリ容積の 25～90%となるように試料を量り取り、容器内に水銀を注入して容器ごと圧力を加え、水銀を試料の空隙に圧入して、その容積を測定した。

(e) 試料中の水分量

水和したセメント材料に含まれる水分量においては、105°C以下で逸散する水分量を自由水量（含水率）、105°Cから 1000°Cまでの間に逸散する水分量を結合水量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°C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°C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°C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°Cから 600°C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°C以上では CaCO₃の分解温度条件となり、試料に含有する CaCO₃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°C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。

自由水量測定は、105°Cの恒温槽で 15 時間以上加熱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°C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(2.1-1)、(2.1-2)、(2.1-3)に示す。

$$w_F = (W_0 - W_{d1}) / W_0 \times 100 \quad (2.1-1)$$

$$w_c = (W_{d1} - W_{d2}) / W_0 \times 100 \quad (2.1-2)$$

$$w_{all} = w_F + w_c \quad (2.1-3)$$

ここで、 w_F ：自由水量 (mass%)

W_0 ：試料質量 (g)

W_{d1} ：105°C乾燥後の質量 (g)

w_c ：結合水量 (mass%)

W_{d2} ：600°C乾燥後の質量 (g)

w_{all} ：全水分量 (mass%)

② 試料の分析結果

(a) 化学組成分析

試料の化学組成分析結果を表 2.1-7 に示す。

表 2.1-7 試料の化学組成分析結果 (単位 : mass%)

試料名	試料概要	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
1)-① 1)-②	OPCペースト W/C=0.45	20.01	17.24	4.18	2.53	52.12	0.85	1.6	0.26	0.32	0.17	0.13	0.09
2)-①~④	OPCコンクリート	7.3	63.02	9.57	2.34	11.79	0.9	0.41	1.93	2.11	0.32	0.13	0.04
2)-⑤ ^{*)}	OPCモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2	9.86	55.64	8.08	2.61	19.48	0.73	0.59	1.51	1.28	0.25	0.07	0.05
2)-⑥	OPCモルタル、砕砂、 W/C=0.60、S/C=3	8.26	61.04	8.69	2.61	14.78	0.7	0.45	1.7	1.43	0.26	0.06	0.05
2)-⑩	OPCモルタル、珪砂、 W/C=0.45、S/C=2	8.36	60.84	6.02	1.55	19.25	0.44	0.56	0.68	1.94	0.13	0.06	0.04
2)-⑪	OPCモルタル、珪砂、 W/C=0.60、S/C=3	6.46	67.79	6.31	1.42	14.19	0.38	0.39	0.78	2.24	0.12	0.04	0.03
2)-⑫	FACモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2	8.23	60.26	9.92	2.77	14.32	0.73	0.48	1.56	1.37	0.34	0.08	0.05
2)-⑬	BFSCモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2	7.85	58.91	9.95	2.03	15.41	1.54	0.94	1.53	1.31	0.34	0.04	0.09

注) 2)-⑥~⑧及び3)-①は、乾燥条件や照射試験時の温度条件が異なるが同配合であり、2)-⑤の化学組成と同一であるため、2)-⑤で代表した。

(b) 粉末 X 線回折

試料の鉱物相の同定結果を表 2.1-8 に、XRD チャートを図 2.1-2~図 2.1-6 に示す。

OPC を用いた試料では、セメントペースト、モルタル、コンクリートを問わず、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。

セメントペースト (1)-①、図 2.1-2) においては、水和物は、ポルトランダイト (Ca(OH)₂)、C-S-H、エトリンガイト及びモノサルフェートが同定された。

コンクリート (2)-①、図 2.1-3) では、骨材由来の石英 (SiO₂)、長石類 (Albite、Orthoclase)、白雲母が同定された。骨材及びカルサイトのピークが強く、C-S-H のピークは確認されなかった。水和物はポルトランダイト、エトリンガイト、モノカーボネートが同定された。また、カルサイト (CaCO₃) も同定された。

モルタルにおいては、すべての試料において、水和物としてはポルトランダイト、エトリンガイト及びモノサルフェートが同定された。また、骨材由来の石英と長石類が同定された (図 2.1-4 ~図 2.1-6)。

モルタル中のセメント水和物について、配合が同じで乾燥条件を変えた 2)-⑤~2)-⑧及び3)-①では、温度をかけて乾燥した試料でのみ微小ながら C-S-H のピークが認められた (図 2.1-4)。これは温度がかかったことで C-S-H の水和が進み、他のピークに隠れていた C-S-H のピークが認められるようになったものと考えられる。

また、骨材種類及び骨材量を変えたモルタル中のセメント水和物については、珪砂を使用し骨材を S/C=3 と多くした試料で C-S-H が認められた (図 2.1-5)。

セメント種類による鉱物相の違いについては、FAC30 を用いた試料では、フライアッシュ起源のムライトが同定された。高炉スラグを混合した BFSC70 では、ポルトランダイトの生成量が少なくなっていた (図 2.1-6)。

表 2.1-8 鉱物相の解析結果

試料名	Portlandite P	Ettringite Ett	Monosulfate AFm	Monocarbonate AFc	β-C2S Be	C-S-H CSH	Calcite C	Mullite Mu	Quartz Q	Albite Al	Orthoclase Or	Muscovite Mv	不明ピーク ★
1)-①	◎	△	△		○	○							○
2)-①	○	△	△	△	○		○		◎	○	○	○	○
2)-⑤	○	△	△		○				◎	○			
2)-⑥	○	△	△		○	△			◎	○			
2)-⑦	○	△	△		○	△			◎	○			
2)-⑧	○	△	△		○	△			◎	○			
2)-⑨	○	△	△		○				◎	○	△		
2)-⑩	○	△	△		○	△			◎	○	○		
2)-⑪	○	△	△		○				◎	○	○		
2)-⑫	○	△	△		○			△	◎	○			
2)-⑬	△	△	△		○				◎	○			
3)-①	○	△	△		○				◎	○			

◎ : ピーク強度が強く明瞭 ○ : ピークが明瞭 △ : ピーク強度が弱い 無印 : ピークが認められない

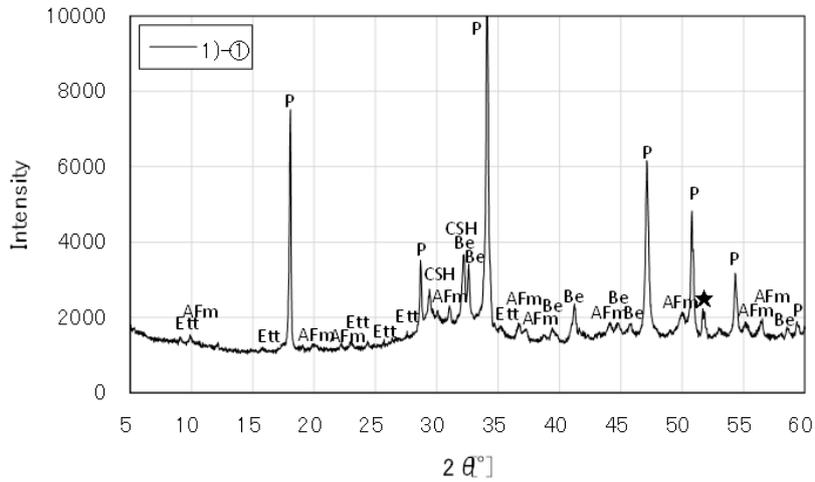


図 2.1-2 セメントペースト試料の XRD チャート

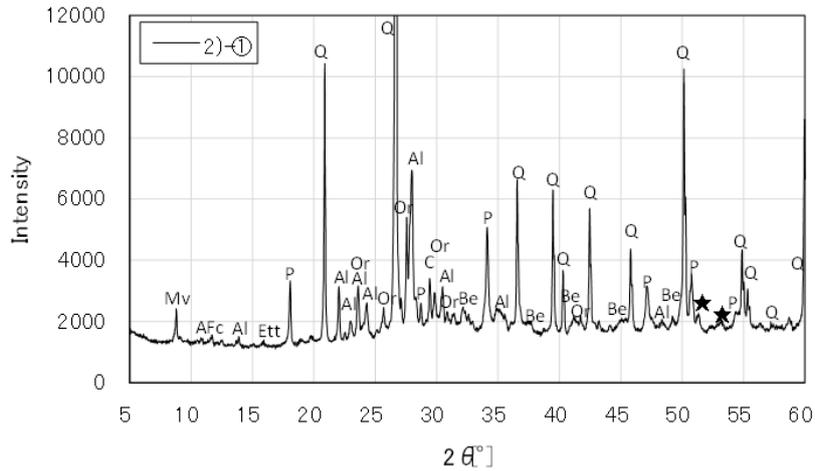


図 2.1-3 コンクリートの XRD チャート

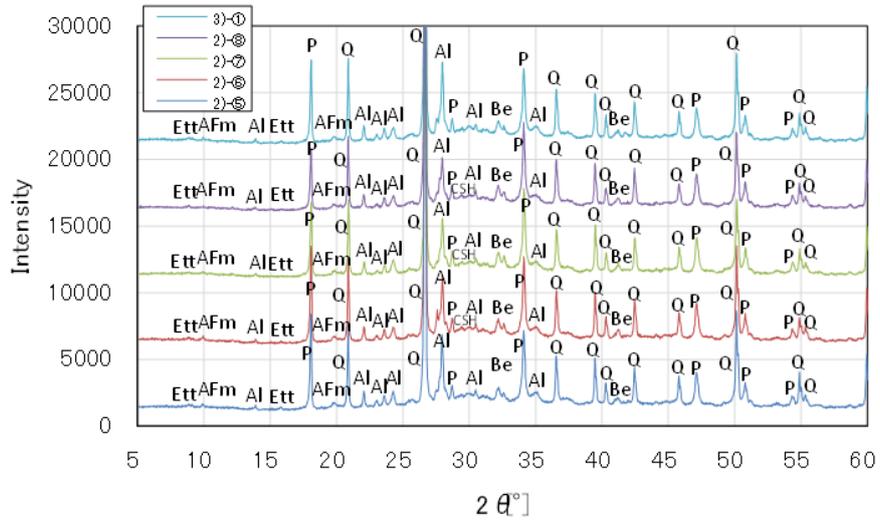


図 2.1-4 モルタルの XRD チャート (乾燥条件の差異)

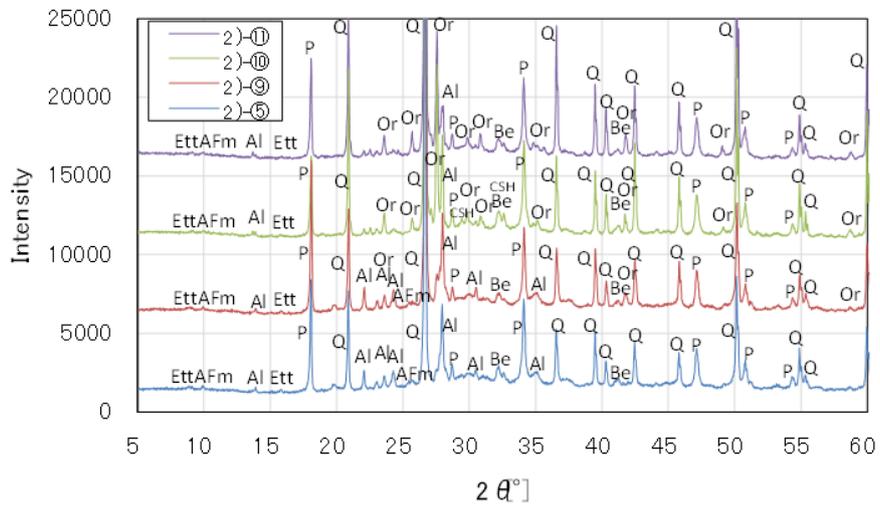


図 2.1-5 モルタルの XRD チャート (細骨材量、細骨材種類の差異)

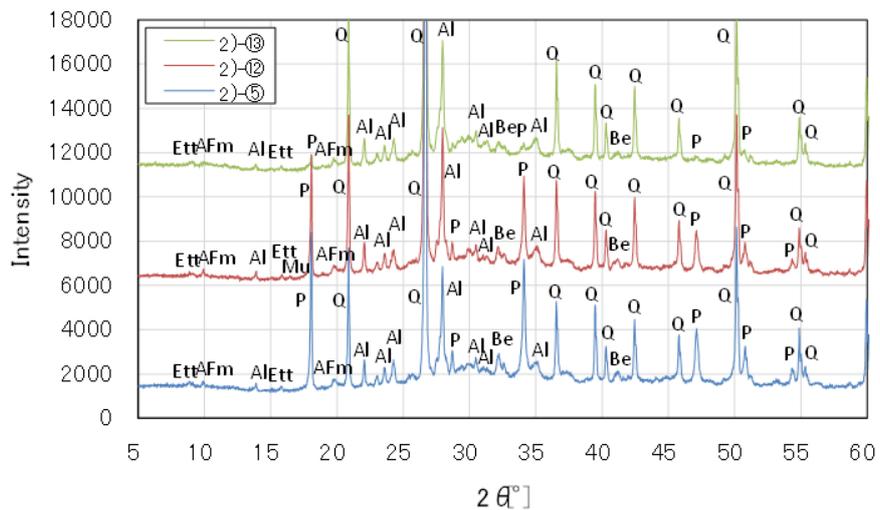


図 2.1-6 モルタルの XRD チャート (セメント種類の差異)

(c) TG-DTA

TG-DTA 測定の結果から求めた $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 量及び CaCO_3 量を表 2.1-9 に、TG-DTA 曲線のチャートを図 2.1-7～図 2.1-11 に示す。

CaCO_3 はコンクリート以外の試料では定量下限以下となった。モルタルにおける $\text{Ca}(\text{OH})_2$ は、OPC モルタルが最も多く、次に FAC モルタル、BFSC モルタルの順に少なくなった。OPC モルタルについては、骨材種類や乾燥条件によらず S/C が同じであれば $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 量が同等であった。

表 2.1-9 $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 含有量及び CaCO_3 含有量

試料名	試料概要	$\text{Ca}(\text{OH})_2$ 含有量 (mass%)	CaCO_3 含有量 (mass%)
1)-① 1)-②	OPCペースト W/C=0.45 表乾	16.0	ND
2)-①	OPCコンクリート 表乾	2.5	1.1
2)-⑤ ^{注)}	OPCモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2、 表乾	6.0	ND
2)-⑥	OPCモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2、 50°C6h乾燥	5.8	ND
2)-⑦	OPCモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2、 80°C6h乾燥	5.8	ND
2)-⑧	OPCモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2、 80°C24h乾燥	6.2	ND
2)-⑨	OPCモルタル、砕砂、 W/C=0.60、S/C=3、 表乾	5.1	ND
2)-⑩	OPCモルタル、珪砂、 W/C=0.45、S/C=2、 表乾	6.5	ND
2)-⑪	OPCモルタル、珪砂、 W/C=0.60、S/C=3、 表乾	4.1	ND
2)-⑫	FACモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2、 表乾	3.3	ND
2)-⑬	BFSCモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2、 表乾	0.7	ND

1)-①、1)-②

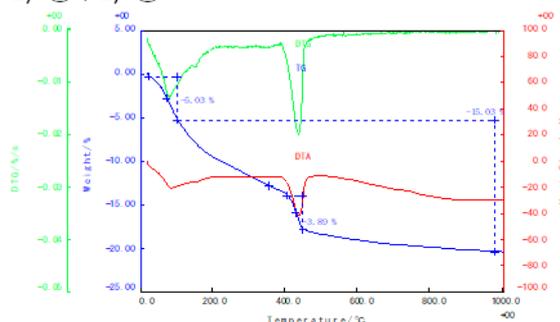


図 2.1-7 OPC ペーストの TG-DTA 曲線

2)-①

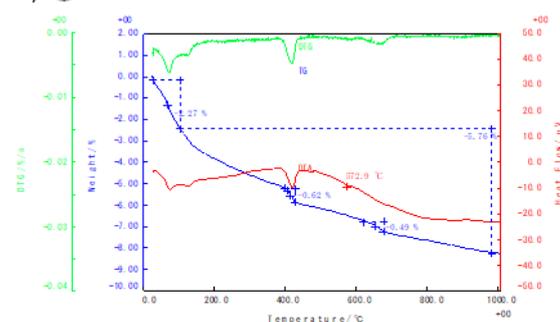


図 2.1-8 OPC コンクリートの TG-DTA 曲線

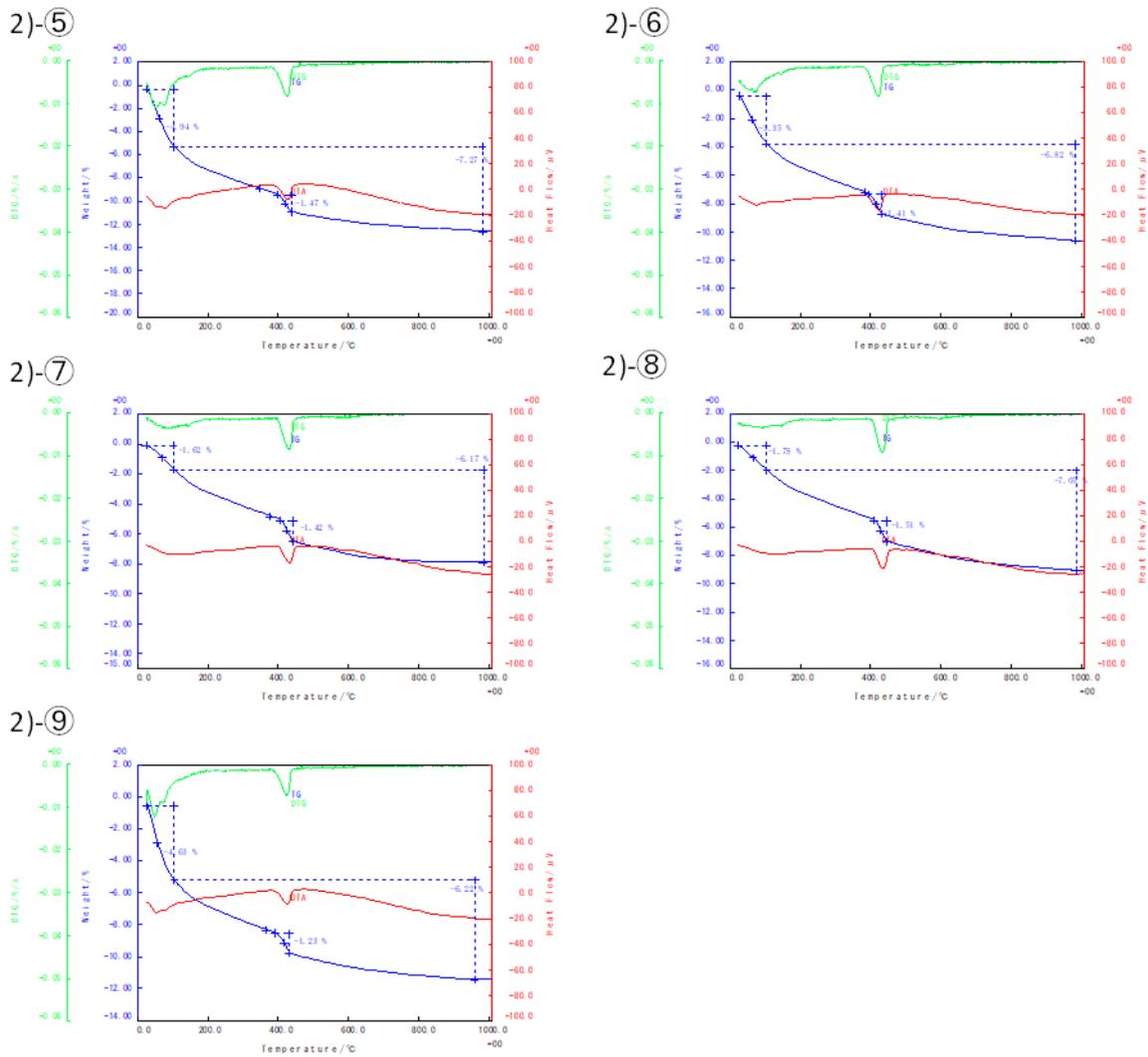


図 2.1-9 モルタル試料の TG-DTA 曲線 (OPC モルタル、砕砂使用)

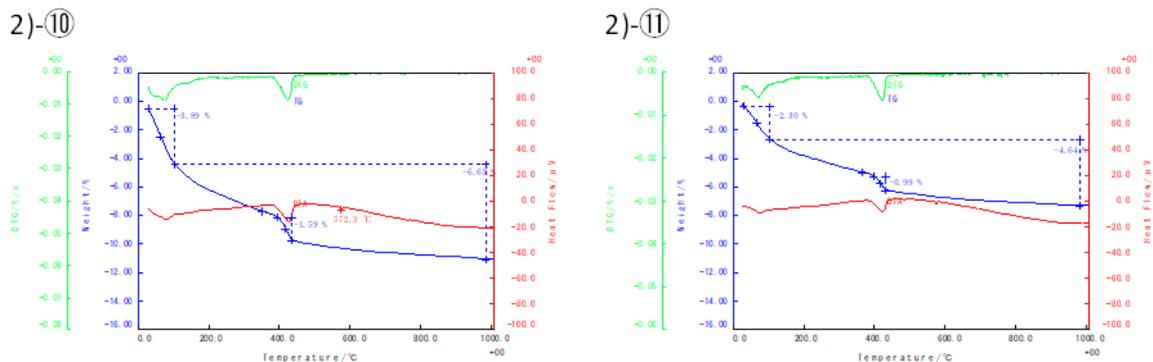
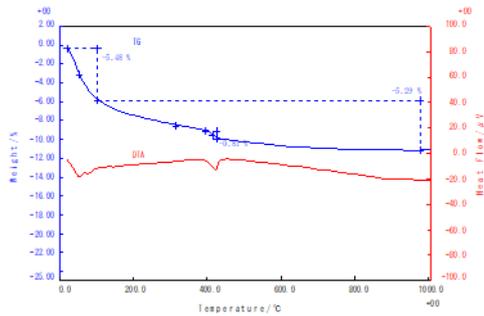


図 2.1-10 モルタル試料の TG-DTA 曲線 (OPC モルタル、珪砂使用)

2)-⑫



2)-⑬

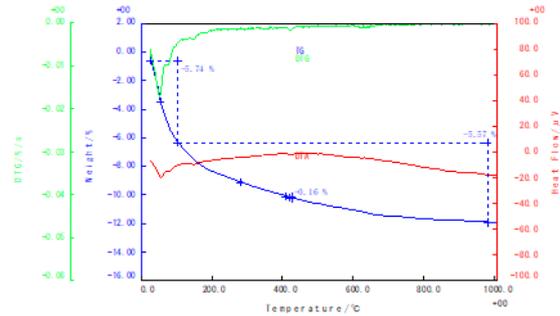


図 2.1-11 モルタル試料の TG-DTA 曲線（混合セメントモルタル、砕砂使用）

(d) 細孔径分布

水銀ポロシメータを用いた各試料の細孔径分布の測定結果を図 2.1-12 に示す。また、測定した全試料の累積空隙径の比較のグラフを図 2.1-13 に示す。

OPC ペースト (1)-①、1)-②) と OPC コンクリート (2)-①) を比較すると、空隙率はセメントペーストの方が大きいですが、コンクリートの方が径の大きな空隙の割合が高かった。

モルタルについては、OPC モルタルでは $S/C=2$ と $S/C=3$ を比較すると (2)-⑤と 2)-⑨)の比較及び 2)-⑩と 2)-⑪)の比較)、 $S/C=3$ の方が空隙率が高く、径の大きな空隙の割合も高かった。本検討では、 $S/C=3$ の試料の方が W/C が大きいことが関係している可能性がある。また、骨材種類を比較すると (2)-⑤と 2)-⑩)の比較及び 2)-⑨と 2)-⑪)の比較)、骨材種類によらず空隙率は一緒であったが、珪砂を用いた方が径の大きな空隙の割合が高かった。混合セメントを用いたモルタルでは、同じ S/C の OPC モルタルより空隙率は高かったが、径の大きな空隙の割合は同等か低かった。

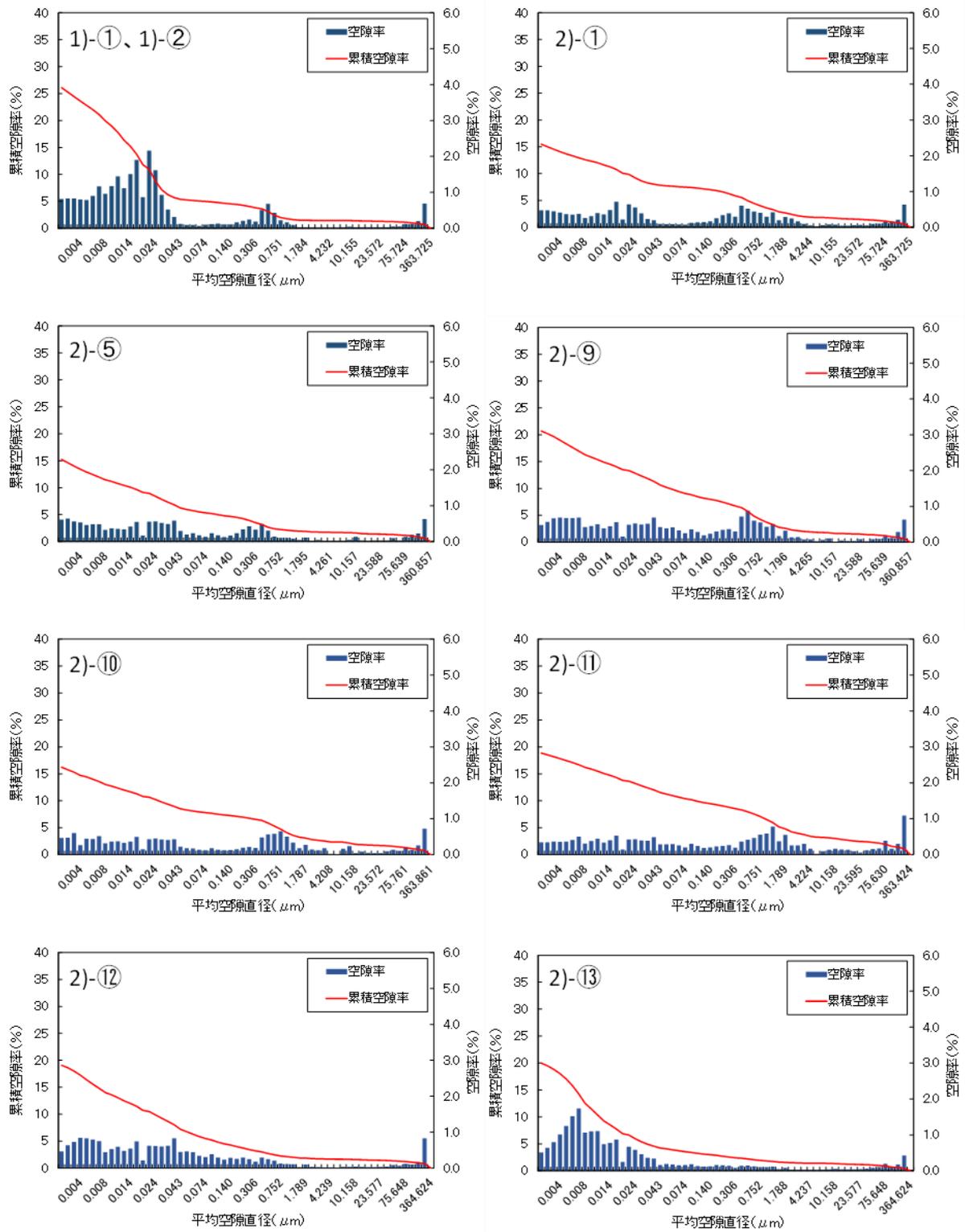


図 2.1-12 細孔径分布の測定結果

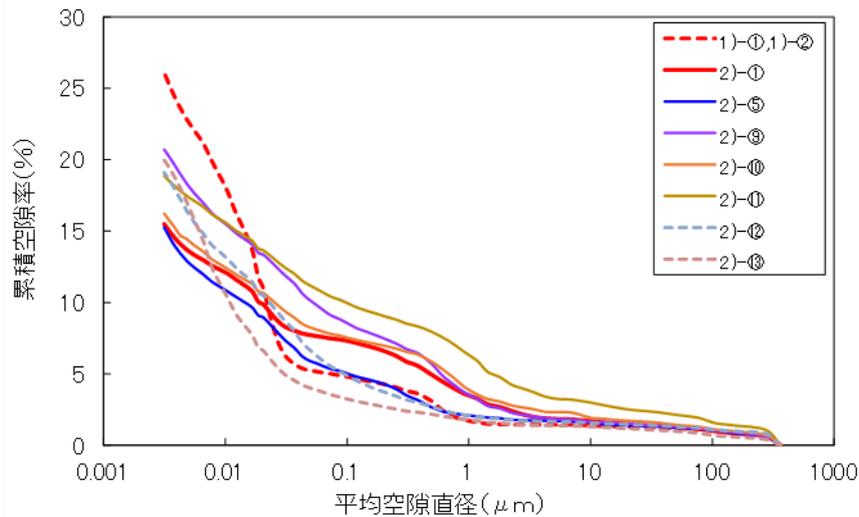


図 2.1-13 測定試料の累積空隙径の比較

(e) 試料中の水分量

試料の大きさによる水素発生量の差異の確認に用いたセメントペースト試料 1)-①及び 1)-②の水分量測定の結果を表 2.1-10 に示す。なお、水分率の測定においては、同じバッチで練ったセメントペーストの一部を分取、封緘養生した物を粉砕して用いた。

表 2.1-10 セメントペースト試料の水分量の測定結果

試験No.	試料名	試料条件				自由水 %	結合水 %	全水分 %
		セメント(C)	W/C	養生・材齢	乾燥条件			
1)-① 1)-②	OPC ペースト	OPC	0.45	20°C、封緘 4W	表乾	18.5	10.7	29.3

コンクリート配合による水素発生量への影響確認に用いたコンクリート試料のうち、材齢 4W まで封緘養生した 2)-①及び 2)-②の水分量測定の結果を表 2.1-11 に示す。なお、水分の測定においては、同じバッチで練ったコンクリート供試体 (φ60mm×150mm) を 1 つ使用した。自由水の測定においては、はじめに 2)-②と同じタイミングで 80°Cにて 1 週間乾燥させた時の重量減少を測定、ついで 105°Cで恒量になるまで乾燥した。そして、2)-①の自由水量は 80°Cと 105°Cの重量減少の合計から、2)-②の自由水量は 105°Cの重量減少からそれぞれ求めた。結合水については、2)-①と 2)-②とで同じと仮定し、105°C乾燥後の試料を粉砕後に 600°Cで乾燥させた時の重量減少を測定した。

表 2.1-11 コンクリート試料の水分量の測定結果

試験No.	試料名	試料条件		自由水 %	結合水 %	全水分 %
		養生・材齢	乾燥条件			
2)-①	OPCコン クリート	20°C、封緘、4W	表乾	5.2	2.8	8.0
2)-②	OPCコン クリート	20°C、封緘、4W +80°C 1W乾燥	80°C 1W	0.5	2.8	3.3

コンクリート配合による水素発生量への影響確認のうち、骨材種類、骨材量、セメント種類などの個々の要因の影響確認、及び、温度による水素発生量の差異の確認に用いたモルタル試料の水分量の測定結果を表 2.1-12 に示す。

配合が同じで乾燥条件が異なる 2)-⑤～2)-⑧及び 3)-①を比較すると、乾燥により自由水量は減少した一方、結合水量は変化しなかった。

骨材量が同じで骨材種類が異なる 2)-⑤と 2)-⑩、2)-⑨と 2)-⑪をそれぞれ比較すると、砕砂を用いた試料 (2)-⑤及び 2)-⑨) が珪砂を用いた試料 (2)-⑩及び 2)-⑪) より自由水量、結合水ともに 1mass%程度多かった。砕砂を使用したモルタルと珪砂を使用したモルタルの自由水量の差異は、ふるい分け前の砕砂の吸水率が 1.87%であったことからの推測ではあるが、砕砂の吸水率分の水分に概ね相当すると考えられる。結合水量の差異については、砕砂に含まれる鉱物に由来する可能性もあるが、さらに詳細な検討が必要である。

骨材種類が同じで骨材量が異なる 2)-⑤と 2)-⑨、及び、2)-⑩と 2)-⑪をそれぞれ比較すると、骨材量が多い試料 (2)-⑨及び 2)-⑪) で結合水が 1mass%程度少なかった。骨材量が多い水準ではセメント量が少ないことが影響して結合水量が少なくなったと考えられる。

表 2.1-12 モルタル試料の水分量の測定結果

試験No.	試料名	試料条件						自由水 %	結合水 %	全水分 %
		セメント (C)	骨材 (S)	W/C	S/C	養生・材齢	乾燥条件			
2)-⑤	OPC モルタル	OPC	砕砂	0.45	2	20°C、封緘 4W	表乾	10.1	5.7	15.8
2)-⑥	OPC モルタル	OPC	砕砂	0.45	2	20°C、封緘 4W	50°C 6h	6.1	5.9	12.0
2)-⑦	OPC モルタル	OPC	砕砂	0.45	2	20°C、封緘 4W	80°C 6h	1.4	6.1	7.5
2)-⑧	OPC モルタル	OPC	砕砂	0.45	2	20°C、封緘 4W	80°C 24h	1.0	6.0	7.0
2)-⑨	OPC モルタル	OPC	砕砂	0.60	3	20°C、封緘 4W	表乾	9.9	4.6	14.5
2)-⑩	OPC モルタル	OPC	珪砂	0.45	2	20°C、封緘 4W	表乾	9.0	4.7	13.7
2)-⑪	OPC モルタル	OPC	珪砂	0.60	3	20°C、封緘 4W	表乾	8.5	3.8	12.3
2)-⑫	FAC モルタル	OPC:FA =7:3	砕砂	0.45	2	20°C、封緘 4W	表乾	11.2	4.0	15.2
2)-⑬	BFSC モルタル	OPC:BFS =3:7	砕砂	0.45	2	20°C、封緘 4W	表乾	11.6	3.7	15.3
3)-①	OPC モルタル	OPC	砕砂	0.45	2	20°C、封緘 4W	表乾	10.0	5.5	15.5
2)-⑤-再	OPC モルタル	OPC	砕砂	0.45	2	20°C、封緘 6W	表乾	9.7	-	-
3)-①-再	OPC モルタル	OPC	砕砂	0.45	2	20°C、封緘 6W	表乾	9.6	-	-

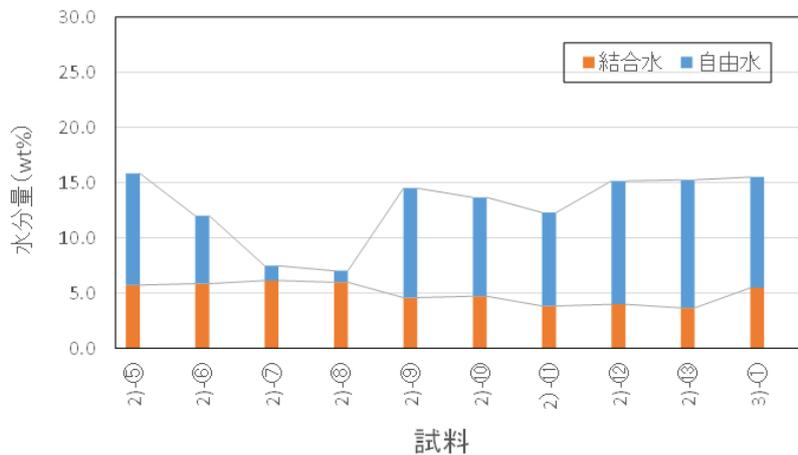


図 2.1-14 モルタル試料の水分量 (材齢 28 日データのみ)

3) 照射試験

① 試験方法

(a) γ 線による照射試験

試料の大きさによる水素発生量の差異の確認については、セメントペーストへの γ 線照射を名古屋大学コバルト 60 γ 線照射室にて実施した。これは、平成 31 年度の水素ガス発生による圧力上昇の確認試験において、水素発生量が少なかった原因が試料の大きさの影響である可能性を検討するため、平成 31 年度と同じ照射施設で実施するものである。照射線量率は、約 1kGy/h で、約 2 日間室温にて γ 線照射を行った。

コンクリート配合による水素発生量への影響確認、及び、温度による水素発生量の差異の確認の照射試験は、平成 31 年度までと同様、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にて実施した。照射線量は、1kGy/h \times 5 時間=5kGy とし、温度による水素発生量の差異の確認以外は室温で γ 線照射を行った。

試料容器は、 ϕ 60mm \times 150mm 及びその粉碎物の試料については、ステンレス製の圧力容器とした。一方その他のペレット状のモルタルについては、平成 31 年度までと同様にブレーカブルシール付きガラスアンプルとした。なお、試料を試料容器に封入する際は、水素のみを測定する場合は純空気、水素以外の成分の測定も行う場合は Ar で置換した。

(i) 名古屋大学コバルト 60 γ 線照射室での照射試験手順

名古屋大学コバルト 60 γ 線照射室での照射試験状況を図 2.1-15 に示す。本試験では、水素ガス発生状況を確認する目的で、ガスハンドリングシステムを用いて容器内圧力も測定した。

セメントペースト試料は質量測定後、ステンレス製圧力容器に入れ、金属 O リングを設置し、フランジを閉じた。本試験においては、ガスの絶対量を求めるために、圧力容器内及び配管等試験系の死容積を求める必要がある。そこで、ガスハンドリングシステムを導入して、試験系の死容積を求めた。死容積の測定ではガスハンドリングシステムの容積既知の部分に Ar ガスを封入してその時の圧力を測定、その後バルブを開いて死容積を測定したい箇所にガスを導入した後の全体 (容積既知+容積を測定したい箇所) の圧力を測定し、 PV =一定の関係から算出した。死容積測定は、複数回実施した。その後、容器内を陽圧状態とし、一定時間圧力の変化がないことを確認し容器にリークがないことも確認した。

照射前には、容器内部をガス置換するため、約 0 kPa まで減圧する操作と Ar ガスを導入する操作を 3 回行い、照射容器内の最終圧力を約 100 kPa (設定圧) とした。

γ 線照射中は、圧力容器とガスハンドリングシステムの間を接続し、ガスハンドリングシステムにガスを導入、ガスハンドリングシステムの圧力計から圧力を連続的に記録した。さらに、圧力容器内の温度変化も連続的に記録した。

γ 線照射後は、 γ 線のエネルギーにより圧力容器内温度の上昇が認められたため、ガス発生による正味の圧力上昇を確認する目的で、チラーにより圧力容器内温度を γ 線照射前と同等になるまで冷却した。ガスの取り出しは、ステンレス製圧力容器内のガスを、圧力容器上部に接続したガス採取ポンベに移すことで行った。なお、ガス採取ポンベは、事前に Ar 置換後減圧しておいた。圧力容器内のガスを導入したガス採取ポンベを取り外し、発生ガスの水素ガス濃度を測定に供した。

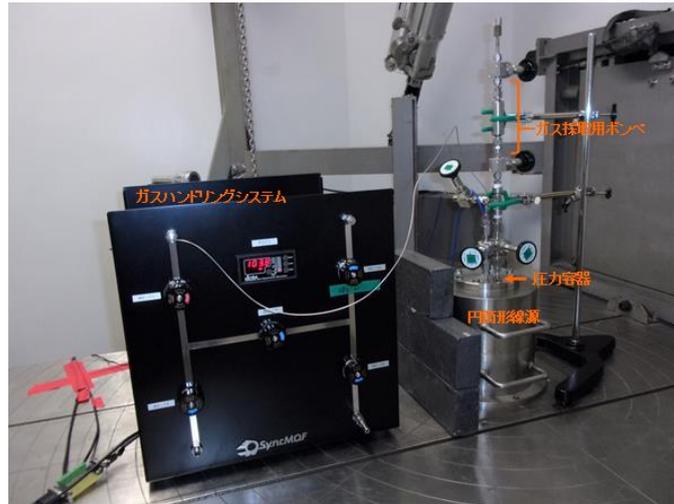


図 2.1-15 名古屋大学コバルト 60 γ 線照射室での照射試験状況

(ii) 量子科学技術研究開発機構 (QST) 高崎量子応用研究所コバルト棟での照射試験手順

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の照射試験においては、試料への照射線量の測定は線量計 (アミノグレイ) を用いた。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 ($\phi 3\text{mm}$ 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吸収線量 (水換算) を求めた。

コンクリート試料からの水素ガス発生量の測定試験照射イメージを図 2.1-16 に、試験状況を図 2.1-17 に示す。コンクリート試料の測定では、試料容器にステンレス製圧力容器を用いて照射試験を実施した。コンクリート試料の測定前準備手順を記す。試料は、質量測定後照射容器に入れ、金属 O リングを設置し、フランジを閉じた。その後、容器内部をガス置換した。ガス置換は、約 30 kPa まで減圧する操作と雰囲気ガスを導入する操作を 4 回行い、照射容器内の最終圧力を約 100 kPa (設定圧) とし容器上部のバルブを閉じた。なお、最終圧力調整前に陽圧状態とし、一定時間圧力の変化がないことを確認し容器にリークがないことを確認した。コンクリート試料の場合、線量計の設置は容器側面とした。試料に対する実照射線量は、ステンレス製容器及び試料による遮蔽により減衰することが考えられる。そこで、実照射線量に補正するため、試料容器と同一のステンレス製の鋼管に照射試料と同形状のセメントペースト試料を設置し、中心に線量計を入れ側定した値から係数を求め補正した。

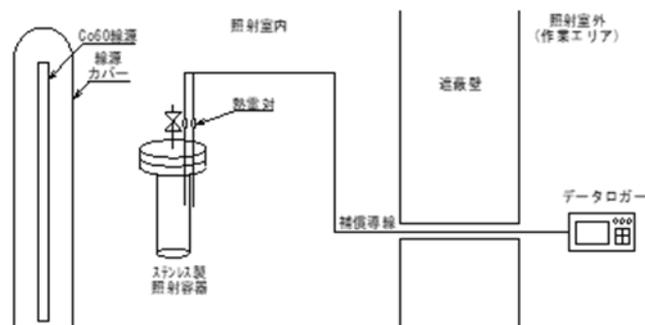


図 2.1-16 コンクリート試料からの水素ガス発生量の測定試験照射イメージ



図 2.1-17 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でのコンクリートの照射試験状況

モルタル試料からの水素ガス発生量の測定試験照射イメージを図 2.1-18 に、 γ 線照射試験の状況を図 2.1-19、図 2.1-20 に示す。モルタル試料の測定は、平成 31 年度と同様にパイレックスガラス製容器を用いて、平成 31 年度と同様の測定系で実施した。ペレット状のモルタル試料の測定前準備手順を以下に記す。試料を充填するガラスサンプル（照射容器）は、内容積はおおよそ 75ml、主管部のガラス厚さが約 2.8mm の物を用いた。照射容器は予め 100℃以上で 1 時間以上乾燥した。乾燥した照射容器は、熱いまま、真空引きと雰囲気ガスの導入を 3 回以上繰り返すことで照射容器内を完全に無水状態とした。その後、真空を維持した状態で室温まで放冷した。乾燥させた照射容器の質量を測定して風袋質量とした。次に、試料を照射容器に入れ質量測定した。試料充填した容器は、約 30 kPa まで減圧する操作と雰囲気ガスを導入する操作を 4 回行い、完全にガス置換した。照射容器を約 90 kPa（設定圧）まで減圧した後にガスバーナを用いて溶封した。溶封箇所に隙間・気泡・亀裂等が無いことを目視するとともに圧力降下がないことを確認した。試料の充填量は、約 40g を基準とした。モルタル試料の線量測定においては、線量計を照射容器と同一のパイレックスガラス製の試験官に入れ、試料容器の横に配置し、試料の照射と同時に γ 線照射累積線量を測定した。また、温度による水素発生量の差異の確認に際しては、照射時の試料温度を確認するため、図 2.1-21 に示す熱電対を埋め込んだペレット状モルタル試料を通常のペレット状モルタル試料と一緒に照射容器に入れて γ 線照射を実施した。なお、恒温槽内の温度制御を行わない（ γ 線照射の温度が室温）試料についても、試料温度を確認するために、熱電対を埋め込んだペレット状モルタル試料についても同様に照射を行った。

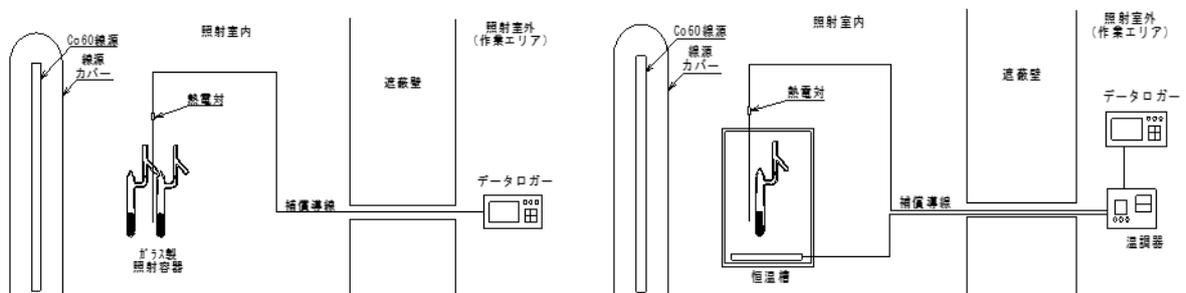


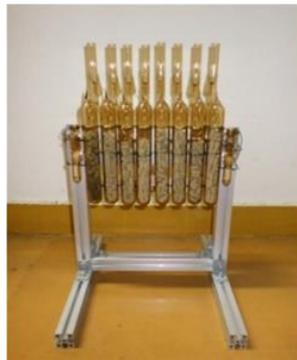
図 2.1-18 モルタル試料からの水素ガス発生量の測定試験照射イメージ



(a) 照射前試料



(b) 照射位置



(c) 照射後試料

図 2.1-19 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でのペレット状モルタルの照射試験状況-1

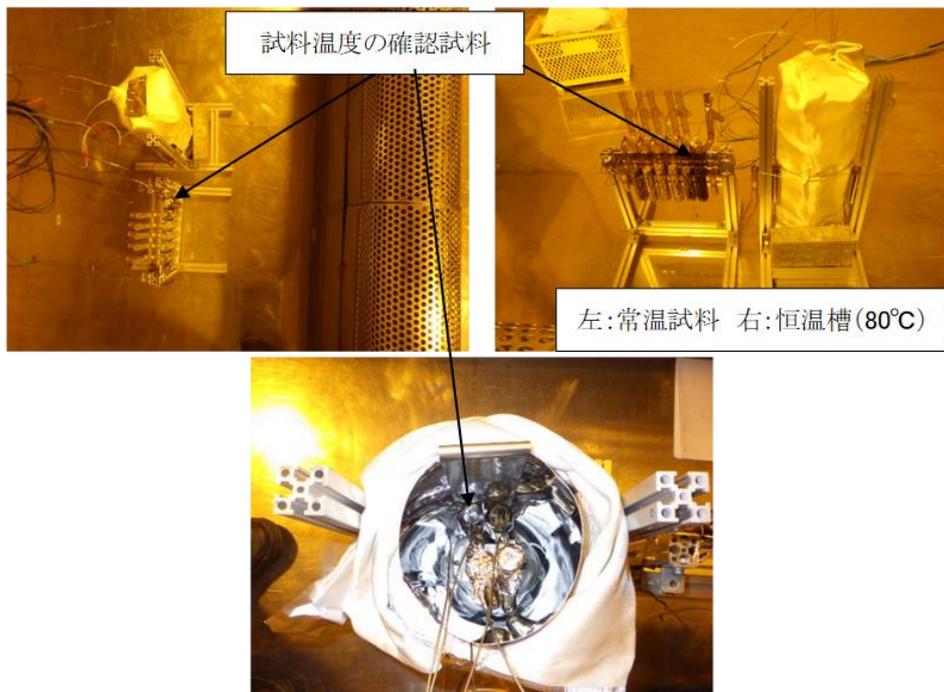


図 2.1-20 国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構（QST）高崎量子応用研究所でのペレット状モルタルの照射試験状況-2



図 2.1-21 試料温度測定用に熱電対を埋め込んだ OPC モルタル試料（φ6.5mm×13mm）
試料温度の確認試料として通常のペレット状モルタルと一緒に照射容器内に入れてγ線照射を実施

照射後の発生ガス濃度の測定においては、コンクリート試料及びモルタル試料ともに、図 2.1-22 に示す真空システムも用いて発生ガスを採取した。照射後のガスの取り出しは、照射容器内のガスを真空システム系内へ移行させた後、系内圧力を陽圧（大気圧より若干高い圧力）にして一定時間放置し、真空システム内のガス濃度を均一にした。真空システム系内ガスの一部をサンプリングして、発生ガスの水素ガス濃度測定に供した。なお、ガスの分析後、発生したガスの絶対量を求めるために、接続した照射容器を含む真空システムの容積測定を実施した。容積測定は、容積既知の部分にガスを封入してその時の圧力を測定、その後バルブを開いて容積を測定したい箇所にガスを導入した後の全体（容積既知+容積を測定したい箇所）の圧力を測定し、 PV =一定の関係を用いて容積を求めた。

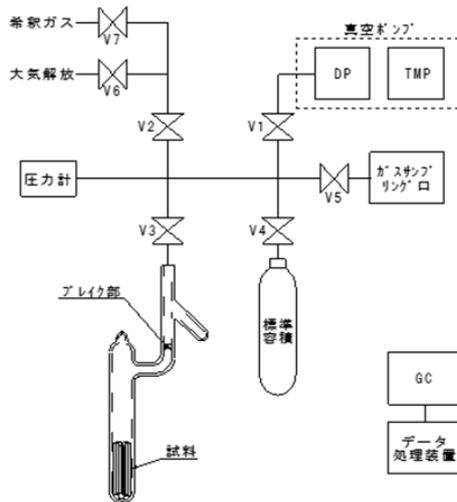


図 2.1-22 真空システム系統図

(b) 照射試験における分析項目

照射試験後に、発生したガス成分の分析を実施した。各試験において分析するガス成分を表 2.1-13 に示す。試料の大きさによる水素発生量の差異の確認については、平成 31 年度の水素ガス発生による圧力上昇の確認試験結果の考察に活用するため、 H_2 、 O_2 、 N_2 、 CO_2 を測定した。コンクリート配合による水素発生量への影響確認及び温度による水素発生量の差異の確認については、 H_2 を測定した。ガス成分の測定は、ガスクロマトグラフィーにより行った。使用するガスクロマトグラフィー装置の仕様を表 2.1-14 及び表 2.1-15 に示す。

表 2.1-13 分析するガス成分

試験内容	分析するガス成分
1) 試料の大きさによる水素発生量の差異の確認	H ₂ 、O ₂ 、N ₂ 、CO ₂
2) コンクリート配合による水素発生量への影響確認	H ₂
3) 温度による水素発生量の差異の確認	H ₂

表 2.1-14 ガスクロマトグラフィー装置の仕様（名古屋大学コバルト 60 γ線照射室での照射試験）

装置名	Varian CP-4900			
	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

表 2.1-15 ガスクロマトグラフィー装置の仕様（量子科学技術研究開発機構（QST）高崎量子応用研究所コバルト棟での照射試験）

測定項目	水素 (H ₂)
検出器	TCD
測定範囲	高濃度用 : 50~2000ppm 低濃度用 : 5~50ppm
キャリアガス	アルゴン
校正	検量線法 高濃度用 : 50, 100, 500, 2000ppm 低濃度用 : 5, 10, 25, 50ppm
測定時間	約10分/検体
試料量	~1ml

② γ線照射により発生した水素量

(a) 試料の大きさによる水素発生量の差異の確認

前述のように、平成 31 年度の水素発生による圧力上昇の検討においては、水素発生量がペレット状のセメントペーストから見積もられた量より少なく、試料の大きさの影響が疑われた。試料の大きさの影響がある場合は、廃棄体パッケージ内の水素を見積る際に形状影響を考慮することが必要となる。そこで、本検討においては試料の大きさが水素発生量に及ぼす影響を確認するため、φ60mm×150mm のセメントペースト試料（以下バルク試料と表記、1)-①）と、それを<6.7mm に粉砕した試料（1)-②）からの水素発生量を比較した。

本試験においては、γ線照射による水素ガス発生状況を確認する目的で、γ線照射中は水素による圧力上昇の検討に際して用いたガスハンドリングシステムにより、圧力変化を連続して測定した。併せて、温度変化も測定した。ここで測定した圧力は、ガスハンドリングシステム+バルブ+接続配管+圧力容器の圧力であり、本報告書では便宜的に試験系の圧力と表記する。

本試験のγ線照射中の試験系の圧力及び温度の測定結果を図 2.1-23、図 2.1-24 に、また PV/T=一定としてガス採取時の温度 22℃に圧力を補正した値を図 2.1-25 に示す。

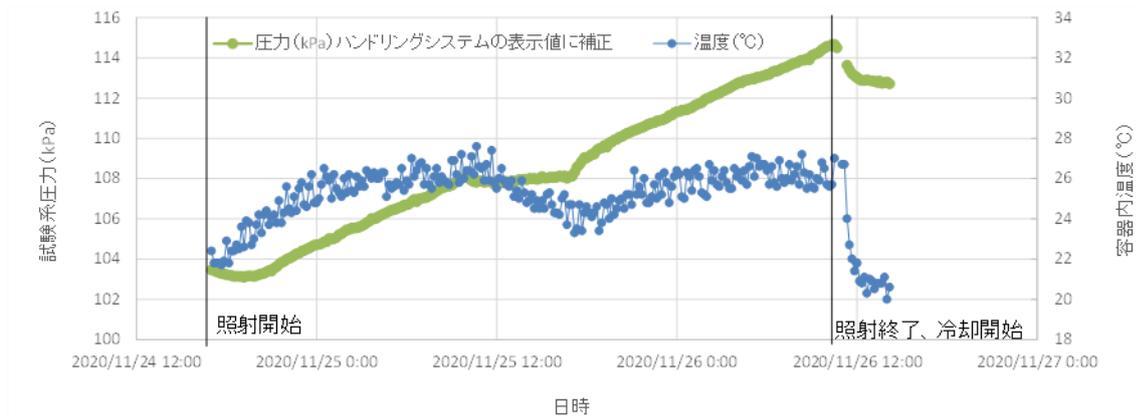


図 2.1-23 γ 線照射時の圧力変化 (1)-①、 $\phi 60\text{mm}\times 150\text{mm}$ 試料)

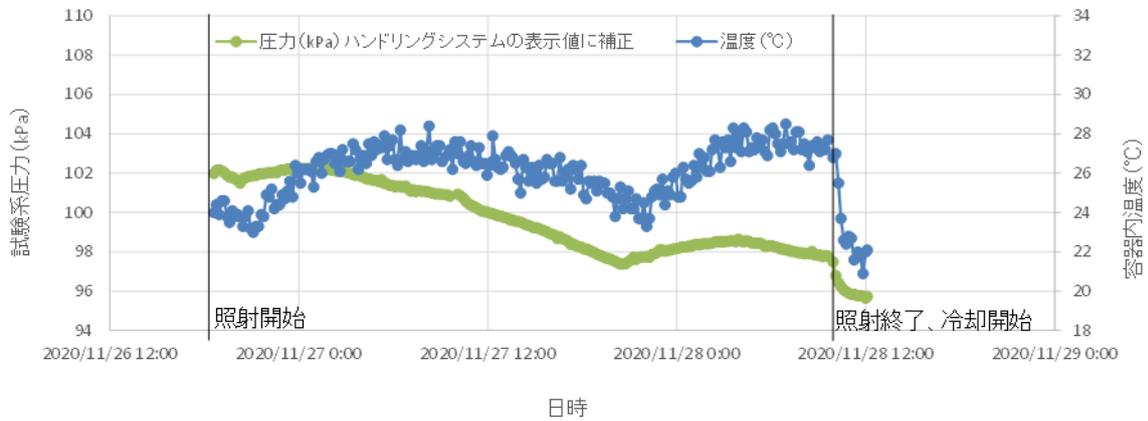


図 2.1-24 γ 線照射時の圧力変化 (1)-②、粉碎後試料)

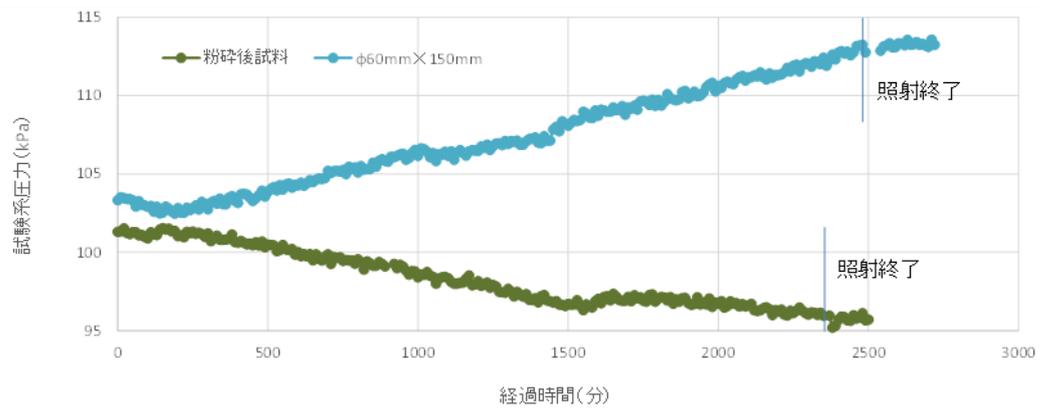


図 2.1-25 温度 22°Cに補正した圧力値の経時変化

バルク試料、粉碎後試料ともに、 γ 線照射後の容器内のガス中に大気より高濃度の水素が検出された(表 2.1-17)。本試験の試験データとガスの分析結果を、表 2.1-16 及び表 2.1-17 にそれぞれ示す。

表 2.1-16 試験データ（試料の大きさによる水素ガス発生の変異の確認）

測定項目	1)-①	1)-②
	OPCペースト、 W/C=0.45、表乾 Φ60mm×150mm	OPCペースト、 W/C=0.45、表乾 <6.7mm
ガス採取時の温度(°C)	21.3	22.1
ガス採取時の圧力(kPa)	113.1	96.1
照射開始時の温度(°C)	22.0	24.6
照射開始時の圧力(kPa)	104.3	102.4
ガス採取時の温度に補正した照射開始時の圧力(kPa)	104.1	101.5
照射時の試験系の死容積(ml)	86.588	351.766
ガス採取用ポンベ+ガスクロ測定用接続パーツの死容積(ml)	36.376	

表 2.1-17 ガス分析結果（試料の大きさによる水素ガス発生の変異の確認）

試験No.	試料概要	ガス分析結果				備考	
		単位	H ₂	O ₂	N ₂		CO ₂
1)-①	OPCペースト、 W/C=0.45、表乾 Φ60mm×150mm	濃度(ppm)	18720	20214	80875	47	ガス採取用ポンベに採取したガスの濃度に相当
1)-②	OPCペースト、 W/C=0.45、表乾 <6.7mm	濃度(ppm)	7511	21428	224338	29	ガス採取用ポンベに採取したガスの濃度に相当

これらの結果に基づき、水素発生量を求めた。バルク試料（1)-①）、粉砕試料（1)-②）ともにガス濃度と容積から水素のモル量を算出した。結果を表 2.1-18 に示す。なお表に示した実照射線量は、圧力容器のステンレス壁による線量の減衰 0.2%を補正した値を示す。

水素発生量は、粉砕後試料の方がバルク試料よりも多かった。

表 2.1-18 照射試験測定結果（試料の大きさによる水素ガス発生の変異の確認）

試験No.	試料概要	実照射線量 kGy	試料質量 g	照射前		ガス採取時		水素発生量 μmol/g/kGy ¹⁾
				温度 °C	容器内圧 kPa	温度 °C	容器内圧 kPa	
1)-①	OPCペースト、 W/C=0.45、表乾 Φ60mm×150mm	43.16	793.8	22.0	104.3	21.3	113.1	0.0031
1)-②	OPCペースト、 W/C=0.45、表乾 <6.7mm	37.74	653.0	24.6	102.4	22.1	96.1	0.0051

1) 単位に記されている kGy は、表中の実照射線量（水換算）を示す。

本試験の結果を以下に記す。

- 異なる大きさの試料で水素発生量の差が生じるかの確認試験では、小さい試料の水素発生量が多かった。このことから、硬化体からの水素発生量評価においては試料の大きさが水素の発生量に影響するといえ、平成 31 年度のバルク試料を用いた圧力検討試験においてペレット試料よりも水素発生量が少なかった原因が、形状の影響である可能性がある。
- 水素発生量（μmol/g/kGy）の値は、平成 31 年度の同配合のペレット試料の 0.012μmol/g/kGy（原環センター，原子力機構，2020）が最も多く、次いで、1)-②の粉砕試料>1)-①のバルク試料の順で多かった。
- 今後、内部充填材からの水素発生量を検討するにあたり、ペレット試料の結果から得られた G 値を用いると、水素発生量を過大評価する可能性が否定できない。水素生成の後に硬化体の外へ放出される水素の量（水素発生量）については、形状を考慮する必要がある

れる。図 2.1-13 に示すようにセメントペーストとコンクリートでは空隙分布が異なるため、細孔構造が異なる。そのため、後述するように大きさの影響度合いが異なる可能性が否定できない。試料の大きさの影響については、今後更に検討が必要である。

なお、バルク試料においては経時的な圧力上昇が認められ、水素が発生している事を確認の上で照射を終了した。一方、粉碎後のセメントペースト試料においては圧力が経時的に低下した。試験途中で圧力容器蓋のねじの増し締めを行ったが圧力低下の傾向に変化は認められなかったこと、及び、最終的に圧力容器内の圧力が大気圧より低くなったことから、リークが原因である可能性は低い。粉碎後試料で圧力が低下傾向を示した理由の可能性として、セメントペースト試料表面へのガスの吸着が起きたと考えられる。バルク試料では認められなかったガスの吸着効果が顕在化した理由は明確ではないが、粉碎によりセメントペースト試料のサイズが小さくなったためにガス吸着の影響が顕在化した事が、理由の一つとして考えられる。試験開始前に圧力容器内を Ar で置換したが、Ar 置換後すぐにγ線を照射したため、Ar が吸着平衡に達していなかった可能性が考えられる。以下、推測の域を出ないが、セメントペースト試料の細孔中には水が存在するため Ar は入っていないが、細孔以外の試料表面ではもともと吸着していた N₂ の一部が Ar と置換する可能性を考えた。N₂ の分子占有面積が 16.2Å²、Ar 分子占有面積が 14.4Å² であり（荒川、1970）、同面積に対する吸着モル数は N₂ よりも Ar の方が多いため、N₂ と Ar の置換が進めば圧力低下が起こると考えられる。バルク試料では、細孔以外の試料表面の面積は粉碎試料よりも小さいため、N₂ と Ar の置換量が少なく、短時間で平衡に達したとともに、圧力低下が顕在化しなかったと考えられる。一方、粉碎試料は試料サイズを小さくしたために細孔以外の試料表面の面積が大きく、N₂ と Ar の置換が平衡に達しない状態でγ線照射を実施した可能性がある。そのため、γ線照射中も N₂ と Ar の置換が進行し、その結果圧力が低下した可能性が考えられる。

(b) コンクリート配合による水素発生量への影響確認

前述のように、実際の内部充填材は、含水率の低減の観点からコンクリートが有望な材料と考えられている。その場合、内部充填材中の骨材割合が多くなり、骨材に含まれる水が水素ガス発生に及ぼす影響が顕在化する可能性がある。そこで、本検討ではコンクリート配合による水素発生量への影響について検討した。

内部充填材として想定される配合で調製したコンクリート試料を用いて、異なる乾燥状態のコンクリートへγ線を照射した際の水素発生量を測定した。測定結果を表 2.1-19 に示す。

なお、表中の 2)-③及び 2)-④は、実照射線量を変えた場合に線量当たりの水素発生量が変わるかを確認したものである。

表 2.1-19 照射試験測定結果（コンクリート配合による水素発生量への影響確認、コンクリート）

試験No.	試料概要	実照射線量 kGy	試料質量 g	ガス取り出し時の温度 °C	大気圧 kPa	測定系容器内圧力 kPa	系統容積 ml	水素濃度測定値 ppm	水素発生量換算 μmol	水素発生量 μmol/g/kGy ¹⁾
2)-①	OPCコンクリート 20°C封緘 4W 表乾	5.6	977.611	24.9	99.9	118.9	250.3	1420	17.3	0.0032
2)-②	OPCコンクリート 20°C封緘 4W + 80°C 1W乾燥	5.6	930.753	24.5	102.1	118.4	277.6	151	2.0	0.0004
2)-③	OPCコンクリート 20°C封緘 8W 表乾	7.2	987.835	28.1	100.0	124.2	243.8	2005	24.6	0.0035
2)-④	OPCコンクリート 20°C封緘 8W 表乾	24.5	969.497	28.1	100.2	110.8	250.8	6065	68.1	0.0029

1)単位に記されている kGy は、表中の実照射線量（水換算）を示す。

本試験の結果を以下に記す。

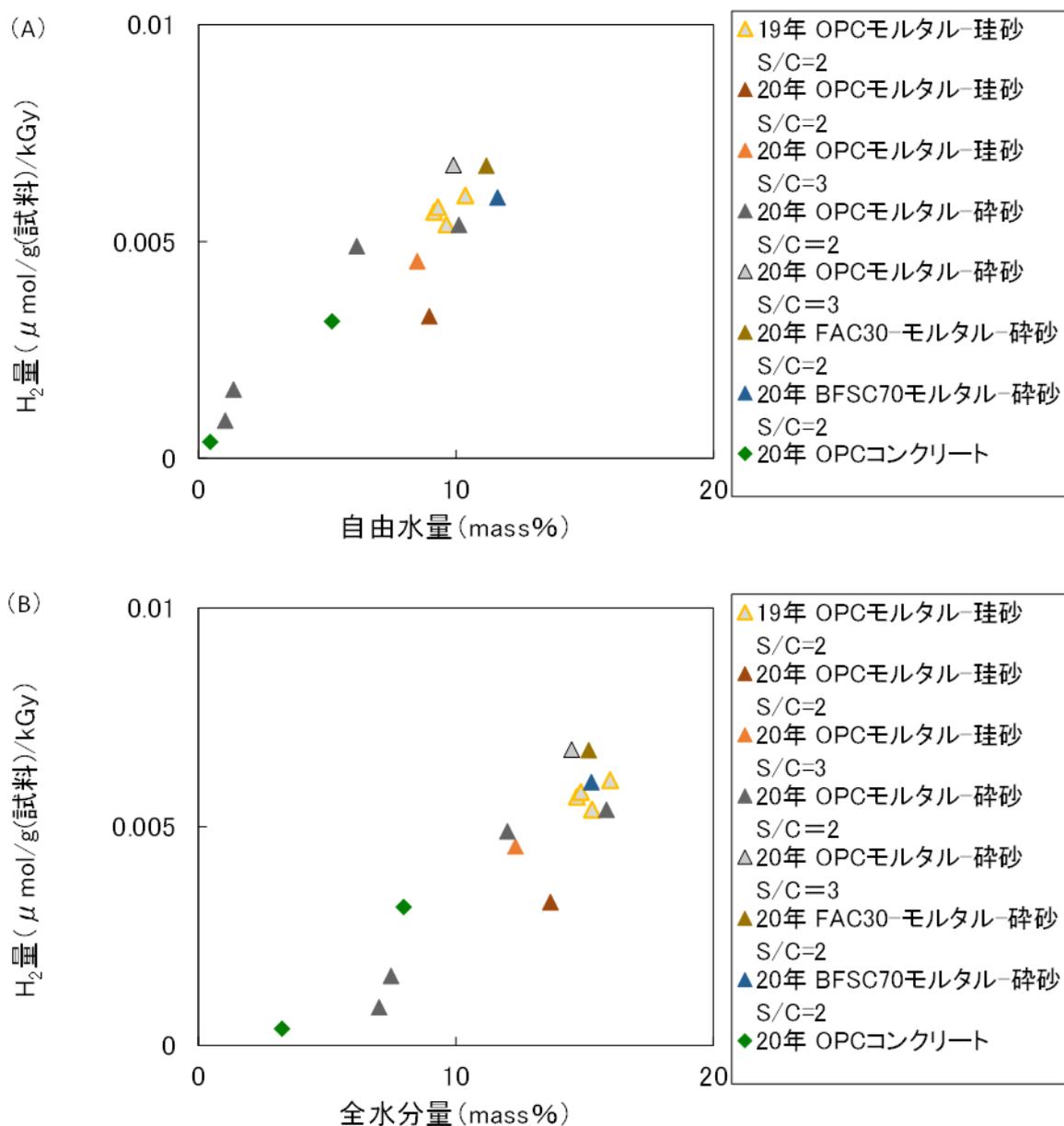
- ・ $\phi 60\text{mm}\times 150\text{mm}$ の大きさのコンクリートからの水素の発生量を測定することが出来た。
- ・ 80°C で 1 週間乾燥させたコンクリートからの水素発生量は、乾燥工程を経なかったコンクリートの $1/9$ 程度に減少した。このことから、コンクリートの乾燥が水素発生量の低減に有効であることが試験的にも確認された。
- ・ 実照射線量を変えた場合、点数は限られるが、水素発生量 ($\mu\text{mol/g/kGy}$) は線量によって変化せず、コンクリートでは $5\sim 24\text{kGy}$ の範囲で水素発生への線量の影響は認められなかった。

次に、比較的単純な系で個々の要因の影響を明確化すること、及び、従来から実施している測定系にてデータを確実に取得することを勘案し、ペレット状のモルタルを用いて骨材種類、骨材量、セメント種類などの個々の要因の水素ガス発生への影響を検討した。本試験における、水素発生量の測定結果を表 2.1-20 に示す。また、モルタルの自由水量及び全水分量と水素発生量の関係を、平成 31 年度の試験で用いたモルタル ($W/C=0.45$ 、珪砂使用、 $S/C=2$) のデータ及び令和 2 年度のコンクリートの結果と併せて、図 2.1-26 に表示する。

表 2.1-20 照射試験測定結果 (コンクリート配合による水素発生量への影響確認、モルタル)

試験No.	試料概要	実照射線量 kGy	試料質量 g	ガス取り出し時の温度 $^\circ\text{C}$	大気圧 kPa	測定系容器内圧力 kPa	系統容積 ml	水素濃度測定値 ppm	水素発生量換算 μmol	水素発生量 $\mu\text{mol/g/kGy}^{1)}$
2)-⑤	OPCモルタル、砕砂、 $W/C=0.45$ 、 $S/C=2$ 、 表乾	5.6	40.819	25.2	99.6	121.4	132.1	187	1.2	0.0054
2)-⑥	OPCモルタル、砕砂、 $W/C=0.45$ 、 $S/C=2$ 、 $50^\circ\text{C}6\text{h}$ 乾燥	5.6	40.808	25.1	99.5	120.2	134.7	168	1.1	0.0049
2)-⑦	OPCモルタル、砕砂、 $W/C=0.45$ 、 $S/C=2$ 、 $80^\circ\text{C}6\text{h}$ 乾燥	5.6	40.835	25.7	101.2	120.3	131.6	57	0.4	0.0016
2)-⑧	OPCモルタル、砕砂、 $W/C=0.45$ 、 $S/C=2$ 、 $80^\circ\text{C}24\text{h}$ 乾燥	5.6	40.438	25.7	101.3	122.7	137.8	29	0.2	0.0009
2)-⑨	OPCモルタル、砕砂、 $W/C=0.60$ 、 $S/C=3$ 、 表乾	5.6	40.654	24.9	101.6	118.2	137.5	235	1.5	0.0068
2)-⑩	OPCモルタル、珪砂、 $W/C=0.45$ 、 $S/C=2$ 、 表乾	5.8	40.805	23.7	102.0	122.6	131.9	119	0.8	0.0033
2)-⑪	OPCモルタル、珪砂、 $W/C=0.60$ 、 $S/C=3$ 、 表乾	5.8	41.031	23.8	102.0	121.0	136.2	163	1.1	0.0045
2)-⑫	FACモルタル、砕砂、 $W/C=0.45$ 、 $S/C=2$ 、 表乾	5.8	41.080	24.4	101.0	125.4	131.1	241	1.6	0.0067
2)-⑬	BFSCモルタル、砕砂、 $W/C=0.45$ 、 $S/C=2$ 、 表乾	5.8	41.850	24.6	101.0	123.9	134.6	216	1.5	0.0060

1)単位に記されている kGy は、表中の実照射線量 (水換算) を示す。



(A) 自由水と水素発生量の関係、(B) 全水分と水素発生量の関係

図 2.1-26 モルタル試料の水分量と水素発生量 ($\mu\text{mol/g/kGy}$) の関係

本試験の結果を以下に記す。

- 2)-⑤～2)-⑧の比較から、セメントペーストと同様モルタルにおいても、乾燥による自由水量の減少に伴い水素発生量が減少することが確認された。また、コンクリートについても同様に乾燥による自由水量の減少に伴い水素発生量が減少する事、及び、自由水と水素発生量の関係においてはセメントペーストと同様の傾向であることが示された。コンクリートについては試料の大きさが異なっているが、図 2.1-13 に示したように空隙径分布がセメントペーストと異なるために試料の大きさの影響が、セメントペーストと比較して大きく表れなかった可能性がある。試料の大きさの影響についてはさらに検討が必要であるため、以下ではモルタルの結果についてのみ言及する。

- 骨材の種類による影響においては、砕砂には粘土鉱物等の水分を含む鉱物が含まれていることから、骨材に含まれる水分の水素発生への影響を検討するため、表乾状態（骨材内部の間隙に水を持っている状態）の砕砂と絶乾状態の珪砂を用いた。砕砂と珪砂を比較すると (2)-⑤と 2)-⑩、及び、2)-⑨と 2)-⑪)、砕砂を用いた試料が珪砂を用いた試料より自由水量、結合水ともに 1mass%程度多く、水素発生量も多くなった。前述したように、砕砂を使用したモルタルと珪砂を使用したモルタルの自由水量の差異は、ふるい分け前の砕砂の吸水率が 1.87%であったことからの推測ではあるが、砕砂の内部の間隙の水に概ね相当すると考えられる。また、2)-⑤と平成 31 年度の珪砂を用いたモルタル (W/C と S/C は同条件) と比較すると自由水量が同程度であり、水素発生量も同等となっている。このように骨材種類によらず自由水量が同等であれば水素発生量が同等である事、また、前述のように異なる骨材を使用したモルタルの自由水量の差異が砕砂の内部の間隙の水に相当すると考えられることから、骨材内部の間隙の水は自由水としてふるまい、水素発生に寄与する可能性が考えられる。ただし、差異がばらつきの範囲内である可能性も否定できず、更に詳細な検討が必要と考える。
- 骨材量の影響については、2)-⑤と 2)-⑨、及び、2)-⑩と 2)-⑪の比較より珪砂及び砕砂とも自由水量は同等であったが、骨材量が多い S/C=3 の試料の若干水素発生量が多かった。本年度の結果のみではばらつきの範囲内の可能性もあるが、骨材ペースト間の自由水とペースト内の自由水の状態の違いが水素発生量に影響している可能性も考えられる。また、図 2.1-13 に示したように砕砂、珪砂いずれの場合も S/C=3 の試料の方が S/C=2 の試料と比較して空隙径の大きい空隙及びトータルの空隙が多いことが影響している可能性もある。
- セメント種類の影響については、混合セメントモルタルについても、OPC モルタルにおける自由水量と水素発生量の関係と同一の関係にあると考えられた。セメントペーストのうち BFSC ペーストは自由水量が大きくなると他の種類のセメントを用いたセメントペーストと水素発生量が異なる例も認められたが（後述の図 2.1-27 にて説明）、本試験で用いた BFSC モルタルは他のセメントを用いたモルタルと同等の水素発生量であった。
- 異なる配合のモルタルであっても、自由水量と水素発生量が同一の関係で整理できる可能性がある。しかし、本年度の結果における各水準の差異は、ばらつきの範囲内であるか、骨材量・種類及びセメントの種類の違いが水素ガス発生に影響するかどうか判断するにはデータが不十分であると考えられる。次年度、データを蓄積し、コンクリートによる水素ガス発生への評価へと繋げる必要がある。

(c) 温度による水素発生量の差異の確認

廃棄体グループ 2 やグループ 4H では廃棄体の発熱量が高いために、廃棄体設置後の廃棄体パッケージ内部の温度は高いと推定される。内部充填材の温度条件が異なると、水素ガスの発生反応及び拡散による外部への放出挙動に影響する事が考えられる。そこで、第 2 次 TRU レポート p3-33 表 3.2.2.2-4 の熱解析の結果にある廃棄体中心温度と同程度の、80℃とした場合のペレット状のモルタルからの水素発生量を検討した。水素発生量の測定結果を表 2.1-21 に示す。

表 2.1-21 照射試験測定結果（温度による水素発生量の差異の確認）

試験No.	照射時の設定温度 °C	試料温度 ¹⁾ °C	試料近傍温度 ¹⁾ °C	実照射線量 kGy	試料質量 g	ガス取り出し時の温度 °C	大気圧 kPa	測定系容器内圧力 kPa	系統容積 ml	水素濃度 ppm	水素発生量換算 μmol	水素発生量 μmol/g/kGy ²⁾
2)-⑤	室温	24.3-26.9 (26.0-26.9)	25.1-26.5 (25.7-26.5)	5.6	40.819	25.2	99.6	121.4	132.1	187	1.2	0.0054
3)-① ³⁾	80°C	80.4-82.3 (80.9-82.0)	78.6-80.0 (79.1-80.0)	4.9	40.816	24.6	101.5	120.6	130.7	251	1.6	0.0080
2)-⑤-再 ⁴⁾	室温	-	24.0-25.6 (25.0-25.6)	5.8	11.312	22.7	101.7	122.2	145.6	53	0.38	0.0058
3)-①-再 ⁴⁾	80°C	-	78.6-80.0 (79.7-80.0)	5.3	11.338	22.8	101.7	126.2	149.7	72	0.55	0.0092

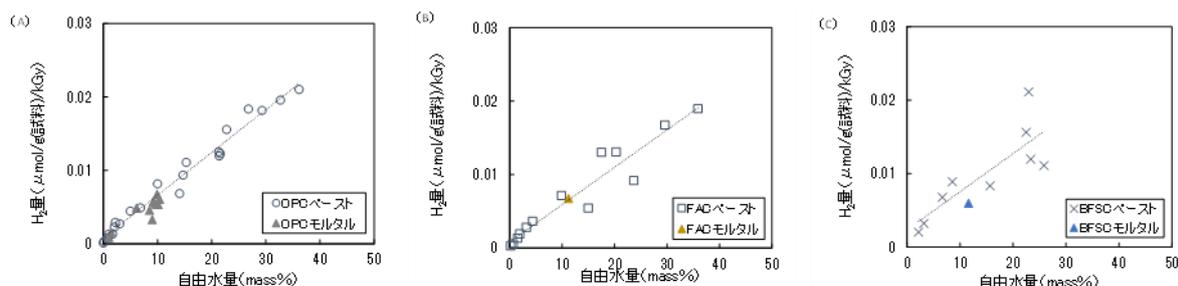
- 1) 上段は照射時間 5 時間を通しての温度範囲、下段カッコ内は照射開始から 50 分経過後、温度が安定してからの温度範囲
- 2) 単位に記されている kGy は、表中の実照射線量（水換算）を示す。
- 3) 試料容器に割れが認められ、ガスが漏れた可能性があるため参考値として示す。
- 4) 材齢 6w の時点で再測定を実施した。

試験結果は以下のとおりである。

- ・ 試料温度を高くした場合にセメント系材料からの水素発生量が変化するか確認を行った。その結果、水素発生反応が促進されたのか、拡散による水素の外部放出が促進されたのかは不明ながら、80°C に加熱した状態で γ 線照射を行った試料の方が、室温で γ 線照射を行った試料よりも水素発生量が多かった。
- ・ このことから、廃棄体グループ 2 やグループ 4H など廃棄体からの熱影響が想定される場合は、水素発生量に熱の影響を考慮する必要がある。

(d) γ 線照射による水素発生についての考察

令和 2 年度はペレット状のモルタルからの水素発生量の測定結果が得られた。これらを平成 30 年度～31 年度に検討してきたペレット状のセメントペースト及び平成 31 年度のモルタル試料と併せて整理した。平成 31～令和 2 年度検討したペレット試料について、セメント種類ごとの自由水量と水素発生量の関係を図 2.1-27 に示す。図中には、セメントペースト試料のデータから導出した近似直線も併せて示す。



(A) OPC、(B) FAC、(C) BFSC

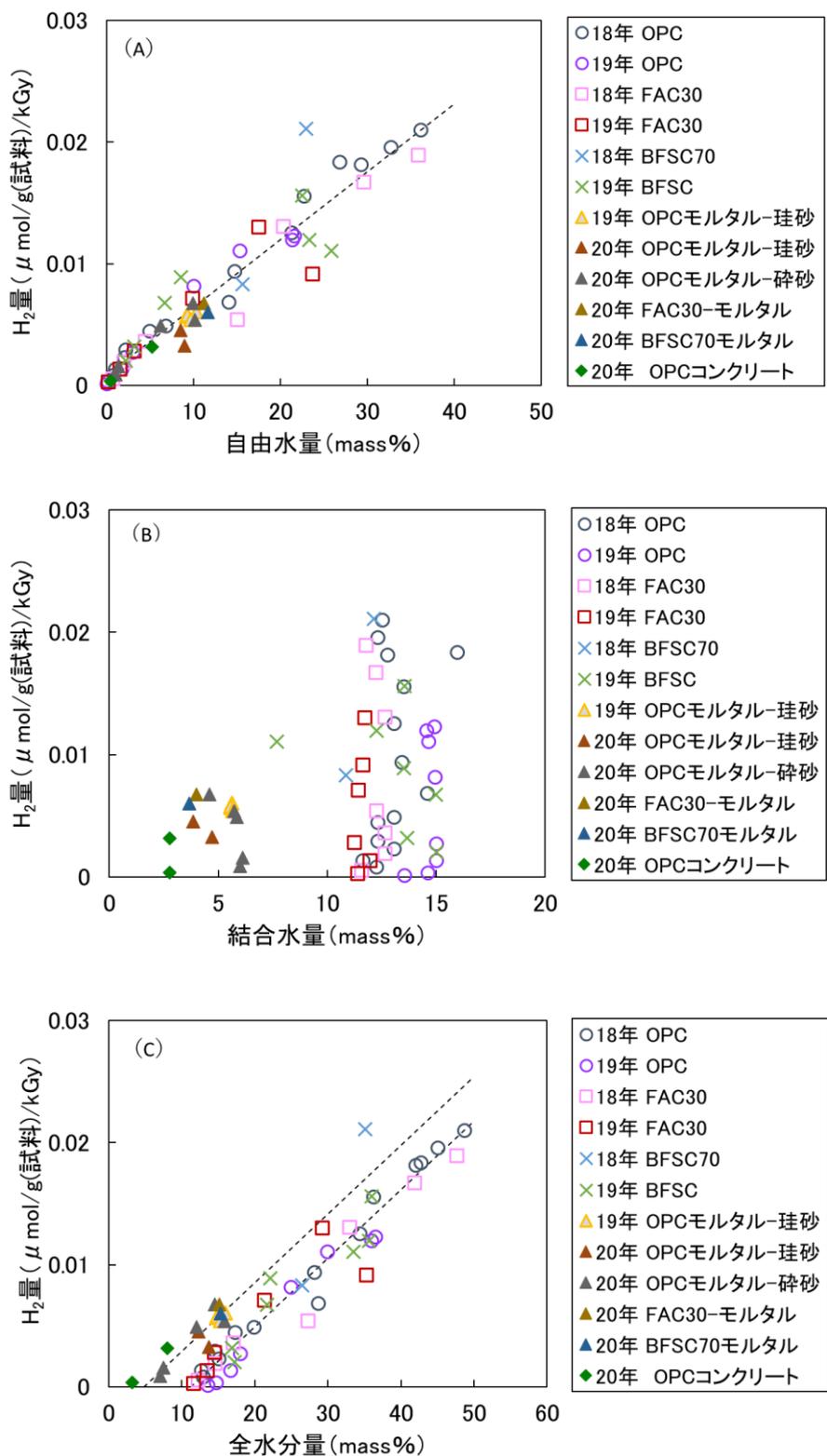
図中の破線はセメントペーストのデータから導出した近似直線

図 2.1-27 セメント種類ごとの自由水量と水素発生量の関係

BFSC のデータについてはばらつきが大きいものの、図 2.1-27 に示すように、セメント種類ごとの自由水量と水素発生量の関係は、近似直線の傾きに 10% 程度、切片に 0.001 程度の差異があるもののいずれも同様の傾向を示した。また、モルタル試料のデータは近似直線の近傍にプロットされた。

これを踏まえ、平成 30～令和 2 年度検討したペレット試料の全データについての、自由水量、結合水量及び全水分量と水素発生量の関係を図 2.1-28 に示す。なお、本図には令和 2 年度の

ンクリートのデータも示した。ただし、大きさの影響についてはさらに検討が必要であるため、参考としての表示にとどめ、近似直線の導出にはコンクリートのデータを使用しなかった。



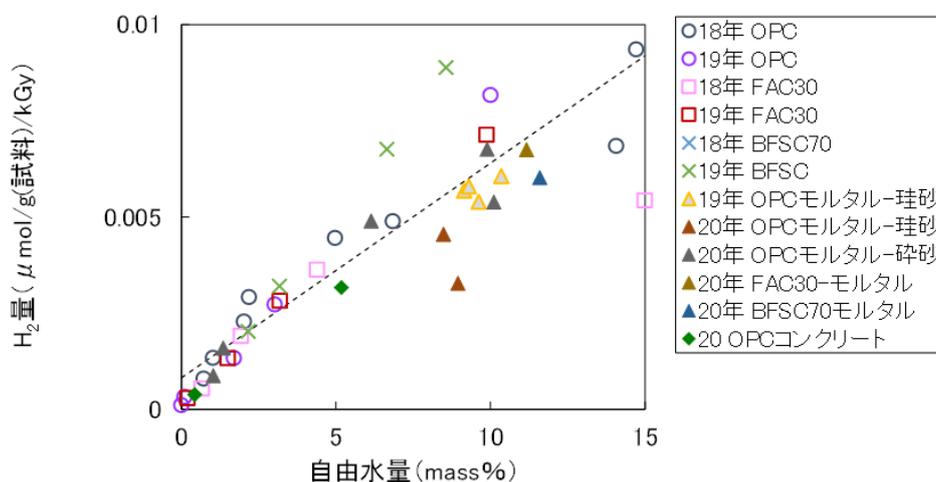
(A) 自由水量と水素発生量の関係、 (B) 結合水量と水素発生量の関係、 (C) 全水分量と水素発生量の関係

図 2.1-28 平成 30 年度～令和 2 年度のペレット試料の水分量と水素発生量の関係

図 2.1-28 からは、以下のことが読み取れる。

- ・ 自由水量と水素発生量の関係（図中（A））においては、セメントペースト及びモルタルともに自由水量の増加に伴い水素発生量が増加し、材料種類（セメントペースト、モルタル）及び使用したセメント種類が異なっても概ね同一の直線関係で整理できた。
- ・ BFSC を用いた試料では、自由水量と水素ガス発生量の直線関係から外れる点を確認されるが、スラグ中の Fe 等が水素ガス発生へ影響している可能性が考えられる。
- ・ 結合水量と水素発生量の関係（図中（B））においては、セメントペーストとモルタルで結合水量が異なり、モルタルでは 5%程度、セメントペーストでは 12~15%程度の結合水を含んでいる。
- ・ 全水分量と水素発生量の関係（図中（C））においては、セメントペースト及びモルタルともに全水分量の増加に伴い水素発生量が増加した。セメントペーストとモルタルは異なる直線関係で整理され、それぞれの直線は平行であり、横軸との交点はセメントペースト及びモルタルそれぞれの結合水量に相当していた。
- ・ 以上のことから、ペースト及びモルタル試料が含有する水分のうち、水素ガス発生に寄与しない水分が存在し、概ね結合水量がこれに相当すると判断される。つまり、水素発生には自由水の寄与が支配的である。

また、コンクリート中の自由水量はセメントペーストやモルタルより少ないこと、乾燥工程を設けることでさらに自由水量が少なくなることを考慮すると、自由水量が少ない範囲が重要となると考え、自由水量 0~15mass%の範囲を拡大した自由水量と水素発生量の関係を図 2.1-29 に示す。



破線は図 2.1-28 (A) の全データより導出した近似直線を示す

図 2.1-29 平成 30~令和 2 年度のペレット試料の自由水量と水素発生量の関係（拡大）

図中からは、以下のことが読み取れる。

- ・ セメントペーストと比較してモルタルのデータは近似直線の下側のプロットが多かったが、令和 2 年度の試験結果からはセメントペーストと明確に異なる傾向は認められなかった。今後、データを拡充し、自由水量と水素発生量の関係が 1 本の直線近似で評価できるかを明確にする必要がある。

以上を踏まえ、 γ 線照射による水素発生について、以下の通りまとめる。

- ・ コンクリート配合による水素発生量への影響について、骨材内部の間隙の水は自由水としてふるまうことが示された。また、異なる配合であっても、自由水量と水素発生量が同一の関係で整理できる可能性がある。しかし、各水準間の差異がばらつきの範囲内であるか、骨材量・種類及びセメントの種類の違いが水素ガス発生に影響するかどうか判断するには、更にデータを蓄積し、コンクリートによる水素ガス発生への評価へと繋げる必要がある。
- ・ 自由水量と水素発生量の相関関係（図 2.1-28 (A)）に基づき、内部充填材からの水素発生量を予測できる可能性がある。今後、モルタル及びコンクリートのデータを拡充し、検討する必要がある。
- ・ 令和2年度の検討から、試料の大きさ及び γ 線照射時の温度が水素発生量に影響する事が示唆された。試料の大きさについては、図 2.1-28 (A) の自由水量と水素発生量の相関関係から内部充填材からの水素発生量を予測する場合、内部充填材の形状を考慮する必要があると考えられる。今後、コンクリート製の内部充填材からの水素発生を評価するためには、これらの要因の影響の仕方を検討していく必要がある。

③ セメント系材料の G 値についての検討

(a) G 値の算出と整理

前述の結果に基づき、セメント系材料からの水素発生に関する G 値について検討、考察した。本項では、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（以下、 $G_{H_2(All)}$ と表記）と、試料中の自由水から発生した水素ガスの G 値（以下、 $G_{H_2(fW)}$ と表記）を設定した。

$G_{H_2(All)}$ の算出に使用する試料に対する吸収線量は、今回実施した試験における水換算の照射線量から算出した。試料の吸収線量については、Co-60 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、OPC モルタル試料 2)-⑤の場合、照射線量（水換算）は 5600Gy、 $(\Sigma Z / \Sigma A)_s = 51.97 / 102.71$ であった。従って、2)-⑤への吸収線量 D_s は

$$D_s = 5600 \text{ Gy} \times \{(51.97 / 102.71) / (10 / 18)\} = 5100 \text{ Gy}$$

と求められた。

一方、 $G_{H_2(fW)}$ の算出に使用する自由水に対する吸収線量は、試料中の水が純粋に γ 線を受けたと想定して、水換算の照射線量を使用した。

水素の G 値を求めた計算式を以下に示す。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 $1\text{eV} = 1.6 \times 10^{-19}\text{J}$ で換算し、求めることができる。

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

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

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

$G_{H_2}(fW)$: 試料中の自由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_{fW} : 試料中の自由水量 (kg)

R_{All} : 試料に対する吸収線量($Gy=J/kg$), R : 照射線量 (水換算) ($Gy=J/kg$)

上記 $G_{H_2}(All)$ 及び $G_{H_2}(fW)$ を算出した結果を、水分量と併せて表 2.1-22 に示す。

モルタル及びコンクリートともに、乾燥により自由水量が減少するに伴い $G_{H_2}(All)$ は減少し、 $G_{H_2}(fW)$ は増加した。モルタルの配合の影響については、水素発生量の考察と同様、ばらつきの範囲内であるか、骨材量・種類及びセメントの種類の違いが G 値に影響するかどうか判断するにはデータが不十分であると考えられる。今後、データを蓄積し、コンクリートによる水素ガス発生への評価へと繋げる必要がある。なお、モルタルにおいて 80°C で γ 線照射を実施した試料は、室温で照射した試料よりも $G_{H_2}(All)$ 及び $G_{H_2}(fW)$ ともに大きな値であった。廃棄体の熱の影響を受けた場合の $G_{H_2}(All)$ 及び $G_{H_2}(fW)$ について検討が必要である。

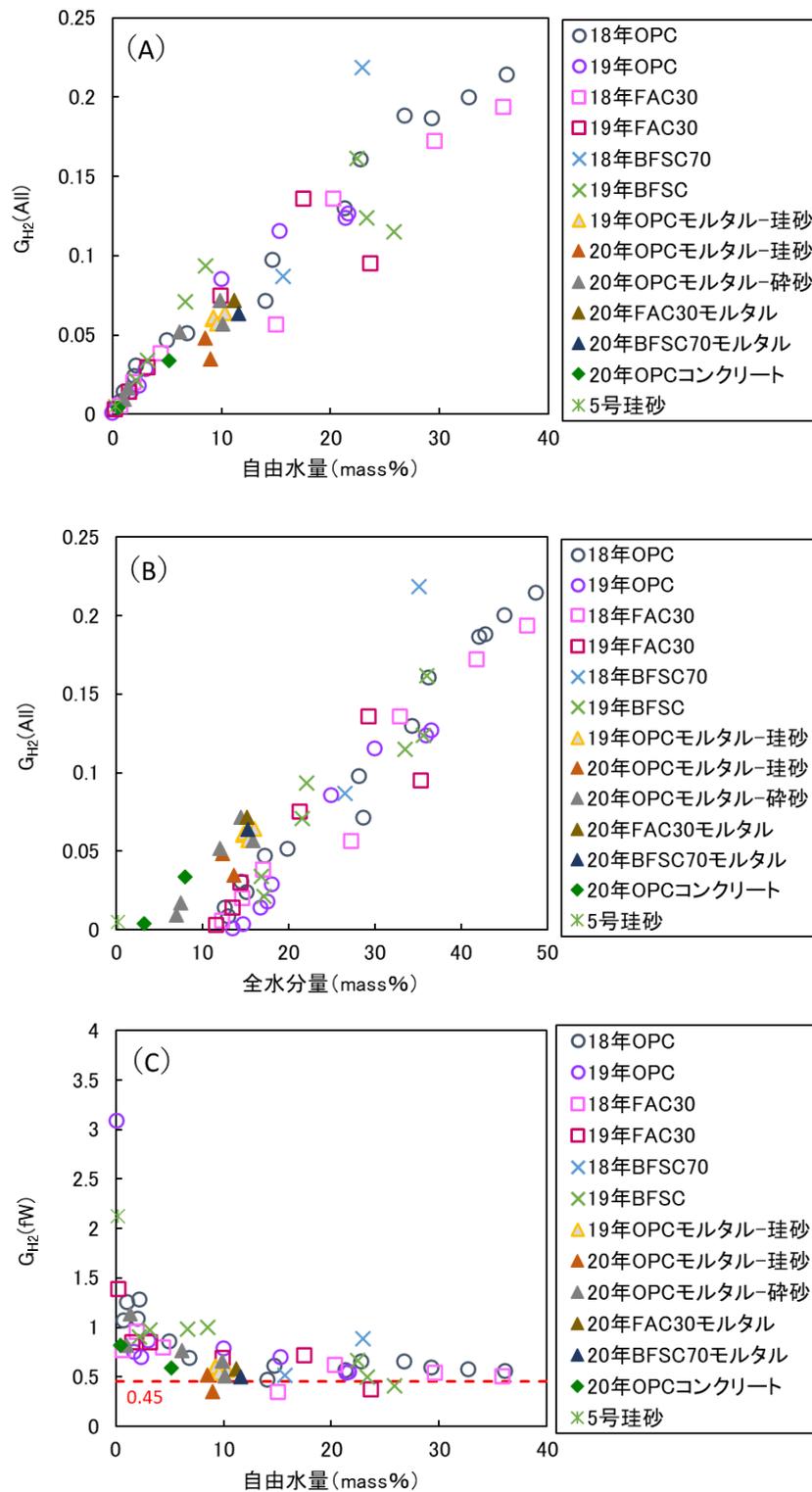
表 2.1-22 試料の水分量と G 値

試験No.	試料概要	水分量(mass%)			G値	
		自由水	結合水	全水分	G _{H2} (All)	G _{H2} (fw)
1)-①	OPCペースト、 W/C=0.45、表乾 Φ60mm×150mm	18.5	10.7	29.3	0.033	0.16
1)-②	OPCペースト、 W/C=0.45、表乾 <6.7mm				0.053	0.27
2)-①	OPCコンクリート 20°C封緘 4W 表乾	5.2	2.8	8.0	0.034	0.59
2)-②	OPCコンクリート 20°C封緘 4W + 80°C 1W乾燥	0.5	2.8	3.3	0.0041	0.82
2)-⑤	OPCモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2、 4W、表乾	10.1	5.7	15.8	0.057	0.51
2)-⑥	OPCモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2、 4w、50°C6h乾燥	6.1	5.9	12.0	0.052	0.77
2)-⑦	OPCモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2、 4W、80°C6h乾燥	1.4	6.1	7.5	0.017	1.1
2)-⑧	OPCモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2、 4W、80°C24h乾燥	1.0	6.0	7.0	0.0093	0.82
2)-⑨	OPCモルタル、砕砂、 W/C=0.60、S/C=3、 4W、表乾	9.9	4.6	14.5	0.072	0.66
2)-⑩	OPCモルタル、珪砂、 W/C=0.45、S/C=2、 4W、表乾	9.0	4.7	13.7	0.035	0.35
2)-⑪	OPCモルタル、珪砂、 W/C=0.60、S/C=3、 4W、表乾	8.5	3.8	12.3	0.048	0.52
2)-⑫	FACモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2、 4W、表乾	11.2	4.0	15.2	0.072	0.58
2)-⑬	BFSCモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2、 4W、表乾	11.6	3.7	15.3	0.064	0.50
3)-①	OPCモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2、 4W、表乾、照射時80°C	10.0	5.5	15.5	0.085 ^{注1)}	0.77 ^{注1)}
3)-①-再	OPCモルタル、砕砂、 W/C=0.45、S/C=2、 6W、表乾、照射時80°C	9.6		-	0.097 ^{注2)}	0.92

注 1) 試料容器に割れが認められ、ガスが漏れた可能性があるため参考値として示す。

注 2) 全水分量が 3)-①と変わらないと仮定して算出した。

表 2.1-22 に G 値を示した試料のうち室温で照射を行ったモルタルのペレット試料については、平成 31 年度までに検討したペレット試料（セメントペースト及びモルタル）、及び、5 号珪砂と併せて（原環センター，原子力機構，2019；2020）G_{H2}(All)及び G_{H2}(W)と水分量との関係を図 2.1-30 に示す。なお、本図には令和 2 年度のコンクリートのデータも示した。ただし、大きさの影響についてはさらに検討が必要であるため、参考としての表示にとどめる。



(A) 自由水量と $G_{H_2(All)}$ の関係、(B) 結合水量と $G_{H_2(All)}$ の関係、(C) 自由水量と $G_{H_2(fw)}$ の関係
 図 2.1-30 平成 31~令和 2 年度のペレット試料の水分量と G 値の関係

図 2.1-30 のグラフから確認されたことを以下に記す。

- 自由水量と $G_{H_2(All)}$ の関係 (図 2.1-30 (A)) においては、図 2.1-28 の自由水と水素発生量の関係と同様、セメントペースト及びモルタルともに自由水量の増加に伴い $G_{H_2(All)}$ が

増加し、材料種類（セメントペースト、モルタル）及び使用したセメント種類が異なっても概ね同一の相関関係で整理できると考えられる。ただし、BFSC ペーストではばらつきが大きかった。

- ・ 全水分量と $G_{H_2(All)}$ の関係（図 2.1-30 (B)）においては、セメントペースト及びモルタルともに全水分量の増加に伴い $G_{H_2(All)}$ が増加した。図 2.1-28 の全水分と水素発生量の関係と同様セメントペーストとモルタルは異なる直線関係で整理することができる。
- ・ 自由水量と $G_{H_2(fW)}$ の関係（図 2.1-30 (C)）においては、セメント及びモルタルともに、自由水量 10mass%以上では $G_{H_2(fW)}$ が水の G_{H_2} 値 0.45 に近い値であるのに対し、自由水量が少ない領域では $G_{H_2(fW)}$ が大きくなった。また、BFSC ペーストでは他の試料と比較すると、 $G_{H_2(fW)}$ が高めの値を示す試料が存在した。

(b) G 値に関する考察

(i) BFSC ペーストのばらつきが大きいことに関する考察

水素発生量を示した図 2.1-28 及び G 値を示した図 2.1-30 については、平成 31 年度の整理（原環センター，原子力機構，2020）を踏襲し、BFSC ペーストについてもばらつきが大きいながらも概ね同じ傾向にある（図 2.1-27 (C)）とみなして同じグラフに載せた。しかし、平成 30 年度の文献調査（原環センター，原子力機構，2019）では、高炉スラグを含むセメント系材料では水素発生量が多くなるのが複数の文献で示されていた（Lewis・Warren, 1989、Noshita et al., 1995）。また、最近の研究において、鉄の硫酸塩水和物において、鉄の価数が変わると G_{H_2} の値が変わることが示された（熊谷ほか，2021）。

本業務においては、図 2.1-28 及び図 2.1-30 に示したように、BFSC ペーストは必ずしも水素発生量及び $G_{H_2(All)}$ が他の種類のセメントと比較して高いとは言い切れないが、何点かは他とは明らかに高い値を示す点が存在する。この結果及び既往の研究の成果を踏まえると、高炉スラグに含まれる Fe の価数次第では、BFSC を用いた内部充填材は他のセメントを用いた内部充填材とは水素発生挙動が異なるケースが生じる可能性がある。したがって、今後、内部充填材からの水素発生挙動及び G 値を検討する場合、BFSC を用いたセメント系材料については、スラグ特有のメカニズムを考慮し、水素発生量を予測する必要がある。

(ii) 自由水量と $G_{H_2(fW)}$ の関係に基づく水素発生メカニズムに関する考察

自由水量と $G_{H_2(fW)}$ の関係では、自由水量が多い領域では $G_{H_2(fW)}$ が純水からの水素生成の G_{H_2} 値（以下、バルク水の G_{H_2} 値）0.45 に近い値、一方、自由水が少ない領域ではそれより高い値を示した。

セメント系材料における水素生成は、硬化体の細孔中の自由水が何らかの形で放射線のエネルギーを吸収した結果として生じると考えられる。自由水量が多い場合の $G_{H_2(fW)}$ がバルク水の G_{H_2} 値 0.45 に近い値を示す事は、自由水量が多い場合には、細孔中の自由水からの水素生成がバルク水と同様のメカニズムである事を示唆している。一方、自由水量が少ない場合には、細孔中の自由水からの水素生成がバルク水とは異なる作用を受けている事を示唆している。

自由水が少ない場合の水素発生には、細孔壁が影響していると考えられる。

自由水量が少ない状態とは、細孔壁との距離が近い水分子の割合が多い状態と考えられる。この状態において、細孔壁からのエネルギーが効率良く水分子に吸収される、もしくは、水素生成反応を阻害する OH ラジカル等の副生成物が細孔壁に吸収される、などの効果により、水素が高効率で生成しているメカニズムが考えられ、その結果として $G_{H_2(fW)}$ 値は高い値を示していることが推測される。同様に自由水量が多い状態を考えると、自由水量が増えるに伴い、細孔壁との

距離が遠い水分子の割合が増加する。その結果、前述のような細孔壁の影響を受けず、バルク水と同様のメカニズムによる水素生成の寄与が大きくなり、 $G_{H_2}(fW)$ がバルク水の G_{H_2} 値 0.45 に近い値となることが考えられる。

メカニズムとしては推測の域を出ないが、自由水が少ない領域での水素生成は、何らかの形で細孔壁の影響を受けていると考えられる。

(iii) 内部充填材からの水素発生量予測のための G 値の整理についての考察

廃棄体パッケージにおける水素発生量を推定するにあたって、水素ガス発生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の水素発生量が重要となる。

図 2.1-30 (C) に示した、自由水量と $G_{H_2}(fW)$ の関係においては、自由水量が少ない領域は水素発生量が少ないが、G 値は大きい領域となる。この関係は、自由水量によって細孔壁の影響度が異なる事が示唆されるなど、水素発生メカニズムを考察する上では重要である。しかし、水素発生量の予測を精度良く行う上では、自由水量が少ない領域で $G_{H_2}(fW)$ が急激に立ち上がっているため、誤差が大きくなる事がネックとなる可能性がある。

図 2.1-30 (B) に示した全水分量と $G_{H_2}(All)$ の関係においては、材料ごとに相関関係が異なっていた。この場合、材料種ごとに相関関係を求める必要があり、現時点ではコンクリートの水素発生量を予測するためのデータが不足している。

図 2.1-30 (A) に示した、自由水量と $G_{H_2}(All)$ の関係においては、平成 31 年度にも言及したように、自由水量が 10mass% 以下の少ない範囲ではセメント種類による影響は軽微である。また、令和 2 年度の結果からは、モルタル及びコンクリートも同じ相関関係に乗る可能性もある。そうであった場合、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、簡易な方法で求めることが可能である。そのため、内部充填材からの水素ガス発生量を見積る方法として、自由水量と $G_{H_2}(All)$ での評価は、現時点では最も有効であると考えられる。

引き続き、内部充填材からの水素発生量の予測に適している G 値の整理の仕方、及び、モルタル及びコンクリートの自由水量と G 値の関係を検討することが必要である。

4) 内部充填材のセメント系材料からの水素発生量に関する検討のまとめ

これまでの検討はセメントペースト及びモルタルを用いて実施してきたが、実際の内部充填材の候補材料であるコンクリートでは骨材割合が多く、骨材に含まれる水による水素ガス発生への影響が顕在化する可能性がある。また、発生した水素ガスはセメント系材料内を拡散により移動して外部に放出されるため、試料の大きさにより水素ガスの発生量に差異が生じる可能性がある。さらに、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、内部充填材の温度条件による水素発生量への影響を整理する必要がある。

以上を踏まえ、試料の大きさによる水素発生量の差異の確認、コンクリート配合による水素発生量への影響確認、及び、温度による水素発生量の差異の確認を実施した。

その結果を以下に記す。

- ・ 試料の大きさによって水素発生量に差異が生じる可能性があり、今後更に検討が必要である。
- ・ コンクリート配合による水素発生量への影響について、骨材内部の間隙の水は自由水としてふるまう。また、異なる配合のモルタルであっても、自由水量と水素発生量が同一の関係で整理できる可能性がある。しかし、各水準間の差異がばらつきの範囲内であるか、骨

材量・種類及びセメントの種類の違いが水素ガス発生に影響するかどうか判断するには、更にデータを蓄積し、コンクリートによる水素ガス発生への評価へと繋げる必要がある。

- ・ 80℃でγ線を照射した試料は、室温でγ線を照射した試料よりも水素発生量が多かった。また、これらの結果に基づきG値を算出して整理した。その結果、以下の知見を得た。
- ・ 自由水量とG_{H2}(All)の関係は、材料種類（セメントペースト、モルタル）及び使用したセメント種類が異なっても概ね同一の相関関係で整理できると考えられる。
- ・ 全水分量とG_{H2}(All)の関係は材料種類ごとに異なる相関関係を示す。
- ・ 自由水量とG_{H2}(fW)の関係は、自由水量が多い領域ではG_{H2}(fW)がバルク水のG_{H2}値0.45に近い値、一方、自由水が少ない領域ではそれより高い値を示した。
- ・ 水素ガス発生の抑制を目的として乾燥処理させたコンクリート製内部充填材からの水素発生量の予測においては、試料質量に対する自由水量が少ない範囲の水素発生量が重要となる。また自由水量は比較的容易に求めることが可能である。これらを考慮すると、データを蓄積し自由水量とG_{H2}(All)の関係から水素発生量を推測することが、現時点では最も有効であると考えられ、廃棄体パッケージ内の水素発生量を推定するにあたっては、試料の大きさの影響、及び、廃棄体の温度の影響について検討し、水素発生量の評価に反映する必要がある。

それらを踏まえた上で、内部充填材からの水素発生量の予測に適しているG値の整理の仕方、及び、モルタル及びコンクリートの自由水量とG値の関係を検討することが必要である。

(2) すき間充填材からの水素発生量の確認

平成31年度の検討では、廃棄体パッケージ製作時に設けるすき間の充填材（すき間充填材）に求められる性能を検討するとともに、すき間の充填に関する要素試験を実施した。その検討において、すき間充填材として検討したPCグラウトから廃棄体パッケージに持ち込まれる水量を算出した。その際には、すき間充填材が施工されるのは廃棄体パッケージ内に廃棄体を設置した後なので、持込み水＝練混ぜ時に添加した水の全量が水素ガスの発生に寄与すると考えた。しかしながら、すき間充填材のPCグラウトは時間の経過に伴い硬化するため、持込み水の全量が水素ガス発生に寄与する訳ではないと考えられ、すき間充填材からの持込み水が水素ガス発生にどのように寄与するかの検討が必要である。そこで、本検討ではすき間充填材からの水素発生量を見積もるための基礎データとして、すき間充填材（PCグラウト）の硬化過程における水素発生量を経時的に測定した。

1) 試験方法

① 試験水準

令和2年度の検討で用いるPCグラウトは、平成31年度の検討において最も水量が大きかった低粘性型PCグラウトが販売停止となったこと、及び、練混ぜからγ線照射までの間に行う試料容器への充填の作業性の観点から、超低粘性PCグラウトを用いた。本試験においては、線量率を一定の条件でγ線を照射した際の水素発生量の経時変化を確認した。照射時間の水準を表2.1-23に示す。

表 2.1-23 試料の条件（すき間充填材からの水素発生量の確認）

試験No.	試料名	試料条件			
		PCグラウト種類	W/P	照射時間	測定温度
4)-①	超低粘性型PCグラウト	太平洋ハイジェクター®	0.36	2h	室温
4)-②	超低粘性型PCグラウト	太平洋ハイジェクター®	0.36	4h	室温
4)-③	超低粘性型PCグラウト	太平洋ハイジェクター®	0.36	17h	室温
4)-④	超低粘性型PCグラウト	太平洋ハイジェクター®	0.36	24h	室温

② 使用材料及び試料の調製

前述の通り、超低粘性 PC グラウト（太平洋ハイジェクター®）を用いた。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 2.1-24 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 2.1-24 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	2.7	1,440	4,000	太平洋ハイジェクター®

③ 試料の分析

照射試験とは別バッチにて同一の手順で調製したすき間充填材について、以下の分析を行った。

(a) フレッシュ性状

すき間充填材のフレッシュ性状の測定は、表 2.1-25 に示す項目及び方法にて実施した。

表 2.1-25 フレッシュ性状試験の概略

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ポート流下時間	土木学会規準:JSCE-F 522
		Jポート流下時間	土木学会規準:JSCE-F 531
		SL(セルフレベリング材)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

(b) 化学組成分析

試料に対する吸収線量を求めるため、硬化後のすき間充填材について、蛍光 X 線分析により化学組成を測定した。また、強熱減量 (ig.loss) の測定には、JIS R 5202 を準用した。

(c) 試料中の水分量

すき間充填材を練混ぜ後、照射時間に相当する時間が経過した時点から 105°Cにて乾燥を行い、試料に対する質量減少率を測定し、この減少率を自由水量とした。自由水量測定後の試料を 600°C、3 時間乾燥した場合の試料に対する質量減少率を測定し、この減少率を結合水量とした。また、自由水量と結合水量の和を全水分量として求めた。自由水量、結合水量及び全水分量の計算式は、前述した通りである。

④ γ 線による照射試験

(a) 照射試験

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にて実施した。照射線量率は、1kGy/h とした。

練り混ぜ後の試料は、ステンレス製インナーカップに入れさらに、ステンレス製圧力容器に入れた。試料量は、4)-①及び 4)-②では 650g 程度としたが、照射後の容器内の水素濃度が爆発限界の 4% (40,000ppm) を超えた試料が存在したため、4)-③及び 4)-④では安全のため 1/10 の 65g

とした。その後、純空気で置換した上で、封入した（図 2.1-31）。照射試験の状況を図 2.1-32 に示す。

雰囲気ガスの置換～照射後のガスの取り出しの手順は前述のコンクリート試料の手順に準じた。

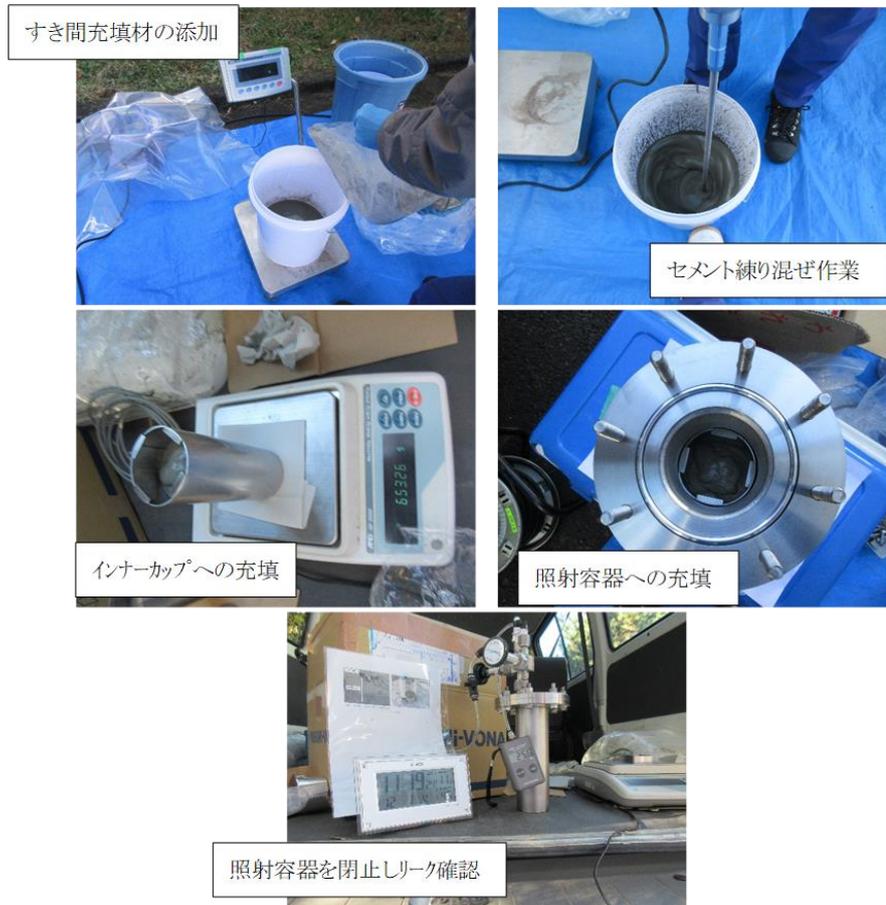


図 2.1-31 硬化過程のすき間充填材からの水素ガス発生量の確認試験の練り混ぜ・充填状況

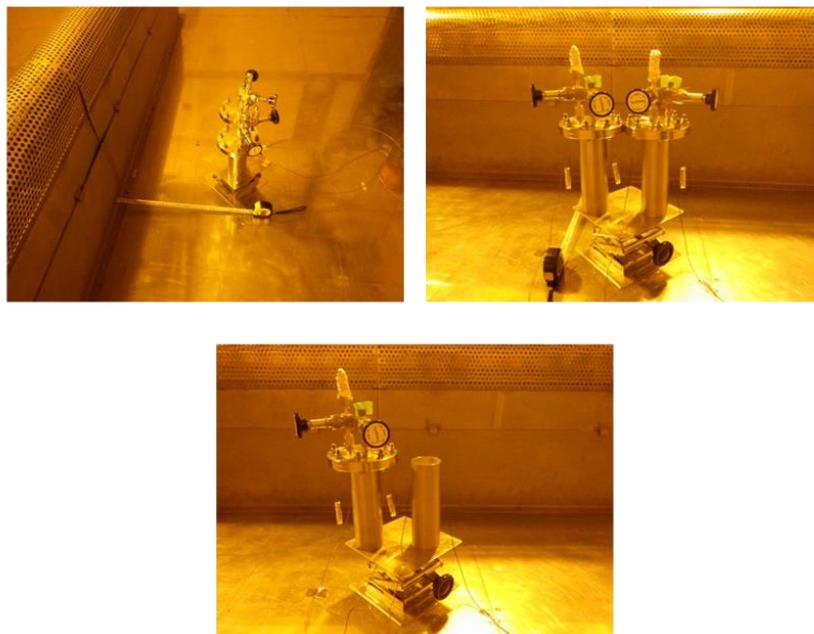


図 2.1-32 硬化過程のすき間充填材からの水素ガス発生量の確認試験照射実施状況

(b) 照射試験による分析項目

圧力容器内のガスを採取し、ガスクロマトグラフィーにより H₂ を測定した。

2) 試験結果

① 試料の分析結果

(a) フレッシュ性状

照射試験とは別バッチにて、同一の手順で調製したすき間充填材について、フレッシュ性状を測定した結果を表 2.1-26 に示す。JP ロート流下時間は、メーカーの基準値である 3.5~6.0s の間であった。なお、γ線照射試験時の練り混ぜの際にも JP ロート流下時を測定したが、5.9s 及び 5.2s であり、メーカー基準値の範囲内であった。その他の測定データについても、平成 1 年度の測定結果（原環センター，原子力機構，2020）と比較して同等の値であった。

表 2.1-26 すき間充填材のフレッシュ性状の測定結果

Pロート流下時間 (s)	18.4s
JPロート流下時間 (s)	4.1s
SLフロー (mm)	201mm、202mm
練上り温度 (°C)	26.7°C
単位容積質量 (g/cm ³)	1.99

(b) 化学組成分析

照射試験とは別バッチにて同一の手順で調製したすき間充填材の化学組成分析結果を表 2.1-27 に示す。本検討で用いるすき間充填材 4)-①~④は硬化の段階が異なるだけであるので、硬化後の試料を測定に供し、その結果を 4)-①~④の固形分の組成とした。

表 2.1-27 すき間充填材の化学組成（単位：mass%）

試料名	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
4)-①~④	21.79	15.43	4.68	2.12	50.97	0.83	2.74	0.33	0.2	0.24	0.12	0.05

(c) 試料中の水分量

照射試験とは別バッチにて同一の手順で調製したすき間充填材について、水分量を測定した結果を表 2.1-28 に示す。ここでは、硬化過程における自由水量及び結合水量の変化を検討できるよう、練り混ぜから所定の時間が経過した後から乾燥を開始した際の重量減少から水分量を求めた。全水分はすべてにおいて練混ぜ水量 26.5mass%と同等であり、練混ぜ~乾燥開始までの時間の経過とともに、セメント成分の水和の進行により全水分中の自由水の比率が低下し、結合水量の比率が増加した。また、練混ぜ 24 時間後に水分量を測定した水準と、練混ぜ 6 日後に水分量を測定した水準とでは、自由水量と結合水量は同等であった。

表 2.1-28 すき間充填材の水分量の測定結果

練混ぜ～乾燥開始までの時間	水分量		
	自由水 (%)	結合水量 (%)	全水分 (%)
0時間	21.5	5.2	26.7
2時間	20.0	6.7	26.7
4時間	18.0	7.9	25.8
17時間	15.8	10.6	26.4
24時間	15.8	10.4	26.2
6日(参考)	16.0	10.7	26.7

② γ線照射により発生したガス量

前述のように、すき間充填材は廃棄体設置後に施工するため、練混ぜ直後の流動性が高い状態から廃棄体からの放射線に暴露される。そこで、本検討では、練混ぜ後の硬化過程からγ線を照射し、所定の時間が経過するまでの間に発生する水素の量を検討した。表 2.1-29 に照射時間と水素発生量との関係を示す。また、照射時間と試料重量あたりの水素発生量 (μmol/g) との関係を図 2.1-34 に示す。

結果は以下のとおりである。

- ・ 照射時間が長くなるとともに、線量当たりの水素発生量 (μmol/g/kGy) は減少し、累積量に相当する水素発生量 (μmol/g) についても、増加曲線の傾き (増加率) が低下する傾向にあった。これは、時間の経過とともに水素発生効率が低下している事を示している。
- ・ 平成 31 年度の同程度の自由水量のペレット状の OPC ペースト (材齢 28 日) (原環センター, 原子力機構, 2020) と比較すると、水素発生量 (μmol/g/kGy) は、照射時間 2 時間の試料で 40 倍程度であった。
- ・ 照射時間 2 時間と 24 時間の試料を比較すると、自由水量が 2 割程度の減少であるのに対し、水素発生量 (μmol/g/kGy) の減少割合は 85%程度であった。このことから、硬化過程のすき間充填材からの水素発生においては、自由水量の影響に加え、別の要因が影響して初期の水素発生量が多くなっていると考えられる。その要因がスラリーであることに由来する要因なのか、もしくは、すき間充填材に含まれる成分に由来する要因なのか等、現時点では明確になっておらず、検討が必要である

表 2.1-29 照射時間と水素発生量との関係

試験No.	照射時間 h	実照射線量 kGy	試料質量 g	ガス取り出し時の温度 ℃	大気圧 kPa	測定系容器内圧力 kPa	系統容積 ml	水素濃度測定値 ppm	水素発生量換算 μmol	水素発生量	
										μmol/g	μmol/g/kGy ¹⁾
4)-①	2	2.1	653.235	23.9	102.0	124.7	310.5	41204	641.8	0.983	0.4679
4)-②	4	4.3	651.100	24.5	102.1	121.9	313.2	33764	517.2	0.794	0.1847
4)-③	17	16.2	65.475	27.3	100.5	128.2	590.5	2525	77.2	1.18	0.0727
4)-④	24	22.9	66.115	27.9	100.5	126.0	602.9	3446	105.6	1.60	0.0697

1) 単位に記されている kGy は、表中の実照射線量 (水換算) を示す。

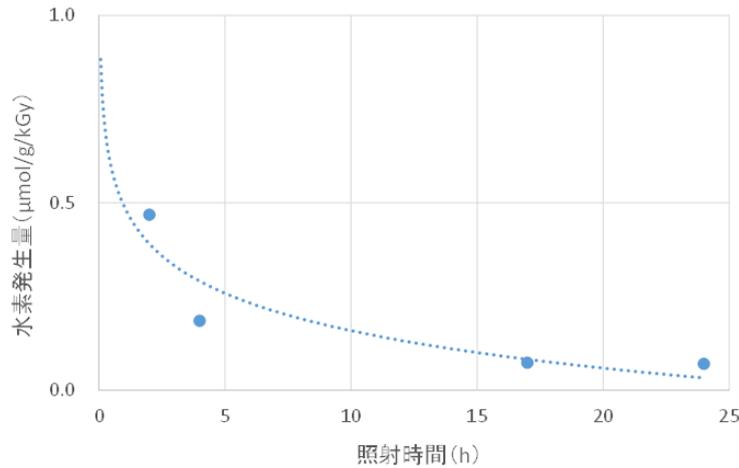


図 2.1-33 照射時間と単位線量、試料重量あたりの水素発生量 (μmol/g/kGy) との関係

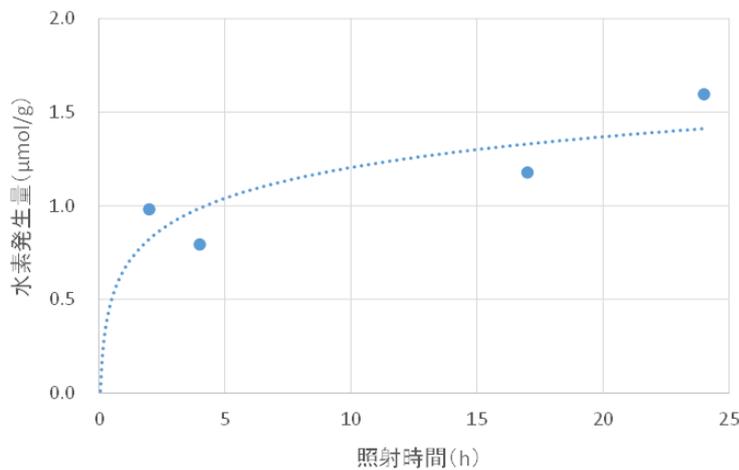


図 2.1-34 照射時間と試料重量あたりの水素発生量 (μmol/g) との関係

また、照射時間と G 値の関係を表 2.1-30 に示す。G 値の定義及び算出方法は前述した通りである。自由水量は時間経過に伴い変化したがる、G 値算出に際しては、照射開始時点の水分量を用いることとした。そのため、いずれの試料も水分量は、表 2.1-28 に示した練混ぜ直後から水分測定を実施した試料の水分量の値を用いた。

照射時間が長くなるのに伴い G 値の値は小さくなり、水素発生効率低下していく傾向が認められた。G_{H2}(fW)に着目すると、バルク水の G_{H2} 値 0.45 と比較して、照射時間が 2 時間の値が 47 倍、24 時間の値が 7 倍と大きな値であった。前述のように、何らかの要因が影響して G_{H2}(fW)が高い値となっていると考えられる。その要因がスラリーであることに由来する要因なのか、もしくは、すき間充填材に含まれる成分に由来する要因なのか等、現時点では明確になっていない。ただし、G_{H2}(fW)が時間の経過とともに小さくなることから、時間の経過とともにその要因の影響は小さくなっていると考えられ、最終的にはセメントペースト硬化体と同様バルク水の G_{H2} 値 0.45 に近づく可能性もある。今後、さらに長時間照射した場合 G_{H2}(fW)、硬化後のすき間充填材の G_{H2}(fW)がどのような値となるかの確認が必要である。

表 2.1-30 すき間充填材の G 値

照射時間	G _{H₂} (All)	G _{H₂} (fW)
2時間	4.9	21.0
4時間	1.9	8.3
17時間	0.76	3.3
24時間	0.73	3.1

3) すき間充填材からの水素発生量の確認のまとめ

平成 31 年度の検討で要素試験を実施したすき間充填材からの水素発生量を予測するにあたり、すき間充填材の PC グラウトは時間の経過に伴い硬化するため、持込み水の全量が水素ガス発生に寄与する訳ではないと考えられる。そこで、本検討ではすき間充填材からの水素発生量を見積もるための基礎データとして、すき間充填材 (PC グラウト) の硬化過程における水素発生量を経時的に測定した。

すき間充填材からの水素発生について以下にまとめる。

- ・ 練混ぜ～乾燥開始までの時間の経過とともに、全水分中の自由水の比率が低下し、結合水量の比率が増加した。
- ・ 照射時間の経過とともに、線量当たりの水素発生量 ($\mu\text{mol/g/kGy}$) は減少し、累積量に相当する水素発生量 ($\mu\text{mol/g}$) についても、増加曲線の傾き (増加率) が低下する傾向にあった。平成 31 年度の同程度の自由水量のペレット状の OPC ペースト (材齢 28 日) と比較すると、水素発生量 ($\mu\text{mol/g/kGy}$) は、0-2 時間で 40 倍程度、17-24 時間で 5-6 倍程度であった。また、G_{H₂}(fW)に着目すると、バルク水の G_{H₂} 値 0.45 と比較して、照射時間が 2 時間の値が 47 倍、24 時間の値が 7 倍と大きな値であった。
- ・ 硬化過程のすき間充填材からの水素発生においては、何らかの要因の作用により水素発生効率が高くなっていると考えられる。その要因が何かは明確ではないが、時間の経過に伴い水素発生効率が低下していることから、時間の経過とともにその影響は小さくなっていると考えられる。

今後の課題として、時間が経過することですき間充填材の G_{H₂}(fW)がセメントペースト硬化体と同様バルク水の G_{H₂} 値 0.45 に近づくかを確認することが必要である。その上で、操業中～閉鎖後 300 年を目安とした期間の水素発生量を見積もるための G 値の整理をする、廃棄体パッケージの製作工程の工夫によるパッケージ内圧の低減が可能かを検討する必要がある。また、廃棄体の熱により温度が上がるため、高温時のすき間充填材からの水素発生量の確認が必要であると考えられる。更に、実際に施工するにあたって、温度が上がることで粘性や流動性といったスラリー性状が変化して施工性に影響はないか、所定の機能を得ることが出来るかの確認が必要である。

(3) 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

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、水の放射線分解で発生した水素ガスによる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) が水素ガス発生挙動に影響することが示唆された。同様な挙動が廃棄体パッケージ内でも起こり得るのであれば、水素ガス発生抑制策を検討する上で、また、廃棄体パッケージの健全性を考える上でも、その現象を把握することが必要である。

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概略把握を目的に、密閉容器内で γ 線照射による圧力変化を測定できる手法を検討し、ガス発生による圧力変化及び水素ガス量を測定した。検討した測定手法により圧力容器内の圧力変化を精度よく測定可能であり、また、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成分について評価できる見通しを得た。一方で、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かった。発生した水素ガスの拡散による外部への放出挙動の試料の大きさによる差異や、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の疑いが考えられ、ガス回収のシステム及び手順については更なる検討、改善が必要である。また、 γ 線の線量率が低かったために水素発生量が少なかった可能性も否定できない。

以上を踏まえ、令和 2 年度は、圧力容器からのガス採取に採取袋を使用せず、ガス採取用のタンクを使用するよう変更した上で、高照射線量率条件下での圧力測定を実施した。

1) 試験装置及び方法

(a) 圧力測定装置

平成 31 年度は、ステンレス製の圧力容器に装置内の死容積が既知のガスハンドリングシステム Visual Conc (SyncMOF 株式会社製) を接続し、ガスハンドリングシステムの圧力計を用いて試験系の圧力上昇を測定した。その際に、圧力容器にガス採取袋を取り付け、圧力の上昇の測定後に発生したガスを採取したが、圧力容器とガス採取袋を繋ぐ配管部分において空気の漏れ込みの疑いが考えられる結果であった。

令和 2 年度は、平成 31 年度と異なりガスハンドリングシステムを照射室外に設置するため、ステンレス製の圧力容器とガスハンドリングシステムを接続する配管の死容積や圧力損失が、圧力の測定値に影響する可能性が懸念された。そこで、令和 2 年度は、ガスハンドリングシステムを活用しての圧力と温度の常時測定と並行して、複数の圧力容器を用いて線量率を変えた条件での γ 線照射を実施し、照射試験終了時点での圧力を測定した。圧力測定装置の全体イメージを図 2.1-1 に示す。また、常時測定に用いた試験装置の概略を図 2.1-36 に示す。本試験の常時測定においては、図 2.1-36 の緑の網掛けで示した試験系（ガスハンドリングシステム+接続配管+圧力容器）の圧力を測定した。一方、線量率を変えての測定においては、照射後の圧力として試験系の圧力を測定したが、照射時の状態を反映するため図 2.1-36 の赤枠の容器内圧力として示した。

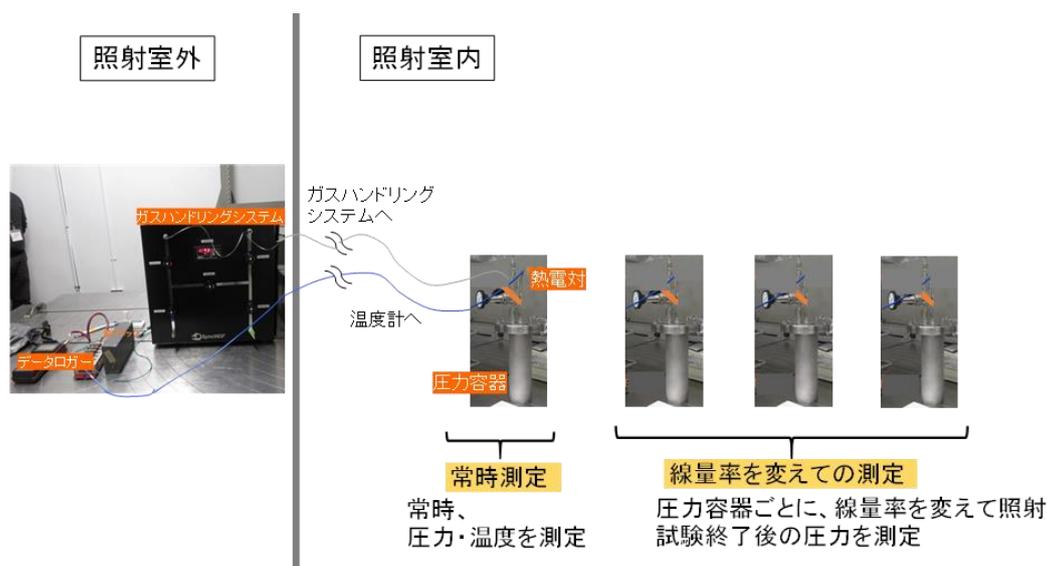
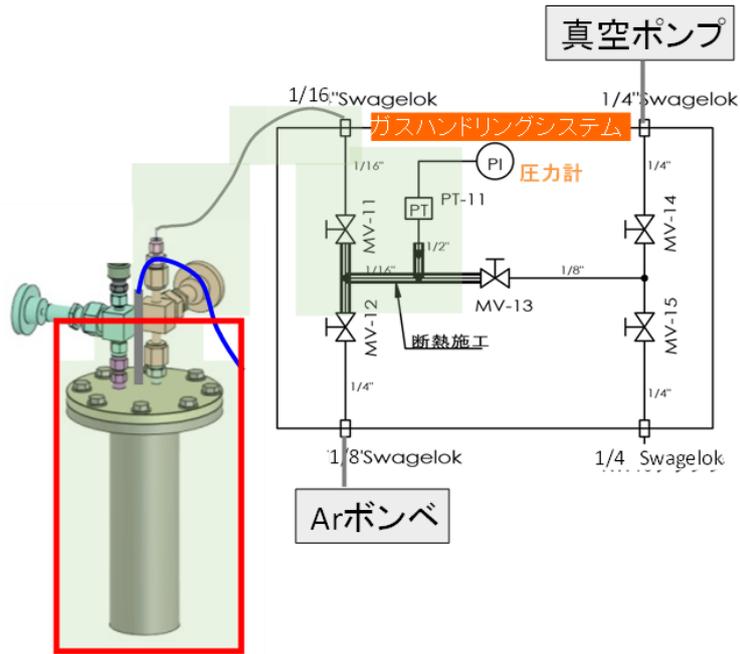


図 2.1-35 圧力測定装置イメージ



赤枠：容器内、緑色網掛け：試験系
 図 2.1-36 常時測定に用いた試験装置の概略

② 試験方法

(a) 測定試料

測定試料は、表 2.1-2 の試料 No.1)-①と同配合かつ同条件で養生した OPC ペーストを用いた。材料は、表 2.1-1 に示した OPC を用いた。試料は乾燥しないように上部を密閉し、28 日間養生した。測定試料中の水分は、前述した方法で測定した。

(b) 試験手順

試験手順は、以下のとおりである。本試験においては、照射により高温になった場合に水蒸気が発生し、それによる圧力上昇があった場合に、水蒸気濃度を測定できないために水素発生による圧力上昇の寄与を正確に評価できない可能性があった。そこで、照射前後の圧力測定値から圧力上昇値を求める際に、温度による圧力値への影響をキャンセルするために照射前後の温度をそろえるのに加え、水蒸気を凝縮させるために積極的に冷却を行う事とした。

まず、試料は、質量測定後ステンレス製圧力容器に入れ、金属 O リングを設置し、フランジを閉じた。その後、容器内部をガス置換した(図 2.1-37)。ガス置換は、約 30 kPa まで減圧する操作と雰囲気ガスを導入する操作を 4 回行い、照射容器内の最終圧力を約 100 kPa (設定圧) とし容器上部のバルブを閉じた。なお、最終圧力調整前に陽圧状態とし、一定時間圧力の変化がないことを確認し容器にリークがないことを確認した。

その後、圧力容器の温度をインキュベータで調整した後に圧力を測定した。

次いで、 γ 線照射を開始した。 γ 線照射は、目標の線量率となる様に設定した、線源からの所定の距離の位置に試料を設置し実施した。所定時間経過後、照射室から圧力容器を取り出し、圧力容器の温度をインキュベータで調整した後に圧力を測定した。

発生ガスの採取は、内圧測定後に図 2.1-38 に示す測定用ガス取り出しタンク系内を大気圧とし、容器内のガスを測定用ガス取り出しタンク系内に誘導し行った。採取したガスは、ガスクロマトグラフィーでガス成分の濃度を測定した。

なお、ガス取出し操作を実施した試料は、ガスの絶対量を求めるために照射容器内の容積を求める必要があるため、ガスの分析後、接続した照射容器の容積測定を実施した。容積測定は、容積既知の部分にガスを封入してその時の圧力を測定、その後バルブを開いて容積を測定したい箇所へガスを導入した後の全体（容積既知+容積を測定したい箇所）の圧力を測定し、 PV =一定の関係を用いて容積を求めた。そして、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。

本試験においては圧力測定に供した試料の他に別途同サイズのセメントペースト試料を準備し、 γ 線照射前の雰囲気ガス置換から4日後まで、及び、予備検討として24時間 γ 線を照射した後8日後まで、経時的に圧力容器内のガスを分析して空気の漏れ込みが無いことを確認した。 γ 線照射時の線量測定方法は前述した通りである。



図 2.1-37 試料のガス置換実施状況



図 2.1-38 ステンレス製圧力容器及びガス取り出しタンク

(c) 照射試験

セメントペーストの照射試験については、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にて実施した。照射試験の状況を図 2.1-39 に示す。

照射中の圧力データ及び試料温度は、圧力容器の一つに接続したガスハンドリングシステムと熱電対をデータロガーに接続することにより、試験系の圧力を連続的に記録した（常時測定）。



図 2.1-39 圧力上昇確認のための照射試験の様子

(d) 発生ガスの測定

圧力測定が終了後に採取したガスの H_2 、 O_2 、 CO_2 、 N_2 濃度を、ガスクロマトグラフィーにより測定した。ただし、常時測定試料については、現地にて配管接続を行う際に配管への空気の入り込みが避けられず、また、 Ar ガスボンベを持込んでガス置換を行うことが出来ないことから、 H_2 のみの測定とした。

2) 試験結果

① γ 線照射による圧力の変化

(a) 水蒸気による圧力上昇への影響の評価

本試験においては、照射により高温になった場合に水蒸気が発生し、それによる圧力上昇があった場合に、水蒸気濃度を測定できないために水素発生による圧力上昇の寄与を正確に評価できない可能性があった。そこで、照射前後の圧力測定値から圧力上昇値を求める際に、温度による圧力値への影響をキャンセルするために照射前後の温度をそろえるのに加え、水蒸気を凝縮させるために積極的に冷却を行う事とした。

それを踏まえ、はじめに本試験における冷却による水蒸気の寄与のキャンセルの効果を評価するために、 γ 線照射後の常時測定試料の冷却前後の圧力を比較した結果を、表 2.1-31 に示す。なお、本節の以下の図表においては、特に注記が無い限り実照射線量は試料に照射された照射線量の水換算値を示す。

なお、常時測定の際は照射室にあるステンレス製圧力容器からガスハンドリングシステムまで 10m の SUS 配管で接続したため、前述のように配管の死容積や圧力損失が圧力の測定値に影響する可能性が懸念された。しかし、配管径を細くして死容積を小さくするとともに、その場合の圧力損失についても本試験に先立つ事前検討から、あったとしても数 kPa 程度であり常時測定で測定した圧力値への影響はわずかと想定された。

表 2.1-31 に記載のある試験系とは、前述の通りガスハンドリングシステム+バルブ+接続配管+圧力容器を意味する。本試験では、 γ 線照射後の常時測定試料の冷却のために照射施設から試験装置 1 式を移動させる際に、ガスハンドリングシステムと圧力容器との間の接続配管を外す必要があった。またその際に、ガスハンドリングシステム内の圧力を大気圧に戻した。そのため冷却後の試験系の圧力測定値は、照射終了直後の圧力とは直接比較ができないため、照射終了直後の圧力値から算出した冷却後の圧力の計算値と比較した（照射後、冷却後の試験系の内圧（測定値）と試験系の内圧（計算値）の比較）。

表 2.1-31 冷却前後の照射後圧力の比較

照射条件		照射終了直後		照射後、冷却後		
実照射線量 (kGy)	照射線量率 (kGy/h)	試験系の内圧 (測定値) (kPa)	温度 (°C)	試験系の内圧 (測定値) (kPa)	試験系の内圧 (計算値) (kPa) 注)	温度 (°C)
242	3.4	196.1	29.3	153.0	161.9	5.8
333	3.6	231.1	29.8	182.3	185.1	6.4

注) 照射後の圧力測定と冷却後の圧力測定の間一度配管を外しているため、試験系の内圧測定値を $P/T=$ 一定により冷却後の圧力に換算した後、各所の容積と圧力測定直前のガスハンドリングシステム内の圧力値を用い、 $PV=$ 一定により冷却後の試験系の圧力に換算した。

本試験においては 3~9kPa 程度、測定値の方が計算値より小さく、冷却によりこの程度の圧力低下が起こり得ることが示された。この値は、照射直後の圧力測定時の温度（30°C程度）と冷却後の圧力測定時の温度（6°C程度）の飽和蒸気圧の差より若干大きい値であった。死容積の誤差などが計算値を求める際に影響した可能性や圧力損失の影響も含まれている可能性も否定できないが、本試験での冷却操作により、狙い通り水蒸気の影響をキャンセルして、水素による圧力上昇への寄与を正確に評価できたと考えられる。

なお、実際の廃棄体パッケージにおいては、廃棄体からの熱により温度が上昇することが考えられる。その場合、水の飽和蒸気圧が高くなるため、内部充填材の自由水量と廃棄体パッケージの空間容積次第では水蒸気による圧力上昇への寄与が無視できないケースがあり得るのかを含め、水蒸気による圧力上昇について留意する必要がある。

(b) 常時測定による圧力の経時変化の測定結果

γ 線照射時の試験系の圧力を常時測定した結果を図 2.1-40~図 2.1-42 に示す。本試験での照射中の試料温度は 30°C程度であったため、飽和蒸気圧を考慮すると水蒸気の影響はあったとしてもわずかである。

本試験において、試料温度及び压力容器周辺の雰囲気温度は、照射開始から早い段階で 30℃付近で比較的安定していた。ガスハンドリングシステムは照射室外に置いていたが、その温度は 5～10℃程度の範囲であったため、圧力の表示値への温度影響は限定的であると考えられる。

常時測定による圧力変化について、以下に記す。

- ・ 図 2.1-40～図 2.1-42 に示すように、装置を改善し、高線量率の条件でセメントペースト試料に γ 線を照射することで容器内の圧力が上昇することが明確に確認された。
- ・ 常時測定を行った 4kGy/h の水準においては、いずれも圧力上昇が一定値に収束するところまでは確認できないながら、図 2.1-40～図 2.1-42 に示されるように圧力上昇カーブは緩やかに寝てきていた。

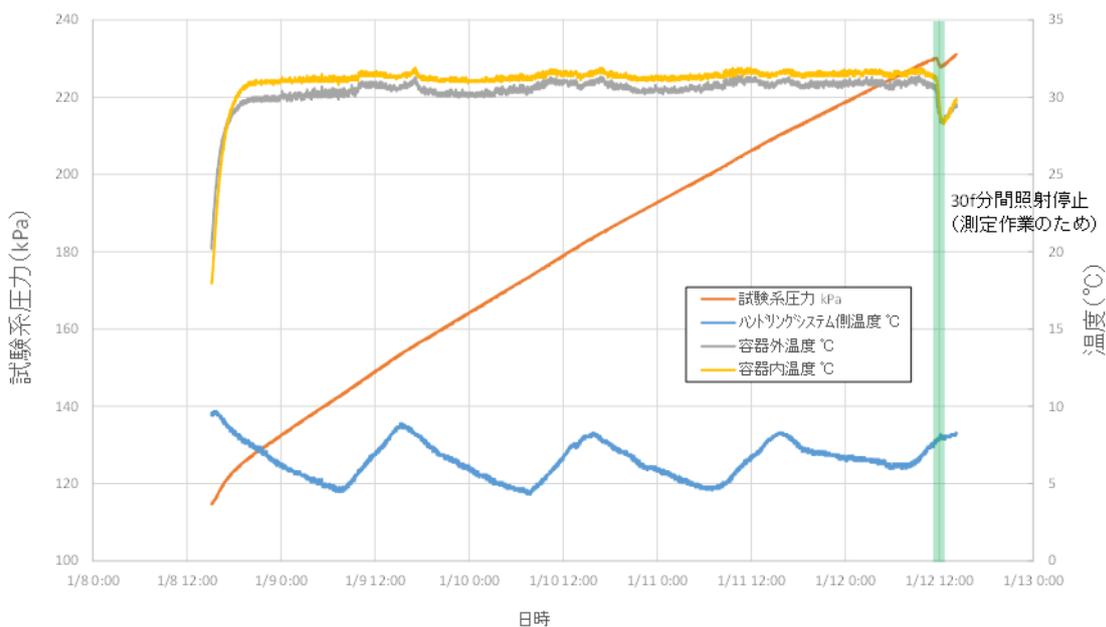


図 2.1-40 1 回目の圧力検討試験時の常時測定の結果（圧力の温度補正無し）

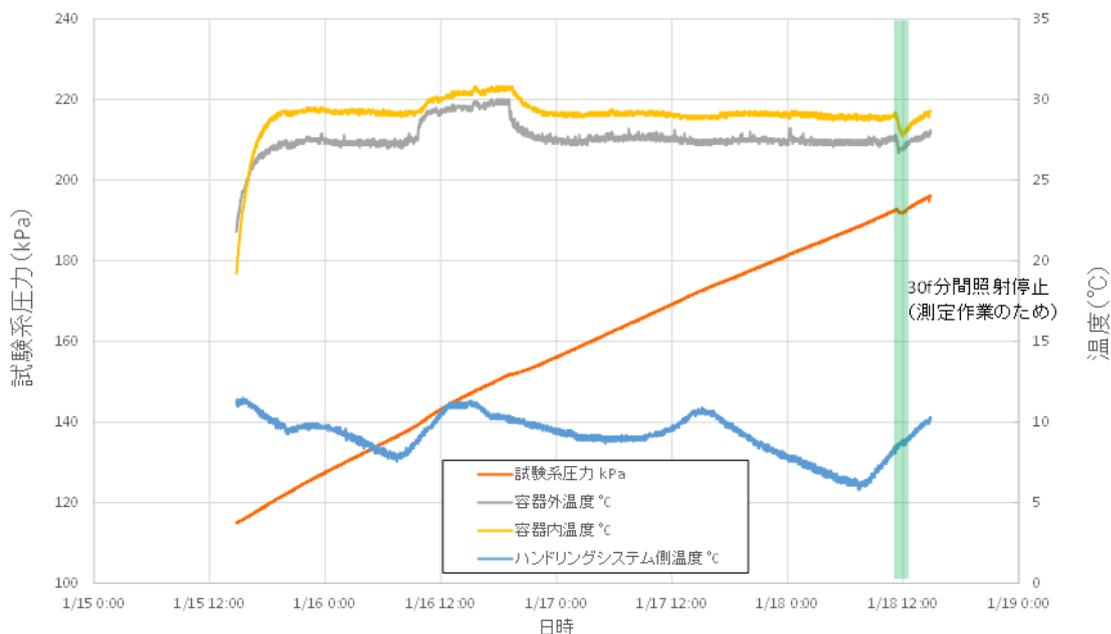


図 2.1-41 2 回目の圧力検討試験時の常時測定の結果（圧力の温度補正無し）

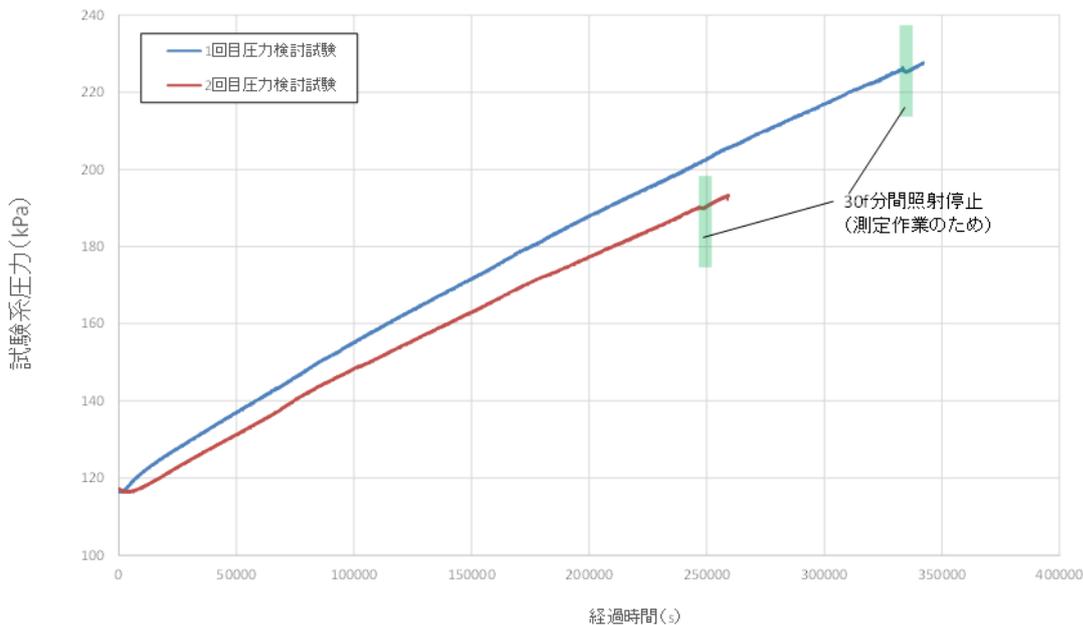


図 2.1-42 圧力検討試験時の常時測定の結果（25℃の圧力値に補正）

(c) 線量率を変えた試料における圧力上昇

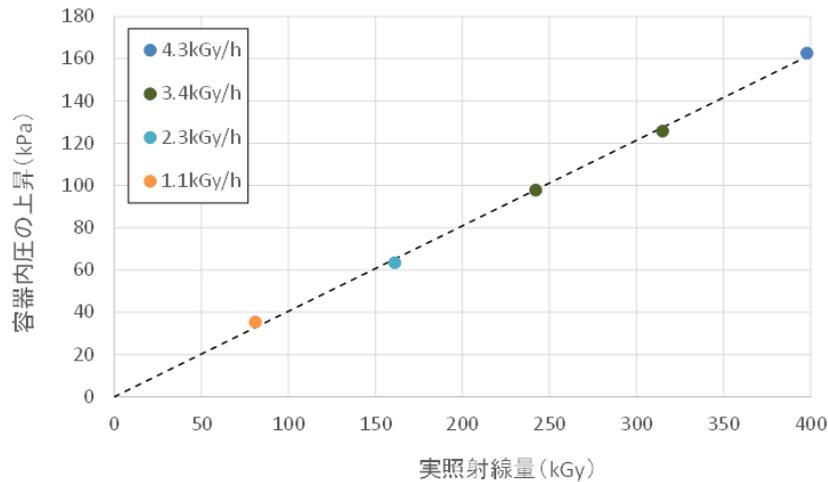
線量率を変えトータルの照射線量を変えた試料について、圧力上昇値を検討した。

これらの試料については、常時測定は実施せず、照射前後にのみ 6℃程度に冷却した状態で圧力を測定した。冷却の理由は前述したとおりである。その測定値から算出した圧力上昇値を表 2.1-32 に示す。また、圧力上昇値と実照射線量の関係を図 2.1-43 に示す。ここでは圧力を容器内圧として示す。

表 2.1-32 圧力測定検討試験における圧力変化（常時測定試料は除く）

照射条件		照射前		照射後			圧力上昇値
実照射線量 (kGy)	照射線量率 (kGy/h)	容器内圧 (kPa)	温度 (°C)	試験系の内圧 (測定値) (kPa)	容器内圧換算値 (kPa) ^{注)}	温度 (°C)	容器内圧 (kPa)
81	1.1	107.3	6.2	132.7	142.7	6.6	35.4
161	2.3	107.3	6.3	154.1	170.8	6.5	63.5
242	3.4	107.1	6.3	180.2	204.9	6.5	97.8
315	3.4	108.2	6.0	202.5	234.0	8.2	125.8
398	4.3	108.4	6.0	230.6	271.1	7.2	162.7

注) 試験系の死容積と容器の死容積を用い、PV=一定により換算した値を示す。



圧力値を圧力容器の容積に対する値（容器内圧）に補正して導出

図 2.1-43 実照射線量と容器内圧の上昇との関係

圧力上昇値と実照射線量の関係から、以下の知見が得られた。

- ・ 圧力上昇値は、平成 31 年度のペレット状のセメントペースト試料からの水素発生量から見積もった値の 2/3 程度であった。前述の検討を踏まえると、本試験ではセメントペーストを使用しているため水素発生量に試料の大きさの影響を受けた可能性がある。
- ・ 本試験においては、圧力容器内の圧力上昇値には線量率の違いによる影響は認められず、圧力上昇値が実照射線量に比例していた。

常時測定においては照射時間の増加に伴い圧力上昇が少し寝る傾向がみとめられたものの（図 2.1-40～図 2.1-42）、図 2.1-43 からは圧力値が一定の値に収束する傾向は認められなかった。今後、更に線量を上げた試験により、圧力の上昇が一定値に収束するかの検討を実施する必要がある。

② 水素発生量及び発生ガス成分の測定結果

(a) 照射試験で発生したガスの成分濃度

表 2.1-33 に発生したガスの成分濃度の測定結果（容器内のガス濃度に換算）、図 2.1-44 に容器内圧の上昇と水素及び窒素の濃度との関係を示す。

水素濃度については、容器内の圧力の上昇値が大きいほど容器内の水素濃度が高かった。また、窒素は測定した全試料において 6～11%と比較的一定に近い濃度で検出されたが、酸素は 1 試料を除き検出されなかった。

このことから、容器内圧力の上昇には窒素や酸素の影響はほとんどなく、水素の発生量の増加の寄与が支配的であると考えられる。

表 2.1-33 ガス濃度の測定結果

実照射線量 (kGy)	容器内圧の 上昇値(kPa)	H ₂ (%)	N ₂ (%)	O ₂ (%)	CO ₂ (%)
398	162.7	121	7	1.5	<0.02
333	-	82	-	-	-
315	125.8	62	6	<0.2	<0.02
242	97.8	66	11	<0.1	<0.02
242	-	56	-	-	-
161	63.5	42	8	<0.1	<0.01
81	35.4	30	11	<0.1	<0.01

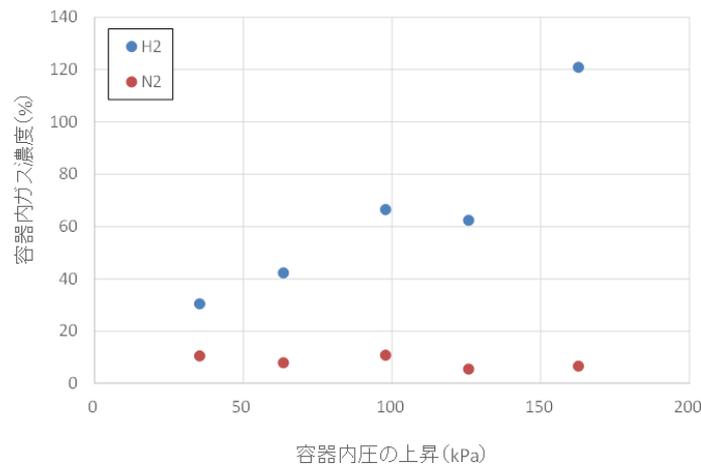


図 2.1-44 容器内圧力の上昇と容器内ガス濃度との関係

(b) 照射試験における水素発生量

表 2.1-34 に本試験における水素発生量の測定結果を示す。水素発生量 ($\mu\text{mol/g/kGy}$) は実照射線量の多少によらず同等で、照射線量の増大に伴う減少傾向は認められなかった。このことは、前述の図 2.1-43 において圧力上昇値が一定値に収束する傾向が認められなかったことと矛盾しない結果であった。なお、表 2.1-34 に示した水素発生量は、前述した $\phi 60\text{mm}\times 150\text{mm}$ のセメントペースト試料の水素発生量 $0.0031\mu\text{mol/g/kGy}$ より大きな値であった。

表 2.1-34 水素発生量の測定結果

実照射線量 (kGy)	容器内圧の上昇値 (kPa)	試料質量 (g)	ガス取り出し時の温度 ($^{\circ}\text{C}$)	大気圧 (kPa)	測定系容器内圧力 (kPa)	系統容積 (ml)	水素濃度測定値 (ppm)	水素発生量換算 (μmol)	水素発生量 ($\mu\text{mol/g/kGy}$ ^{注)})
398	162.7	815.021	7.3	103.5	162.4	133.26	326459	2968	0.009
333	-	801.567	6.1	103.5	140.7	126.72	259462	1952	0.007
315	125.8	815.539	8.1	103.5	148.4	131.12	188548	1537	0.006
242	97.8	818.133	6.3	103.4	139.3	130.22	214795	1644	0.008
242	-	806.185	5.8	103.4	133.7	103.07	247132	1440	0.007
161	63.5	818.867	6.5	103.4	127.5	130.19	144951	1015	0.008
81	35.4	822.956	6.5	103.4	116.8	126.37	112815	702	0.011

注) 単位に記されている kGy は、表中の照射線量 (水換算) を示す。

また、これらの結果に基づき G 値を算出した。試料の水分量と $G_{\text{H}_2(\text{All})}$ 及び $G_{\text{H}_2(\text{fW})}$ を表 2.1-35 に示す。試料の水分量は、試料と同じ練り混ぜバッチのセメントペーストを分取したものについて測定した結果を示す。G 値の定義及び算出方法は、前述した通りである。

表中の G 値は、実照射線量及び照射線量率によらず同等の値であった。

表 2.1-35 圧力測定に用いたセメントペースト試料の G 値

実照射線量 (kGy)	照射線量率 (kGy/h)	容器内圧の上昇値 (kPa)	水分量(mass%)			G値	
			自由水	結合水	全水分	G _{H₂} (All)	G _{H₂} (fw)
398	4.3	162.7	20.0	10.1	32.1	0.095	0.44
333	3.6	-	20.0	10.1	32.1	0.076	0.35
315	3.4	125.8	19.9	10.1	32.0	0.062	0.29
242	3.4	97.8	20.2	10.1	32.3	0.086	0.40
242	3.4	-	20.2	10.1	32.3	0.077	0.35
161	2.3	63.5	19.9	10.2	32.1	0.080	0.37
81	1.1	35.4	19.9	10.2	32.1	0.11	0.51

3) 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まとめ

圧力変化挙動の確認及びガス成分の測定を実施した。試験結果を以下にまとめる。

- ・ 高照射線量率、高照射線量条件下での圧力を精度よく確認できた。また、圧力容器からのガス採取方法を平成 31 年度の方法から変更した上でガス成分の測定を行い、照射により発生した高濃度の水素が検出された。
- ・ 常時測定において照射時間の増加に伴い圧力上昇が少し寝る傾向が認められた。また、線量率と照射線量を変えた試験結果では、圧力容器内の圧力上昇値には線量率の違いによる影響は認められず、圧力上昇値が実照射線量に比例していた。
- ・ 本試験での冷却操作により、狙い通り水蒸気の影響をキャンセルして、水素による圧力上昇への寄与を正確に評価できたと考えられる。
- ・ 容器内圧力の上昇には窒素や酸素の影響はほとんどなく、水素の発生量の増加の寄与が支配的であると考えられる。

また、令和 2 年度の試験結果を踏まえた今後の課題を以下に記す。

- ・ いずれの試験においても、圧力値が一定の値に収束する傾向は認められず、今後、更に高線量率、高線量の条件下での試験により、圧力の上昇が一定値に収束するかの検討を実施する必要がある。
- ・ 実際の廃棄体パッケージにおいては、廃棄体からの熱により温度が上昇することが考えられる。その場合、水の飽和蒸気圧が高くなるため、内部充填材の自由水量と廃棄体パッケージの空間容積次第では水蒸気による圧力上昇への寄与が無視できないケースがあり得るのかを含め、水蒸気による圧力上昇について留意する必要がある。

(4) 水素ガスの発生抑制及び発生量の見積もり方法に関する検討のまとめ

水素ガスの発生要因、発生量 (G 値)、水素発生に伴う圧力上昇の評価、及び、発生要因を踏まえた水素ガス発生低減を目的に検討を実施した。令和 2 年度は、水素ガスの発生に関しては、内部充填材の候補材料であるコンクリートでは骨材に含まれる水による水素ガス発生への影響が顕在化する可能性、発生した水素ガスがセメント系材料内を拡散により移動して外部放出される際に試料の大きさが影響する可能性、廃棄体からの熱による温度上昇が水素発生量に影響する可能性について検討した。また、すき間充填材からの水素ガス発生量の見積もりのための基礎データの取得、及び、水素ガス発生に伴う圧力の上昇挙動の確認試験を実施した。

水素ガス発生に関しては、令和 2 年度の試験では、骨材内部の間隙の水は自由水としてふるまうことが示された。しかし各水準間の差異がばらつきの範囲内であるか、骨材量・種類及びセメントの種類の違いが水素ガス発生に影響するかどうか判断するには、更にデータを蓄積し、コン

クリートによる水素ガス発生の評価へと繋げる必要がある。また、試料の大きさ及び温度は水素発生に影響する可能性が示唆され、更に検討を進める必要がある。

また、令和2年度の水素発生量の測定結果に基づきG値を算出して整理した結果、自由水量と $G_{H_2(All)}$ の関係は材料種類（セメントペースト、モルタル）及び使用したセメント種類が異なっても概ね同一の相関関係で整理できると考えられること、自由水量と $G_{H_2(fW)}$ の関係は自由水量が多い領域では $G_{H_2(fW)}$ がバルク水の G_{H_2} 値0.45に近い値、一方、自由水が少ない領域ではそれより高い値を示すこと、の知見を得た。水素ガス発生抑制を目的として乾燥処理させたコンクリート製内部充填材からの水素発生量の予測においては、試料質量に対する自由水量が少ない範囲の水素発生量が重要となる。また自由水量は比較的容易に求めることが可能である。これらを考慮すると、自由水量と $G_{H_2(All)}$ での評価は、現時点では最も有効であると考えられる。すき間充填材からの水素発生については、硬化過程のすき間充填材からの水素発生において、何らかの要因の作用により水素発生効率が高くなっていると考えられる。その要因が何かは明確ではないが、時間の経過に伴い水素発生効率が低下していることから、時間の経過とともにその影響は小さくなっていると考えられる。

水素発生による圧力上昇については、高照射線量率、高照射線量条件下での圧力を精度よく確認でき、常時測定において照射時間の増加に伴い圧力上昇が少し寝る傾向が認められた。また、線量率と照射線量を変えた試験結果では、圧力容器内の圧力上昇値には線量率の違いによる影響は認められず、圧力上昇値が実照射線量に比例していた。一方、圧力値が一定の値に収束する傾向は認められなかった。採取したガスの分析結果からは、容器内圧力の上昇には窒素や酸素の影響はほとんどなく、水素の発生量の増加の寄与が支配的であると考えられた。

以上を踏まえ、今後、廃棄体パッケージにおける水素発生量の推定に向けた基礎データの蓄積としては、水素発生量へのコンクリート配合の影響があるかの検討、試料の大きさの影響の検討、廃棄体の熱による温度の影響の検討が必要と考えられる。また、圧力上昇挙動に関連しては、より高線量率、高線量の条件下で試験を実施し圧力上昇が一定値に収束するか、及び、圧力挙動への温度影響を検討する事が必要である。すき間充填材については、時間が経過することですき間充填材の $G_{H_2(fW)}$ がセメントペースト硬化体と同様バルク水の G_{H_2} 値0.45に近づくかの確認、温度影響の確認、廃棄体パッケージの製作工程の工夫によるパッケージ内圧の低減が可能かの検討が必要である。それらを踏まえた上で、廃棄体パッケージの水素発生量の予測に適しているG値の整理の仕方、及び、モルタル及びコンクリートの自由水量とG値の関係を検討することが必要である。

2.1.3 内部充填材の施工性及び製作性に関する検討

内部充填材の候補材料の適性を検討し、材料種及び仕様の確定に資する知見を得ることを目的とする。

(1) 過年度までの検討概要及び検討課題の整理

平成 30 年度の検討において、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内部充填材の候補となる事が分かったとともに、コンクリートの乾燥試験から、乾燥により含水率を低減出来る見込みが得られた。また、内部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 ケースが挙げられ、製作性の観点から、内部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が行われた。

- 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）

更に机上検討により、上記 3 つの組立手順に対応できる内部充填材の要求性能として、以下の 5 点が挙げられた。

- ・施工性
- ・遠隔封入性
- ・構造健全性
- ・乾燥工程時の水分逸散時間
- ・乾燥工程時に生じる変形及び粗大なひび割れの制御

以上を踏まえ、平成 31 年度の検討では、内部充填材に要求される 5 要件のうち、施工性（すなわち、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、充填材が十分充填すること）及び遠隔封入性（すなわち、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）を満たすセメント系材料の内部充填材の配合として、高流動コンクリート（自己充填性ランク 1 相当）を暫定的に設定し、乾燥による水分の低減に係る試験を行ってデータを取得するとともに、60cm 角のブロック試験体の製作を通じて製作性を検討し、課題を抽出した。

廃棄体パッケージ容器の製作方法の検討も含めた、平成 31 年度の廃棄体パッケージの製作技術に関する成果から、内部充填材に関わる主な課題として、以下が挙げられた。

- ・製作工程に関する検討の結果、内部充填材の組立手順は、プレキャスト方式を採用し、また、金属容器内部に十字鋼板を設ける方針となった。組立手順及び金属容器の設計に適した充填材を製作し、施工性や構造健全性を確認して充填材の仕様の具体化を検討していく必要がある。
- ・金属容器の蓋部の熱処理に伴い、内部充填材に 100～600℃の温度勾配が生じると考えられる。内部充填材に求める機能により、許容可能な温度範囲が異なることが想定される。内部充填材に期待する機能を整理した上で、温度影響を検討する必要がある。
- ・試験体の大きさ（形状）により水分逸散に要する時間が異なることから、任意の試験体形状、乾燥条件（期間・温度）における水分逸散量を推定する手法を構築する必要がある。

- ・乾燥工程時のひび割れの発生は、内部充填材に補完的に期待される地下水の浸入抑制効果を損ね、地下水に溶出した放射性物質の移行挙動に影響する可能性があることから、乾燥工程後の物質移行特性を把握しておくことが望ましい。

そこで令和2年度は、上記の課題を受けて、以下の項目を実施した。

- 1) 想定される製作工程での内部充填材の製作方法の検討
 - パッケージ設計/製作条件に応じた内部充填材の製作工程の検討（室内試験）
 - 断熱材に関する情報収集
- 2) 製作性及び施工性に関する要素試験
 - 乾燥条件と水分逸散量に関する実験的検討
 - 乾燥工程後の物質移行特性の評価

以降、実施内容について詳述する。なお、令和2年度は、過年度までの検討結果を踏まえ、以下を前提条件に検討した。

- ・内部充填材は、セメント系材料を使用する。
- ・内部充填材中の水量を減らすため、コンクリート配合を基本とする。
- ・水素ガス発生は自由水量に依存することから、自由水量を減らすため、乾燥工程を設ける。

(2) 想定される製作工程での内部充填材の製作方法の検討

1) パッケージ設計/製作条件に応じた内部充填材の製作工程の検討（室内試験）

平成31年度に廃棄体パッケージの設計及び製作工程に関して検討した結果、内部充填材の組立手順はプレキャスト方式とし、金属容器内部に十字鋼板を採用する方針となった。内部充填材の形状は金属容器内部の形状に拠り、形状に応じたプレキャスト部材の成形方法、内部充填材の配合、廃棄体と内部充填材のすき間部の充填要否等について検討する必要がある。

そこで本項では、パッケージ設計/製作条件に応じたプレキャスト方式による内部充填材の製作工程を検討し、工学規模（室内試験で実施可能な範囲）で製作性や水素ガス低減に係るデータを取得した。

① プレキャスト部材の製作方法の検討

本項ではまず、別途実施の「廃棄体パッケージ容器の製作方法の検討」から提示される、金属容器の設計情報に基づき、想定される内部充填材の形状を設定し、既存のコンクリート二次製品の製作方法を参考に、プレキャスト方式による内部充填材の製作方法について検討した。

(a) プレキャスト方式による製作方法の検討における着眼点

プレキャスト方式の概略工程を表 2.1-36 に示す。

表 2.1-36 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)内部充填材を製作する。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内部充填材が硬化した後、脱型し、乾燥工程にかける。
③	乾燥後、廃棄体パッケージ容器(金属容器)にPCa内部充填材を設置する。
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	必要に応じて、金属容器と内部充填材、及び内部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。

- ・内部充填材の打設時に遠隔操作を行う必要がないため、高い施工精度を確保できる。
- ・乾燥工程時に廃棄体及び金属容器の影響を考慮しなくてよい。

一方、懸念事項を挙げると、以下の通りとなる。

- ・高温乾燥時の内部充填材の体積変化（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、内部充填材の形状によっては粗大な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。
- ・すき間充填材には極めて高い流動性が求められる。また、すき間充填材は乾燥工程を経ないため、水素ガス発生量の検討が必要となる。

この他、平成 31 年度に 60cm 角のブロック試験体を製作し、内部充填材の製作性、乾燥による水分の低減に係る試験を行ったが、実施内容は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おき、プレキャスト方式に特化した内容ではなかった。また、金属容器内部には十字鋼板を設ける方針となり、狭隘部（内部充填材で最小となる幅）はさらに狭くなることが予想される。このため、内部充填材の配合を見直す必要があり、併せて、乾燥に伴う水分逸散の挙動及び乾燥工程後の寸法精度についても、再度確認する必要がある。

以上の内容を踏まえた、プレキャスト方式による製作方法を検討する際の着眼点を以下に示す。

- ・狭隘部（内部充填材で最小となる幅）の成形性、充填性確保
- ・作業性（製作時のハンドリング）
- ・乾燥工程における水分逸散及び変形（ひび割れ、乾燥後の寸法精度）
- ・廃棄体パッケージの仕様（強度、充填容積等）

(b) 内部充填材の設計要件

廃棄体パッケージの構成要素である容器と内部充填材について、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連が整理されている（原環センター，原子力機構，2019）。令和 2 年度は、この内容について改めて整理した。その結果、内部充填材に機能としては、容器内で廃棄体が移動しないこと（製作工程上発生する数ミリの隙間は許容する）、及び、内圧制限（始祖ガス発生量の低減）に重点を置くこととした。

(c) 想定する廃棄体パッケージの形状

本検討で想定する廃棄体パッケージの形状を図 2.1-45 に示す。なお本図は「廃棄体パッケージ容器の製作方法の検討」から提供された情報に基づく。図 2.1-45 より、内部充填材の狭隘部における最小すき間幅は、30mm となる。

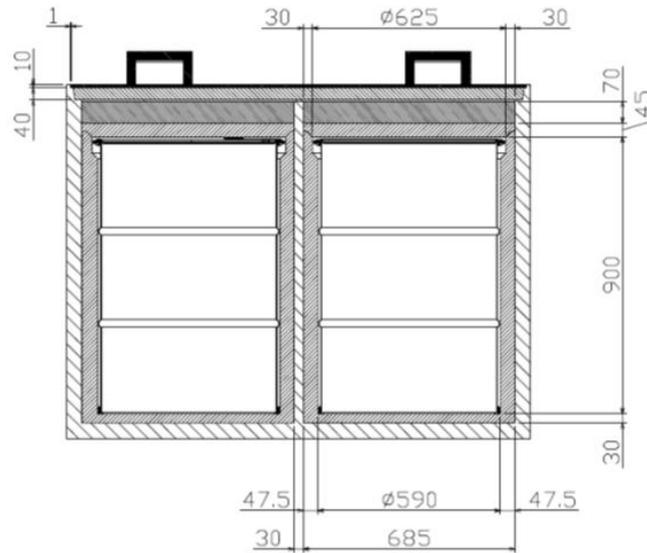


図 2.1-45 想定する廃棄体パッケージの形状

(d) 内部充填材の設計及び製作方針

図 2.1-45 で示した内部充填材を設計・製作するための基本的な考え方としては、表 2.1-37 に示す 4 パターンが挙げられる。ここで、成形方法で挙げている一体型とは、底部と側面部を一体で成形し、蓋部のみ別に成形するパターンであり、これに対し分割型とは、底部、側面部、蓋部をそれぞれ成形するパターンである。また、形状で挙げた円筒形とは、水素ガス発生バッファとして金属容器内での空間を許容し、廃棄体を固定するための充填材量を最小限に留める（廃棄体の周囲を覆うだけの円筒形にする）というパターンであり、これに対しブロック型とは、金属容器内の空間を密充填するパターンである。

前述した内部充填材に求める機能を踏まえ、空間を密充填するブロック型で検討した。また、成形方法については、製作時のハンドリング、乾燥時の水分の抜けやすさ、変形に伴う影響を加味し、まずは一体型ではなく、分割型で検討した。

表 2.1-37 内部充填材の設計・製作の基本的な考え方

成形方法	形状（空間の充填）
一体型	円筒形（空間あり）
	ブロック型（密充填）
分割型	円筒形（空間あり）
	ブロック型（密充填）

② プレキャスト部材形状に応じた内部充填材配合の検討

前項の検討結果を受けて、内部充填材の配合について検討した。なお本項では、狭隘部への充填性確保及び作業性の観点で、主に内部充填材製作に適した硬化前性状（流動性等）について検討し、乾燥工程における水分逸散の観点での検討は、後述する「乾燥条件と水分逸散量に関する実験的検討」で述べる。

(a) 試験方法

本項では、狭隘部を想定した小型型枠を用い、充填及び仕上げ作業に要した時間、脱枠後の充填状態の目視確認により、実工程を考慮した作業性と充填性に適した条件を検討した。

ここで、プレキャスト方式では、振動成形等の人手による作業が可能であり、遠隔封入性を満足する自己充填性が要求されないため、必ずしも平成 31 年度に検討した高流動コンクリートの配合を選択することは合理的でない。これは、自己充填性を高めるために水セメント比を小さくし粉体量を増やすことにより、乾燥工程の遅延をもたらす可能性があるためである。そこで、プレキャスト方式での内部充填材の配合は、スランプで管理するコンクリート配合とし、平成 30 年度に試験したコンクリートを参考に検討した。

(i) 使用材料

使用材料を表 2.1-38 に示す。使用材料は国内で入手できる銘柄とし、粗骨材最大寸法は設定した狭隘部の最小幅 30mm への充填を考慮し、13mm とした。

表 2.1-38 使用材料

材料名	記号	仕様
練混ぜ水	W	上水道水
セメント	C	太平洋セメント(株)社製 普通ポルトランドセメント
細骨材	S	静岡県掛川産山砂
粗骨材	G	茨城県桜川産碎石(粗骨材最大寸法:13mm)
高性能AE減水剤	SP	BASFジャパン株式会社製 マスターグレニウムSP8SV (ポリカルボン酸系 高性能AE減水剤 標準型I種)
AE助剤	AE	BASFジャパン株式会社製 マスターエア303 (AE剤I種)

(ii) 配合

内部充填材のコンクリート配合を表 2.1-39 に示す。配合はスランプが異なる 3 条件を設定した。空気量は $4.5 \pm 1.5\%$ とした。

表 2.1-39 内部充填材のコンクリート配合

目標 スランプ (cm)	目標 空気量 (%)	粗骨材 最大寸法 (mm)	W/C (mass%)	s/a (vol%)	単体量 (kg/m ³)				添加率	
					W	C	S	G	SP	AE
6	4.5 ± 1.5	13	45.0	44.0	163	362	769	998	C×0.60%	C×0.0015%
12					167	371	761	988	C×0.80%	C×0.0015%
18					170	378	755	980	C×0.95%	C×0.0015%

(iii) 混練方法

混練方法を以下に示す。混練には 50L 強制パン型ミキサを用い、1 バッチの混練量は 30L とした。

G+1/2S+C+1/2S → 空練り 30sec → W+SP+AE → 本練り 60sec → かき落とし
→ 本練り 60sec → 排出

(iv) 充填材の評価方法

狭隘部への充填を想定した厚さ 30mm アクリル製の型枠を用意し、混練したコンクリートの充填作業に要する時間を計測するとともに、硬化後に型枠内部への充填状況を目視で確認した。



図 2.1-46 アクリル製型枠への充填性作業状況

(b) 試験結果

スランプ測定状況を図 2.1-47 に、アクリル製型枠への充填結果を表 2.1-40 に示す。

表 3.2-5 より、何れの目標スランプでも、30mm 厚型枠に充填できることは確認できた。しかしながら、スランプの値が小さくなるほど、充填作業に要する時間は長くなった。



目標スランプ:6cm

目標スランプ:12cm

目標スランプ:18cm

図 2.1-47 スランプ測定状況

表 2.1-40 アクリル製型枠への充填結果

	目標スランプ:6cm	目標スランプ:12cm	目標スランプ:18cm
充填状況 (側面)			
充填状況 (底面)			
作業時間	1分43秒	1分10秒	50秒

③ モックアップ製作による製作性の確認

前項までの検討結果を踏まえ、室内試験で実施可能な規模でモックアップを製作し、検討した内部充填材の製作性について確認した。また、水素ガス低減に係る参考データとして、製作するモックアップを乾燥させ、乾燥に伴う質量の経時変化を測定した。

モックアップ製作における評価項目を以下に記す。

- ・狭隘部の成形性、充填性

- ・製作時のハンドリング
- ・乾燥工程における質量の経時変化

(a) コンクリートの作製方法

(i) 使用材料

モックアップ製作における使用材料を表 2.1-41 に示す。セメント、骨材、混和剤は②項と同じであるが、モックアップ製作では、繊維補強材を添加した配合も設定した。これは、モックアップの製作条件で後述するが、補強材として鉄筋の適用が困難な場合を想定したものである。

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。そこで、既往の繊維補強コンクリートに関する指針や海外の先行事例の他、平成 31 年度に実施した繊維補強コンクリートの試験練りの結果を参考に、 $\phi 0.3 \times 15\text{mm}$ のステンレス短繊維を用いることとした。

表 2.1-41 モックアップ製作における使用材料

材料名	記号	仕様
練混ぜ水	W	上水道水
セメント	C	太平洋セメント(株)社製 普通ポルトランドセメント
細骨材	S	静岡県掛川産山砂
粗骨材	G	茨城県桜川産砕石（粗骨材最大寸法：13mm）
高性能AE減水剤	SP	BASFジャパン株式会社製 マスターグレニウムSP8SV（ポリカルボン酸系 高性能AE減水剤 標準型I種）
AE助剤	AE	BASFジャパン株式会社製 マスターエア303（AE剤種）
繊維補強材	FM	伊藤忠丸紅特殊鋼社製 ステンレス短繊維 $\phi 0.3 \times 15\text{mm}$

(ii) 配合

モックアップ製作における内部充填材の配合を表 2.1-42 に示す。設定した狭隘部の最小幅 30mm への充填に対し、②項で実施した充填性確認試験の結果から、目標スランプは $18 \pm 2.5\text{cm}$ とした。なお、SP 及び AE の添加率は、目標スランプの範囲内となるよう、適宜調整した。また、繊維補強材の添加率は前年度の検討結果を踏まえ、0.5vol%とした。

表 2.1-42 モックアップ製作における配合

種類	粗骨材 最大寸法 (mm)	目標 スランプ (cm)	目標 空気量 (%)	W/C (mass%)	s/a (vol%)	単位量 (kg/m ³)				添加率		
						W	C	S	G	SP	AE	FM
繊維無し	13	18 ± 2.5	4.5 ± 1.5	45.0	43.8	170	378	752	984	C × 0.95%	適宜	—
C × 1.1%										0.5vol%		

(iii) 混練方法

混練方法を以下に示す。混練には 50L 強制パン型ミキサを用いた。1 バッチの混練量は 35L とし、1 体につき 4 回混練した。

【繊維無し配合】

G+1/2S+C+1/2S → 空練り 30sec → W+SP+AE → 本練り 60sec → かき落とし
→ 本練り 60sec → 排出

【繊維有り配合】

G+1/2S+C+1/2S → 空練り 30sec → W+SP+AE → 本練り 60sec → かき落とし

→ 本練り 60sec → 繊維投入後本練り 30sec → 排出

(b) モックアップ製作の内容

(i) 寸法

製作するモックアップの寸法図を図 2.1-48 に示す。モックアップは補強材としてワイヤーマッシュを配置した条件と、繊維補強材を適用した条件の計 2 条件を設定した。図 2.1-48 はワイヤーマッシュを配置した条件の図である。ワイヤーマッシュは狭隘部への設置を考慮し、 $\phi 3.3\text{mm}$ 、網目 $100 \times 100\text{mm}$ を用いた。型枠取り外し後のハンドリング用として、内部充填材の四隅には、吊上げ用のインサートを設置した。

使用した型枠の外観を図 2.1-49 に示す。型枠内部には、発泡スチロール製の内型枠を設置した。内型枠には狭隘部への充填性を考慮し、テーパを設け、製作時はテーパを下にして充填材を打設した。

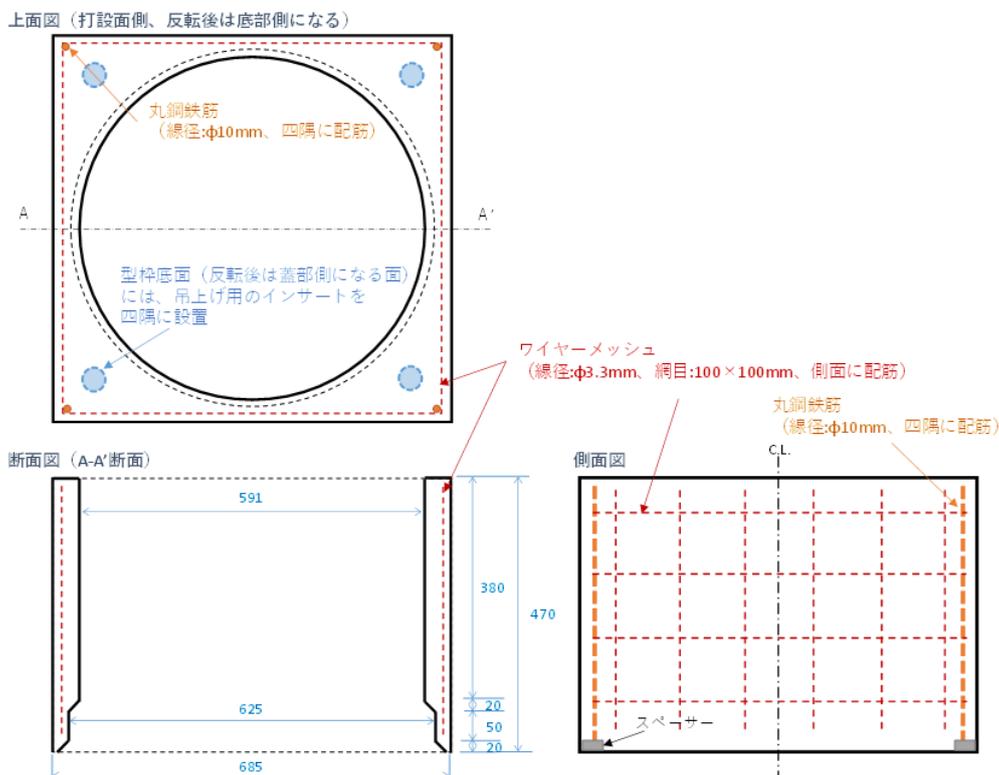


図 2.1-48 モックアップの寸法図



図 2.1-49 型枠の外観

(ii) 製作及び測定手順

製作及び測定手順を以下に記す。

1) 1) 項に示す配合で練り混ぜ、練り上がり後の性状（フレッシュ性状）を確認した。

フレッシュ性状の測定項目：

- ・スランプ : JIS A 1101
- ・空気量、単位容積質量 : JIS A 1128

2) モックアップ 1 体の打設に必要な量を混練した後、図 2.1-49 に示す型枠に打設した。打設の際には棒バイブレータ（加振器）を用いた。この際、充填作業にかかる時間を計測した。

3) 打設後、1 週間程度型枠内で封緘養生した。

4) 所定期間養生後、型枠を付けた状態で反転させ、反転後に脱枠した。脱枠後、充填状態を目視で確認するとともに、質量及び寸法を測定した。

5) 質量及び寸法測定後、乾燥に伴う質量の経時変化を実施可能な期間で測定した。乾燥温度は、前年度までの試験結果と比較できるように、80℃に設定した。

(c) モックアップの製作結果

(i) フレッシュ性状

フレッシュ性状の測定結果として、練り上がり直後のスランプ及び空気量の測定状況を図 2.1-50 に示す。概ね目標とする性状が得られた。



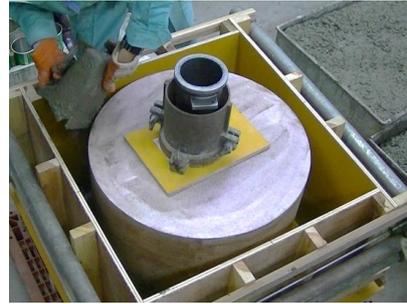
図 2.1-50 スランプ及び空気量の測定状況（モックアップ製作時）
（左：繊維補強材なし、右：繊維補強材あり）

(ii) 充填作業

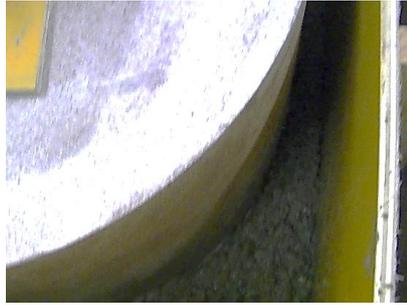
型枠への充填作業状況を図 2.1-51 に示す。なお、充填作業に要した時間は、繊維補強材の有無によらず、概ね 20 分であった。



(a) コンクリート排出



(b) 型枠内への投入



(c) 狭隘部への充填



(d) 棒バイブレーターによる加振作業



(e) 打設完了後



(f) 打設面仕上げ

図 2.1-51 型枠への充填作業状況

(iii) 外観観察

脱枠後のモックアップの外観を図 2.1-52 に示す。目視による外観観察の結果、側面にはひび割れや充填不良などの箇所はなく、懸念された狭隘部への充填もできていることが確認された。なお、反転作業の際に角欠けが生じた。形状の変形は認められなかったが、反転作業時の吊り下げ位置や衝撃を緩衝する等で改善の余地があった。なお、反転作業に要した時間は、モックアップ 1 体につき 30 分程度であった。



図 2.1-52 脱枠後のモックアップの外観
(左：繊維無しメッシュ筋補強、右：繊維有り)

(iv) 乾燥による質量変化

乾燥によるモックアップの質量変化を図 2.1-53 に示す。質量減少は乾燥期間 14 日までに完全には収束しなかったが、モックアップの種類によらず、-4%程度であった。

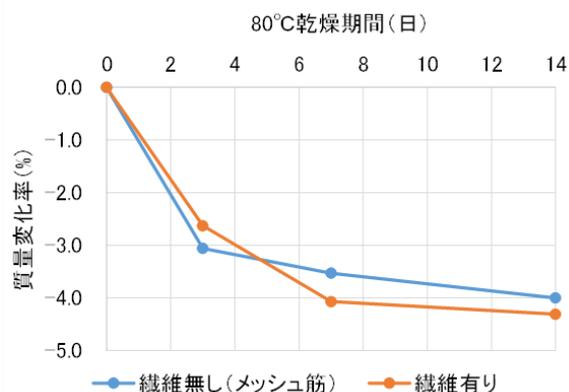


図 2.1-53 乾燥によるモックアップの質量変化

乾燥終了後のモックアップに対し、ドラム缶を収納した状況を図 2.1-54 に示す。収納したドラム缶の外径は、200L ドラム缶と同じである。



図 2.1-54 乾燥後モックアップへのドラム缶収納状況

(d) モックアップ製作のまとめ

モックアップ製作に関するまとめとして、本項で得られた測定結果について、モックアップ製作での評価項目として挙げた以下の内容について評価した。

・狭隘部の成形性及び充填性

内部充填材の狭隘部における最小すき間幅は、想定廃棄体パッケージの形状から 30mm となるため、モックアップ製作では狭隘部を模擬するとともに、事前に 30mm の狭隘部への充填を想定した試験に基づき選定した配合条件で充填性を確認した。

成形後のモックアップの外観観察の結果から、補強材（ワイヤーメッシュ）の有無、配合条件の違い（繊維補強材の有無）によらず、充填不良などの箇所はなく、懸念された狭隘部への充填もできていることが確認された。

製作したモックアップの打設高さは、内部充填材の設計・製作の基本的な考え方のうち、分割で製作することを想定し、廃棄体パッケージの想定高さ（900mm）に対して、半分程度（470mm）とした。今回のモックアップ製作では、充填状況を十分確認しながら作業を進めることができた。

しかしながら、900mm の高さで成形した場合、充填状況の確認に係る作業性は低下することが想定され、狭隘部への充填性を鑑みると、一体型ではなく分割型で成形することが望ましいと考えた。

一方で、充填性を優先し、打設高さを低く設計すると、その分作業性は向上することが見込まれる。しかしながら、分割する数が増えると製作に要する時間は増加し、全体の作業工程に及ぼす影響が大きくなる。従って、実規模の成形工程を設計する場合、充填作業と全体の作業工程を鑑みて分割する数を設定し、内部充填材の形状を設計する必要がある。

・製作時のハンドリング

充填作業では棒バイブレーターによる加振を入念に行い、作業時間としてはモックアップ 1 体において 20 分程度要した。人手を介した試験室レベルでの作業時間であり、実規模工程では加振機を導入する等により、作業時間を短縮できる余地はあると考えられる。

今回製作したモックアップでは、製作工程上、脱枠した後に反転する作業が必要であり、反転作業に要した時間は、モックアップ 1 体につき 30 分程度であった。また、反転作業の際に角欠けが生じた。なお、作業時間や角欠け対策は、反転作業時の吊り下げ位置の見直しや衝撃を緩衝する方策を講じることで、改善できると考えられる。

・乾燥工程における質量の経時変化

乾燥によるモックアップ（水セメント比 45%）の質量減少（乾燥期間最大 14 日）は、モックアップの種類によらず、-4%程度であった。乾燥期間 14 日までに完全には収束しなかったが、概ね乾燥開始から 7 日程度で収束し始める傾向を示した。

ここで、平成 31 年度に製作した 60cm 角コンクリート試験体（水粉体比 27%）の、乾燥工程における質量減少（図 2.1-55）を見ると、乾燥期間 14 日における質量減少率は、今回製作したモックアップとの差は 0.5~1%程度であるが、乾燥期間 14 日においても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。この要因は、水セメント比の違い、形状の違いによるものと考えられ、配合や試験体の形状によって水分逸散が大きく異なることが改めて示された。

実規模工程において、工程検査として、乾燥後の水分残存量を確認することが想定される。現時点で廃棄体パッケージの形状が決定していない状況から、試験体形状や乾燥条件（期間・温度）が異なるケースでも、水分残存量（逸散量）を推定する方策を検討する必要がある。乾燥条件と水分逸散量に関する実験的検討については、次項で詳述する。

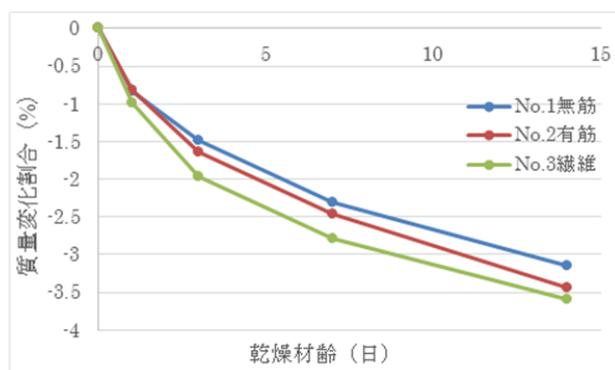


図 2.1-55 60cm 角コンクリート試験体（水粉体比 27%）の乾燥工程における質量減少測定（平成 31 年度製作・測定）

2) 断熱材に関する情報収集

金属容器の溶接工程及び焼きなまし工程で、内部充填材も高温になる部分がある。焼きなまし工程では、内部充填材で 100～600℃程度の温度勾配が生じると考えられ、内部充填材に求める機能により、許容可能な温度範囲が異なることが想定される。平成 31 年度までの「廃棄体パッケージ容器の製作方法の検討」の結果から、焼きなまし工程ではアスファルト固化体において温度の許容値を超える可能性が高く、内部充填材に及ぶ温度の影響を低減させる方策が必要である。

そこで、温度影響の低減策の一つとして断熱材の使用を挙げ、既存製品でどのような断熱材があるかを、無機材料を対象に調査した。

① 調査方法

断熱材とは、JIS A 0202「断熱用語」によると“熱移動を少なくするための材料で化学的性質と物理的構造で断熱性能を発揮する材料の総称”とある。断熱材の種類は、製造業向け（機械、装置、設備などの工業用）、建設業向け（住宅、ビル、工場などの建築用）に大別されるが、用途に応じて要求される性能は様々である。このため、断熱材の材質、供給形状は多岐に亘り、既存製品の品種も多く、断熱材料全体をとらえるには非常に広い分野に及ぶ調査となる。また、断熱材に係る用語についても、前出の JIS A 0202 で規定されているものの（表 2.1-43～表 2.1-45 を参照）、実際には混用されているケースが多い（多くは成形製品を断熱材、これを形作る材料を断熱材料と呼ぶ。工業用では、保温材、保温材料、保冷材、保冷材料などと呼ばれるが、単に保温材または保温材料と総称することが多い）。

そこで本項では、本報告書における用語、廃棄体パッケージで断熱材に想定される適用要件を整理した上で、材質、耐熱性といった材料特性から調査範囲を絞り込み、廃棄体パッケージ内に設置する断熱材として適用し得る材料を抽出した。

表 2.1-43 JIS A 0202 における繊維系断熱材に係る用語

用語	定義
金網補強ブランケット	片面又は両面が可とう性のメタルメッシュで覆われているブランケット断熱材料。
ガラス繊維	熔融ガラスから連続フィラメントとして作られた繊維。一般に補強材、薄織物又は織物に使われる。
グラスウール	ガラスを溶解し、繊維化した材料。
グラスウール断熱材	グラスウールを用いて作られた断熱材。必要に応じて、外被材を張り付け、又は表面を被覆したもので、板状、ロール状、その他の形状のものがある。
グラファイト繊維	炭素がグラファイト化する温度の近傍で熱的に安定化させた炭素繊維で作られた断熱材料。
鉱物ウール 鉱物繊維	金属以外のすべての結晶性又は非結晶性の無機繊維の総称。熔融されたロック、スラグ、ガラスから作られた毛のような柔らかさをもつガラス質の繊維が多く用いられている。
人造鉱物繊維	熔融岩石、スラグ、ガラス、金属酸化物又は粘土から作られる人工の無機繊維。
スラグウール	スラグを溶解し、繊維化した材料。
石綿繊維 アスベスト繊維	細いフィラメントの結晶構造をもつ、天然鉱物けい酸塩から得られる繊維。既知の健康障害のために、平成 16 年 10 月 1 日に一部シール材を除き全面的に使用禁止された。
セラミック繊維	金属酸化物又はクレーから作られた無機質繊維。
セルローズ断熱材	紙、パルプ、板紙の原料又は木材から得られる繊維質保温材。接着剤、防燃材、その他の添加物を混入したもの及びしないものがある。
繊維質（系）断熱材	天然又は人工の繊維で作られた断熱材料で、綿状の柔軟さをもつもの（グラスウール、ロックウール、セルローズ断熱材など）。
炭素繊維	炭化されて大部分炭素になっているが、まだ、熱的に安定していない有機繊維でできている断熱材料。
軟質木質繊維板	木質繊維に結合材を加えたり、又はなしで、加熱若しくは非加熱プレス成形にした板。
粒状綿	塊状又は粒状になるように機械的に処理された繊維系物質。
ロックウール	石灰及びけい酸を主成分とする鉱物を溶解し、繊維化した材料。
ロックウール断熱材	ロックウールを用いて作られた断熱材。一般に板状のものが多い。
木毛ウール	木を切削して繊維を開綿して綿状にした材料。

表 2.1-44 JIS A 0202 における多孔質系断熱材に係る用語

用語	定義
気泡コンクリート	相当数の小気泡をもつコンクリート。
けい酸カルシウム保温材	水和けい酸カルシウムに補強材として繊維を添加した断熱材
けい藻土保温材	主としてけい藻土で構成される断熱材料。粉状，粒状で得られる。
コルク	保護層を形成するコルク樹の幹から定期的に採られる材料。コルク樹とは，(Quercus Suber L)を意味する。
コルク板	粒状コルクを，接着剤を用いたり又は用いないで，加熱圧着成形した断熱材料。
石こう保温材	軽量骨材を含む石こう。
断熱コンクリート	体積比で，かなりな量の軽量骨材を含むコンクリート。
軽量コンクリート	空気吹込み又は発泡で含気泡化したコンクリート。オートクレーブで養生してもよい。
発泡パーライトボード	発泡パーライト，補強繊維及び接着剤からなる板状断熱材。
バーミキュライト断熱材	天然の雲母（母）鉱物を加熱し，膨張又ははく離させて作ったものを主体とする断熱材料。
パーライトプラスター	発泡パーライト骨材を用いたプラスター。
微細気泡保温材 シリカエアロゲル	標準大気圧下の空気分子の平均自由行程と，同程度又はそれ以下の平均寸法の連続気孔をもつ，密な粉体又は繊維状の材料。微細気泡保温材は，熱放射伝熱量を減らすため，不透明材を含んでもよい。

表 2.1-45 JIS A 0202 における発泡系断熱材に係る用語

用語	定義
泡ガラス	ガラスを加熱溶融して発泡構造とした断熱材。
泡状材料	その内部に多数の小室（連続でも、独立でも、又は両者が混在していてもよい。）をもつ材料。弾性のない硬いものからスポンジ状の軟らかいものと用途によって種々ある。
押出法ポリスチレンフォーム	ポリスチレン又はその共重合体を押出発泡によって発泡成形した硬質プラスチック断熱材。
硬質発泡プラスチック	プラスチック材料内に多くの気体を封じ込めた複合材料で、ゴム弾性をもたない材料。
可とう（撓）性弾性発泡材	天然若しくは合成ゴム、又は2種を混合して、発泡成形した可とう（撓）性発泡材。
発泡塩化ビニル樹脂	ポリ塩化ビニルペーストに低温で炭酸ガスその他のガスを溶解し、高速でかき混ぜてガスを樹脂中に微細に分散させて発泡クリーム状にし、硬化させた製品。
発泡粘土	粘土を加熱発泡して泡状構造にした発泡材。
発泡ゴム	硬質ゴム混合物を発泡成形したもの。
発泡スラグ骨材	高炉スラグを発泡させた軽量骨材。
発泡スラグコンクリート	発泡スラグ骨材を含むコンクリート。
ユリアフォーム	ユリア樹脂からなる発泡プラスチック。
発泡パーライト	天然の火山性岩石から作られた粒状物で、熱によって発泡させたもの。
発泡プラスチック	プラスチックで、その中に多数の気泡（連続でも独立でもよい。）を含んでいて見かけ密度が小さくなっているものの総称。気泡状のゴムは、発泡プラスチックに入れられることがある。
発泡ポリスチレンビーズ法ポリスチレンフォーム	ポリスチレン又はその共重合体の発泡ビーズを型内で発泡成形した硬質発泡プラスチック（JIS A 9511 参照）。
フェノールフォーム	フェノールとホルムアルデヒドを縮合重合して得られるレゾール樹脂及びノボラック樹脂に硬化剤、表面活性剤、発泡剤、充てん剤などを加えて製造される硬質発泡体。
ポリイソシアヌレートフォーム	主としてイソシアヌレート形の重合体からなる硬質発泡プラスチック。
ポリウレタンフォーム 硬質ウレタンフォーム	ポリウレタン樹脂で独立気泡体を形成した半硬質又は硬質の発泡系プラスチック。硬質発泡系プラスチックが断熱材としては一般的である。
ポリエチレンフォーム	主としてエチレン共重合体を発泡成形した半硬質又は軟質発泡プラスチック断熱材料。

(a) 断熱材の想定要件

廃棄体パッケージ内に設置する際に想定される適用要件として、まず耐熱性に関する要件を整理する。熱処理時に内部充填材が受ける熱履歴については、平成 31 年度の本事業の報告において、伝熱解析の結果が示されている。伝熱解析の条件を表 2.1-46 に、モデルの概要を図 2.1-56 に、伝熱解析の結果を図 2.1-57 に示す。

表 2.1-46 伝熱解析の条件（原環センター，原子力機構，2019）

項目	設定条件
熱処理条件	容器蓋端部が615°Cで30分間保持するよう、室温(20°C)から約4時間40分掛けて昇温
充填材（モルタル）の熱物性	密度 : 2350(kg/m ³) 比熱容量 : 1050(J/kg/K) 熱伝導率 : 2.56(W/m/K)

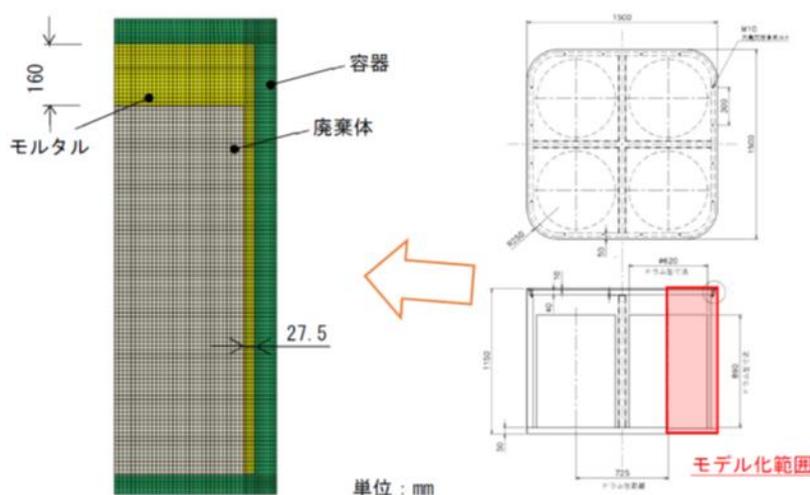


図 2.1-56 充填材にモルタルを用いた場合の平蓋構造の伝熱解析モデル（原環センター，原子力機構，2019）

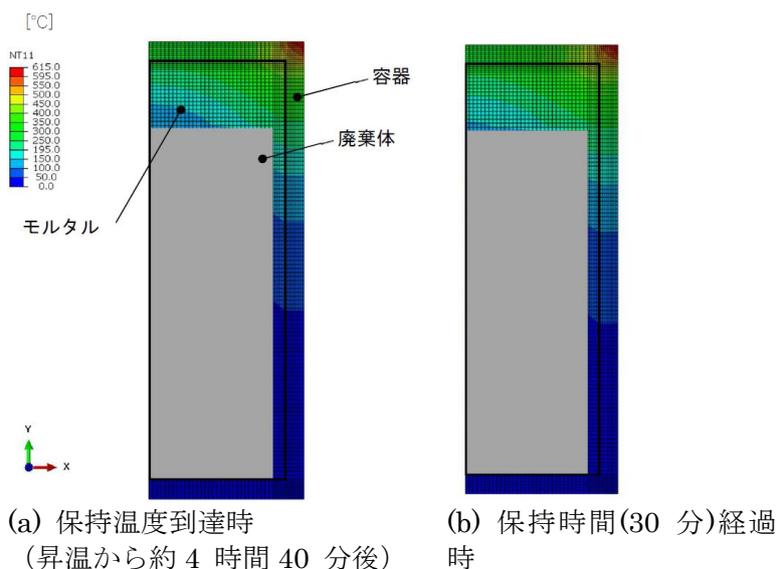


図 2.1-57 伝熱解析結果（原環センター，原子力機構，2019）

図 2.1-57 によれば、内部充填材は最大 500°C程度の熱履歴を受けると想定され、615°Cで 30分保持という熱処理条件を鑑みると、600°Cでも対応できる耐熱性を有する材料を選定する必要がある。

耐熱性以外の要件としては、材質が挙げられ、材質については処分に影響を及ぼさないことが考えられる。すなわち、断熱材は廃棄体パッケージ内に設置されることから、放射線照射や結束剤の分解等に伴うアウトガスの影響が小さい構成材料であること、処分環境下でも長期的に安定していることが考えられる。また、断熱材はパッケージ容器内に遠隔操作で設置されると想定され、ハンドリングに影響を及ぼさない程度の硬度を有し、かつフレキシブルに対応できるよう、加工性に優れた素材が望ましいと考えられる。

(b) 断熱材の分類

断熱材は熱の遮断や保温のために用いる、熱を伝えにくい材料の総称であるが、既往の報告(柴田, 1989)によれば、断熱材料を使用温度範囲によって、およそ次のように分類できるとしている。

- i. 保冷材:常温以下の使用を目的とするもの
- ii. 保温材:常温~600°C 付近での使用を目的とするもの
- iii. 断熱材:約 600~1100°C 付近での使用を目的とするもの
- iv. 耐火断熱材:約 1100°C 以上での使用を目的とするもの

なお、加熱・溶解などの高温条件で使用される工業炉向けの断熱材は、断熱性と耐火性のどちらも必要となるため、下記のような工業生産材を指しているのが一般的となっている(日本工業炉協会, 2003)。

- ・熱伝導率は 0.12W/(m・K)以下
- ・800°C以上の温度で使用

また、材質、製法、特性による分類もあるが、建築用と工業炉用とで分類方法は異なる。建築用の場合、大きく「繊維系断熱材」「発泡プラスチック系断熱材」「天然素材系断熱材」の3種類に分類され、工業炉用の代表的な種類としては、表 2.1-47 に示す通りとなる(日本工業炉協会, 1993)。

表 2.1-47 断熱材の代表的な種類

種類	材料	定義・特徴
耐火断熱レンガ	アルミナ質粘土質	耐火れんがの一種で、多数の小気孔を分散・形成させることで、軽量で熱伝導率の低い耐火れんが。 JIS R 2611 では、かさ比重や熱伝導率などの特性で耐火断熱れんがを分類している。
セラミックファイバ	RCF (リフラクトリーセラミックファイバ)	工業炉ライニングの内張り材から裏張り材まで幅広く使用されており、バルクファイバ、ブランケット、ボード、成形品、不定形品、クロス、ロープなどの様々な製品群がある。
	AF (アルミナファイバ)	RCF より更に高温で安定して使用可能。
断熱保温材	ケイ酸カルシウム製品 ロックウール製品	耐火物やセラミックファイバのバックアップ材や、ダクト等の外部断熱材などに使用。
低熱伝導断熱材	マイクロポーラス断熱材 など	微細なヒュームドシリカを母材とし、セラミックファイバや断熱保温材より更に低い熱伝導率を有し、その値は静止空気より低い。耐火物やセラミックファイバのバックアップ材として使用される。

(c) 断熱材の種類

断熱材料は、その材質によって適用可能な最高温度が異なる。例えば無機繊維材料の場合は、表 2.1-48 に示す通りとなり、適用要件、用途に応じた材質を選定することになる。機能と形態に応じた、断熱材料の選定基準の一例は、断熱材のメーカーで公表されている。

表 2.1-48 断熱材料として使用される主な無機繊維材料
(柴田, 1989)

	平均繊維径	真比重	最高使用温度	備考
アスベスト	0.2~3 μ	2.4~3.3	400~600 $^{\circ}$ C	天然に産する結晶質繊維。
グラスウール	約7 μ /約12 μ	2.5~2.6	300~400 $^{\circ}$ C	熔融繊維化法により製造されるガラス質人造無機繊維。
ロックウール	4~6 μ	2.6~2.7	400~650 $^{\circ}$ C	
セラミックファイバ	2~3 μ	2.6~2.8	1000 ~ 1500 $^{\circ}$ C	
アルミナファイバ	3~4 μ	3.3~3.6	1600 ~ 1700 $^{\circ}$ C	前躯体繊維化法により製造される結晶質人造無機繊維。

(d) 調査対象範囲の設定

断熱材の想定要件(無機の素材で、使用温度範囲が600~1100 $^{\circ}$ Cでの使用を目的とした断熱材)と、整理した使用可能範囲等を照合すると、調査対象範囲は以下を素材とした製品となる。

- ・ケイ酸カルシウム
- ・高性能断熱材

② 調査結果

本項では、前項で示した調査対象範囲の製品を取り扱っているメーカーより情報を収集し、断熱材の特長と、各断熱材料の代表的な製品情報について整理した結果を記す。

(a) ケイ酸カルシウム

ケイ酸カルシウムの断熱材は、ケイ酸カルシウム水和物と繊維補強や充填材などで構成される。強く安定した結合構造から、温湿度による変形、変質が少なく、断熱性を持ち、軽量で加工性にも優れることから、工業製品や建材製品など多岐にわたり使用されている。ケイ酸カルシウム水和物は多種多様な結晶構造が知られているが、JIS 製品 (例えば、JIS A 9510「無機多孔質保温材」等) として工業的に利用されているケイ酸カルシウム水和物は、Tobermorite と Xonotlite の2種類となっている (永井, 2018)。

ケイ酸カルシウム材料の特長を表 2.1-49 に示す。

表 2.1-49 ケイ酸カルシウム材料の特長

項目	特長
軽量性	微細構造で結晶内部に多くの空隙をつくる。この空隙により軽量化が図れる。
保温/断熱性	微細構造で形成される空隙は、直径数 nm~数百 μ m。この微小な空隙が熱の伝導を抑制し、保温性、断熱性が得られる。
不燃/耐火性	加熱時に結晶性水和物が脱水することで、気化熱により材料の温度上昇を遅らせる効果がある。

	ケイ酸カルシウム水和物の脱水は、結晶構造を大きく変化させないため、材料の加熱に伴う収縮によるひび割れ等が起きにくい。
--	--

(b) 高性能断熱材

高性能断熱材とは低伝導率断熱材のことであり、ケイ酸カルシウム材料の製品に比べて 2～3 倍の熱抵抗を有する。使用する断熱材料はメーカーによって異なるが、ケイ酸カルシウム等の従来素材をベースに微細孔を持つエアロゲル（ナノレベル多孔体）等を用いる。これにより、固体同士の接触面積を減らし、微細孔の大きさは平均 $0.1\mu\text{m}$ 以下で空気の自由運動行程よりも小さいために、空気の分子運動を規制するために熱伝導率を大幅に低くすることができる。高性能断熱材は熱伝導率が低いことから、板厚を薄く設計することができ、省エネルギーや産業設備の小型化にも繋がっている。

③ まとめ

本項では、金属容器蓋部の熱処理工程で生じる温度勾配の影響を低減する方策の一つとして断熱材の使用を挙げ、既存製品でどのような断熱材があるかを、無機材料を対象に調査した。本項で候補となり得る代表的な製品例を調査したが、実際の適用性については、断熱材にどこまでの遮熱性能を見込むのかによって、成型する断熱材の形状が大きく変わるため、パッケージ内の寸法が確定し、断熱材の必要厚さ等が分かった段階で、改めて検討する必要がある。

(3) 製作性及び施工性に関する要素試験

1) 乾燥条件と水分逸散量に関する実験的検討

内部充填材の含水率をどの程度に設定するかは、水素ガス発生量の目安が基準となるが、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れる。平成 31 年度に乾燥工程時の水分逸散時間を推定するために 80°C 環境で質量減少量を測定した結果、試験体の大きさ（形状）により水分逸散に要する時間が異なることが分かった。このことから、任意の試験体形状、乾燥条件（期間・温度）における水分逸散量を推定する手法を構築する必要がある。しかしながら、乾燥温度から時間を推定する等、数値解析のみで定量的に予測することは、現状では困難である。

そこで本項では、水セメント比、乾燥条件（温度・期間）等をパラメータとした要素試験体を用いて、実験的アプローチにより水分逸散の挙動を確認し、乾燥工程時の水分逸散量（残存水分量）の推定に資するデータを蓄積した。

① 水分移動に関する既往の研究

プレキャスト方式では、鋼製容器に封入する際の内部充填材の含水率をある程度制御することが可能である。しかし現時点では、水素ガス発生量の目安が設定されていないため、任意の乾燥期間における水分逸散量を予測可能な手法を構築しておくことが望ましい。また、内部充填材の形状も未確定であるため、数値解析によって乾燥面積の影響を推定できる手法の構築が望まれる。

従来、建設業界におけるセメント系材料の研究では高温乾燥時の水分逸散量の推定が必要な場面はほとんどなく、水分移動に関する研究は主として、ひび割れ解析のための乾燥収縮の予測や、塩化物イオン等の耐久性に影響を与える物質移動の予測を目的として研究がなされてきた。そのため、高温、低湿度域の水分移動の研究は数が少ない。本項では、水分移動解析における既往の研究の要点を整理し、乾燥工程における内部充填材の水分逸散量の推定に必要な課題を抽出する。

コンクリート中の水分移動に関する近年の研究の多くは、水の形態として、液状水と水蒸気双方の移動を考慮できるよう、連続体理論の局所平衡仮定に基づいた下式の表現がなされている。

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot (g_l + g_v) = G_m \quad (1)$$

ここで、

w : 質量含水率 (kg/m³)、

g_l, g_v : それぞれ液状水と水蒸気のフラックス (kg/(m²s))、

G_m : 湧出項 (kg/(m³s))

である。

水がコンクリート中の空隙を移動する駆動力は化学ポテンシャルの差異と考えられるが、化学ポテンシャルを表す変数としては、空隙の「含水率」及び「相対湿度」のいずれを採用しても物理的に正しいことが証明されている。

そのため、既往の研究では水分移動を説明するための変数として、相対湿度を使用したものや、質量含水率によるもの、あるいは後述するように飽和度（飽和質量含水率に対する空隙の質量含水率の割合）を用いたものがある。1980年代以降の国内の研究では含水率あるいは飽和含水率を用いることが多くなっているが、これは相対湿度と比較して実験的に取得することがより簡便であるためである。

本検討で想定されるプレキャスト方式のように、高温環境での乾燥が行われるコンクリートでは、コンクリート内部の相対湿度を高精度に測定することが更に困難になるため、以下には、含水率及び飽和度を用いた研究事例を主として取り上げる。

式(1)に示す支配方程式を質量含水率もしくは飽和度を用いて記載するために、空隙の飽和度が毛管圧とある関係性を有すると仮定する。この仮定は、毛管圧が気液界面に形成されるメニスカス半径により決定されることを考えると妥当といえる。飽和度 S が毛管圧 p_c の関数と考えたとき、質量含水率 w は下式のように表記できる。

$$w = w_{sat} S(p_c) \quad (2)$$

ここで、

w_{sat} : 飽和質量含水率 (kg/m³)、

$S(p_c)$: 飽和度 (-)

である。

また、液状水と水蒸気のフラックス g_l, g_v はダルシー則に基づき、以下のように表現される。

$$g_l = -K_l \nabla p_l \quad (3)$$

$$g_v = -\delta_v \nabla p_v \quad (4)$$

ここで、

K_l : 液状水の透水係数 (s)

δ_v : 水蒸気の透気係数 (s)

である。

液圧の勾配と毛管圧の勾配が等しいと仮定すると g_l は毛管圧 p_c の関数として、以下のように表される。

$$g_l = -K_l \nabla p_c \quad (5)$$

また、平衡条件では蒸気圧と毛管圧が等しいと考えられるため、以下のケルビン式が成り立つ。

$$RH = \frac{p_v}{p_{v,sat}} = \exp\left(\frac{p_c}{p_l R_v T}\right) \quad (6)$$

ここで、

RH : 相対湿度 (-)、

p_v : 蒸気圧 (Pa)、

$p_{v,sat}$: 飽和蒸気圧 (Pa)、

R_v : ガス定数 (J/(kgK))、

T : 絶対温度 (K)

である。

よって、式 (4) は以下のように変形できる。

$$g_v = -K_v \nabla p_c \quad (7)$$

ただし、 $K_v = \delta_v \frac{p_c}{p_l R_v T}$ である。

以上より、 K を K_l と K_v の和と定義すると、水全体のフラックス g は、

$$g = g_l + g_v = K \nabla p_c \quad (8)$$

と表される。

式 (1) に式 (8) を代入すると、水分移動の支配方程式は毛管圧 p_c を用いて以下のように表される。

$$\frac{\partial w}{\partial p_c} \frac{\partial p_c}{\partial t} + \nabla \cdot (K \nabla p_c) = G_m \quad (9)$$

本研究のように、十分に硬化したコンクリートにおける水分逸散を考える場合には、水和などによる水の消費や、水和物の分解による水の増大を大凡無視できるため、 $G_m = 0$ と仮定でき、結果として下式が得られる。

$$\frac{\partial w}{\partial p_c} \frac{\partial p_c}{\partial t} + \nabla \cdot (K \nabla p_c) = 0 \quad (10)$$

上記の支配方程式を数値解析に使用するためには、飽和度 $S(p_c)$ の関数形や K_l 、 K_v といった定数を求めることが必要となる。

飽和度 $S(p_c)$ は、最大質量含水率が既知であれば水分特性曲線 $w(p_c)$ と相互変換が可能である。空隙中の水分量と含水率との関係性を示す曲線としては、一般に吸着等温線がよく知られている。吸着等温線は、同一温度時の相対湿度の変化に対する水分吸着及び毛管凝縮による質量増分を表しているが、ケルビン式に基づいて相対湿度軸を毛管張力に置き換えたものが水分特性曲線である。すなわち、吸着等温線を求めることが飽和度 $S(p_c)$ の関数形を求めることに直結している。

吸着等温線をモデル化する試みとしては、大きく二つのアプローチがある。

一つは、小孔の空隙から水分が充填するとの前提にたち、空隙構造を仮定することで空隙構造から吸着等温線を導出するものであり、Hillerborg、下村らや半井らの研究がある (Hillerborg,

1985 ; 下村ら, 1995 ; 半井ら, 2005)。このモデルでは、吸着等温線に生じる脱着時と吸着時のヒステリシスを考慮することが難しいが、石田らは、インクボトル効果を考慮してヒステリシスを示す実験値に合うように下村らのモデルを修正している (石田ら, 1997)。

他方、空隙構造を考慮せず、経験的に吸着等温線をモデル化するアプローチとしては、岡島ら、Thierry ら、内海らの研究があり (岡島ら, 1989 ; Thierry ら, 2008 ; 内海ら, 2008)、材齢によるセメント硬化体の変化に応じた吸着等温線の変化を考慮できるモデルとしては、Xi ら、Jonasson ら、丸山らの研究がある (Xi ら, 1994 ; Jonasson ら, 1999 ; 丸山ら, 2011)。

しかしながらセメント水和物の主成分であるカルシウムシリケート化合物 (C-S-H) は、材齢だけでなく乾燥状態によってもその水分吸着性状が異なることが明らかになっているため、精緻なモデル化を実施するためには更なる検討が必要とされている。加えて、異なる配合に対して K_I 、 K_v の厳密値を導出することも多大な労力を有するため、配合が決定していない時点において詳細な検討を実施することは望ましくない。

そのため、コンクリート中の水分移動を数値解析で求める工学的な方法としては、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。例えば、みかけの水分拡散係数 D を用いると、式(10)は飽和度 S の関数として下式のように書ける。

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla S) \quad (11)$$

本来の拡散係数は、物質の状態と温度のみで一義的に決まるが、ここで用いられているみかけの拡散係数 D は、配合条件や温度だけでなく、コンクリートの含水状態によっても大きく変化することが経験的に分かっている。工学的には、みかけの拡散係数をどのように与えるかによって、コンクリートの水分逸散量の予測精度が決定することから、みかけの拡散係数 D を含水率や相对湿度の関数として記述することが行われている。

以下では、みかけの拡散係数に特に大きな影響を与えるコンクリート内部の水の存在状態の配分を表現できるように提案された水分移動の数値解析モデルの現状を整理する。Bazant による著名な研究では、みかけの拡散係数を相对湿度の関数として下式を用いている (Bazant, 1971)。

$$D(RH) = D_{100} \left(\alpha_0 + \frac{1-\alpha_0}{1+\left(\frac{1-RH}{1-RH_c}\right)^\eta} \right) \quad (12)$$

ここで、

D_{100} : 相对湿度 100% のときのみかけの拡散係数 (m²/s)

RH : 相对湿度

RH_c : みかけの拡散係数が $0.5 \times D_{100}$ となる相对湿度

α_0 : 最大拡散係数と最小拡散係数の比

η : フィッティングパラメータ

である。この関数形は欧州を中心によく用いられており CEB-FIP の model code でも採用されている。

Xi らは、実験によるフィッティングを想定して下式を提案している (Xi ら, 1994)。

$$D(RH) = \alpha_H + \beta_H [1 - 2^{-10\gamma_H(RH-1)}] \quad (13)$$

ここで、

$\alpha_H, \beta_H, \gamma_H$: フィッティングパラメータ
である。

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, 1989)。

$$D(RH) = A \cdot \exp(B \cdot RH) \quad (14)$$

ここで、 A, B : フィッティングパラメータである。

国内でも、阪田ら、秋田らがみかけの拡散係数の実験式を提案している (阪田ら 1981 ; 秋田ら 1990)。参考までに式(15)に阪田らのみかけの拡散係数の導出式を記す。

$$D_w(w) = D_{w0} + \frac{D_s - D_0}{1 + \left(\frac{100-w}{100-w_c}\right)^n} + \frac{D_s - D_0}{1 + \left(\frac{100}{100-w_c}\right)^n} \frac{w-100}{100} \quad (15)$$

式(12)から(15)を比較して分かるように、みかけの拡散係数の関数形は研究者により微妙な違いがあり、いずれもフィッティングパラメータを含んでいる。これらの各係数は例えばボルツマン-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ものの、配合条件から汎用的に推定する手法がないのが現状である。

配合条件からみかけの拡散係数を推定する手法の一例としては、例えば Bazant の提案した式(12)では D_{100} を圧縮強度の関数で表現している (Bazant, 1971)。

また、Miguel は、水セメント比の関数として下式で表現している (Miguel, 2009)。

$$D(\theta_m) = D_1 \left[1 + \left(\frac{D_1}{D_0} - 1 \right) (1 - \theta_m)^n \right]^{-1} \quad (16)$$

$$D_0 = \tilde{D}_0 (WC)^3 \left(1 - \frac{c_s}{c_c} \right)^2 \quad (17)$$

$$D_1 = \tilde{D}_1 (WC)^{2.5} \left(1 - \frac{c_s}{c_c} \right)^2 \quad (18)$$

ここで、

c_c, c_s : それぞれセメントとシリカフェュームの含有率
である。

Ding らも、水セメント比の関数として式(19)を提案している (Ding ら, 2019)。

$$D_0 = \exp(4.636 \cdot WC + 0.087) \times 10^{-12} \quad (19)$$

Mjornell は、コンクリートの毛管空隙を介して、間接的に水セメント比で表現している (Mjornell, 1997)。

$$D(RH) = D^{60\%} + (D^{100\%} - D^{60\%}) \left(\frac{RH-0.6}{0.4} \right)^k \quad (20)$$

$$D^{60\%} = a + b \cdot P_{cap}, \quad D^{100\%} = c + d \cdot P_{cap}^2 \quad (21)$$

$$P_{cap} = \frac{WC - 0.39\alpha_c}{WC + 0.32} \quad (22)$$

ここで、

α_c : 水和反応率

a, b, c, d : フィッティングパラメータ

である。

国内の研究では、秋田らが、水セメント比 WC の関数として下式を提案している (秋田ら, 1990)。

$$D_1 = \frac{230}{WC} + 0.25 \cdot WC - 14.7 \quad (23)$$

このように、みかけの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が、いずれの提案式にも物理的な意味合いはないとされており、数値解析によって水分逸散量の予測を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と考えられる。

② 検討方法

乾燥工程におけるコンクリートの水分逸散の速度は、体積 (V) と乾燥面積 (S) の割合 (V/S) に大きく影響を受ける。例えば建築学会の「鉄筋コンクリート造構造物のひび割れ制御設計・施工指針」では、乾燥収縮予測式の乾燥速度を表す変数として V/S が採用されている。

プレキャスト方式で作製される内部充填材の寸法は、壁面にあたる部分や底面部では 30～45mm 程度、隅部の厚い所では 130mm 程度であり、テーパ部分も含めて複雑な形状を有していることや、乾燥の方法が定まっていないことを考慮すると、水分逸散量を推定する方法は種々の V/S に適用できることが望ましい。

そこで本検討では、理想的な一次元拡散に近い条件の試験体を用いて、異なる温度、配合に対するみかけの拡散係数を取得し、得られたみかけの拡散係数が種々の V/S を有する試験体に対して適用可能であるか否かを確認することを目的とした。

みかけの拡散係数の推定には、秋田らが提案した式(24)を参考にした (秋田ら, 1990)。

$$D(S) = \frac{D_1}{\{29(1-S)+1\}^{1.4}} \quad (24)$$

ここで、

D_1 : 飽和度 1 のときのみかけの拡散係数 (cm^2/day)

である。

また平衡含水率曲線は、秋田らが 20°C で実施した実験値を 3 次の多項式により近似した値をベースとし、平衡含水率曲線が高温時には低含水率側にシフトするという五十嵐らの知見 (五十嵐ら, 2012) を参考に下式を使用した。

$$S = a_1 + a_2 \cdot RH + a_3 \cdot WC + a_4 \cdot RH^2 + a_5 \cdot RH \cdot WC + a_6 \cdot WC^2 + a_7 \cdot RH^3 + a_8 \cdot RH^2 \cdot WC + a_9 \cdot RH \cdot WC^2 + a_{10} \cdot WC^3 \quad (25)$$

ここで、

$a_1 \sim a_{10}$: フィッティングパラメータ

である。

式(24)について秋田らは、水セメント比が小さいほどみかけの拡散係数が小さくなる実験結果を踏まえ、 D_1 を水セメント比の関数で表している (秋田ら, 1990)。一方、 D_1 に及ぼす温度の影響については取り上げられていないため本検討では、 D_1 そのものをフィッティングパラメータとし、

実験結果から得られた値より、水セメント比と温度の影響について既往の研究との整合性について考察を行った。

また、外部への水分逸散を推定するためには、みかけの拡散係数と同時に、表面係数が必要である。秋田らの論文（秋田ら、1990）では、表面係数も水セメント比の関数で表現しているが、佐々木らの研究（佐々木ら、2012）によると、表面係数とみかけの拡散係数はおおよそ線形の関係にあるため、本研究では表面係数とみかけの拡散係数が線形関係にあると仮定して式(26)で表した。

$$a_m = k \cdot D_1 \quad (26)$$

ここで、

a_m ：飽和度 1 のときの表面係数 (cm²/day)

k ：比例定数

である。

③ 使用材料及び配合

内部充填材の配合は、平成 30 年度に試験したコンクリートを参考に、水セメント比を 3 水準 (W/C=35、45 及び 55%) 設定した。なお使用材料は、「パッケージ設計/製作条件に応じた内部充填材の製作工程の検討」の項と同じ銘柄である。

ここで、平成 30 年度の試験では、水分逸散に関するデータを取得するための基礎的検討として、単位水量は揃えて水セメント比を 3 水準設定したが、最大寸法 20mm の粗骨材(G)を用いていた。狭隙部への充填性確保の観点で、粗骨材最大寸法を 13mm に設定したため、無理に単位水量を揃えると、内部充填材として適さない配合になる可能性が考えられた。そこで本項では、何れの水準でも狭隙部に充填できるような配合を設計し、試験練りにより単位水量、混和剤添加量を設定した。ただし、水準間で物性を比較できるように、単位粗骨材かさ容積は揃えた。設定した配合を表 2.1-50 に示す。

表 2.1-50 配合

配合条件		コンクリート配合				混和剤使用量		試験結果			
W/C (%)	s/a (%)	単位量(kg/m ³)				減水剤類 (C*%)	空気量調整剤 (C*%)	スランプ (cm)	空気量 (5)	温度 (°C)	単位容積質量 (kg/m ³)
		W	C	S	G						
35.0	41.5	163	466	698	983	1.10	0.0015	16.0	5.0	23	2319
45.0	43.8	170	378	752	984	0.10	0.0015	16.5	4.6	22	2297
55.0	44.7	177	322	780	983	0.60	0.0015	11.5	4.0	22	2294

④ 試験体寸法及び乾燥方法

理想的な一次元拡散に近い条件の試験体として 100×100×400mm の角柱試験体を用意し、長手方向の両端からのみ水分逸散が生じるよう、残りの 4 面をアルミテープによってシールした。また、V/S が水分逸散性状に及ぼす影響を調べるために、2 種類の型枠を用いて、3 種類の V/S を有する試験体を作製した。型枠の選定に際しては、プレキャスト方式で想定される内部充填材の形状を参考にした。試験体概要は、報告書本編に掲載したとおりである。

これらの形状に成型した試験体を、材齢 28 日まで 20℃封緘養生し、材齢 28 日よりそれぞれ 60℃及び 80℃環境で乾燥を実施した。同一条件の試験体は各 2 体であり、試験値としてはその平均値を採用した。

乾燥開始から乾燥終了までの間に実施する測定項目とその試験方法を表 2.1-51 に示す。

表 2.1-51 乾燥開始から乾燥集口湯までの間に実施する測定項目及び試験方法

実施期間	測定項目	試験方法
乾燥開始時 (封緘養生、材齢 28 日)	圧縮強度 静弾性係数	JIS A 1108、JIS A 1149
	自由水量	105℃24 時間乾燥後の質量減少量を自由水量とする。
乾燥期間中	含水率の 経時変化	供試体の質量の測定による
乾燥後	圧縮強度 静弾性係数	JIS A 1108、JIS A 1149
	自由水量	105℃24 時間乾燥後の質量減少量を自由水量とする。

⑤ 実験結果

図 2.1-58～図 2.1-59 に乾燥工程後の圧縮強度及び静弾性係数を示す。

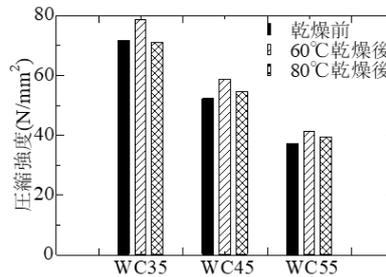


図 2.1-58 乾燥前後の圧縮強度の比較

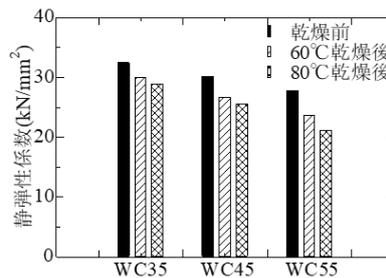


図 2.1-59 乾燥前後の静弾性係数の比較

60℃乾燥では、いずれの水セメント比の試験体でも圧縮強度が増大し、80℃乾燥でも水セメント比 35%を除き若干の増大傾向が見られた。一方、静弾性係数ではいずれの乾燥温度及び配合についても低下する結果が得られた。高温乾燥時に力学特性が増加する要因としては、高温時におけるセメントの水和の進展が考えられ、低下する要因としては、コンクリートを複合材料と考え

たときにセメント硬化体の高温時の熱膨張によって骨材との温度ひずみ差による骨材界面の損傷が考えられる。

高温養生時に骨材界面に損傷が発生する現象は多数報告されており、温度ひずみ差が大きくなるほど損傷の程度は大きくなり、圧縮強度より引張強度、静弾性係数の方が影響を受けやすいといわれている (H. Son and A. Hosoda, 2010)。本実験で得られた実験結果は、これらの既往の知見と定性的に合致している。

今回の配合及び乾燥温度における静弾性係数の低下は、内部充填材に期待される性能からすると問題になる量ではないが、高温養生が力学特性に及ぼす影響は配合や使用材料によって異なり、また乾燥温度や乾燥速度の影響も受けるため、配合もしくは使用材料が概ね決定した時点で改めて確認をしておくことが望ましい。

次に、乾燥前の水和によって消費される自由水量を大凡把握するため、封緘養生 28 日時点での含水率を測定した。この時、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、含水率を以下の方法により求めた。

$$w_{28} = \frac{W_{28} - W_d}{W_d} \quad (27)$$

ここで、

w_{28} : 質量含水率

W_{28} : 28 日時点の試験体質量

W_d : 絶乾時の試験体質量

である。

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。測定結果を図 2.1-60 に示す。

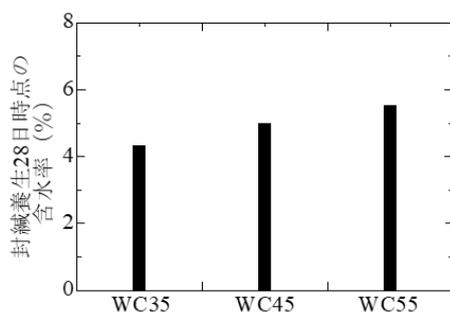


図 2.1-60 封緘養生 28 日の含水率

図 2.1-60 から確認できるように水セメント比が小さいものほど含水率が小さい結果が得られた。この結果は配合時の単位水量の差異とその後の水和反応率を反映している。

次に、図 2.1-61 に 60℃及び 80℃乾燥時の逸散した水量の割合（ここでは逸散含水率と呼ぶ）の経時変化を示す。逸散水率は、乾燥前の材齢 28 日時点を基準とし、乾燥期間中に逸散した自由水の質量と絶乾時の試験体質量との比である。

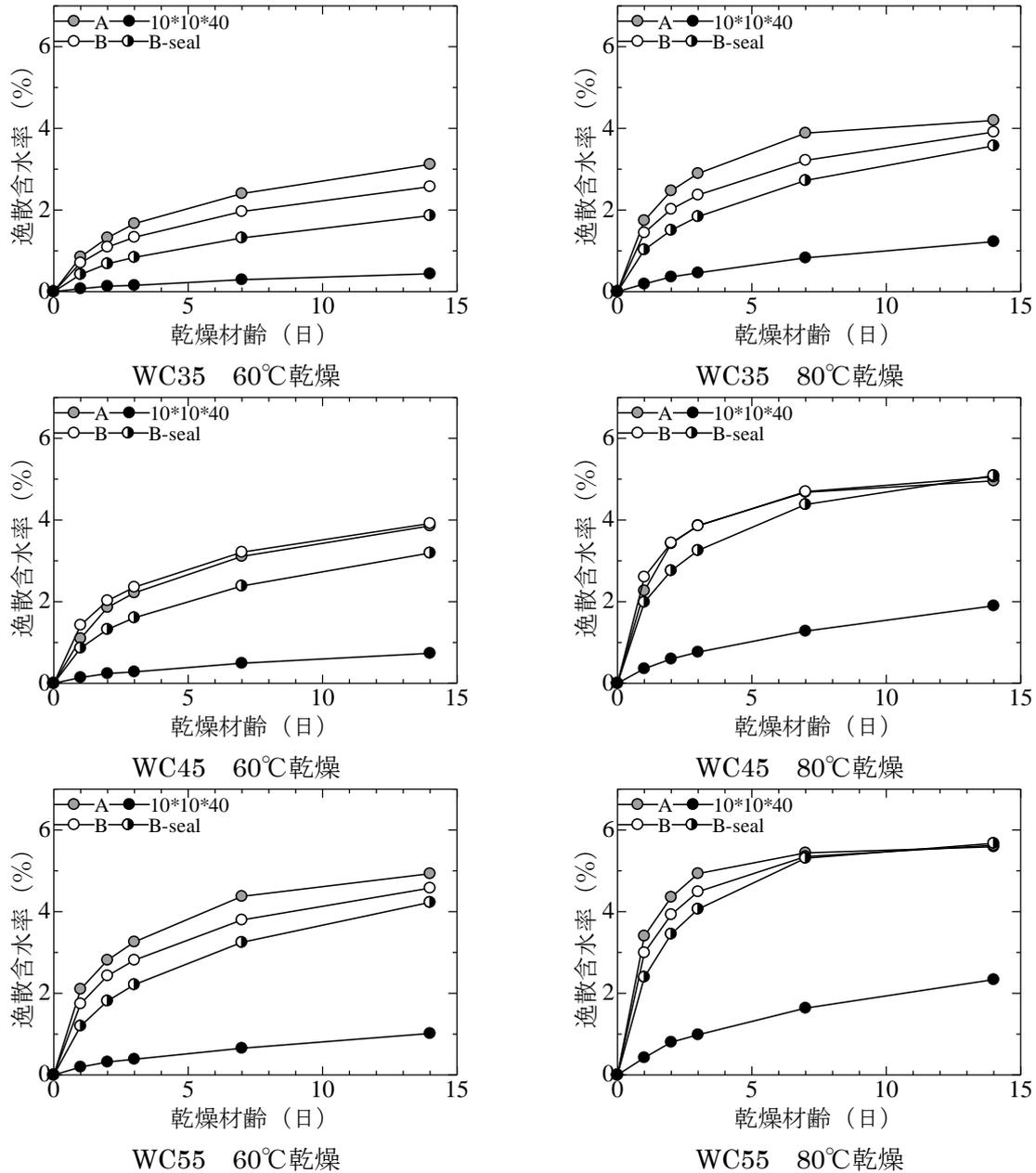


図 2.1-61 乾燥試験結果

図 2.1-61 の結果より、高温条件ほど乾燥速度が大きい V/S が小さい試験体ほど乾燥速度が大きい水セメント比が大きい試験体ほど乾燥速度が大きいという、想定された結果が再現されている。また、右下図の水セメント比 55%の 80°C乾燥の試験体では、10*10*40 を除く試験体で乾燥材齢 7 日以降およそ一定の値を示しており、乾燥がほぼ収束している様子が見取れる。このときの逸散水率は 5.6%程度であり、図 2.1-60 に示した質量含水率の結果と大凡一致している。

乾燥工程でコンクリートに残存している水の量をみるため、残存含水率=28 日時点の質量含水率 - 逸散水率を算定した。その結果が図 2.1-62 である。

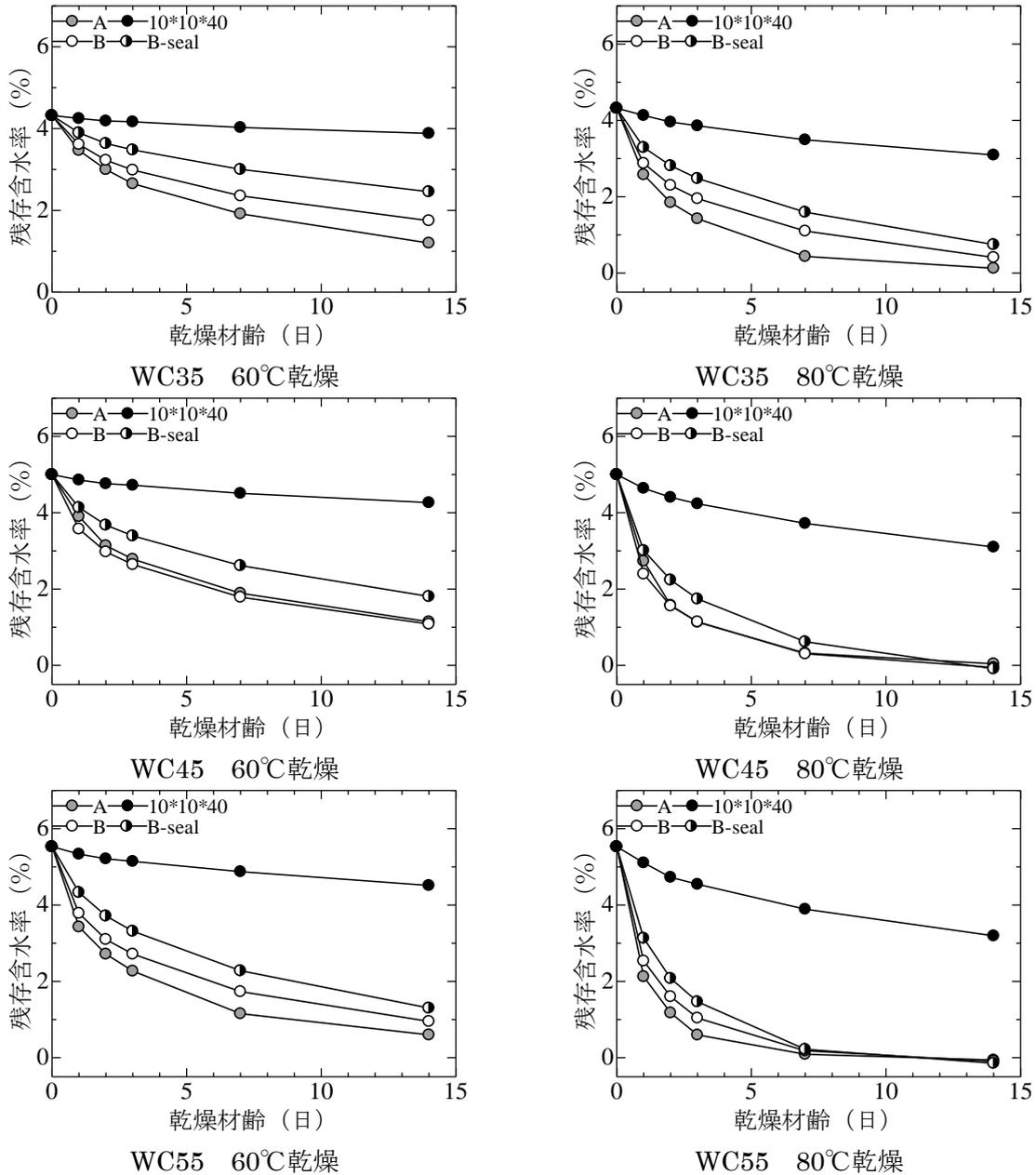


図 2.1-62 残存含水率

水セメント比 55%の試験体だけでなく、水セメント比 35%、45%でも V/S が小さい試験体では、乾燥 14 日時点でおおよそ残存含水率が 0%に達している結果が得られた。一方、60°C乾燥では 14 日時点でも 1~2%程度の含水率が残存していた。

以上の実験結果を、式(11)の支配方程式を用いて数値解析により再現する。

隅部のように複数の方向に同時に水分逸散が進行する場所では複雑な挙動が生じているため、本検討では、理想的な一次元拡散に近い条件の 10*10*40 の試験体を用いてみかけの拡散係数を取得し、得られたみかけの拡散係数が種々の条件の試験体に対して適用可能であるか否かを確認した。図 2.1-63 が 10*10*40 試験体の逸散含水率の実験結果と、最小二乗法により D_l と k をフィッティングすることで得られた解析値である。

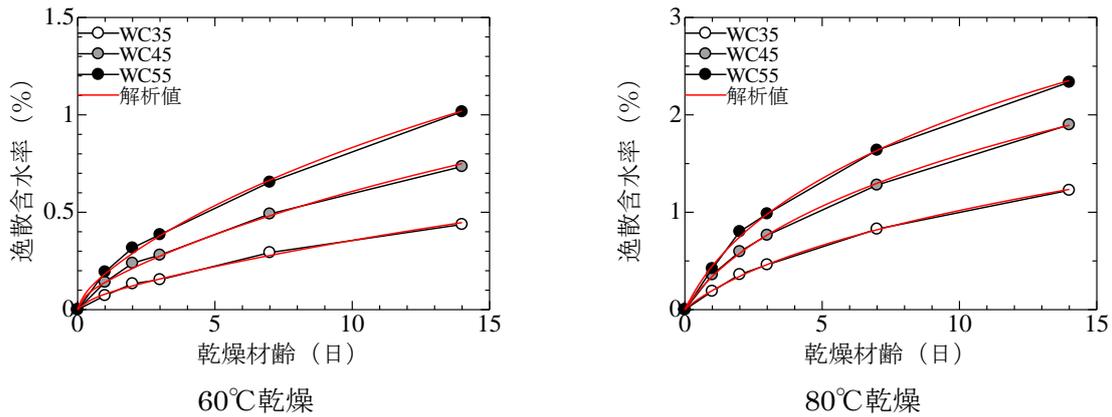


図 2.1-63 10*10*40 試験体における水分逸散性状のフィッティング結果

このとき使用した D_1 と k は、図 2.1-64 に示すとおりである。

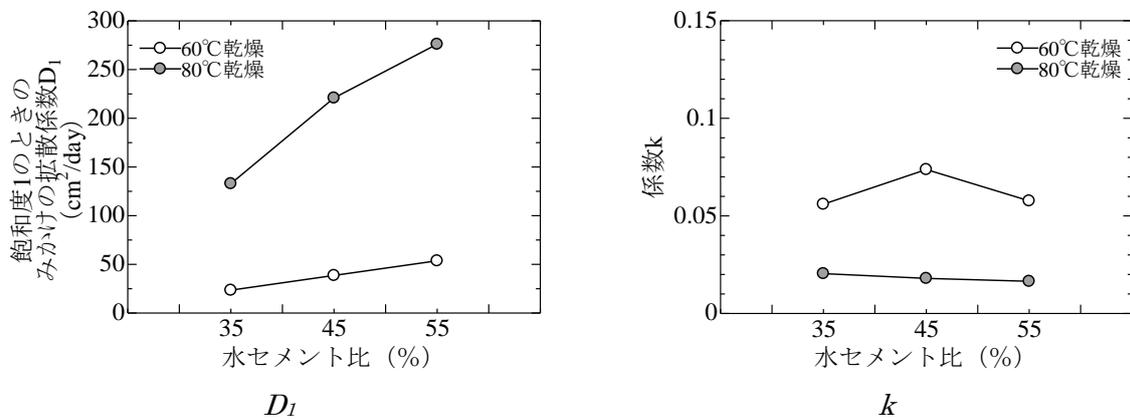


図 2.1-64 フィッティングで得られた係数

図 2.1-64 の D_1 の値を水セメント比の観点からみると、みかけの拡散係数は水セメント比の増加に伴い増大しているのに対し、表面係数とみかけの拡散係数の比率 k には明確な傾向が見られない。

D_1 と水セメント比の関係の妥当性を確認するため、みかけの拡散係数と水セメント比の関係性を数式化した式(19)と式(23)と比較した。このときみかけの拡散係数は骨材の混合率や乾燥条件により異なるため絶対値としては比較ができない。そこで図 2.1-65 では水セメント比 35%を基準として正規化している。

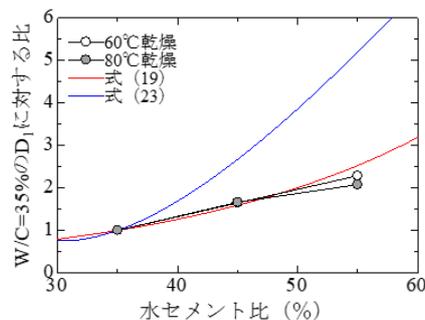


図 2.1-65 D_1 に与える水セメント比の影響

本検討の結果は、乾燥温度によらず式 (19) と大凡一致しており、妥当な結果が得られていると考えられる。

次に、 D_1 に与える乾燥温度の影響を確認するため、同じ水セメント比で 60°C と 80°C の D_1 の比をとった結果が図 2.1-66 である。

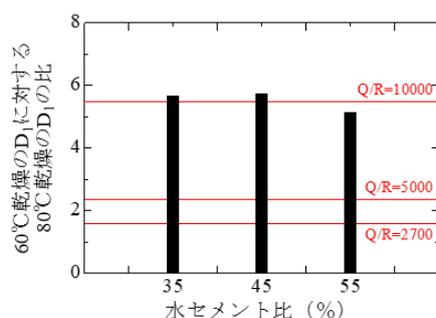


図 2.1-66 D_1 に与える温度の影響

図より、いずれの水セメント比においても、60°C乾燥に対して80°C乾燥はおおよそ5~6倍程度の値を取っている。Bazantらの研究では、みかけの拡散係数に及ぼす温度の影響はアレニウズ則に則り、下式の形で考慮されている (Bazantら, 1971)。

$$\beta_T = \exp \left[\frac{Q}{R} \left(\frac{1}{T_0+273} - \frac{1}{T+273} \right) \right] \quad (27)$$

ここで、

β_T : 基準温度 ($T_0=20^\circ\text{C}$) に対する温度 T のときにみかけの拡散係数の割合

Q : みかけの活性化エネルギー

R : ガス定数

である。

Bazantらは $Q/R = 2700\text{K}$ を採用しているが、この値を使用して60°C乾燥と80°C乾燥の比を取ると図 2.1-66 に示すように1.58となり本検討より小さい。一方、Xiらは、相対湿度80%時の水蒸気のみかけの拡散係数は、15°Cと45°Cで5から8倍になると報告しており (Xiら, 1994)、これを式(27)から逆算すると Q/R は、4900Kから6350K程度になる。本検討で得られた Q/R は約10000Kであり、既往の研究と比較して大きな値を取った。このような結果が得られた原因としては、高温乾燥時に表面が早期に低湿度域に達し、みかけの拡散係数の含水率依存性を表す式(24)や平衡含水率曲線式(25)について、温度の影響を適切に反映できていない可能性が考えられる。本検討で得られたみかけの拡散係数の温度依存性の妥当性を確認するためには、高温時及び低湿度域の適用性を検証する必要がある。

以上の検討を踏まえ、理想的な一次元拡散に近い条件の $10*10*40$ の試験体を用いて得られた D_1 と k を使用して、他の試験体の水分逸散性状の推定を行った。その結果が図 2.1-67 である。

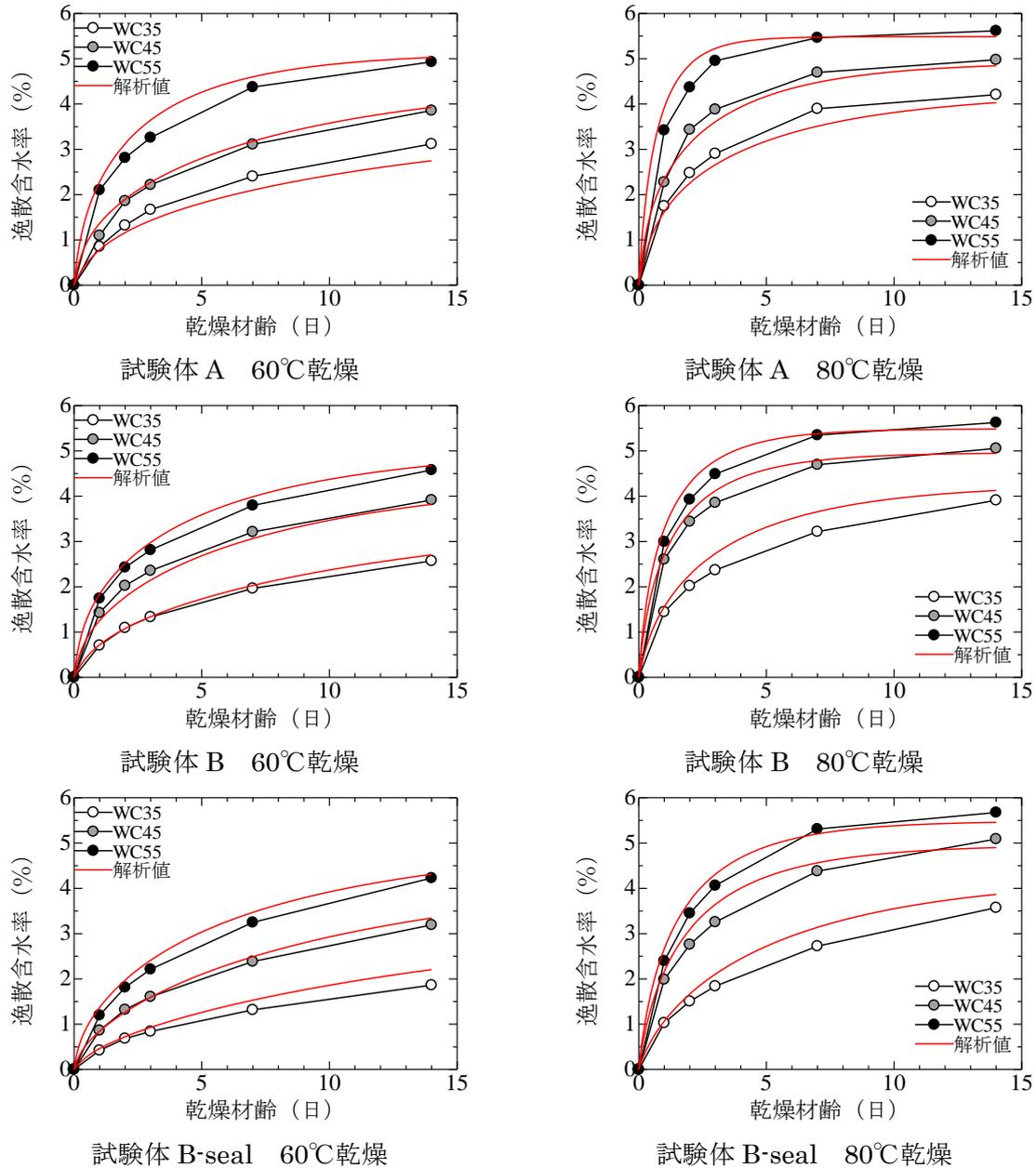


図 2.1-67 試験体 A、B、B-seal の実験結果と解析結果の比較

図 2.1-67 より、いずれの試験体についても乾燥工程初期に、やや逸散水量を大きく見積もる傾向がみられるもののおおよそ良い一致を示した。このことから、 $V/S=16.6\sim37.5$ という比較的薄い形状の試験体に対しても、 $10*10*40$ 試験体を用いた一軸乾燥試験のみかけの拡散係数を使用することは有効であることが確認された。

⑥ まとめと今後の課題

本検討で得られた知見と今後の課題を記す。

- ・パッケージ内部充填材の配合及び形状が確定していない状況では、机上検討のみで任意の乾燥期間における水分逸散量を予測することは困難である。解析精度を高めるためには、配合条件が及ぼす、高温時の水分特性曲線、等温吸着線及びみかけの拡散係数の含水率依存性を取得することが必要である。

- ・一方で、配合及び乾燥温度条件がおおよそ決定したときには、100*100*400mm の試験体等を使用して一軸のみかけの拡散係数を取得することで、現在検討されているパッケージ内部充填材の形状の V/S の範囲の水分逸散量は概ね推定可能である。
- ・乾燥工程で静弾性係数の低下が確認された。本検討の配合及び乾燥温度における静弾性係数の低下は、内部充填材に期待される性能からすると問題になる量ではないが、高温乾燥が力学特性に及ぼす影響は、配合や使用材料によって異なると考えられること、乾燥温度や乾燥速度の影響を受けることを考慮すると、配合もしくは使用材料によって高温乾燥が力学特性に与える影響を把握しておくことが望ましい。

2) 乾燥工程後の物質移行特性の評価

平成 31 年度に製作した 60cm 角ブロック試験体（以下、ブロック試験体）で、乾燥に伴い生じたひび割れは、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浸透に係る特性を、実験的に取得しておく方が望ましいと考えられる。

また、乾燥工程後のコンクリートが高湿度環境、あるいは直接水分と接触するような環境に置かれると、吸湿・吸水により、内部充填材の含水率が上昇するケースも想定される。これは、水素ガス発生量の見積もりにも影響を及ぼすため、プレキャスト方式で製作した内部充填材の品質管理（廃棄体パッケージ容器に収納するまでの期間の保管条件の設定）の観点からも、乾燥工程後の吸湿・吸水に関するデータを取得しておく方が望ましい。

そこで本項では、極端なケースを想定し、乾燥工程を経た試験体を水と接触させ、乾燥を施さない試験体と水分浸透を比較した。

① 試験方法

水分浸透試験は、土木学会規準 JSCE-G 582「短期の水掛かりを受けるコンクリート中の水分浸透速度係数試験方法(案)」を参考にした。ここで、JSCE-G 582 とは、コンクリートの一部を水に浸漬することにより、短期の水掛かりによりコンクリートに浸透する水分の浸透速度係数を求めることを目的とした試験方法で、短期の水掛かりとは、降雨や一時的な水の作用を想定している。以下に実施要領を記す。

(a) 試験体

水分浸透試験には「パッケージ設計/製作条件に応じた内部充填材の製作工程の検討」で設定した配合 (W/C=45%) で成型した円柱試験体 (φ100×200mm) を用いた。内部充填材 (コンクリート) の配合を表 2.1-52 に示す。

表 2.1-52 乾燥工程の有無による水分浸透の比較試験における配合

粗骨材 最大寸法 (mm)	目標 スランプ (cm)	目標 空気量 (%)	W/C (mass%)	s/a (vol%)	単位量 (kg/m ³)				添加率	
					W	C	S	G	SP	AE
13	18±2.5	4.5 ±1.5	45.0	43.8	170	378	752	984	C×0.95%	適宜

試験体は、成型後材齢 28 日まで 20℃封緘養生し、材齢 28 日より 80℃環境で 14 日間乾燥を実施した。乾燥工程後、水に浸漬する面及びその対面以外の面をエポキシ樹脂でシールした。

一方、乾燥を施さない試験体は、成型後材齢 28 日まで 20℃封緘養生した後、温度 20±2℃、相対湿度 60±5%の環境で 91 日間置いた試験体である。80℃乾燥を施さない試験体についても、浸漬する面及びその対面以外の面をエポキシ樹脂でシールした。

ここで、JSCE-G 582 では、水に浸漬する面は、打ち込み時の底面側端面から約 25mm 部分を切断除去すると記載されている。これは、型枠に剥離剤を用いた場合の影響を除去することを目的とした操作である。本試験では剥離剤は用いず、また、実際に水分が接触するケースの表面状態を想定し、切断除去は行わずにそのまま型枠底面を浸漬する面として試験に供した。

(b) 浸漬方法

前項で準備した試験体を、打設面は上、型枠底面は下にして浸漬した。浸漬中は、試験体の下部が 10±1mm 水が浸るようにした。浸漬水には試験を実施する環境（温度約 20℃の試験室）で 24 時間静置した上水道水を用いた。浸漬水を張った容器の底面と試験体の間にスペーサーを設置し、試験体と容器底面との距離が 5mm 以上になるようにした。浸漬期間は 48 時間とした。

(c) 水分深さの測定

浸漬開始から 24 時間後及び 48 時間後に水分浸透深さを測定した。浸漬水から引き上げた試験体を、浸漬時の鉛直方向に試験体中央で割裂し、割れた試験体の一方について、水分浸透深さを測定した。水分浸透深さは、NDIS3423 の発色現像法に該当する、水分により発色する現像剤を割裂面に噴霧し、発色している部分を目視にて判定した後、その部分の浸漬面からの深さを測定した。割裂した試験体の一例を図 2.1-68 に示す。



(a) 割裂直後の状態

(b) 発色現像剤噴霧後の状態

図 2.1-68 割裂した試験体の一例

(d) 水分浸透速度係数の算定

水分浸透に係る参考値として、JSCE-G 582 に準じて、水分浸透速度係数を算定した。水分浸透速度係数は、浸漬期間 48 時間までの水分浸透深さと浸漬時間の平方根との関係で表され、以下の式により算定する。

$$A = \frac{\sum_{n=1}^n (\sqrt{t_i} - \sqrt{t}) (L_1 - \bar{L})}{\sum_{n=1}^n (\sqrt{t_i} - \sqrt{t})^2}$$

ここに、 A ：水分浸透速度係数 (mm/ hr)

n ：データ数

$\sqrt{t_i}$ ： i 番目のデータの浸漬時間の平方根 (hr)

$\overline{\sqrt{t}}$ ：浸漬時間の平方根の平均値 (hr)

L_i ： i 番目のデータの浸透深さ (mm)

\bar{L} ：浸透深さの平均値 (mm)

B ：定数

A は縦軸を水分浸透深さ、横軸を浸漬時間の平方根として測定値をプロットした場合に、最小二乗法により求められる近似直線の傾きに相当する。近似直線の切片である定数 B は、以下の式で算定する。

$$B = \bar{L} - A\overline{\sqrt{t}}$$

② 試験結果

水分浸透深さの測定結果を表 2.1-53 に示す。80℃乾燥を施した水準は、乾燥を施していない水準に比べ水分浸透深さが大きく、水分との接触に伴う吸水量は多くなった。また、水分浸透速度係数で比較すると、80℃乾燥の係数は、80℃乾燥なしの約 2 倍となり、吸水性も速まった。

表 2.1-53 水分浸透深さの測定結果

水準名	80℃乾燥		80℃乾燥なし	
浸漬時間(hour)	24	48	24	48
水分浸透深さ(mm)	44	64	5	10
	41	60	0	14
	36	53	0	14
	40	57	0	12
	31	61	0	10
平均深さ(mm)	38.4	59	1	12
水分浸透速度係数 A (mm/ $\sqrt{\text{hr}}$)	10.15		5.42	
定数 B	-11.33		-25.56	

③ まとめ

乾燥工程を経た内部充填材は、乾燥を施していないケースと比べ、水分との接触による吸水量が多くなり、また、吸水性も速まることが定量的に示された。

今回は極端なケースとして、水分と直接接触する状態を想定した試験を実施した。実工程は屋内で製作することが想定され、降雨等の水分との直接の接触は避けられると考えられるが、湿度条件によっては内部充填材が吸湿し、乾燥工程後から含水率が変化する可能性は否めない。プレキャスト方式で乾燥工程を経た内部充填材の品質管理の観点から、容器に収納するまでの期間に

おける保管条件を設定するための基礎情報として、今後、乾燥工程後の吸湿に関するデータを取得することが望ましいと考えられる。

(4) まとめ

(a) パッケージ設計/製作条件に応じた内部充填材の製作工程の検討（室内試験）

60cm 角規模のモックアップを製作し、狭隘部の成形性及び充填性、製作時のハンドリング、乾燥工程における質量の経時変化について評価した。

- ・想定廃棄体パッケージの形状から狭隘部における最小幅が 30mm となるため、モックアップ製作では狭隘部を模擬するとともに、事前に 30mm の狭隘部への充填を想定した試験に基づき選定した配合条件で充填性を確認した。成形後のモックアップの外観観察の結果から、補強材（ワイヤーメッシュ）の有無、配合条件の違い（繊維教材の有無）によらず、充填不良などの箇所はなく、懸念された狭隘部への充填もできていることが確認された。
- ・モックアップ製作では内部充填材の打設高さを、一体型ではなく分割型を想定して設定し（470mm）、充填状況を十分確認しながら作業を進めることができた。一体型の高さ（900mm）では、充填状況の確認に係る作業性は低下することが想定され、狭隘部への充填性を鑑みると、一体型ではなく分割型で成形することが望ましいと考えた。一方で、分割する数が増えると製作に要する時間は増加し、全体の作業工程に及ぼす影響が大きくなることから、充填作業と全体の作業工程を鑑みて設計する必要がある。
- ・充填作業では棒バイブレーターによる加振を入念に行い、作業時間としてはモックアップ 1 体において 20 分程度要した。人手を介した試験室レベルでの作業時間であり、実規模工程では加振機を導入する等により、作業時間を短縮できる余地はあると考えられる。
- ・製作したモックアップ（水セメント比 45%）の乾燥による質量減少（乾燥期間最大 14 日）は、-4%程度であった。乾燥期間 14 日までに完全には収束しなかったが、概ね乾燥開始から 7 日程度で収束し始める傾向を示した。これに対し、2019 年度に製作した 60cm 角コンクリート試験体（水粉体比 27%）では、乾燥期間 14 日においても下げ止まらず、更なる水分逸散を見込める結果であった。この要因は、水セメント比の違い、形状の違いによるものと考えられ、配合や試験体の形状によって水分逸散は大きく異なることが示唆された。

(b) 断熱材に関する情報収集

パッケージ容器の溶接工程に伴う温度影響の低減策の一つとして断熱材の使用を挙げ、廃棄体パッケージに設置する上での要件を整理した上で、既存製品でどのような断熱材があるかを、無機材料を対象に調査した。

- ・内部充填材は最大 500°C 程度の熱履歴を受けると想定され、615°C で 30 分保持という熱処理条件を鑑みると、600°C でも対応できる耐熱性を有する材料を選定する必要がある。
- ・耐熱性以外の要件として、材質については処分に影響を及ぼさないことが考えられる。すなわち、放射線照射や結束剤の分解等に伴うアウトガスの影響が小さい構成材料であること、処分環境下でも長期的に安定していることが考えられる。
- ・この他、断熱材はパッケージ容器内に遠隔操作で設置されると想定され、ハンドリングに影響を及ぼさない程度の硬度を有し、かつフレキシブルに対応できるよう、加工性に優れた素材が望ましいと考えられる。
- ・候補となり得る代表的な製品例を示したが、実際の適用性については、断熱材に見込む遮熱性能によって形状が大きく変わるため、改めて検討する必要がある。

(c) 乾燥条件と水分逸散量に関する実験的検討

水セメント比、乾燥条件（温度・期間）等をパラメータとした要素試験体を用いて、実験的アプローチにより水分逸散の挙動を確認し、乾燥工程時の水分逸散量（残存水分量）の推定に資するデータを蓄積した。

- ・パッケージ内部充填材の配合及び形状が確定していない状況では、机上検討のみで任意の乾燥期間における水分逸散量を予測することは困難である。解析精度を高めるためには、配合条件が及ぼす、高温時の水分特性曲線、等温吸着線及びみかけの拡散係数の含水率依存性を取得することが必要である。
- ・一方で、配合及び乾燥温度条件がおおよそ決定したときには、100*100*400mmの試験体等を使用して一軸のみかけの拡散係数を取得することで、現在検討されているパッケージ内部充填材の形状のV/Sの範囲の水分逸散量は概ね推定可能である。
- ・乾燥工程で静弾性係数の低下が確認された。本検討の配合及び乾燥温度における静弾性係数の低下は、内部充填材に期待される性能からすると問題になる量ではないが、高温乾燥が力学特性に及ぼす影響は、配合や使用材料によって異なると考えられること、乾燥温度や乾燥速度の影響を受けることを考慮すると、配合もしくは使用材料によって高温乾燥が力学特性に与える影響を把握しておくことが望ましい。

(d) 乾燥工程後の物質移行特性の評価

乾燥工程を経た試験体を水と接触させ、水分浸透に関する基礎的なデータを取得した。その結果、乾燥工程を経た内部充填材は、乾燥を施していないケースと比べ、水分との接触による吸水量が多くなり、また、吸水性も速まることが定量的に示された。

今回は極端なケースとして、水分と直接接触する状態を想定した試験を実施した。実工程は屋内で製作することが想定され、降雨等の水分との直接の接触は避けられると考えられるが、湿度条件によっては内部充填材が吸湿し、乾燥工程後から含水率が変化する可能性は否めない。プレキャスト方式で乾燥工程を経た内部充填材の品質管理の観点から、容器に収納するまでの期間における保管条件を設定するための基礎情報として、今後、乾燥工程後の吸湿に関するデータを取得することが望ましいと考えられる。

2.1.4 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

TRU 廃棄物処分場において、セメント系材料は人工バリア等に多用されることが想定される。廃棄体からの熱によりセメント系材料が変質し、人工バリアの長期挙動評価の初期設定条件へ影響することが懸念される。そのため、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」に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℃程度のそれほど高温ではない環境条件においても C-S-H が結晶化し、トバモライトへと変化する可能性が示唆された。また、結晶化は環境温度が高いほど促進され、また、混和材や骨材などセメント系材料を構成する材料にも影響されることが示唆された（原環センター、2018）（原環センター、2018）。平成 31 年度までに、セメント系材料の機械的特性およ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、20℃、50℃、80℃環境下に置いたバルク試験体の結晶化による特性変化を検討した（定温度試験と呼ぶ。）その結果、高温条件の試料において特性変化は見られるものの、トバモライトへの変化の指標となる 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ていない。そこで令和 2 年度は、継続している定温度試験について、XRD による結晶化の確認及び空隙率等の微細構造変化を確認するとともに、平成 31 年度に検討した加速試験を実施し、結晶化挙動と物性値への影響について考察した。

また、廃棄体の発熱による廃棄体パッケージ内充填材への影響は、廃棄体外部の熱影響よりも高温となるため物性へ大きく影響を及ぼすことが考えられる。そこで、廃棄体からの内部充填材への熱影響について把握するため、広範囲における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とした。

(1) C-S-H の結晶化が物性に及ぼす影響

セメント系材料における C-S-H が熱変質によりトバモライトへと変化した場合、物性へどのような影響を及ぼすか検討することを目的とし、バルク試験体を 20℃、50℃、80℃の環境下に置き、特性変化を検討した。骨材からのシリカの供給を想定し、シリカ微粉末を混合して物性試験用のモルタル硬化体を作製した。モルタル硬化体では、C-S-H とトバモライトの密度の違いからトバモライトへの変化推定するために、長さ変化を継続的に測定している。また、化学的変化を詳細に分析するためペースト硬化体を作製し、評価した。

1) モルタル硬化体による定温度試験

① モルタル硬化体による定温度試験条件

結晶化した試料の物理特性を評価するため、モルタル硬化体による定温度試験を継続して実施している。試験条件を表 2.1-54 に示す。

セメントの種類は、OPC、FAC15、FAC30 および SC10 とした。セメント水和物と骨材との反応を模擬するためシリカ微粉末を混合した。また、骨材は混合したシリカ微粉末と区別するため石灰石砂を使用した。OPC では、20℃水中で 3 ヶ月、FAC15、FAC30、SC10 の混合セメントでは 20℃水中で 6 ヶ月前養生し、十分水和が進んだ状態の硬化体を 20℃、50℃及び 80℃に設定した恒温槽に移し、定温度試験を開始した。高温、水中環境条件における結晶化挙動を評価するための定温度試験を継続して実施し、本年度は、定温度による水中での養生期間、OPC ペースト硬化体で 4.8 年（以下、5y と記す）、FAC15、FAC30 および SC10 ペースト硬化体で 3.6 年（以下、4y と記す）の試料を評価した。

表 2.1-54 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 にシリカフェューム 10%混合]
シリカ微粉末	シリカ微粉末(SiO ₂)：粒径 4 μ m、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.)
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
温度の条件	20℃、50℃、80℃
定温度における養生期間	OPC ペースト硬化体：4.8年 (5y) FAC15 ペースト硬化体：3.6年 (4y) FAC30 ペースト硬化体：3.6年 (4y) SC10 ペースト硬化体：3.6年 (4y)

② 分析項目及び方法

(a) 質量測定

供試体の破損等による質量変化を確認するため、モルタル供試体の質量を 0.1g まで測定した。

(b) モルタル硬化体による長さ変化

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が、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。ここでは、密度の変化およ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。モルタル供試体の長さ変化をコンパレータ法により測定した。供試体の長さ変化測定では、供試体のゆがみ等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、正および逆方向、打設面を手前に正および逆方向）から測定した。最小値は 0.01mm である。

(c) 測定結果

質量測定の結果を表 2.1-55 に、長さ変化の測定結果を表 2.1-56 に示す。

表 2.1-55 質量測定結果

温度 (°C)	N=	OPC 5y			FAC15 4y			FAC30 4y			SC10 4y		
		質量(g)		変化率	質量(g)		変化率	質量(g)		変化率	質量(g)		変化率
		初期	5y	(%)	初期	4y	(%)	初期	4y	(%)	初期	4y	(%)
20	①	581.5	584.20	0.46	582.4	584.16	0.30	575.0	576.27	0.22	575.5	576.42	0.16
	②	580.5	582.88	0.41	582.9	584.47	0.27	575.6	576.73	0.20	571.4	572.13	0.13
	③	581.5	584.38	0.49	581.1	582.72	0.28	571.7	572.80	0.19	576.8	577.83	0.18
	Ave.			0.45			0.28			0.20			0.16
50	①	576.9	577.58	0.13	574.0	574.10	0.02	575.8	575.48	-0.06	575.0	575.52	0.09
	②	575.5	575.55	0.01	577.2	577.92	0.12	577.5	577.50	0.00	575.6	576.76	0.20
	③	576.4	576.59	0.04	576.1	576.45	0.06	577.4	577.15	-0.04	574.3	575.50	0.21
	Ave.			0.06			0.07			-0.03			0.17
80	①	576.9	578.08	0.20	574.5	573.05	-0.25	571.5	570.04	-0.26	578.7	577.40	-0.22
	②	577.8	578.78	0.17	573.1	571.43	-0.29	575.1	573.73	-0.24	573.6	572.08	-0.26
	③	576.0	576.75	0.13	575.2	573.86	-0.23	578.5	577.47	-0.18	581.6	580.39	-0.21
	Ave.			0.17			-0.26			-0.22			-0.23

表 2.1-56 長さ変化の測定結果

温度 (°C)	N=1	OPC 5y					FAC15 4y						
		長さ変化量(mm)				変化率(%)	長さ変化量(mm)				変化率(%)		
		打設面 上		打設面 手前		Ave.	Ave.	打設面 上		打設面 手前		Ave.	Ave.
		正	逆	正	逆			正	逆	正	逆		
20	①	-0.760	-0.812	-0.788	-0.860	-0.805	-0.021	-0.018	0.031	-0.020	-0.007		
	②	-0.753	-0.701	-0.801	-0.757	-0.753	-0.020	-0.018	-0.022	-0.022	-0.021		
	③	-0.889	-0.913	-0.965	-0.976	-0.936	-0.029	-0.023	-0.023	-0.027	-0.026		
	Av.					-0.831	-0.520				-0.018	-0.011	
50	①	-0.806	-0.804	-0.799	-0.826	-0.809	-0.022	-0.019	-0.024	-0.025	-0.023		
	②	-0.855	-0.860	-0.845	-0.852	-0.853	-0.024	-0.017	-0.019	-0.025	-0.021		
	③	-0.736	-0.707	-0.754	-0.727	-0.731	-0.031	-0.023	-0.028	-0.026	-0.027		
	Av.					-0.798	-0.498				-0.024	-0.015	
80	①	-0.894	-0.864	-0.961	-0.828	-0.887	-0.391	-0.399	-0.380	-0.374	-0.386		
	②	-0.885	-0.945	-0.977	-1.007	-0.954	-0.381	-0.401	-0.384	-0.390	-0.389		
	③	-0.942	-0.940	-0.949	-0.968	-0.950	-0.385	-0.359	-0.281	-0.370	-0.349		
	Av.					-0.930	-0.581				-0.375	-0.234	
温度 (°C)	N=1	FAC30 4y					SC10 4y						
		長さ変化量(mm)				変化率(%)	長さ変化量(mm)				変化率(%)		
		打設面 上		打設面 手前		Ave.	Ave.	打設面 上		打設面 手前		Ave.	Ave.
		正	逆	正	逆			正	逆	正	逆		
20	①	-0.019	-0.023	-0.019	-0.019	-0.020	-0.028	-0.021	-0.025	-0.015	-0.022		
	②	-0.024	-0.028	-0.022	-0.025	-0.025	-0.028	-0.024	-0.020	-0.018	-0.023		
	③	-0.023	0.006	-0.017	-0.024	-0.015	-0.018	-0.027	-0.020	-0.019	-0.021		
	Av.					-0.020	-0.012				-0.022	-0.014	
50	①	-0.027	-0.036	-0.029	-0.033	-0.031	-0.022	-0.022	-0.022	-0.015	-0.020		
	②	-0.031	-0.024	-0.027	-0.019	-0.025	-0.023	-0.030	-0.024	-0.026	-0.026		
	③	-0.028	-0.028	-0.033	-0.031	-0.030	-0.026	-0.025	-0.027	-0.024	-0.026		
	Av.					-0.029	-0.018				-0.024	-0.015	
80	①	-0.209	-0.350	-0.241	-0.319	-0.280	-0.351	-0.284	-0.376	-0.267	-0.320		
	②	-0.290	-0.329	-0.405	-0.275	-0.325	-0.232	-0.302	-0.390	-0.277	-0.300		
	③	-0.222	-0.211	-0.276	-0.228	-0.234	-0.292	-0.247	-0.257	-0.190	-0.247		
	Av.					-0.280	-0.175				-0.289	-0.180	

初期からの長さ変化率の経時変化を図 2.1-69～図 2.1-72 に示す。OPC は、50°C及び 80°Cで長さ変化率の減少が見られたが、4y 以降では変化率が小さくなった。FAC15、FAC30 および SC10 では、20°C及び 50°Cでは変化が見られず、80°Cのみで変化率の減少が見られた。セメントの水和による収縮により、セメント水和物の体積は、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)。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ために OPC では 3 ヶ月、混合セメント系では 6 ヶ月の前養生し、十分に水和が進んだ状態から定温度試験を実施している。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て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から判断すると80°Cの条件では定温度試験開始1年以降にはシリカ微粉末の反応はほぼ終了し、C-S-Hの結晶化が生じていると推測される。80°C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。さらにOPC 80°Cの条件について3年以降では変化が見られなくなり、この条件におけるC-S-Hの結晶化は停滞している状態であると推測される。

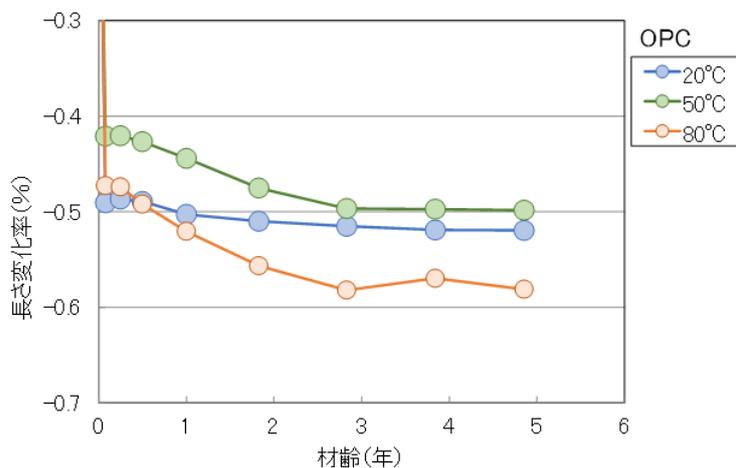


図 2.1-69 OPC モルタル硬化体の長さ変化率

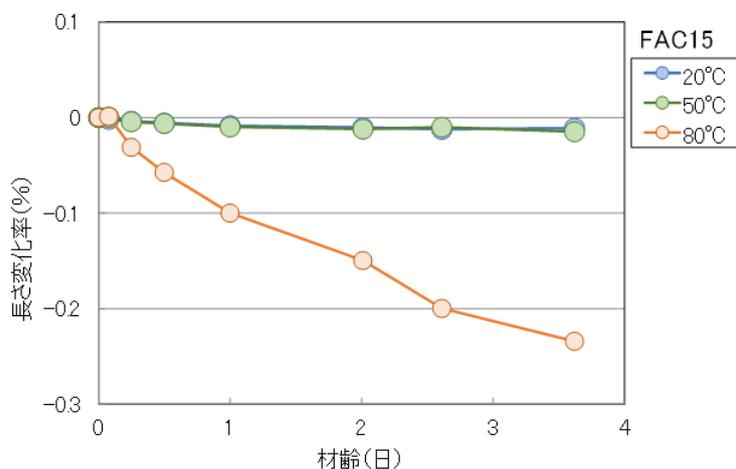


図 2.1-70 FAC15 モルタル硬化体の長さ変化率

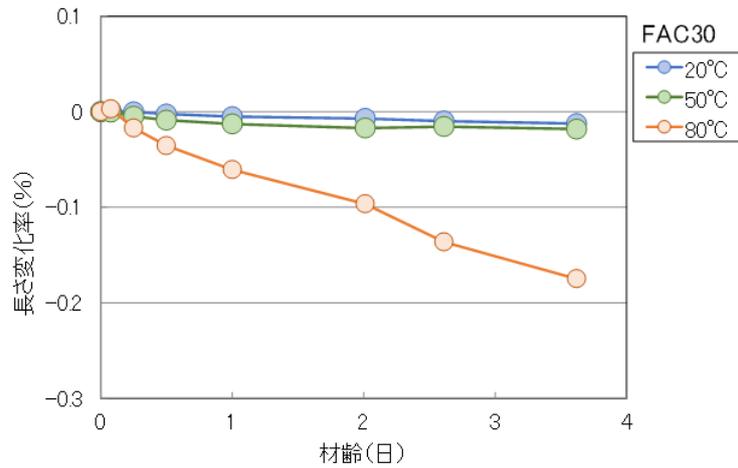


図 2.1-71 FAC30 モルタル硬化体の長さ変化率

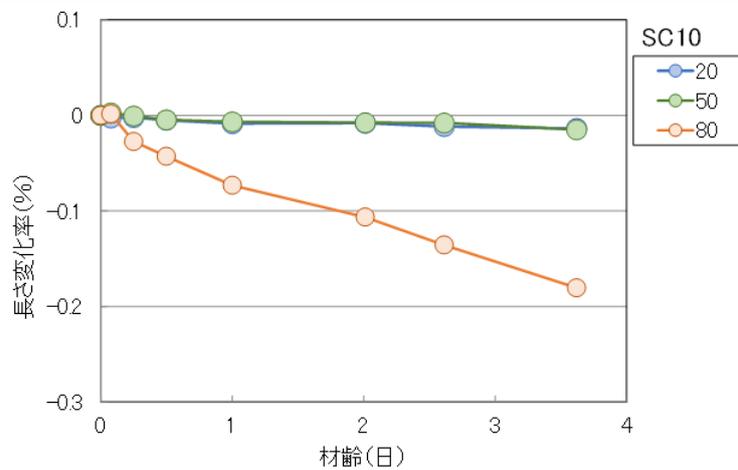


図 2.1-72 SC10 モルタル硬化体の長さ変化率

2) ペースト硬化体による定温度試験

① ペースト硬化体による定温度試験条件

ペースト硬化体による定温度試験条件を表 2.1-57 に示す。

セメントの種類は、モルタル硬化体と同様に OPC、FAC15、FAC30、SC10 とした。粒径 4 μ m の石英型シリカ微粉を混合し、硬化体を作製した。OPC では、20°C 水中で 3 ヶ月、FAC15、FAC30、SC10 の混合セメントでは 20°C 水中で 6 ヶ月前養生し、十分水和が進んだ状態の硬化体を作製した。前養生後、試験体を 20°C、50°C、80°C の所定の温度で定温度試験を開始した。本年度評価する試料は、OPC ペースト硬化体で 4.8 年（以下、5y と記す）、FAC15、FAC30 および SC10 ペースト硬化体では 3.6 年（以下、4y と記す）である。

表 2.1-57 ペースト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
ペースト配合	セメントにシリカ微粉末を 40mass%混合，水/粉体比=50mass%
養生	①：20℃、水中養生 3ヶ月 ②，③，④：20℃、水中養生 6ヶ月
形状	ペースト：2×2×3cm
温度の条件	20℃、50℃、80℃
定温度における養生期間	OPC ペースト硬化体：4.8年 (5y) FAC15 ペースト硬化体：3.6年 (4y) FAC30 ペースト硬化体：3.6年 (4y) SC10 ペースト硬化体：3.6年 (4y)

② 分析項目及び方法

(a) XRD による結晶化の確認

C-S-H の結晶化状況を確認するために粉末 X 線回折 (XRD) 測定による鉱物の同定を行った。測定条件を以下に示す。

- ・装置：X'Pert PRO MPD (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 $2\theta = 5 \sim 60^\circ$ ，スリットソーラスリット 0.04rad，発散スリット： 1° ，散乱防止スリット： 2° ，マスク 15mm

(b) TG-DTA

熱重量-示差熱分析 (TG-DTA) による測定を行い、結合水量、Ca(OH)₂、CaCO₃ 量求め、シリカ微粉末とセメントとの反応の程度を確認した。以下に測定条件を示す。なお、結合水量については 100℃から 1000℃までの質量減少率を求め、Ca(OH)₂ 量及び CaCO₃ 量については TG 曲線より算出した。

- ・装置：Thermo plus EVO2 (リガク社製)
- ・条件：昇温速度 10℃/min，測定温度範囲室温～1000℃，測定雰囲気 N₂ ガス
リファレンス α -Al₂O₃，試料量 約 20mg

(c) SEM による水和物の形態確認

電子走査顕微鏡 (SEM) によりセメント水和物の形態観察を行い、特に、温度条件の違いによる C-S-H の形態の違いを確認し、トバモライトへの変化について検討した。また、EDS を使用して点分析を行い、その元素組成から水物等の同定を行った。

- ・装置：SEM SU-5000 (日立ハイテクノロジー社製) 任意の倍率

(d) EPMAによるC/Sの測定

電子線マイクロアナライザー (EPMA) による面分析により、Ca および Si 濃度分布を測定し、その結果を用いて、ピクセル (測定点) の C/S 分布を求めた。C/S を 0.1 刻みで区切り、その範囲に相当するピクセル数を求め、この処理は 3 視野を合算して実施した。ペースト試料では C-S-H が主要な水和物であるため、測定範囲においては C-S-H が存在するピクセル (測定点) が最も多くなり、C/S で整理すると C-S-H の C/S に近い値の最大値を有する正規分布形状となる。本試験の試料においても同様に整理し、C-S-H の C/S を推定した。測定条件を表 2.1-58 に示す。

表 2.1-58 EPMA 測定条件

装 置	条 件
使用装置	JXA-8100 (日本電子社製)
加速電圧	15kV
照射電流	$5 \times 10^{-8} \text{A}$
測定時間	40msec/ピクセル
分析元素	Ca、Si
分光結晶	TAP:Si, PET:Ca
標準試料	Ca, Si:Wollastonite (CaO : 48.3mass%、SiO ₂ : 51.7mass%)
プローブ径	<0.5 μm
ピクセルサイズ	1 \times 1 μm
ピクセル数	400 \times 400 (面分析範囲 400 \times 400 μm)
視野数	3 視野

(e) 水銀圧入法による空隙率及び空隙径分布

水銀圧入法による空隙率・空隙径分布の測定を行い、温度条件の違いによる空隙径分布の経時変化を確認した。

- ・装置：オートポアIV9500(マイクロメリティクス社製)
- ・条件：測定温度範囲 0.5~60,000(0.03~300 孔径 μm 相当)，水銀表面張力 484mN/m
接触角=130°

③ 分析結果

(a) XRD による結晶化の確認

OPC ペースト硬化体の XRD 測定結果を図 2.1-73 に、FAC15 ペースト硬化体の XRD 測定結果を図 2.1-74 に、FAC30 ペースト硬化体の XRD 測定結果を図 2.1-75 に、SC10 ペースト硬化体の XRD 測定結果を図 2.1-77 に示す。

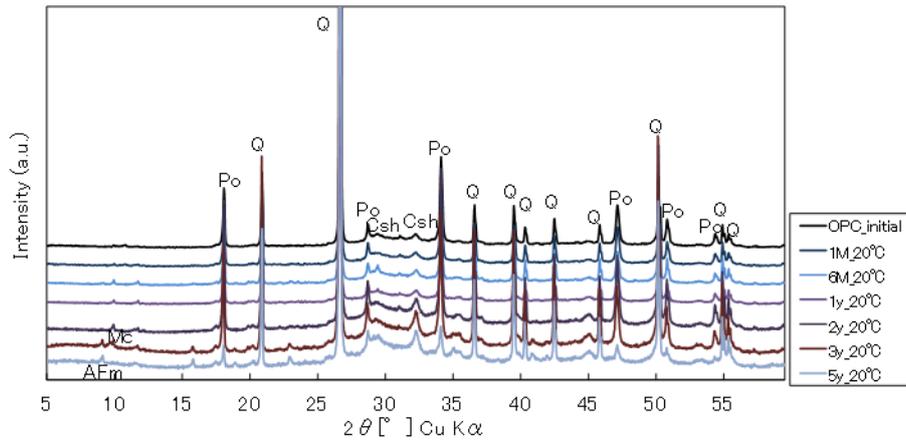
OPC ペースト硬化体の 20°C、5y 試料では、ポルトランダイト、モノサルフェート、C-S-H およびクオーツのピークが同定された。ポルトランダイトのピーク強度は 3y の試料に比較して小さくなっていた。クオーツのピーク強度は、3y と 5y でそれほど大きな違いは見られなかった。ポルトランダイトのピークが小さくなっていることから、シリカ微粉とポルトランダイトの反応が進んでいることが考えられる。50°C、5y の試料では、C-S-H、カトアイトおよびクオーツが同定され、3y の試料と違いは見られなかった。80°C、5y の試料においても、トバモライトのピークは確認されず、C-S-H、カトアイト、カルサイト、クオーツが同定された。クオーツのピーク強度は、3y の試料と同程度であり、鉱物相に変化は見られなかった。

FAC15 ペースト硬化体、20°C、4y の試料で同定された鉱物は、モノサルフェート、ポルトランダイト、C-S-H、クオーツであった。1y の試料に比較してポルトランダイトのピーク強度が小さくなっていた。ポルトランダイトのピークが小さくなっていることから、ポゾラン反応あるいはシリカ微粉との反応が進んでいることが考えられる。50°C、4y の試料では、C-S-H、カトアイトおよびクオーツが同定された。1y の試料と同様な鉱物が確認され、ほとんど変化は見られなかった。80°C の試料も同様に、C-S-H、カトアイト、クオーツが同定され、4y 試料からの変化は見られなかった。

FAC30 ペースト硬化体、20°C、4y の試料は、モノサルフェート、C-S-H、クオーツが同定された。FAC30 では、1y の試料において既にポルトランダイトは検出されておらず、1y からの変化は見られなかった。50°C、4y の試料では、C-S-H、モノサルフェート、カトアイト、クオーツが同定された。1y の試料との変化は見られなかった。80°C、4y の試料では、C-S-H、カトアイトおよびクオーツが同定された。図 2.1-76 に、図 2.1-75 と同様な図を $2\theta=35^\circ$ までを拡大した XRD パターンを示す。ピーク強度は小さいが、 $2\theta=7.8^\circ$ にトバモライトのピークが確認された。また、 $2\theta=29^\circ$ の C-S-H のピークには、 $2\theta=29.9^\circ$ 付近にショルダーピークが見られ、トバモライトの変化が確認できたものと判断された。しかし、1y 試料と 4y 試料では変化がほとんど見られず、トバモライトへと結晶が成長している状況は確認されなかった。

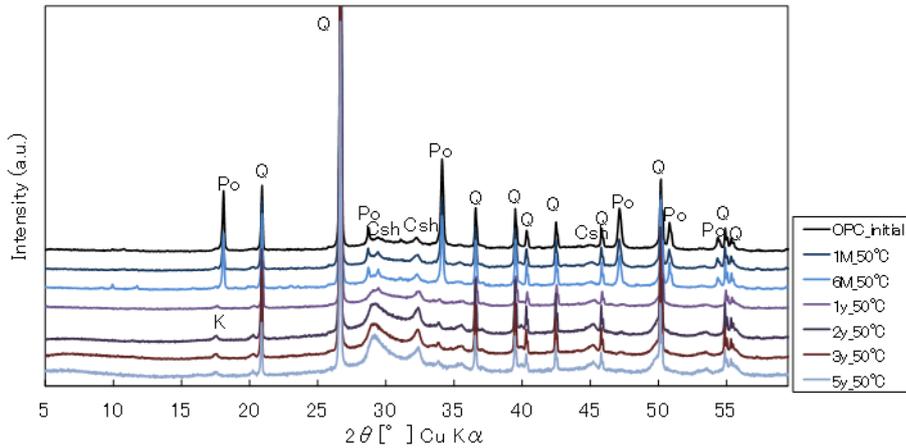
SC10 ペースト硬化体、20°C、4y 試料では、C-S-H とクオーツのみが同定され、1y で確認されたポルトランダイトは同定されなかった。ポゾラン反応が進んだものと考えられる。50°C の場合、1y の試料で既にポルトランダイトは確認されておらず、4y の試料で同定された鉱物は、1y の試料と同様に C-S-H、カトアイト、クオーツであった。80°C、4y の試料においても 1y の試料と比較して変化は見られず、C-S-H とクオーツのみが確認された。

Q:Quartz, Po:Portlandite, Csh:C-S-H, CC:Calcite AFm: Monosulfate, Mc: Monocarbonate



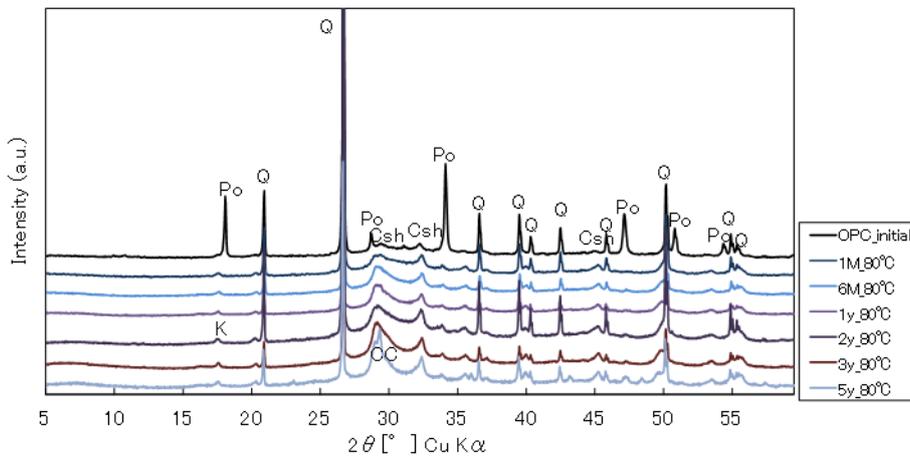
(a) 20°C

Q:Quartz, Po:Portlandite, Csh:C-S-H, CC:Calcite K:Katoite



(b) 50°C

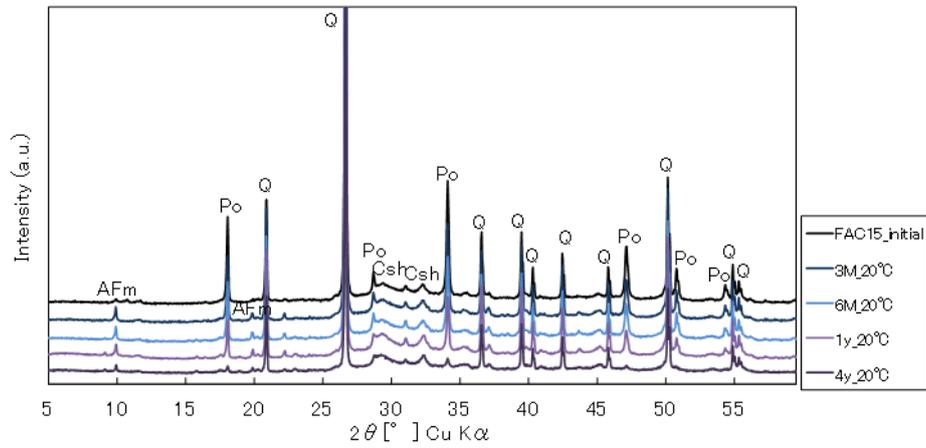
Q:Quartz, Po:Portlandite, Csh:C-S-H, CC:Calcite K:Katoite



(c) 80°C

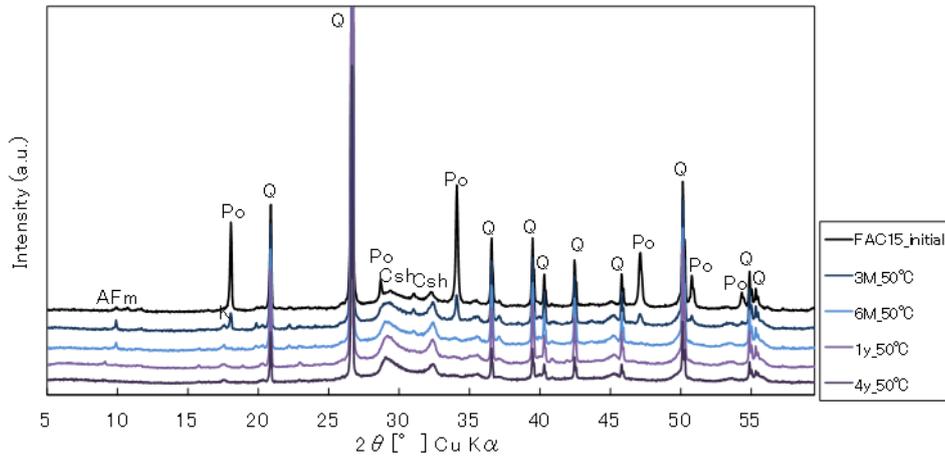
図 2.1-73 OPC ペースト硬化体の XRD 測定結果

Q:Quartz, Po:Portlandite, Csh:C-S-H, AFm: Monosulfate



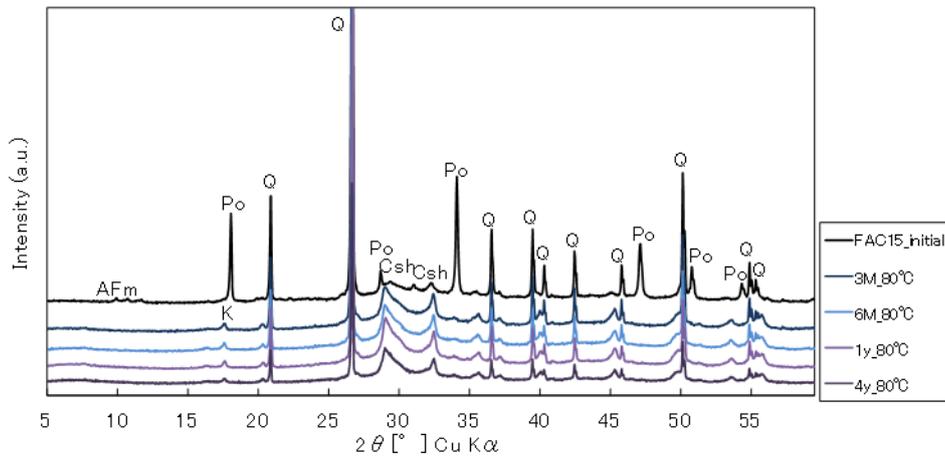
(a) 20°C

Q:Quartz, Po:Portlandite, Csh:C-S-H, AFm: Monosulfate, K: Katoite



(b) 50°C

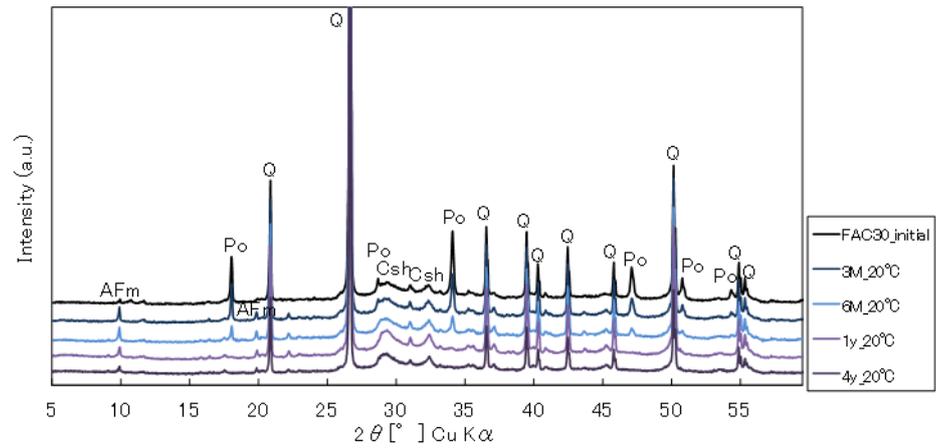
Q:Quartz, Po:Portlandite, Csh:C-S-H, AFm: Monosulfate, K: Katoite



(c) 80°C

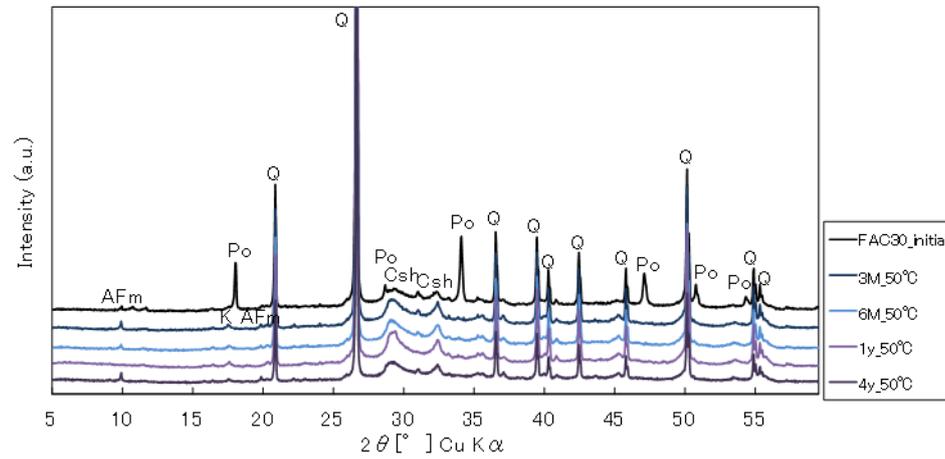
図 2.1-74 FAC15 ペースト硬化体の XRD 測定結果

Q:Quartz, Po:Portlandite, Csh:C-S-H, AFm: Monosulfate



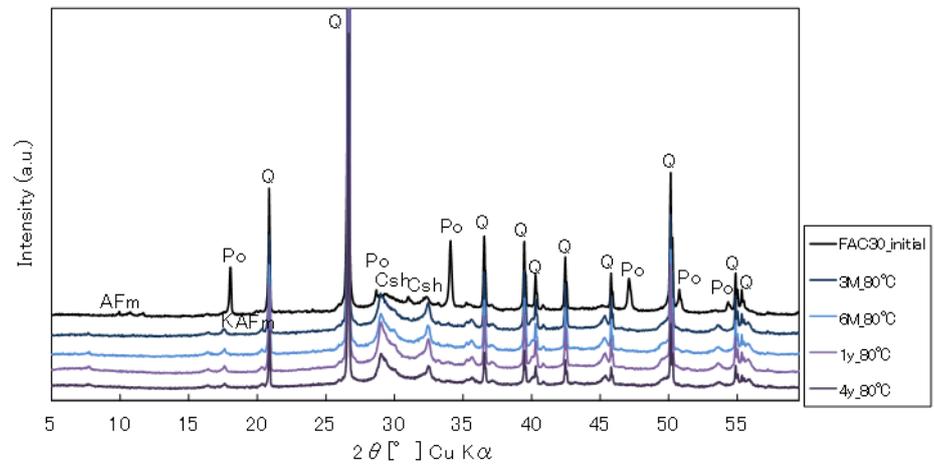
(a) 20°C

Q:Quartz, Po:Portlandite, Csh:C-S-H, AFm: Monosulfate



(b) 50°C

Q:Quartz, Po:Portlandite, Csh:C-S-H, AFm: Monosulfate, K:Katoite



(c) 80°C

図 2.1-75 FAC30 ペースト硬化体の XRD 測定結果

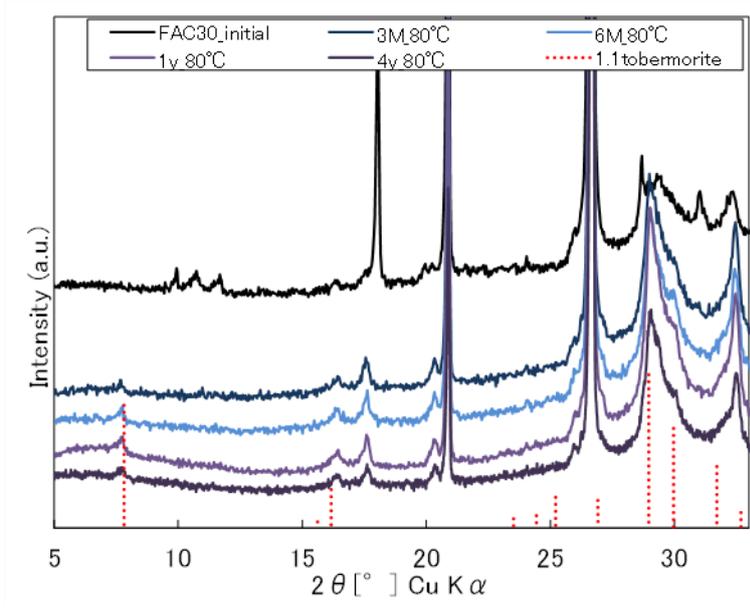
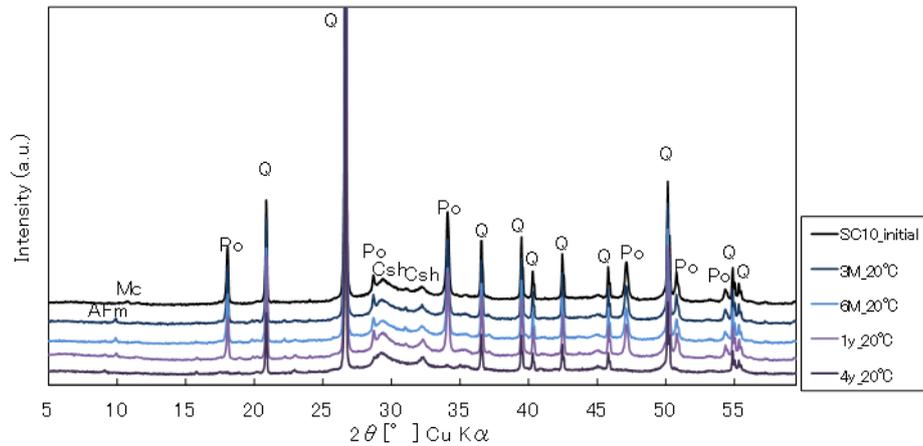


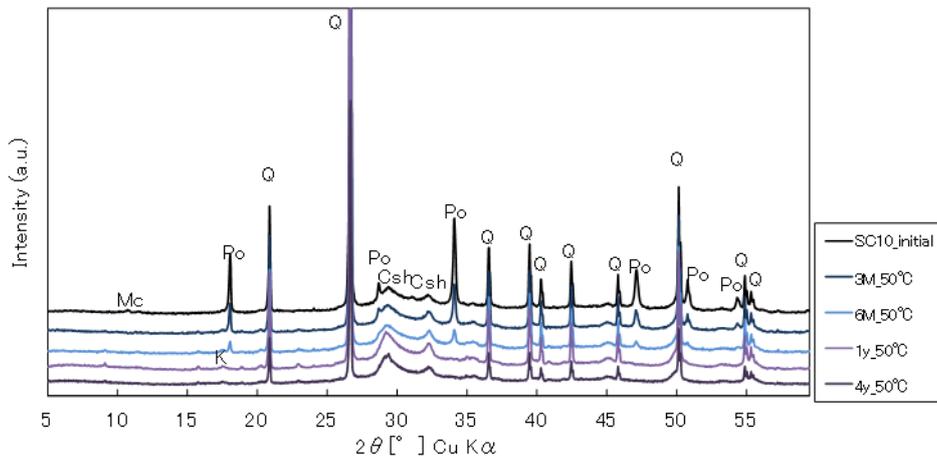
図 2.1-76 FAC30 硬化体ペーストの $2\theta = 5^\circ \sim 35^\circ$ の XRD パターン

Q:Quartz, Po:Portlandite, Csh:C-S-H, AFm:Monosulfate, Mc:Monocarbonate



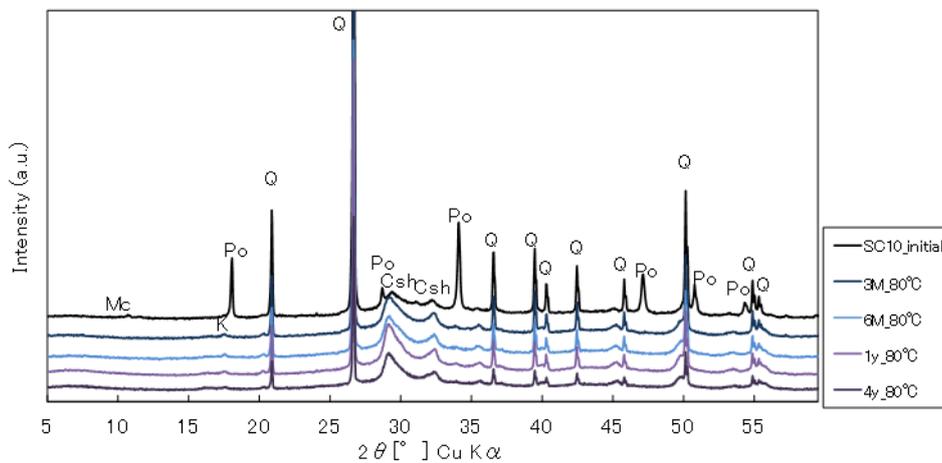
(a) 20°C

Q:Quartz, Po:Portlandite, Csh:C-S-H, Mc:Monocarbonate, K:Katoite



(b) 50°C

Q:Quartz, Po:Portlandite, Csh:C-S-H, Mc:Monocarbonate, K:Katoite



(c) 80°C

図 2.1-77 SC10 ペースト硬化体の XRD 測定結果

(b) TG-DTA

TG-DTA の測定結果を表 2.1-59 に示す。

$\text{Ca}(\text{OH})_2$ の含有が確認された 20°C の試料の $\text{Ca}(\text{OH})_2$ の経時変化を図 2.1-78 に示す。 20°C 試料において、材齢の経過とともにいずれのセメントにおいても $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 量が減少していることが分かった。 20°C の条件においても $\text{Ca}(\text{OH})_2$ と混合したシリカ微粉が徐々に反応し、 $\text{Ca}(\text{OH})_2$ が消費されているものと判断される。

表 2.1-59 TG-DTA 測定結果

セメント	温度 材齢	結合水量(%) 100-1000°C	$\text{Ca}(\text{OH})_2$ 量 (%)	CaCO_3 量 (%)
OPC	20°C 5y	11.7	1.8	-
	50°C 5y	11.6	—	-
	80°C 5y	12.8	—	-
FAC15	20°C 4y	11.2	2.1	-
	50°C 4y	11.2	-	-
	80°C 4y	11.3	-	-
FAC30	20°C 4y	10.6	-	-
	50°C 4y	9.9	-	-
	80°C 4y	10.2	-	-
SC10	20°C 4y	11.4	-	-
	50°C 4y	11.4	-	-
	80°C 4y	11.3	-	-

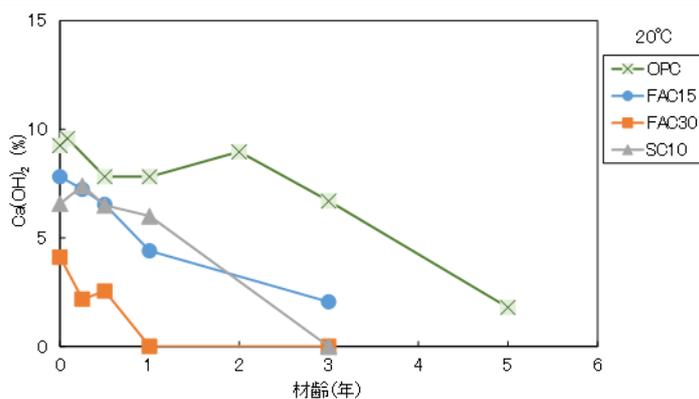


図 2.1-78 20°C 試料の $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 含有量の経時変化

(c) SEMによる水和物の形態観察

20°C、OPC ペースト硬化体の C-S-H は針状結晶であった。未反応のシリカ微粉の結晶も多く確認された。50°C、OPC ペースト硬化体では、未反応のシリカ微粉が多く確認された。C-S-H の形態も 20°C と同様に針状であるものが多いが一部、板状結晶とは言えないが箔状に見られる結晶も存在した。80°C、OPC ペースト硬化体では、50°C よりも大きな板状の結晶が見られた。未反応のシリカ微粉も全体的に少なかった。前述の XRD の結果では、トバモライトのピークは確認できないものの、C-S-H の形態は比較的大きく、トバモライトに類似する結晶となり、状態が変化していることが確認された。

20°C、FAC15 ペースト硬化体では、フライアッシュは反応が進んでいる粒子が多かった。シリカ微粉は、OPC、20°C の場合と同様に未反応で残存しているものが多かった。C-S-H の形態についても不定形のものも多く見られた。50°C、FAC15 ペースト硬化体においても 20°C の場合と同様に、フライアッシュの粒子は比較的反応が進んでいるものも多く、シリカ微粉については未反応のものが残存していた。C-S-H の形態については、20°C の場合より箔状のものも多く確認された。80°C、FAC15 ペースト硬化体では、数 μm 程度の板状結晶も見られた。XRD の測定結果では、明確なトバモライトのピークは確認されなかったものの、結晶化としては進んでいるものと判断される。

20°C、FAC30 ペースト硬化体では、フライアッシュは反応している粒子が多いが、シリカ微粉末については未反応のものも多く見られた。C-S-H の形態は不定形～針状あるいは蜂の巣状であった。50°C、FAC30 ペースト硬化体では、未反応のシリカ微粉が多く見られた。50°C の場合、不定形～針状の C-S-H が多くみられるものの、数 μm の大きな板状の C-S-H も確認された。80°C、FAC30 ペースト硬化体では、未反応のシリカ微粉は 20°C および 50°C の場合よりも少なかった。XRD の結果からもトバモライトのピークが確認されたように、C-S-H の形態においても板状結晶が多く確認された。

20°C、SC10 ペースト硬化体では、 $\text{Ca}(\text{OH})_2$ については確認されず、未反応のシリカ微粉末が多く確認された。C-S-H の形態は他の 20°C の試料と同様に不定形～針状であった。50°C、SC10 ペーストの硬化体では、1 μm 程度と小さいものの一部板状結晶が確認された。80°C の場合、50°C よりも大きい板状結晶が確認された。

以上より、80°C のペースト硬化体では、OPC、FAC15、FAC30 および SC10 いずれの試料も一部、板状の C-S-H が確認された。XRD の結果では、明確にトバモライトのピークは検出されていないが、C-S-H はトバモライトに類似する板状型の形態となり、20°C と比較して C-S-H の形態が変化していることが確認された。しかし、板状結晶の大きさは大きくても数 μm 程度であり、以前の結果と比較すると大きな変化は見られず、XRD 測定でトバモライトのピークが確認できるほどの明確な結晶は生成していないものと判断される。

(d) EPMAによる C-S-H の C/S

20°C、OPC ペースト硬化体の場合、3 年の試料までは変化が見られないが、本年度測定した試料では若干変化が見られ、C/S=1.8 付近と C/S=0.7 付近のピクセル数が多くなっていた。C-S-H の C/S に相当するピクセル数が増加していることから、20°C 環境においてもシリカ微粉と $\text{Ca}(\text{OH})_2$ が反応し、C-S-H が生成していることが考えられる。長期間供用されるコンクリートでは、特に高温環境下でなくてもシリカ組成の骨材とセメント水和物の反応が進行し、C-S-H が生成していくことが考えられる。放射性廃棄物の処分システムにおける人工バリア材の長期評価においては、この現象を考慮する必要があると考えられる。50°C の場合、C/S=1.0 を最大値とした正規分布の形状が見られた。1 年、3 年、5 年と時間の経過とともに C/S が 0.9～1.2 のピクセル

数が増加し、 $C/S=1.0$ 前後の $C\text{-}S\text{-}H$ が増加していた。 $Ca(OH)_2$ とシリカ微粉の反応が継続し、 $C\text{-}S\text{-}H$ の割合が多くなっているものと考えられる。 $80^\circ C$ の 5 年試料の場合は、 C/S 分布においてほぼ全体的に $C/S=0.8$ 付近の青色のとなっていた。ヒストグラムで整理した結果からも $C/S=0.8$ のピクセル数が 3 年の試料よりもさらに増加しており、シリカ微粉の反応がかなり進んでいることが分かった。3 年の試料では $C/S=0.9$ が最大値であるが、5 年の試料では $C/S=0.8$ が最大値となり、 $C\text{-}S\text{-}H$ の C/S が低下する傾向が確認された。これまでの結果より、トバモライト組成の C/S よりも低い $C\text{-}S\text{-}H$ では、トバモライトへの変化が生じにくいことが分かっている。この試料がトバモライト組成よりも低い C/S の $C\text{-}S\text{-}H$ が多くなっている状態であると考え、トバモライトへの変化を確認することは難しいと推測される。

$20^\circ C$ 、 $FAC15$ ペースト硬化体では、初期試料からの明確な変化は見られなかった。 $50^\circ C$ の場合は、 $C/S=1.0$ に最大値が現れ、 $80^\circ C$ では、 $C/S=0.8$ に最大値が見られた。 C/S の分布からも $80^\circ C$ においては視野全体が青色を呈しており、 $C\text{-}S\text{-}H$ に相当するピクセルがほとんどを占めていることが分かる。 $50^\circ C$ 、 $80^\circ C$ の試料ともに 3 年の試料よりは $C\text{-}S\text{-}H$ に相当する C/S のピクセル数が増加していることから $C\text{-}S\text{-}H$ の生成は進んでいることが分かった。

$FAC30$ ペースト硬化体においても、 $20^\circ C$ の場合では初期試料との明確な差異は見られなかった。 $50^\circ C$ の場合では $C/S=0.8$ に最大値が見られ、 $80^\circ C$ の場合では $C/S=0.7$ に最大値が見られた。 $FAC30$ ペースト硬化体においても、 $FAC15$ の場合と同様に 1 年の試料よりもさらに $C\text{-}S\text{-}H$ の生成は進んでいることが分かった。 XRD においてトバモライトのピークが確認された $80^\circ C$ 、 $FAC30$ ペースト硬化体の場合、 C/S の最大値が $C/S=0.7$ とトバモライト組成よりも低い値を示しているが、これは、未反応のフライアッシュの影響により低い値となっていことが考えられる。

$SC10$ ペースト硬化体の場合も、 $FAC15$ および $FAC30$ と同様に $20^\circ C$ では $C\text{-}S\text{-}H$ の C/S の相当する値に最大値は明確には見られなかった。 $50^\circ C$ の場合、1 年では明確な最大値は認められなかったが、本年度測定 of 4 年の試料において $C/S=1.0$ の最大値が確認された。 $80^\circ C$ の場合では、 $C/S=0.8$ に最大値が見られ、 $C\text{-}S\text{-}H$ への反応が進んでいることが分かった。

以上より、 OPC 硬化体では、 $20^\circ C$ においてもシリカ微粉と $Ca(OH)_2$ が反応していると推測された。 $50^\circ C$ および $80^\circ C$ の試料では、 OPC 、 $FAC15$ 、 $FAC30$ および $SC10$ のいずれの試料も $C\text{-}S\text{-}H$ が増加していることが分かった。また、 $80^\circ C$ の試料は、 $C\text{-}S\text{-}H$ の C/S が 0.8 とトバモライト組成よりも低くなる傾向が見られた。本試験においては、 $C\text{-}S\text{-}H$ がトバモライトへと変化した場合の物性値への影響を検討するため、骨材の代わりに Si 源として反応しやすいシリカ微粉を用いて硬化体を作製し、トバモライトの生成を確認した時点で物性評価を実施することを目的としている。 $EPMA$ の結果より、現状の試料では、シリカ微粉はセメント水和物と反応しているものの、トバモライトへの結晶化は不十分の状態です。低 C/S の $C\text{-}S\text{-}H$ に変化していることが推測された。

(e) 空隙率及び空隙径分布

ポロシメータの測定結果を表 2.1-60 に示す。

$20^\circ C$ 、 OPC ペースト硬化体の場合、5 年の試料においても空隙径分布に経時変化は見られなかった。 $50^\circ C$ の場合は、時間の経過とともに孔径の小さい空隙へと移行した。 $C\text{-}S\text{-}H$ の生成により大きな空隙径が減少し、小さい空隙が増加しているものと考えられる。 $80^\circ C$ の場合、本年度測定試料においては、空隙率が増加し、空隙径分布においても 3 年試料よりも大きな空隙径の空隙が増加していた。 $80^\circ C$ 、 OPC ペースト硬化体試料は、養生水から上げた状態で数 m 程度の塊に崩れてしまう状態であった。今回の結果においては、細孔に水銀を満たした際に試料が崩れたことにより、正確な測定結果となっていない可能性がある。

20℃、FAC15 ペースト硬化体では、時間の経過とともに大きな空隙径が減少し、0.01 μm 以下の小さな空隙径の増加が見られた。水和に進行により微細な空隙が増加したものと考えられる。50℃の場合では、1年の試料に比べて0.01 μm 程度の孔径を持つ空隙が増加していた。80℃の場合では、6ヵ月、1年の試料の空隙径分布とほぼ同様であった。

20℃、FAC30 ペースト硬化体の場合、20℃、FAC15 に試料と同様に大きな空隙の減少と0.01 μm 以下の空隙の増加が見られた。50℃および80℃の場合は、1年の試料と比較するとその差は小さいが小さい孔径へ移行していた。

20℃、SC10 ペースト硬化体の場合、空隙径分布においては初期試料を含めすべての試料で際が見られなかった。前述の結果より、20℃においても水和反応は進んでいることが確認されていることから、空隙径分布の測定結果としてはその差が現われなかったものと思われる。50℃の場合では、0.03 μm 程度の孔径が0.01 μm へと移行していた。80℃の場合では、1年の試料とほとんど変わらない結果となった。

表 2.1-60 ポロシメータ測定結果

試料	温度	期間(y)	空隙率	かさ密度	見かけ密度	平均径
			(%)	(g/cm ³)	(g/cm ³)	(μm)
OPC	20℃	5y	40.5	1.34	2.26	0.012
	50℃		31.8	1.37	2.01	0.006
	80℃		40.5	1.34	2.26	0.012
FAC15	20℃	4y	42.9	1.29	2.27	0.011
	50℃		36.2	1.35	2.11	0.009
	80℃		30.4	1.35	1.94	0.006
FAC30	20℃	4y	45.5	1.24	2.28	0.010
	50℃		40.6	1.26	2.12	0.009
	80℃		36.6	1.31	2.07	0.008
SC10	20℃	4y	36.6	1.36	2.15	0.009
	50℃		32.4	1.37	2.03	0.007
	80℃		26.1	1.37	1.86	0.005

3) 定温度試験試料の加速試験

継続して実施している定温度試験試料のトバモライトへの変化を見極めるため、反応を加速する試験を行い、XRDにより鉱物変化を確認した。反応性を高めるために、反応表面積を大きくする目的で試料を微粉碎し、温度環境を95℃と高い条件下とした。

① 試験方法

前項で測定した定温度試験試料を用いて加速試験実施した。試験条件を表 4.1-8 に示す。対象試料として用いたペースト硬化体は、20℃及び80℃温度条件の試料を用いた。ペースト硬化体を90μm以下の微粉碎し、この試料に対して25倍量のイオン交換水に浸漬し、95℃条件下で反応させた。固液分離後、XRDにて鉱物を同定した。

表 2.1-61 ペースト硬化体を用いた加速試験条件

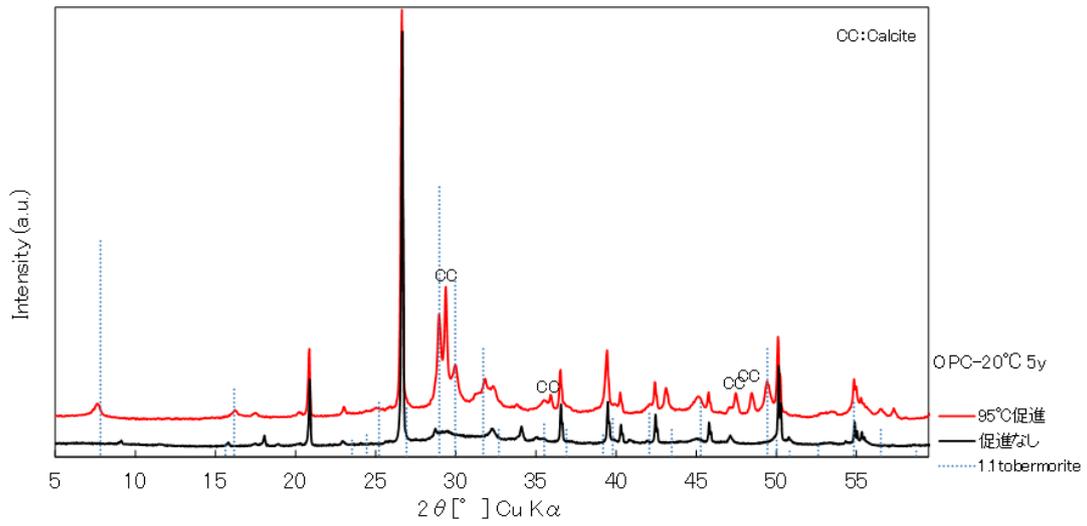
項目	条件
使用した試料	OPC ペースト硬化体-5y (20℃/80℃)
	FAC15 ペースト硬化体-4y (20℃/80℃)
	FAC30 ペースト硬化体-4y (20℃/80℃)
	SC10 ペースト硬化体-4y (20℃/80℃)
反応条件	ペースト硬化体を 90 μm 以下に微粉碎 水/粉体質量比=25 温度：95℃ 反応期間：10 日間

- ・ XRD 装置：X'Pert PRO MPD (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 $2\theta = 5\sim 60^\circ$, スリットソーラスリット 0.04rad, 発散スリット： 1° , 散乱防止スリット： 2° , マスク 15mm

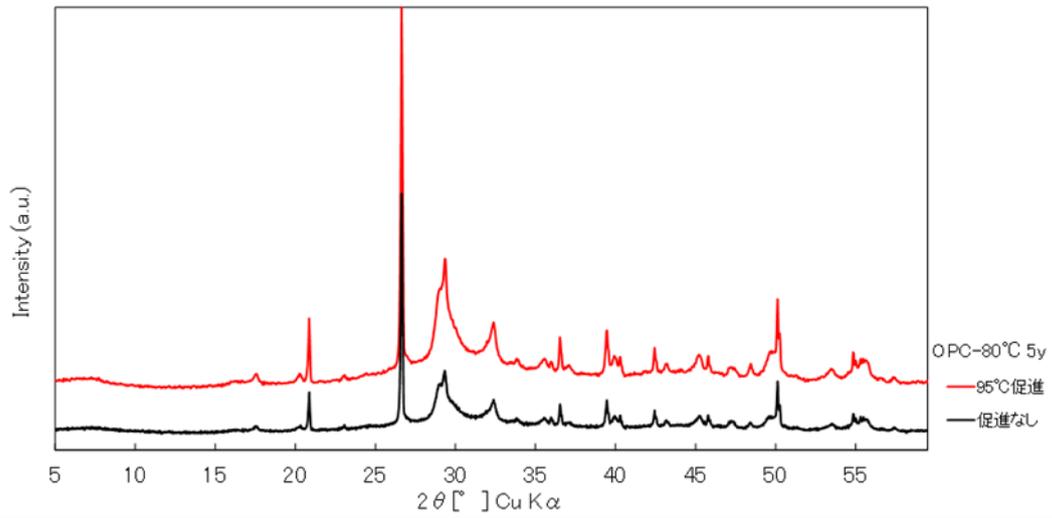
② 結果

加速試験による XRD 測定結果を試験前試料の XRD 結果とともに図 2.1-79～図 2.1-82 に示す。

OPC、FAC15、FAC30 および SC10 とともに同様な結果が得られた。80℃で定温度試験を実施していた試料は、粉碎し、95℃の温度環境下においてもトバモライトのピークが確認されず、試験前試料の XRD パターンと同一であった。一方、20℃条件で定温度試験を実施していた試料については、微粉碎後、95℃環境条件にすることで、トバモライトのピークが確認された。これまでの定温度試験の結果より、C-S-H を経由してトバモライトへと変化するが、トバモライト組成よりも低い C/S の C-S-H では、トバモライトへ変化しないことも確認している (原環センター、2017)。また、水熱合成によるトバモライトの生成機構においては、液相中の C/S が高く維持されていると固相の C-S-H はトバモライトへの転化が促進されると報告されている (光田, 1982)。20℃、OPC および FAC15 ペースト硬化体では $\text{Ca}(\text{OH})_2$ が残存しており、液相の C/S が 80℃の試料よりも高く維持されていた可能性が考えられる。また、20℃、FAC30 および SC10 のペースト硬化体においても、C/S の高い C-S-H により、液相 C/S が高く維持された状態であった可能性が考えられる。一方、80℃条件における試料は、既に生成した C-S-H がトバモライト組成の C/S 以下に低下しているため、さらなる高温環境下においてもトバモライトへの変化が見られなかったと推測される。つまり、80℃の定温度試験試料においては、これ以上のトバモライトへの変化は期待できないものと判断される。しかしながら、80℃環境の定温度試験試料においては、SEM 像や EPMA の結果より、20℃環境下で生成している C-S-H より C/S が低く、異なった状態であることが確認されている。モルタル試料については物性値の評価を行い、温度条件による影響を検討する必要がある。またペースト試料については、C-S-H の状態が異なることから吸着試験等の試料として活用できるものと考えられる。

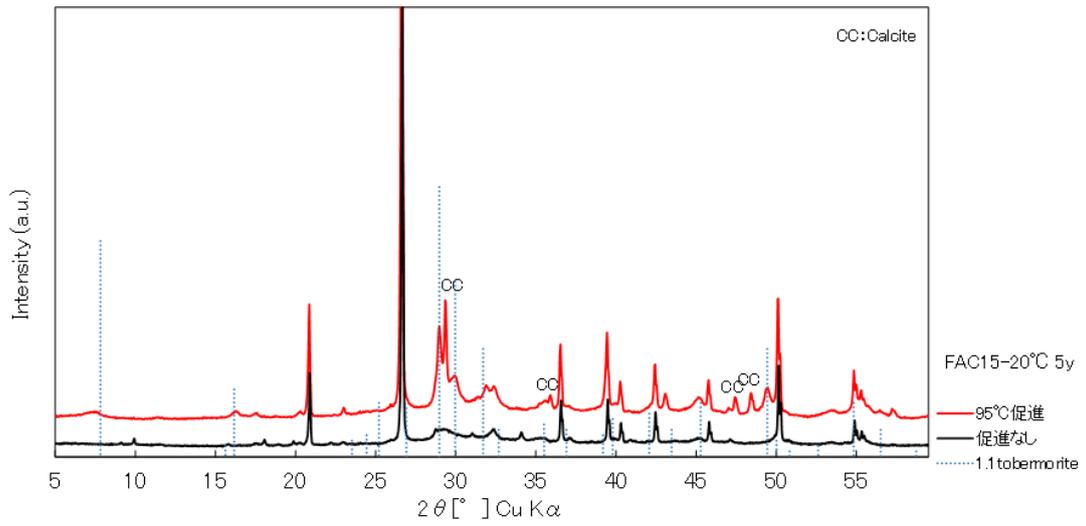


(a) 20°C、OPC ペースト硬化体

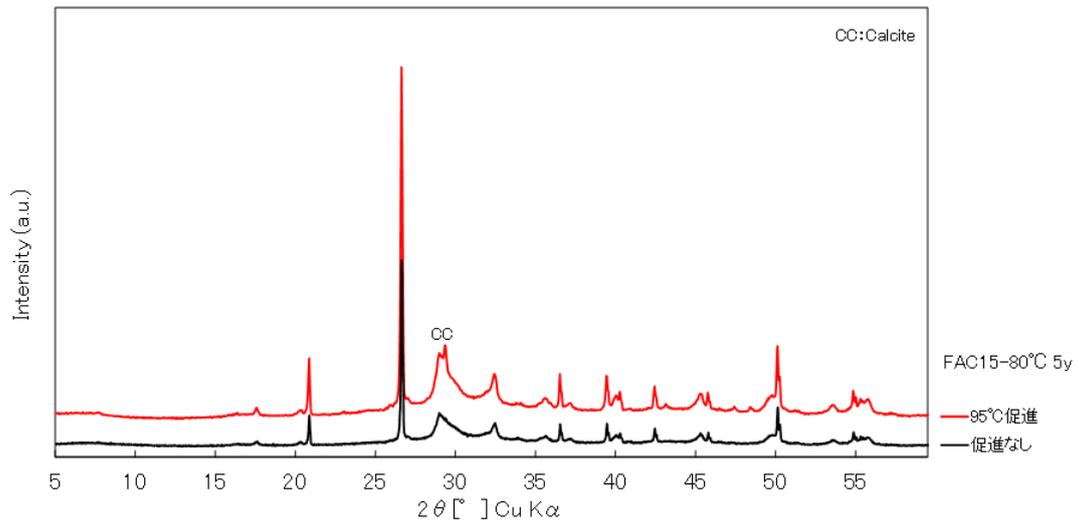


(b) 80°C、OPC ペースト硬化体

図 2.1-79 加速試験の XRD 結果 (OPC ペースト硬化体)

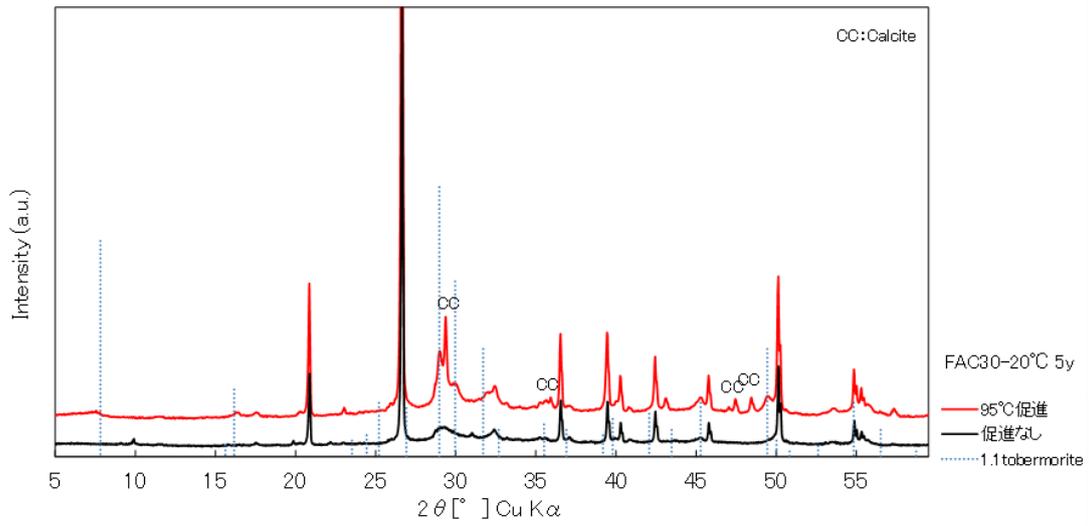


(a) 20°C、FAC15 ペースト硬化体

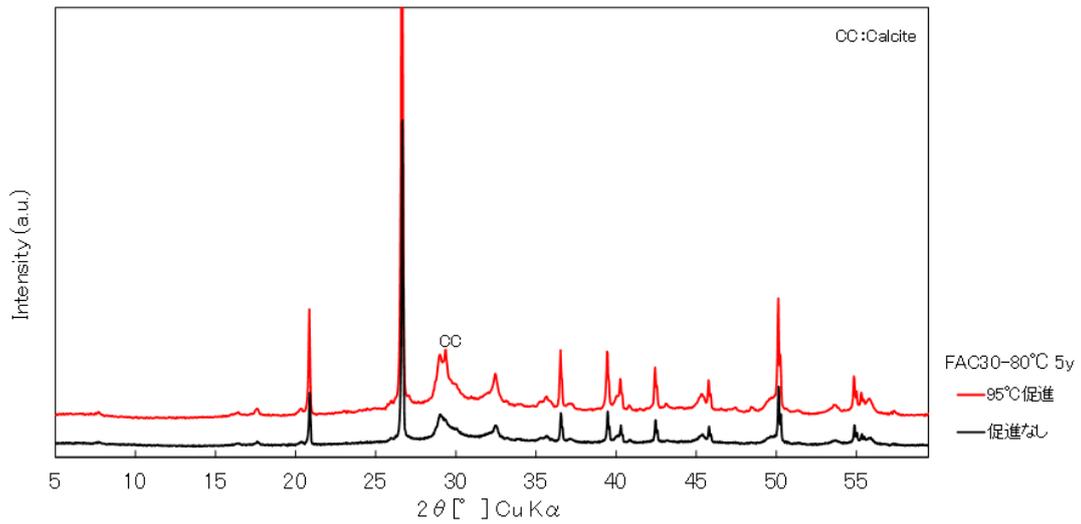


(b) 80°C、FAC15 ペースト硬化体

図 2.1-80 加速試験の XRD 結果 (FAC15 ペースト硬化体)

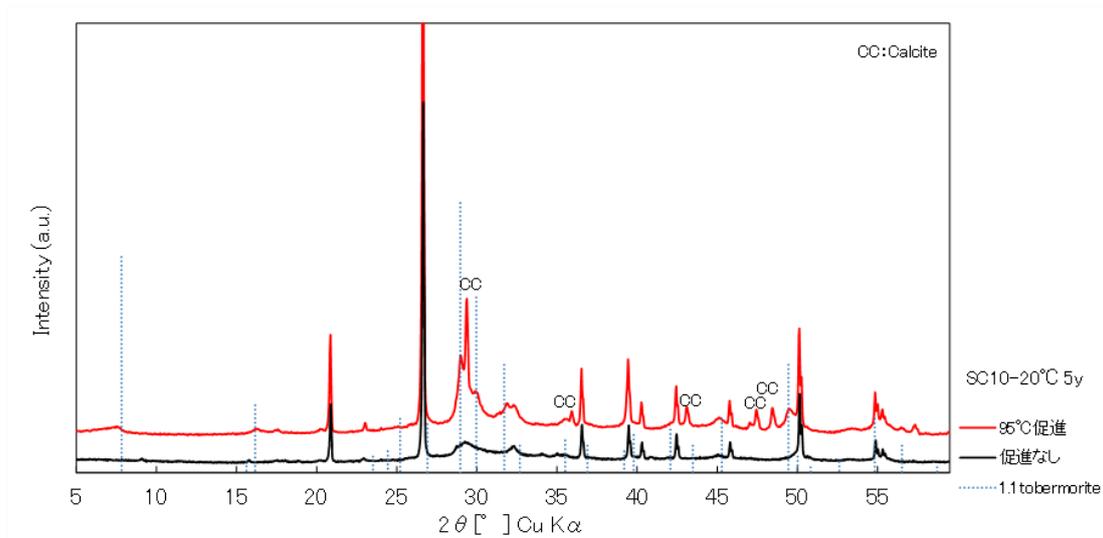


(a) 20°C、FAC30 ペースト硬化体

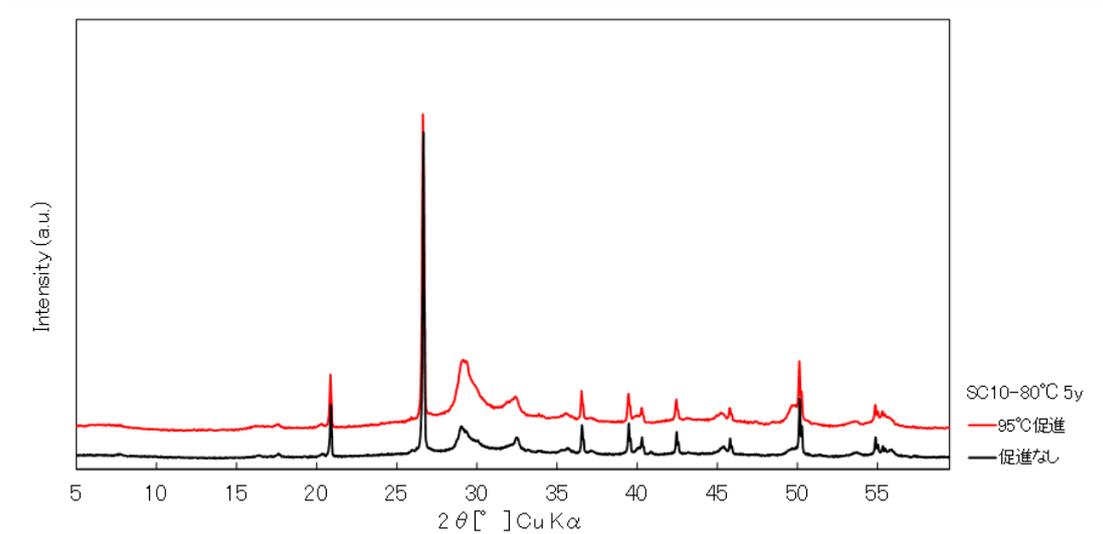


(b) 80°C、FAC30 ペースト硬化体

図 2.1-81 加速試験の XRD 結果 (FAC30 ペースト硬化体)



(a) 20°C、SC10 ペースト硬化体



(b) 80°C、SC10 ペースト硬化体

図 2.1-82 加速試験のXRD結果 (SC10 ペースト硬化体)

4) まとめ

セメント系材料の機械的特性およ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、20°C、50°C、80°C環境下に置いたバルク試験体の結晶化による特性変化を検討した。

- 80°C、OPC モルタル試料では、長さ変化は小さくなっているが、20°Cおよび50°Cに比較して収縮していることが分かった。FAC15、FAC30、SC10 の80°Cのモルタル試料では、収縮が継続していた。変化は継続していることが確認された。
- 20°C、OPC ペースト硬化体試料においては、Ca(OH)₂が減少していることから、セメント水和物とシリカ微粉末は継続して反応していることがわかった。間隙水が存在する状態のコンクリートでは、骨材とセメント水和物の反応は、20°C環境においても継続して生じることが示唆された。

- ・本年度の XRD 測定結果より、OPC、FAC15 および SC10 の 80℃の定温度試験試料においては、トバモライトの生成は確認されなかった。FAC30 の試料では、トバモライトのピークは検出されたものの、時間経過とともに結晶化が進んでいる傾向は確認されなかった。
- ・定温度試験を実施している 80℃の試料においては、EPMA の結果より、C-S-H の C/S が低下しているものと推察された。シリカ微粉末とセメント水和物の反応は進んでいるものの、トバモライトへの変化よりも、C-S-H の C/S 低下、あるいは低 C/S の C-S-H の生成が生じているものと考えられる。

また、本年度は継続している定温度試験試料が、トバモライトへ変化するかどうか判断するため、20℃および 80℃の定温度試験試料を用いて微粉碎、95℃環境下で反応させる加速試験を実施した。

- ・80℃の定温度試験試料については、加速試験試験前と試験後の XRD に変化は見られなかった。一方、20℃の定温度試験試料については、トバモライトの生成が確認された。80℃環境の試料については、生成している C-S-H が低 C/S となり、トバモライトへと変化しにくい C-S-H となっている可能性が考えられる。

定温度試験においては、セメント水和物とシリカの反応を促進させる目的で、シリカ微粉末を混合した試料を作製し、定温度試験に供した。粉末試料を用いた定温度試験においては、生成した C-S-H が速やかにトバモライトへと変化するが、バルク試験体では、粉末試料の試験とは異なり、トバモライトへの変化は確認されなかった。さらに、定温度試験試料を用いて加速試験を実施した結果、トバモライトへの変化は確認されなかった。本試料においては、トバモライトへの変化しにくい C-S-H が生成しているものと考えられる。しかしながら、この定温度試験で生成している C-S-H は C/S=0.8 程度とトバモライト組成に近い。SEM 像の結果からも 20℃の C-S-H の形態とは異なることが確認されている。XRD によるトバモライトのピークは確認されにないが、状態は十分異なることからモルタル試料においては物性評価を実施し、状態の違いを確認することが必要である。また、ペースト試料においても、50℃、80℃と温度影響を受けた C-S-H は 20℃環境下の C-S-H とは明らかに形態が異なる。Ochs ら (Ochs et al., 2016) は、結晶性の C-S-H と C-A-S-H では Cs の収着量が異なることを示していることから、定温度試験試料を用いて吸着特性等の評価を行うことが望ましいと考えられる。

(2) セメント系材料の熱変質による物性値への影響

1) 廃棄体パッケージ内充填材への熱影響

廃棄体パッケージ内部においては、廃棄体の発熱による内部充填材への熱影響が想定され、グループ 2 やグループ 4H では比較的発熱量が高いものが含まれている。また、廃棄体パッケージの製作においては、鋼製容器の上蓋は溶接によって外側容器と接合され、この際、溶接工程において発生する熱によってパッケージ内充填材の一部は 400℃近くに達する可能性がある (原環センター, 2019)。溶接後応力除去焼きなましを実施する場合、595℃以上で熱処理されるため (原環センター, 2020)、パッケージ内充填材も一定時間にわたって高温履歴を受けることが考えられる。内部充填材の物性については、高温に曝された場合の熱変質による変化を見込んでおく必要がある。そこで本項では、パッケージ内充填材の熱変質による特性変化を推定するために、セメント系材料の温度影響による機械的特性および化学的特性変化について既往の研究より取りまとめた。

2) セメント系材料の温度影響による化学的变化

コンクリートが高温影響を受けた場合、セメント水和物の化学的变化、骨材とセメント組織の熱膨張・収縮挙動の相違、石英の相転移に起因する骨材の膨張などが要因となり強度低下等の機

械的特性が変化する。ここでは、ポルトランドセメントを使用したコンクリートの熱による特性変化についてまとめた。

① セメント水和物

セメントペーストの室温から 1000°C までの TG-DTA 曲線を図 2.1-83 に示す。

セメントペーストの熱による化学変化は以下のようにまとめられる。

- ・ 100°C 以下では、自由水の脱水が生じる。
- ・ 70°C～450°C では、エトリンガイト、モノサルフェート等の AFm 相および C-S-H からの結晶水の脱水が生じる。
- ・ 450～500°C では次の式に示す $\text{Ca}(\text{OH})_2$ の分解が生じる。 $\text{Ca}(\text{OH})_2 \rightarrow \text{CaO} + \text{H}_2\text{O}$
- ・ 600～700°C では、では次に示す CaCO_3 の分解が生じる。 $\text{CaCO}_3 \rightarrow \text{CaO} + \text{CO}_2$
- ・ 750～900°C では C-S-H が $\beta\text{-C}_2\text{S}$ やワラストナイト等へ結晶化する。

100°C 以下では、エトリンガイトの結晶水の一部が脱水するものの、主に自由水の蒸発が生じている。自由水の脱水については、水和物が分解するわけではないので水和組織としては変化しないものと考えられる。70°C～450°C の温度領域においては、エトリンガイト、モノサルフェートの結晶水が消失し、非晶質化する。また、同時に C-S-H の脱水も生じている。図 2.1-83 に示したようにセメントペーストにおいては、1000°C までに 30% 程度の重量減少が生じるが、約 400°C までに約 20% の減少し、この温度領域までにセメント水和物の大部分の結晶水が分解していることから、常温時の水和組織とはかなり異なっている。さらに、高温になると $\text{Ca}(\text{OH})_2$ の分解が生じ、600°C 程度までにセメントペーストの水分がほとんど消失する。一旦結晶水が消失した場合にも、冷却時に水分がある場合には再水和が生じるが、CaO の再水和による膨張など、必ずしも強度増加の方向に働くとは言えない。さらに高温領域では、 CaCO_3 の分解による脱炭酸、C-S-H の結晶化が生じる。C-S-H が分解し生じた $\beta\text{-C}_2\text{S}$ は、水和活性が低いため、後に補水した場合にも再水和等の相変化は生じないものと考えられる。

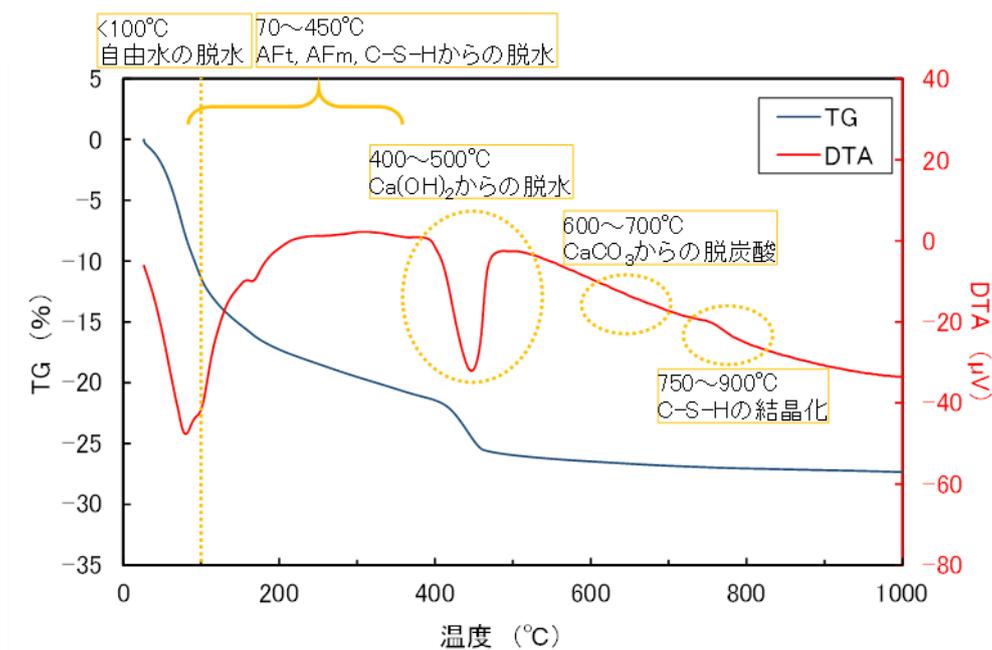


図 2.1-83 セメントペーストの TG-DTA 曲線

② 骨材

一般的に、花崗岩のような珪質骨材でできたコンクリートは、石灰石骨材を使用したコンクリートと比較して高温時の強度低下が大きい。これは、珪質骨材は、石灰石系骨材より低い温度で変化が生じるためと考えられる。珪質骨材の場合、主要鉱物である石英 (SiO_2) は 573°C において $\beta\text{-SiO}_2$ へと変化し、この相転移に起因する骨材の体積膨張が起こり、コンクリートの劣化を生じる (W. Lin, et al., 1996)。石灰石系骨材では、 750°C で方解石の分解が生じることから、この温度以上では、骨材は破壊することとなる。石灰石骨材を用いたコンクリートは、高温時に爆裂が発生しやすいとの報告 (Li et al., 2011) は、方解石の脱炭酸によるものと考えられる。また、このように高温時には骨材自体の変化が生じるが、それよりも低い温度においても骨材とセメント組織の熱膨張・収縮挙動の相違によりコンクリートの劣化が生じる。

3) 温度領域ごとのセメント系材料の熱変質の影響

平成 30 年度に実施した高温加熱によるコンクリート特性の変化についての調査を中心に温度領域ごとの熱影響について以下に整理した。

○常温～ 100°C

セメントの化学的変化として、エトリンガイト等のアルミネート水和物の結晶水の一部も脱水が生じるが、主に自由水が外部へ逸脱する温度領域である。コンクリートの圧縮強度については、 300°C までほとんど影響が見られないことから、この温度領域では圧縮強度への影響は小さい。高温環境による水和反応の促進によりわずかに強度が増加する傾向も見られる。曲げ強度、引張強度、ヤング係数についてもこの温度領域では同様な傾向であるが、圧縮強度よりも強度低下する報告も見られる。いずれにせよ自由水の蒸発のみならば、大きな強度低下につながらないと考えられる。

○ $100\sim 550^\circ\text{C}$ (石英の転移温度以下)

100°C を超えると結合水からの脱水が生じる。つまり、骨材の間を埋めているセメント水和物が分解し、セメントペーストマトリックスが収縮する。この影響により 300°C を超えるとコンクリートの強度は劇的に低下する。 300°C までに C-S-H の脱水はほとんど終了し、 400 以上では $\text{Ca}(\text{OH})_2$ が分解する。これらセメント水和物の分解の影響により 300°C を超えた時点で大きく強度低下が生じるものと考えられる。また、結合水が損失することによりセメントペーストと骨材界面や鉄筋との付着は維持できなくなる。この付着強度の低下も伴い大きな強度低下に繋がるものと推定される。

○ 550°C 以上 (石英の転移温度以上)

550°C 以上では、骨材の変化が生じることによる強度低下が生じる。 573°C での石英の転移による骨材の膨張や 750°C での方解石の分解等、 550°C 以上ではセメントマトリックスだけでなく、骨材の体積変化が生じるため、コンクリートとしての強度を期待できない温度範囲である。 800°C 以上の熱影響を受けた場合にはコンクリートの強度はほとんど失われる。

○爆裂

段階的な強度低下とは別に、高温時にコンクリートの機械的特性を大幅に低下させる現象として熱による爆裂現象がある。この爆裂現象は、水セメント比が小さいほどセメントペーストが緻

密となり細孔内の圧力が増大するため高温域で生じやすい。セメント水比の増大に伴い減少し、50%程度であればほとんど爆裂は発生しないとしている（山崎・西田，1998）。

ここで、図 2.1-84 にコンクリート（2.1 章の水素発生量の確認試験で用いた試料）の TG-DTA 曲線を示す。300℃以下では、自由水の蒸発、アルミネート水和物や C-S-H からの脱水が起り、450℃付近では水酸化カルシウムの分解、573℃で石英の転移、650℃付近では炭酸カルシウムの分解が確認される。本試料は、珪質岩骨材であるため石英の転移が見られるが、その他の反応はペーストと同一である。ここで、ペーストの場合と比較して大きく異なることは、骨材を含むため 1000℃までの質量減少量が、セメントペーストでは 25%程度であるのに対し、コンクリートでは 8%と 1/3 程度となることである。焼きなまし工程で 600℃近くまで充填材の温度が上昇するとコンクリート中の大部分の水分は失われる可能性があるが、発生する水分量を見積ることは可能であり、コンクリートの配合等で水分量を低減することも可能である。その一方で、コンクリートの強度低下を抑制することはできないため、強度低下を考慮した充填材の材料設計する必要がある。充填材からの脱水による水蒸気の発生は、廃棄体パッケージ内の圧力上昇や水素発生への影響も考えられることから、どの程度の温度と時間により、充填材から水分が蒸発するか、またそれが水素発生にどう影響するかなどデータの蓄積することが必要となる。

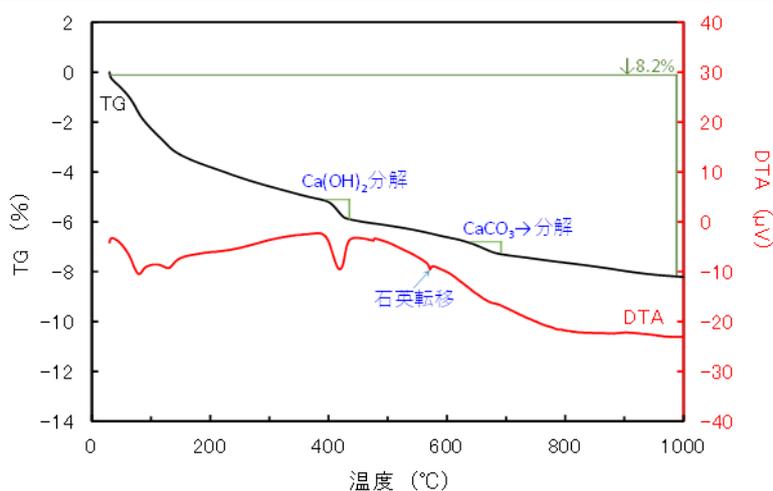


図 2.1-84 コンクリートの TG-DTA 測定結果

(3) まとめ

セメント系材料の機械的特性およ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継続して行っている定温度試験のバルク試験体の分析を行った。また、定温度試験の試料がさらに長期間試験を継続した場合、トバモライトへ変化するかどうか判断するために加速試験を実施した。

- ・80℃条件下の試料は、シリカ微粉末とセメント水和物の反応は進んでいるものの、現段階ではトバモライトへの変化は停滞しているものと判断された。
- ・加速試験の結果、20℃条件の試料ではトバモライトへの変化が確認されたが、80℃の試料では変化が見られなかった。80℃環境条件の試料については、生成している C-S-H が低 C/S となり、トバモライトへと変化しにくい C-S-H となっている可能性が考えられる。

以上の結果より、今後、本試験の試料では、トバモライトへの変化を確認することは難しいと推測された。しかしながら、高温条件の試料は現状においても 20℃の試料とは状態が異なっていると考えられ、強度特性を評価することが望ましい。また、ペースト試料においても、高温条件の試料は、XRD によるトバモライトのピークは確認できないものの、結晶化は進んだ状態の C-S-H であると考えられる。この定温度試験の試料を活用し、C-S-H とトバモライトに近い状態の C-S-H で収着特性に違いがあるか検討することは長期評価において有益なデータ取得することができるものと考えられる。

また、廃棄体パッケージ内部においては、廃棄体の発熱による熱影響が想定される他、廃棄体パッケージの製作工程における鋼製容器の上蓋の溶接及び焼きなましによって、内部充填材への熱影響が懸念される。そこで、パッケージ内充填材の熱変質による特性変化の推定のために、セメント系材料の温度影響による特性変化について整理した。

- ・ 300℃程度までは、コンクリートの強度低下は小さいものの、C-S-H 等の水和物の結合水が失われることから、300℃以上の温度になると著しく強度低下が生じる。
- ・ 蒸発する水分量や強度低下を考慮して充填材の配合を決定していく必要がある。

今後、想定される内部充填材の温度範囲において、強度特性の変化、蒸発する水分の影響、さらには水素発生への影響等のデータを蓄積する必要がある。

参考文献

- 荒川 正文, 粉体材料の基礎的性質の測定 (IV) (粉体比表面積の測定), 材料, 第 19 巻, 第 202 号, p685-691, 1970.
- 秋田 宏, 藤原 忠司, 尾坂 芳夫, モルタルの乾燥・吸湿・吸水過程における水分移動, 土木学会論文報告集, Vol.420, pp.61-69, 1990.
- Azenha, M.A., Numerical simulation of the structural behavior of concrete since its early ages, PhD thesis, University of Porto, 2009.
- Bazant, Y. Xi, Z. P. and Jennings, H.M., Moisture diffusion in cementitious materials Adsorption Isotherms, Advn. Cem. Bas. Mat., pp. 258-266, 1994.
- Bazant, Z. P. and Najjar, N. J. Drying concrete as a nonlinear diffusion problem, Cement and Concrete Res., Vol.1, No.5, pp. 461-473, 1971.
- 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.
- Ding, X., Zhang, J. and Wang, J., Integrative modeling on self-desiccation and moisture diffusion in concrete based on variation of water content, Cement and Concrete Composites, 97, pp322-340, 2019.
- 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.
- 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 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報告書, 2020.
- 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—, 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 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, 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.
- 阪田 憲次, 蔵本 修, 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, 土木学会論文報告集, Vol.316, pp145-152, 1981.
- 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.
- Hillerborg, A., A modified absorption theory, Cement and Concrete Research, Vol. 15, pp. 809-816, 1985.
- 五十嵐 豪, 丸山 一平, セメント硬化体の処女脱着等温線および BET 比表面積の温度依存性のモデル化, 日本建築学会東海支部研究報告書, Vol.50, pp81-84, 2012.
- 石田 哲也, Chaube, R.P., 岸 利治, 前川 宏一, 任意の乾湿繰り返しを受けるコンクリートの含水状態予測モデル, 土木学会論文集, No.564/V-35, pp.199-209, 1997.
- Jonasson, J.-E., Modelling of Moisture Isotherms Including Alkali Effects Proceedings of Workshop Water in Cement Paste and Concrete, Hydration and Pore Structure, Skangen, Denmark 7-8 October 1999, The Nordic Concrete Federation pp. 28-48, 2000.
- 熊谷 純, 堀之内 克好, 根岸 久美, 井田 雅也, 無機水和物・水酸化物の放射線分解水素分子生成収率 物理吸着水と遷移金属イオンの影響, 日本原子力学会 2021 春の年会予稿集, 1I05, 2021.
- Lewis, M. A. and Warren, D. W., Gas generation from the irradiation of mortar, U.S. Department of Energy, CONF-890488, 1989.
- Lin, W.-M. and Lin, T.D., Powers-Couche L.J. Microstructures of fire-damaged concrete. ACI Materials Journal, Vol.93, pp.199-205, 1996.

- Li, Y., Li, L. and Su, J., Effect of coarse aggregate variety on heat burst properties of high strength concrete. *Concrete, Material and Management*, Vol.4, Total No.258, pp.73-75, 2011.
- 丸山 一平, 五十嵐 豪, セメント硬化体の水蒸気吸着等温線モデル, 日本建築学会構造系論文集, Vol.76, No.664, pp.1033-1041, 2011.
- Mensi, R., Acker, P. and Attolou, A., Drying of concrete: Analysis and modelling. *Sechage du beton: Analyse et modelisation*, Materials and Structures, Vol. 21, pp.3-12, 1998.
- Mjornell, K.N., Moisture conditions in high performance concrete- mathematical modelling and measurements-, PhD thesis, University of Technology Goteborg, 1997.
- 永井 幸治, けい酸カルシウム材料の技術紹介～特長と製造方法、応用製品について～, ニチアス技術時報 2018, No.3, 2018.
- 半井 健一郎, 石田 哲也, 岸 利治, 前川 宏一, セメント硬化体組織構造の温度依存性に基づく熱力学連成解析の高度化, 土木学会論文集, No.802, V-69, pp.61-78, 2005.
- Noshita, K., Nishi, T. and Matsuda, M., Generation mechanism of hydrogen gas from hardened cement paste by gamma-irradiation, *Scientific Basis for Nuclear Waste Management XVIII*, Pts 1 and 2, Vol.353, pp.921-928, 1995.
- Ochs, M., Mallants, D. and Wang, I., Radionuclide and Metal Sorption on Cement and concrete, *Topics in Safety, Risk, Reliability and Quality*. Springer, Switzerland, 2016.
- 岡島 達夫, 水谷 章夫, 河辺 伸二, 志村 欣一, モルタルの等温吸着特性, 日本建築学会大会学術講演梗概集, Vol. A, pp.349-350, 1989.
- 佐々木 謙二, 岡野 耕大, 片山 強, 原田 哲夫, 蒸気養生を模擬した温度履歴を与えたコンクリートの水分逸散性状と緻密性評価, コンクリート工学年次論文集, Vol.34, No.1, pp.1540-1545, 2012.
- Scrivener, K., Snellings, R. and Lothenbach, B. (ed.), *A practical guide to microstructural analysis of cementitious materials*, Boca Raton: Crc Press, 2016.
- 柴田 研一, 最近の無機繊維質断熱材料, 燃料協力誌, 第 68 卷, 第 8 号, 1989.
- 下村 匠, 前川 宏一, 微視的機構に基づくコンクリートの乾燥収縮モデル, 土木学会論文集, No. 520/V-28, pp.35-45, 1995.
- Son, H. and Hosoda, A., Detection of Microcracking in concrete subjected to elevated temperature at very early age by acoustic emission, *Journal of Advanced Concrete Technology*, Vol. 8, No. 2, 201-211, 2010.
- 社団法人日本工業炉協会, 新版工業炉用語辞典, 2003.
- 社団法人日本工業炉協会, 工業炉の基礎知識, 1993.
- 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.
- Thierry, J. Ph. and Chanvillard, G., Autogenous and drying shrinkage modeling: from paste to concrete, *Proc. of Int. RILEM Symp. on Concrete Modelling - CONMOD'08*, 26-28 May, Delft, The Netherland, pp. 337-344, 2008.
- 内海 秀幸, セメント硬化体の水蒸気吸着等温関係式, 土木学会論文集 E, Vol. 64, No. 4, pp. 560-571, 2008.
- 山崎 庸行, 西田 朗, 耐爆裂性コンクリート, コンクリート工学, Vol.36, No.1, 1998.

2.2 廃棄体パッケージの構造健全性評価

2.2.1 はじめに

本項では、2.1.4「廃棄体パッケージの構造健全性評価」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 構造健全性評価の手順

(1) 破壊形態および破壊モードの想定

日本機械学会発電用原子力設備規格維持規格（以後、維持規格）（日本機械学会, 2016a）における構造健全性評価では、対象となる構造物の破壊形態（どの部位がどのように壊れるか）を想定し、それぞれの破壊形態に対して考えられる破損モード（ここでは破壊モードと同義として用いる）を想定する。破壊モードには、延性破壊、脆性破壊、疲労破壊などがある。そして、想定した破壊モードに対応する破壊の駆動力を算出し、材料の強度と比較することで破損（破壊）の有無を判断する。想定する破壊モードは、材料や構造物の形状（亀裂寸法）などに依存し、いずれの破壊モードか判断ができない場合は、複数の破壊モードを想定する。そして、想定した全ての破壊モードに対して破壊が生じないとの結論をもって、対象構造物の構造健全性が確認されたことになる。したがって、構造健全性評価では、破壊形態と破壊モードを適切に想定することが重要となる。

廃棄体パッケージおよびその溶接部の破壊モードとしては、図 2.2-1 に示すように塑性崩壊（座屈を含む）、弾塑性破壊、および脆性破壊の3つが考えられる（釜谷ほか, 2014）。塑性崩壊は構造物断面で生じる延性破壊で、破壊する断面における平均的な応力（実断面応力）が破壊の駆動力になる。亀裂がない構造物や、ステンレス鋼のように延性が大きい材料では亀裂構造物でも破壊モードとして塑性崩壊が想定される（日本機械学会, 2016a）。

断面全体が変形する塑性崩壊に対し、弾塑性破壊と脆性破壊では切欠きや欠陥などの局所を起点として、亀裂が発生・進展する。したがって、弾塑性破壊と脆性破壊に対する破壊評価には局所的な力の大きさを表すJ積分や応力拡大係数が駆動力として用いられる。弾塑性破壊と脆性破壊のどちらの破壊モードが出現するかは、材料や構造、使用条件などに依存する。同じ材料を対象とした場合でも、亀裂の大きさ、材料の脆化度によって破壊モードが変化する場合がある。

一般的な機器設計では、構造物に欠陥がないこと、または欠陥が十分小さいことを前提としているため、欠陥を起点とした弾塑性破壊と脆性破壊は想定されない。廃棄体パッケージの強度設計を行う場合も、塑性崩壊を破壊モードとした設計が行われる。一方、未溶接部では応力集中が発生する。そして、溶接部と未溶接部の境界が破壊の起点となり弾塑性破壊や脆性破壊が発生する可能性がある。したがって、塑性崩壊のみでなく、弾塑性破壊や脆性破壊も想定することが安全側の考え方となる。

原子力機器の設計（日本機械学会, 2016b）では、疲労（ラチェット変形含む）も破壊モードとして考慮する。廃棄体パッケージに対しても、繰り返しの荷重が想定される場合には、疲労による破壊も考慮する必要があるが、ここでは考えない。

破壊モード	破壊モード	駆動力パラメータ	必要な材料特性
<p>延性</p> <p>照射損傷</p> <p>亀裂サイズ</p> <p>脆性</p> <p>小 小</p> <p>大 大</p>	塑性崩壊	荷重(応力)	降伏強度 引張強さ
	弾塑性破壊	J積分 (J値)	J-R曲線 応力・ひずみ曲線 (J値算出のため)
	脆性破壊	応力拡大係数 (K値)	破壊靱性値 (K_{IC})

図 2.2-1 破壊モードと強度評価方法
(日本機械学会, 2016a)

(2) 破壊強度評価方法

廃棄体パッケージの構造健全性評価では、欠陥を起点としない塑性崩壊と未溶接部を亀裂と見なした弾塑性破壊または脆性破壊が想定される。塑性崩壊に対しては、弾完全塑性の応力・ひずみ曲線(図 2.2-2)を想定した有限要素解析により、破壊荷重(崩壊荷重)を推定する。実構造物の形状を模擬した有限要素モデルを作成し、想定される荷重を負荷する。これにより、最弱断面に応力が集中して変形が進む様子が模擬される。本業務では 2 倍勾配法(日本機械学会, 2008)を用いて崩壊荷重を決定する。2 倍勾配法では、図 2.2-3 に示すように、変形が大きな代表点の変位がしきい値(弾性変形の勾配を 2 倍した直線との交点)を超えた時点の荷重を崩壊荷重とする。

弾塑性破壊では駆動力として J 積分を用いる。J 積分は弾塑性の有限要素解析により算出するため材料の応力・ひずみ曲線を想定する必要がある。一方、材料強度としては、弾塑性破壊靱性(J-R 曲線)が用いられる。弾塑性破壊では、破壊時に亀裂先端での塑性変形、延性亀裂進展における安定破壊から不安定破壊への遷移を考慮するため 2 パラメータ評価法(小林ほか, 2005) [5]などが適用される。弾塑性破壊評価に必要な応力・ひずみ曲線や J-R 曲線は 2 次元の特性を有する(曲線として与えられる)ことから一般化することが困難で設計規格(日本機械学会, 2016b)や維持規格(日本機械学会, 2016a)でも、物性値は与えられていない。したがって、弾塑性破壊評価を行うには、使用される予定の材料(または相当材)を用いた材料試験を行う必要がある。

未照射の構造材料(炭素鋼など)では亀裂先端から延性亀裂が発生する弾塑性破壊が一般的な

破壊モードとなるが（小林ほか, 2005）、照射により材料が硬化すると、弾塑性破壊から脆性破壊へと破壊モードが変化する。脆性破壊評価では、破壊駆動力に応力拡大係数を、材料強度に破壊靱性 (K_{Ic}) をとり、両者を比較することで破壊の有無を判断する。応力拡大係数は弾性解析により求まり、その数値はポアソン比にのみ依存する（ヤング率には依存しない）。また、 K_{Ic} は曲線ではなくスカラー量で与えられる。一般的な K_{Ic} は与えられていないが、代表的な値（安全側の値）であれば維持規格でも規定されている。したがって、設計段階においても、脆性破壊評価を実施することは困難ではない。

一般に、亀裂構造物の強度は、塑性崩壊、弾塑性破壊、脆性破壊の順に弱くなる。材料が硬く（脆く）なると、例えばガラスのように、小さな亀裂が存在しただけでも破壊強度は低下する。そこで、本事業では未溶接部を亀裂と見なした評価においては、弾塑性破壊ではなく脆性破壊を想定した評価を行う。つまり、想定される外力に対して応力拡大係数を算出するとともに、想定される複数の K_{Ic} に対して構造健全性評価に対して許容される溶接深さを算出する。つまり、破壊モードとして塑性崩壊と脆性破壊を想定することを前提に検討を進める。

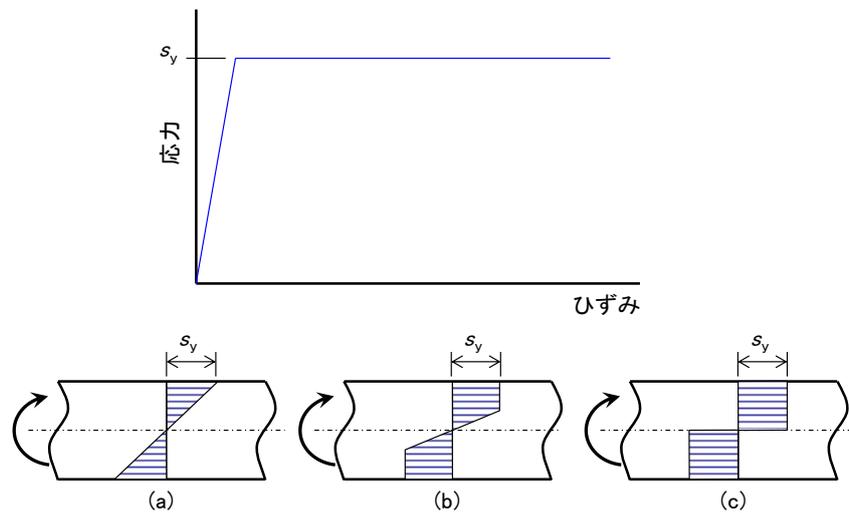


図 2.2-2 弾完全塑性モデルの応力・ひずみ曲線における塑性崩壊の考え方

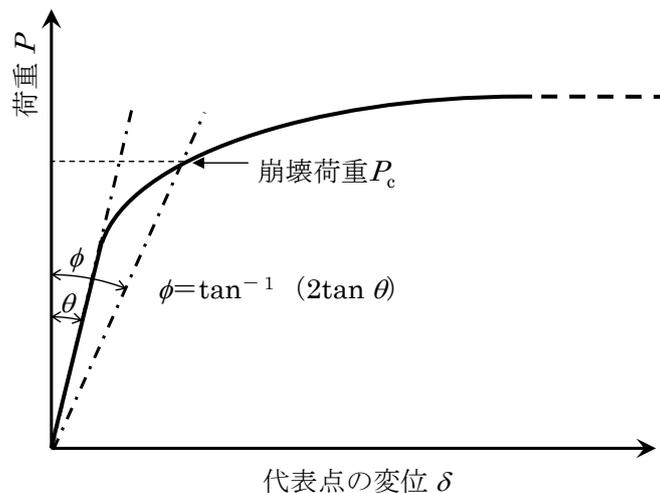


図 2.2-3 2倍勾配法

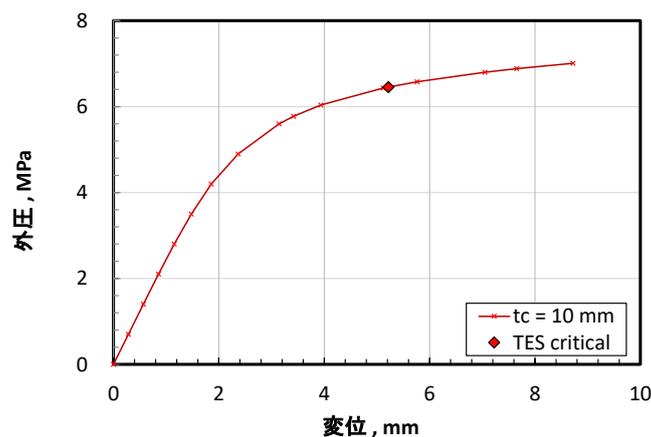
2.2.3 塑性崩壊解析

(1) 二重蓋構造の基本的な傾向

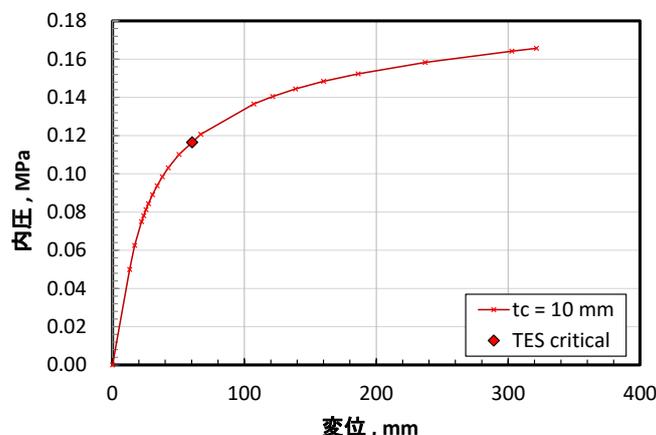
内圧および外圧に対して基本条件での解析を行う。弾塑性有限要素解析による崩壊解析と、未溶接部先端の応力拡大係数(K 値)を弾性解析により算出した。崩壊解析用の材料の変形特性として降伏強度 $S_y = 200 \text{ MPa}$ の弾完全塑性モデルを仮定する。K 値は内圧、外圧とも 1 MPa を付与し Abaqus の機能を用いて算出した。

外蓋厚さ $t_c = 10 \text{ mm}$ のモデルに対して外圧または内圧を負荷した場合の変位と圧力の関係を図 4.2-1 に示す。モデル全節点の中で一番大きな変位が生じた節点を代表節点、そして代表節点の変位を代表変位と呼ぶ。代表変位と荷重の関係は、図 2.2-3 に示すように、直線的な弾性変形から塑性変形に遷移していることがわかる。2 倍勾配法 (Twice Elastic Slope Method : TES 法) によって決定される崩壊荷重を TES クリチカル点として赤丸点で示している。外圧に対して内圧の崩壊荷重が小さくなっている。

崩壊荷重に到達した近傍のステップにおける Mises 相当応力の等高線図を図 2.2-5 (外圧負荷) と図 2.2-6 (内圧負荷) に示す。カラースケールは降伏強度 S_y で正規化しており赤色部分が降伏した部位に相当する。代表節点は図中に示しているが、いずれも外蓋外面部となった。外圧を負荷した場合は、蓋部と胴部の変位が相対的に大きくなり、最終的に蓋部において最大変位が発生した。底部の板厚は蓋部と同じであるが、大きな変位は発生しなかった。



外圧負荷



内圧負荷

図 2.2-4 解析結果 ($t_c = 10 \text{ mm}$ 、 $H_c = 1250 \text{ mm}$ 、 $\mu = 0$)

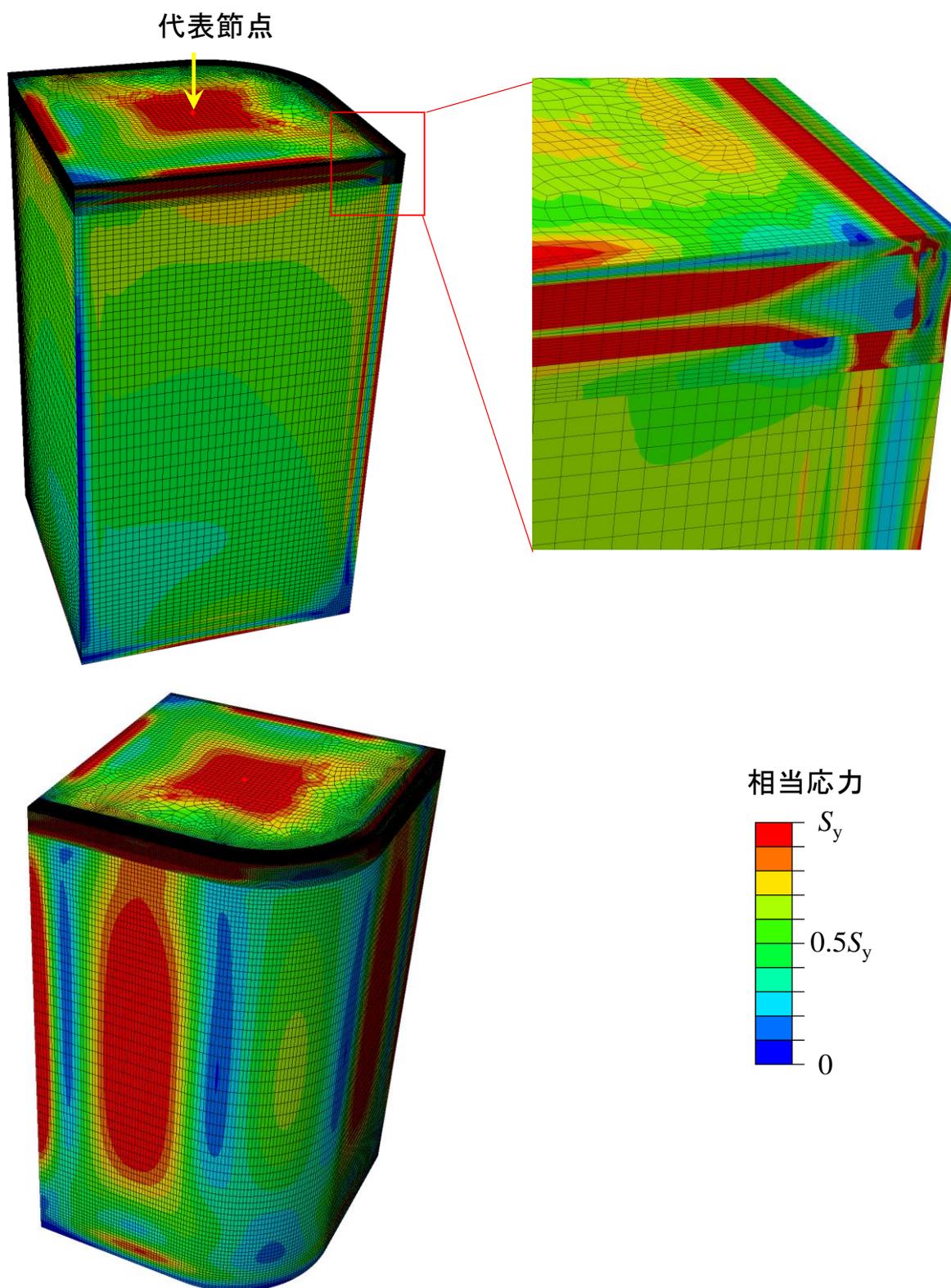
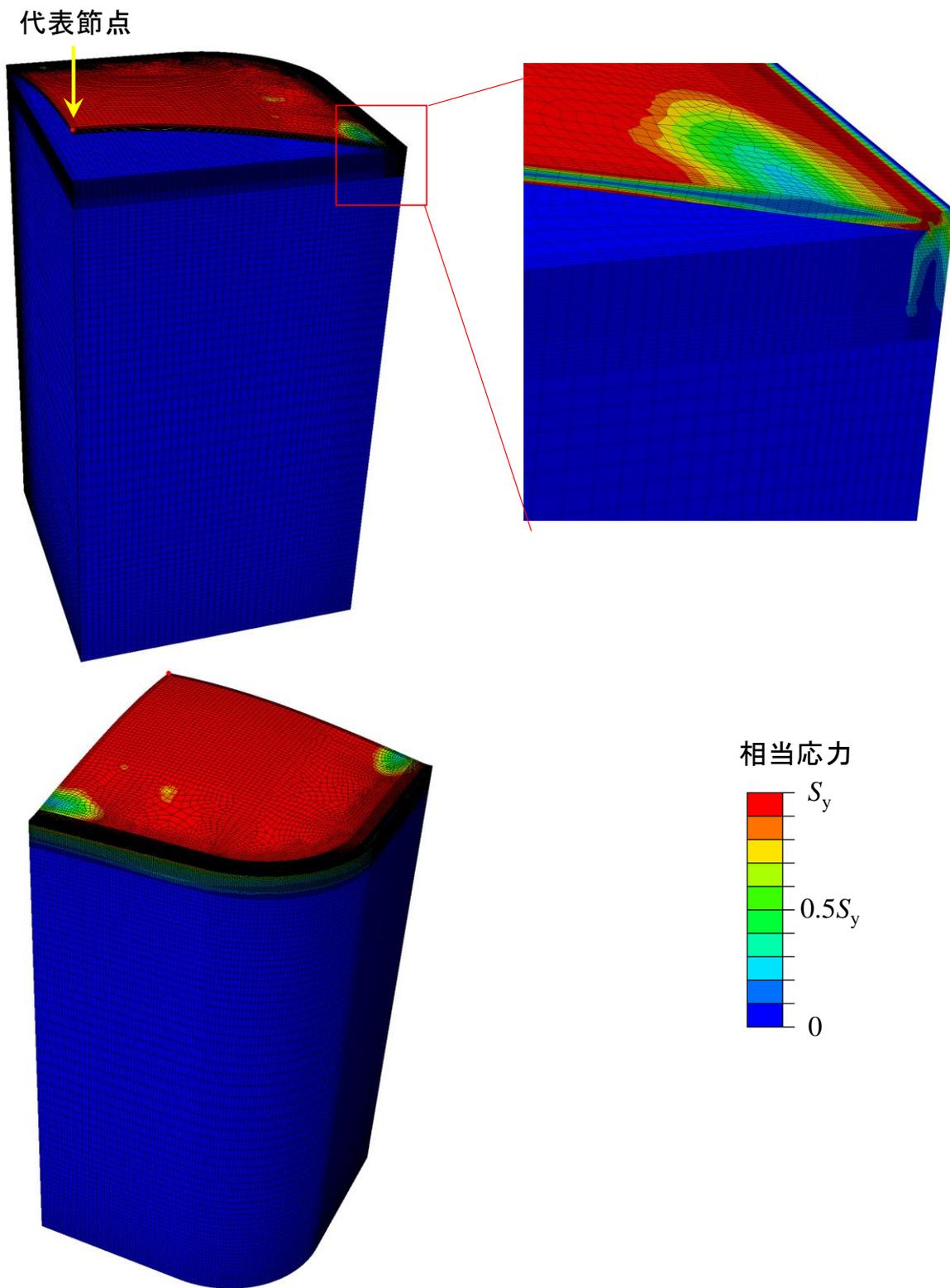


图 2.2-5 Mises 应力分布 (外压 6.4 MPa、 $t_c = 10$ mm、 $H_c = 1250$ mm、 $\mu = 0$)



(変形を10倍して表示)

図 2.2-6 Mises 応力分布 (内圧 0.12 MPa、 $t_c = 10$ mm、 $H_c = 1250$ mm、 $\mu = 0$)

(2) 要素分割の影響

適用した要素分割が十分であるかを確認するために、要素分割の異なる条件で解析を行った。解析条件は先の基本条件と同一とした。図 2.2-7 に代表節点の変位と圧力関係を示す。用いたメッシュを図 2.2-8～図 2.2-10 に示すが、メッシュの粗い順から Coarse、Medium、Fine、Very fine の 4 種類を作成した。2.2.3(1)の結果は Fine を用いた結果となる。表 2.2-1 にそれぞれのメッシュの要素数と節点数を示す。

図 2.2-7 の結果から外圧に対しては Medium、内圧に対しては Fine で収束した結果が得られていることが確認できる。本事業では、とくに断りのないかぎり Fine のメッシュを用いて解析を行った。

表 2.2-1 適用したメッシュ分割

	要素	節点
Coarse (図 4.2-5(a))	52,864	66,620
Medium (図 4.2-5(b))	285,044	332,071
Fine (図 2.3-4)	867,469	964,632
Very fine (図 4.2-5(c))	1,318,832	1,457,934

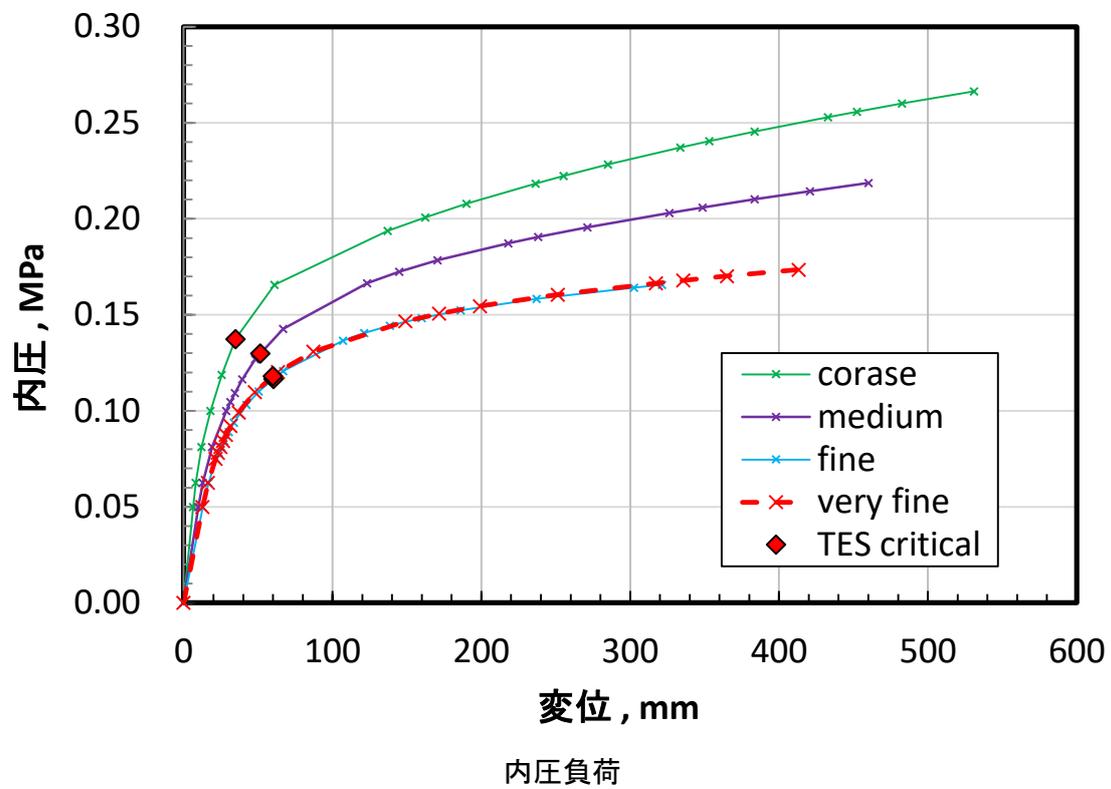
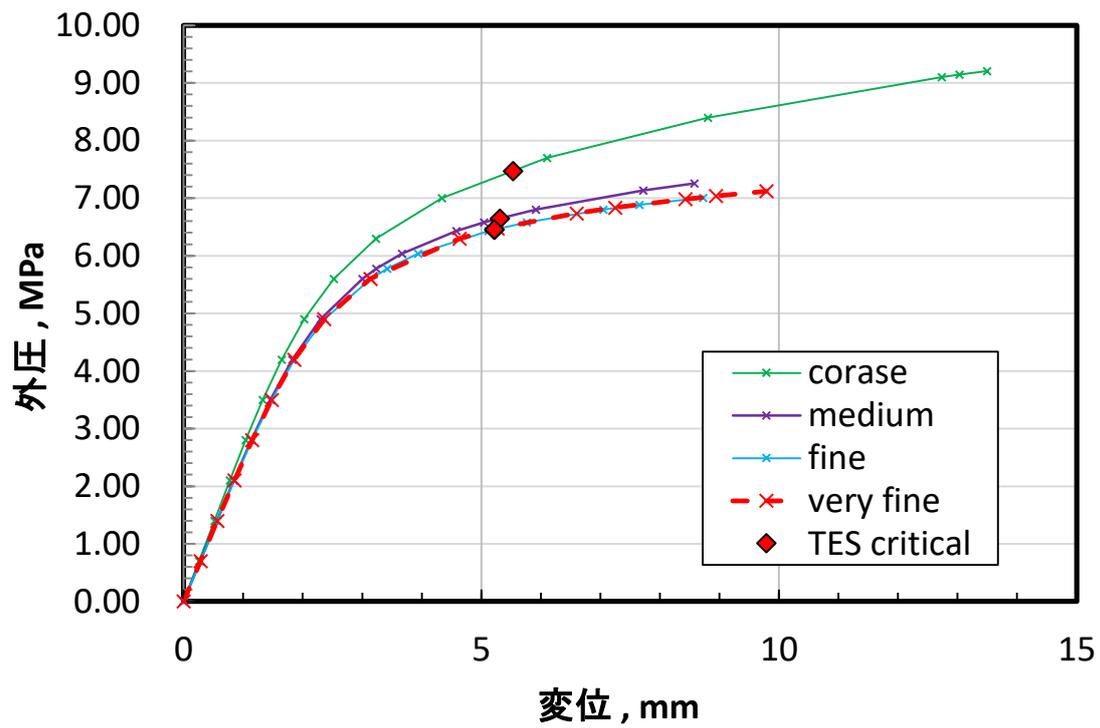


図 2.2-7 要素分割の影響 ($t_c = 10 \text{ mm}$ 、 $H_c = 1250 \text{ mm}$ 、 $\mu = 0$)

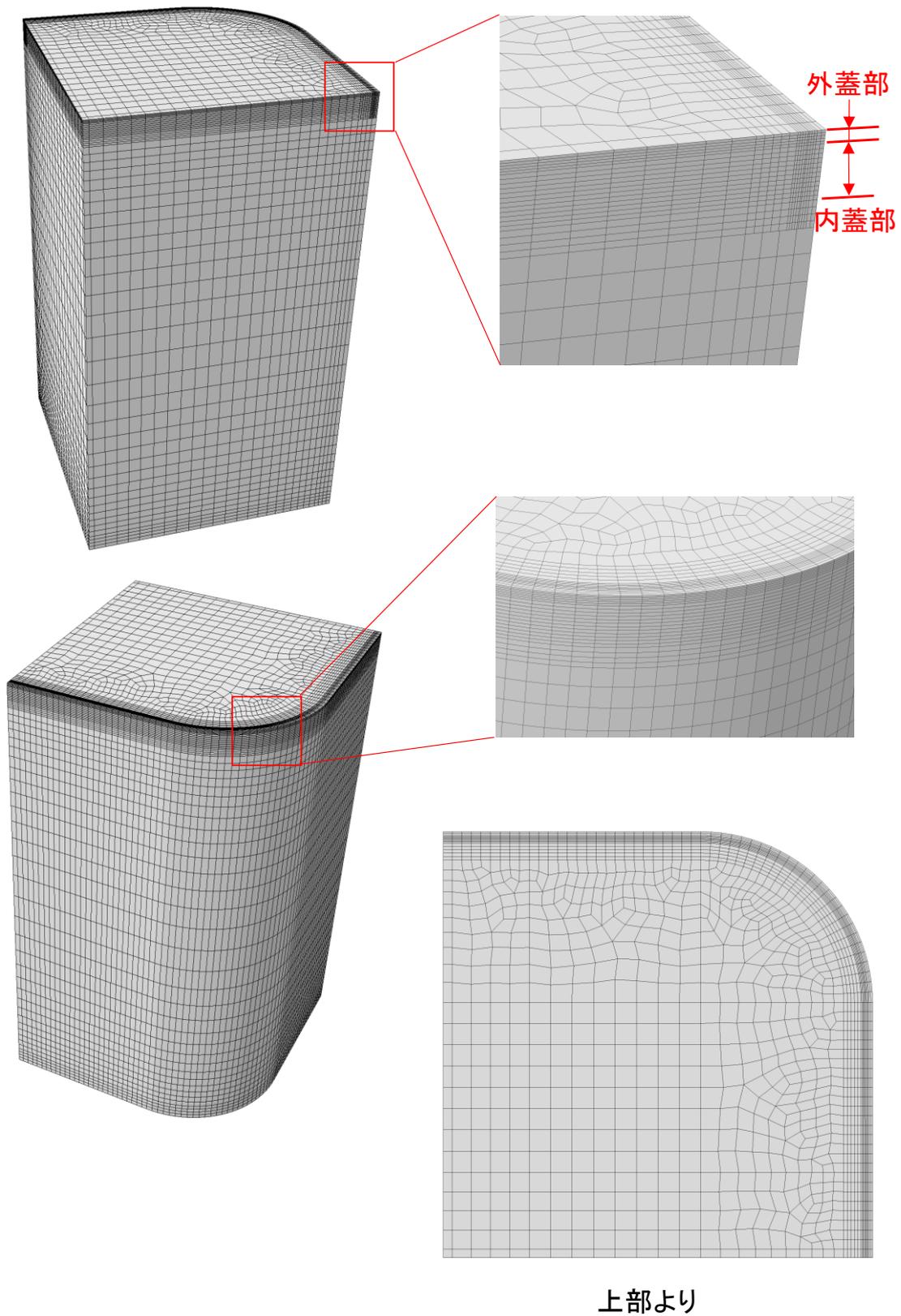


図 2.2-8 有限要素分割 (Coarse、 $t_c = 10$ mm、 $H_c = 1250$ mm)

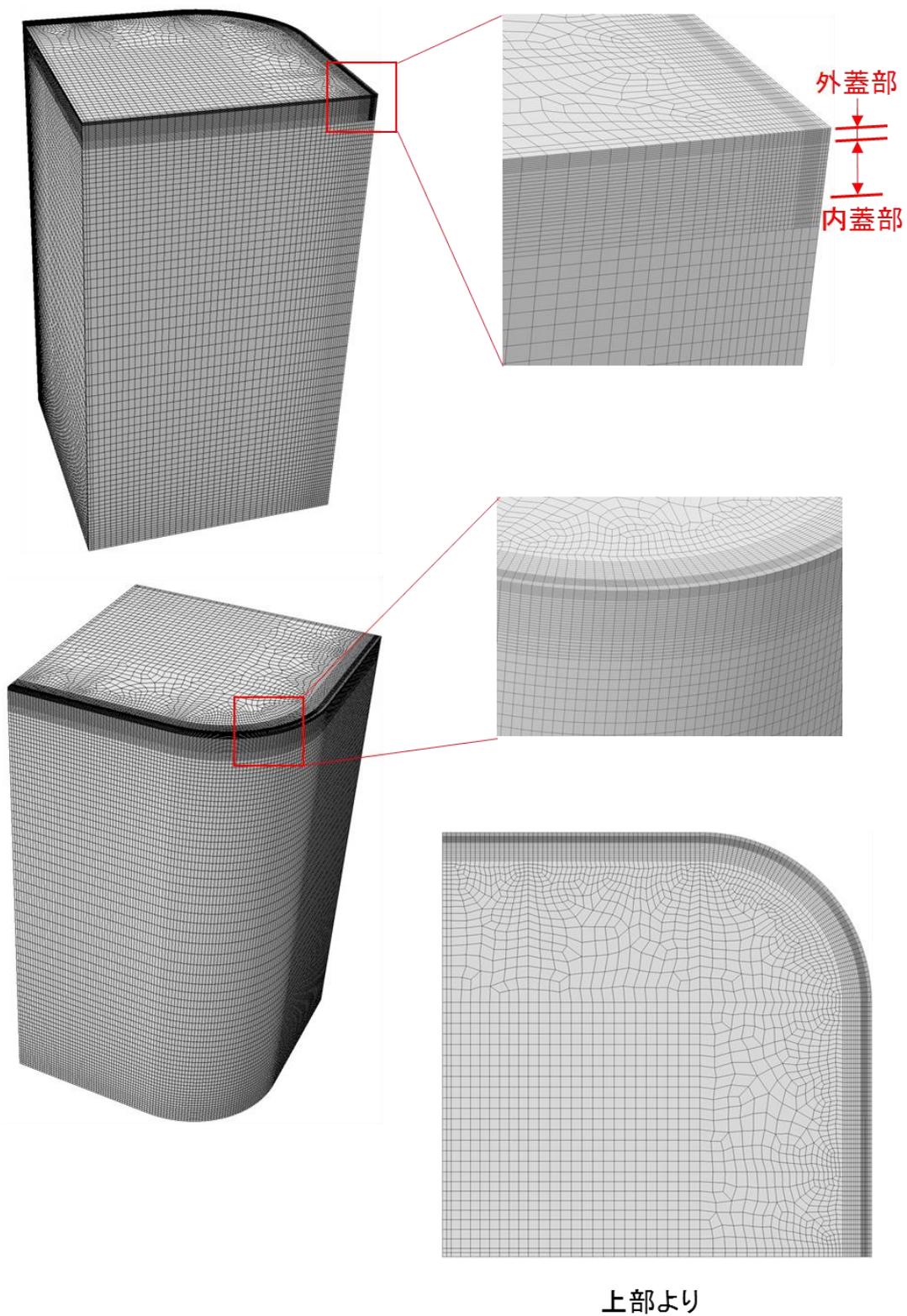


図 2.2-9 有限要素分割 (Medium、 $t_c = 10 \text{ mm}$ 、 $H_c = 1250 \text{ mm}$)

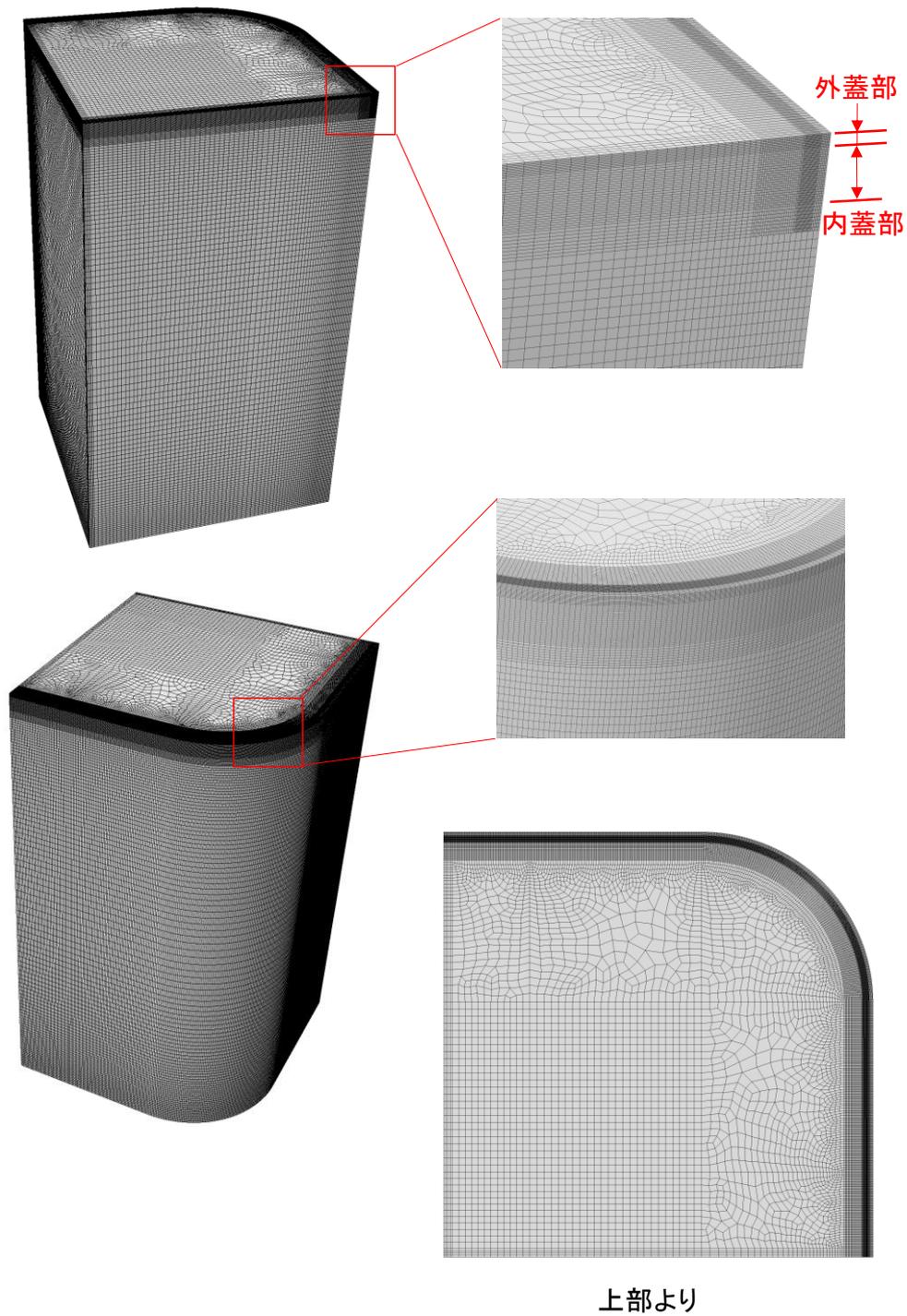


図 2.2-10 有限要素分割 (Very fine、 $t_c = 10 \text{ mm}$ 、 $H_c = 1250 \text{ mm}$)

(3) 接触の影響

内圧を荷重した解析において図 2.2-11 に示すように水平界面に接触を考慮するよう条件で解析した場合、解析が収束せずに解が得られなかった。安定化のためのエネルギー減衰を考慮することで、解析を収束させることができたが、安定化のための減衰が解析結果に影響を及ぼすという問題が発生した。

解決方法として、内圧に対しては接触を考慮しないこととした。内圧による変形では内蓋と外蓋、内蓋と胴体に接触が発生していないので、解析結果に影響を及ぼすことはないと考えられる。

外圧を荷重した場合において、鉛直界面で接触が発生している可能性が考えられる。そこで、鉛直界面に接触を考慮した場合の解析を図 2.2-12 に示す。内圧を荷重した場合の結果は、接触の有無によって変化しなかったが、外圧を荷重した場合は接触を考慮した方の崩壊荷重が大きくなった。

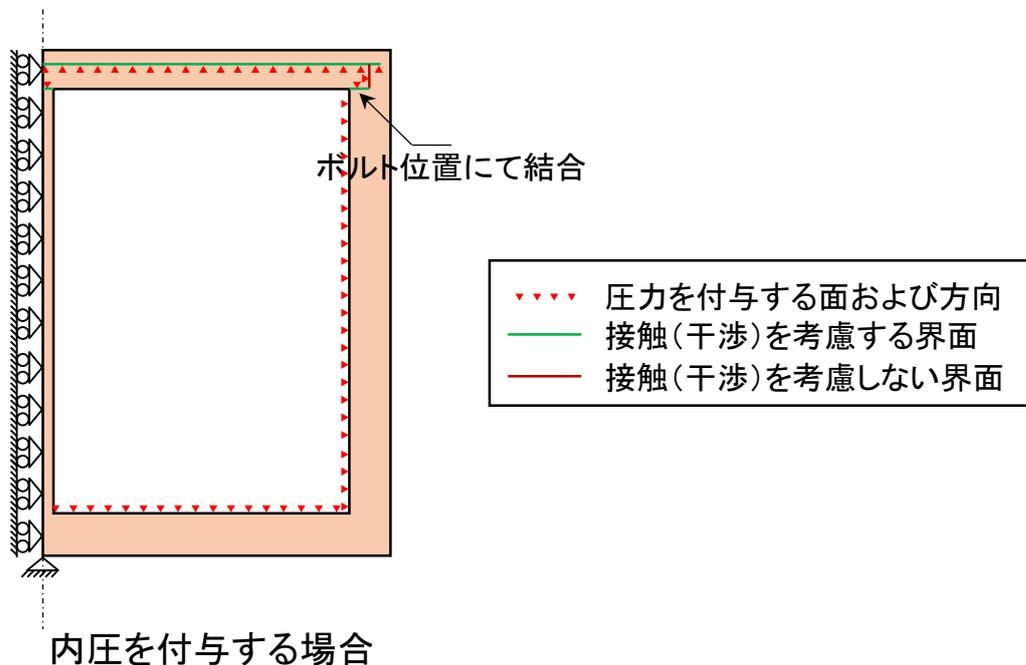


図 2.2-11 内圧負荷時の境界条件（当初設定した条件）

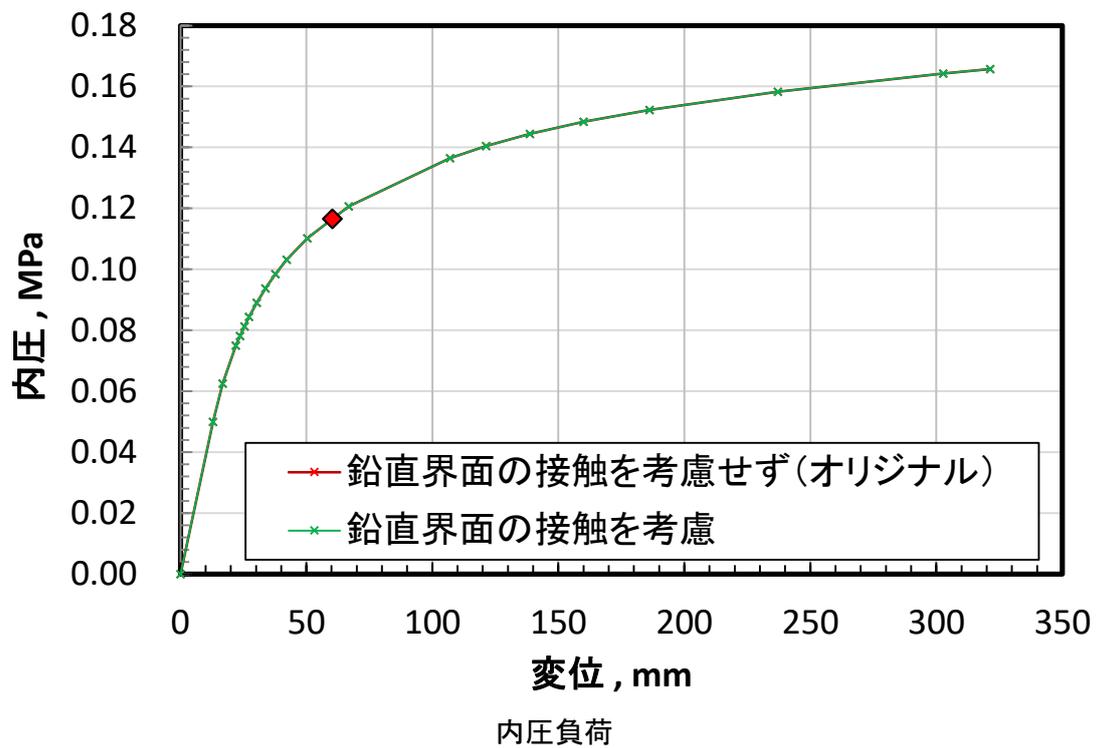
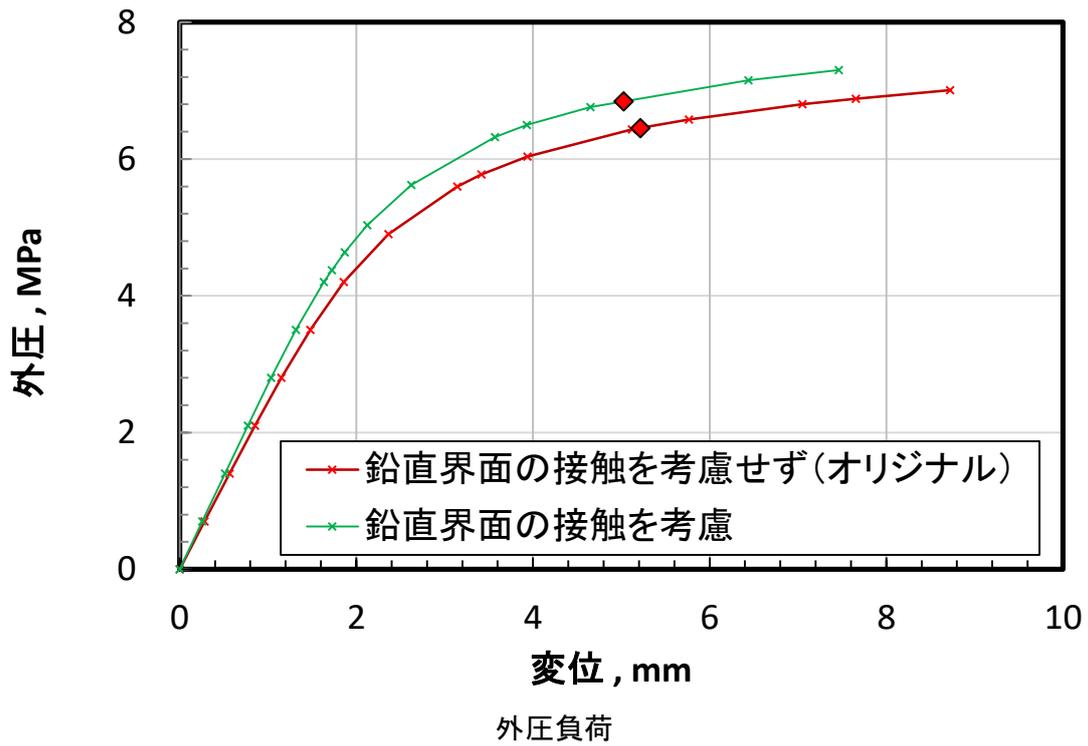


図 2.2-12 鉛直界面の接触の考慮の影響 ($t_c = 10$ mm、 $H_c = 1250$ mm、 $\mu = 0$)

2.2.4 脆性破壊解析

(1) 二重蓋構造の基本的な傾向

蓋厚さ $t_c = 10 \text{ mm}$ のモデルに対して、未溶接部（亀裂）前縁に沿った K 値を算出した。 K 値は亀裂先端の各節点で算出されるが、亀裂位置は図 4.3-1 に示した経路に沿った値を表示する。

外圧または内圧を負荷した場合のモード I の K 値 (K_I) を図 4.3-2 に示す。外圧負荷に比べて内圧負荷の K 値が大きくなった。とくに、対称面部（図 4.3-1 の A および D 部）で大きくなっている。外圧負荷の場合は角部（図 4.3-1 の B および C の近傍）で K 値が大きくなった。

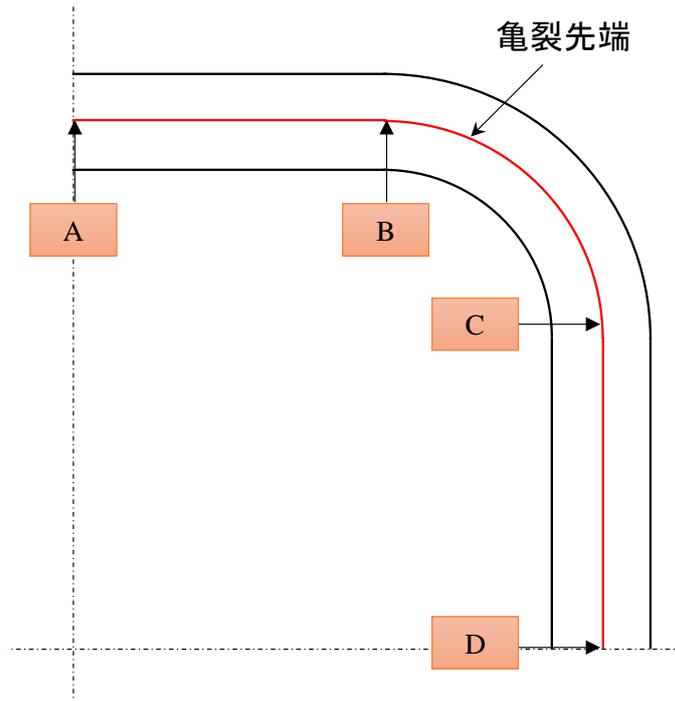


図 2.2-13 亀裂前縁の位置

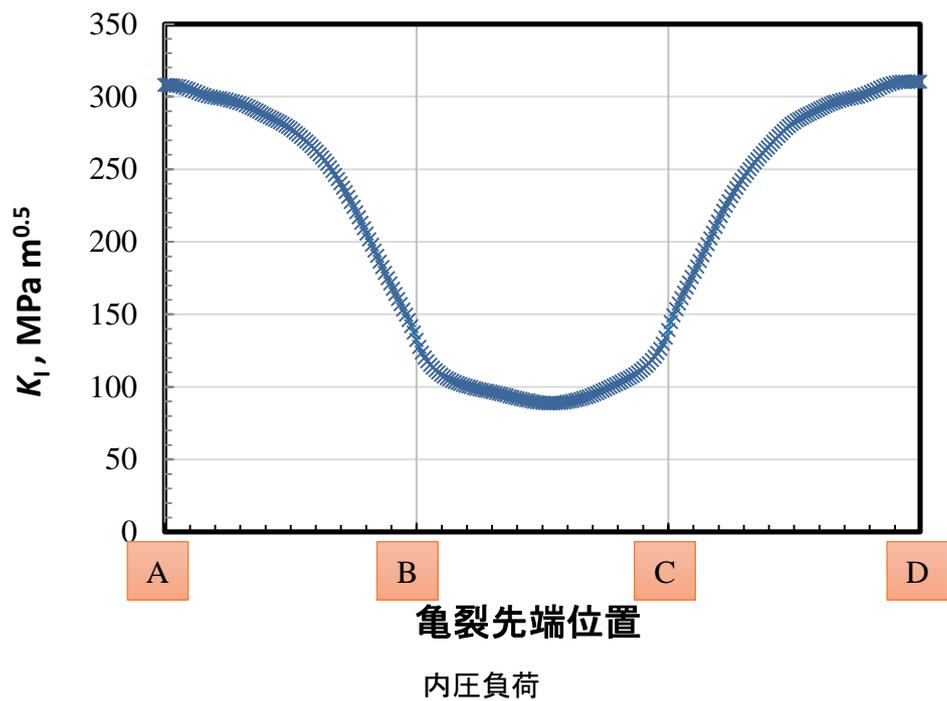
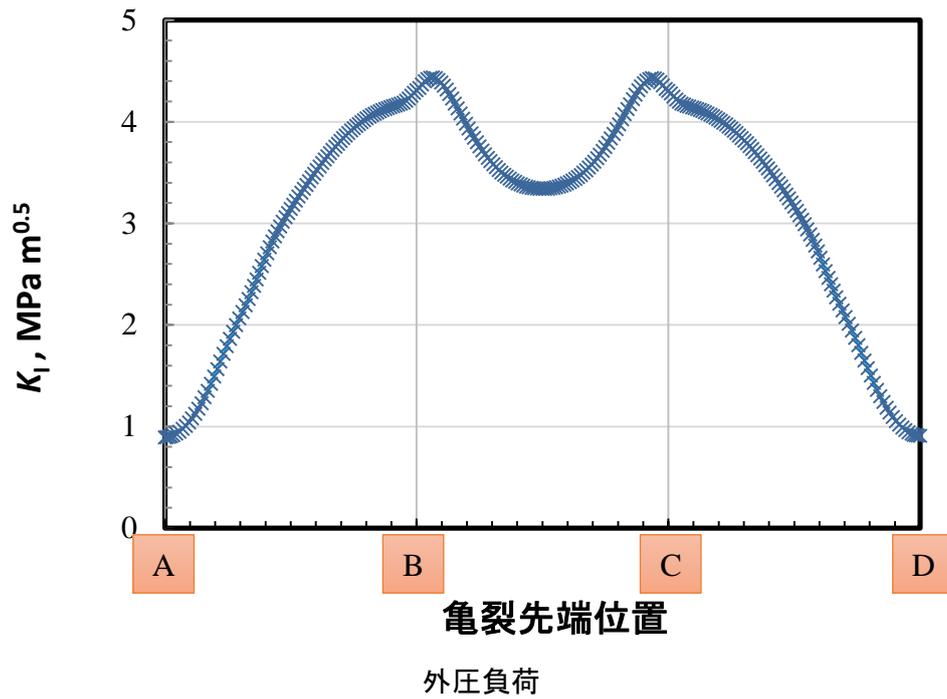


図 2.2-14 モードIの応力拡大係数 ($t_c = 10 \text{ mm}$ 、 $H_c = 1250 \text{ mm}$ 、 $\mu = 0$)

(2) 一体型2重蓋構造の応力拡大係数

1) 内圧負荷

ここでは図 2.2-15 のような一体型2重蓋構造にすることにより、内蓋で内圧を受けることができる。ここでは、この条件で1 MPaの内圧を負荷した場合のシール板の未溶接部（亀裂）前縁に沿ったK値を算出した。未溶接先端は、シール板内側と外側の2箇所あるが、K値は外側の亀

裂先端の各節点で算出した。内側溶接部は、シール板と蓋が接触する圧縮負荷が作用する部位であることから、 K 値は大きくならないと考えられる。

モード I の K 値 (K_I) を図 2.2-16 に示す。亀裂位置は図 2.2-13 に示した経路に沿った値を示している。図 2.2-14 と比較すると、一体型 2 重蓋にすることで、 K 値が大きく低下していることがわかる。とくに、接触を考慮することによって、 K 値は $40 \text{ MPa m}^{0.5}$ 程度まで低下した。崩壊荷重と同様に、接触を考慮した場合は、ボルト結合の有無が応力拡大係数に及ぼす影響は大きくないようである。値としては、対称面部 (A および D 部) で大きくなっている。

モード II とモード III の K 値を図 2.2-17 に示す。モード II の K 値はモード I の K 値の概ね 4 分の 1 程度であった。モード III の値は無視できる程度に小さかった。

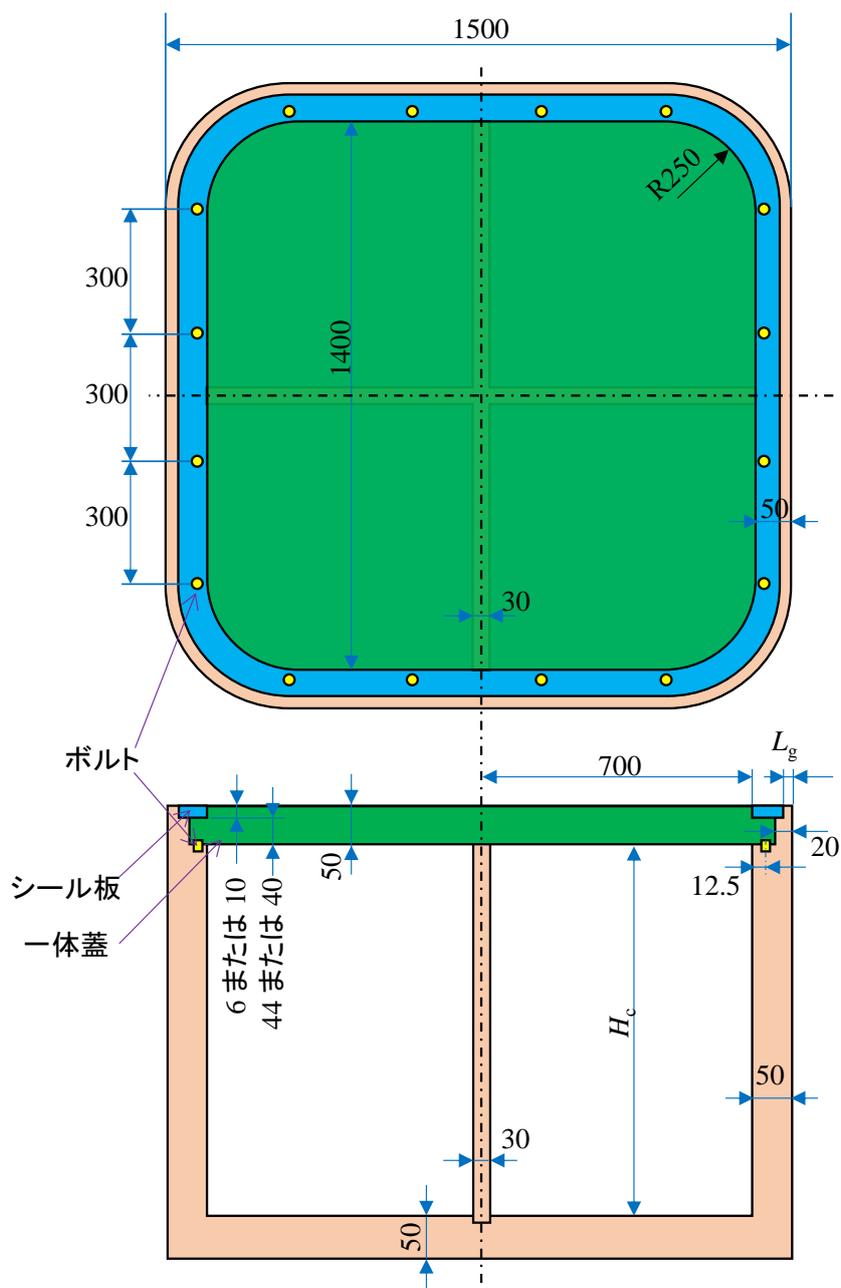


図 2.2-15 一体型 2 重蓋構造の廃棄体パッケージの形状 (分離したシール板を使用)

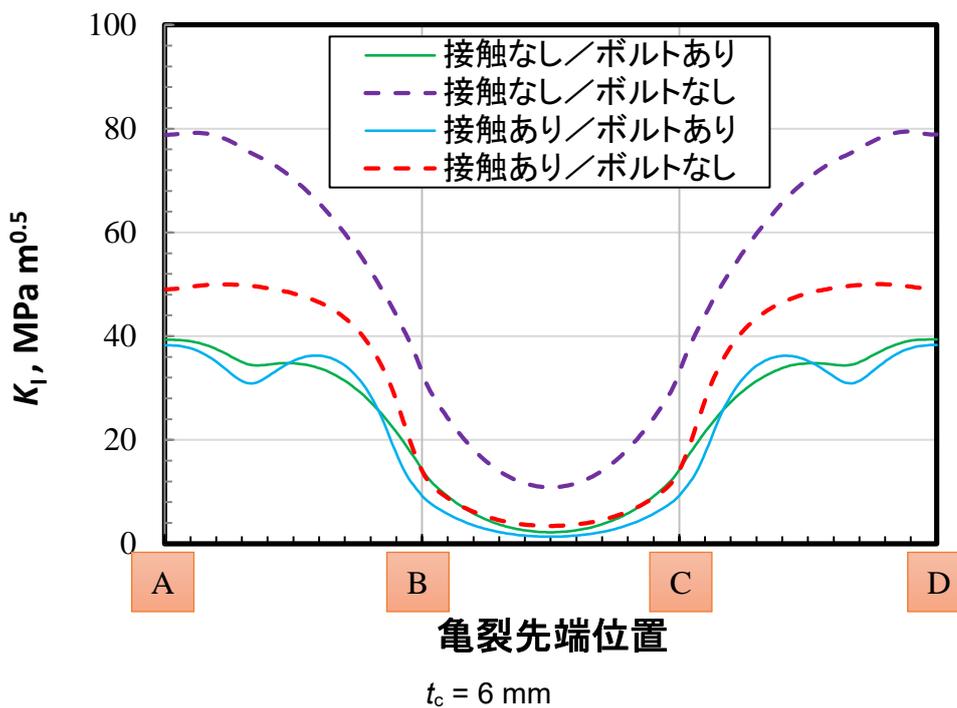
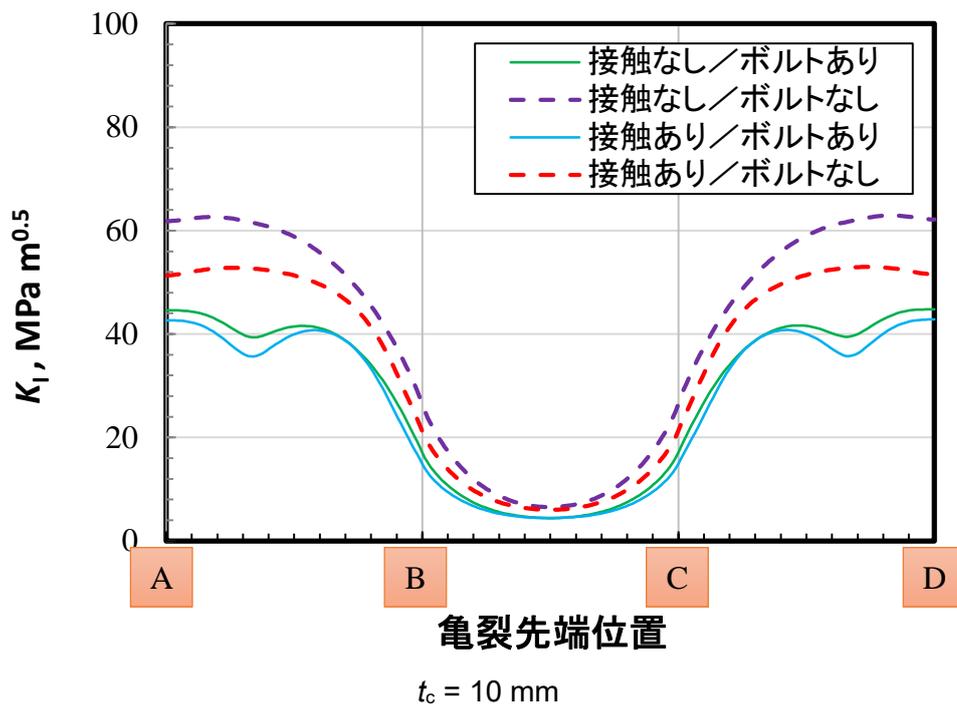


図 2.2-16 応力拡大係数 (内圧 1 MPa 負荷、 $H_c = 1250 \text{ mm}$ 、 $\mu = 0$)

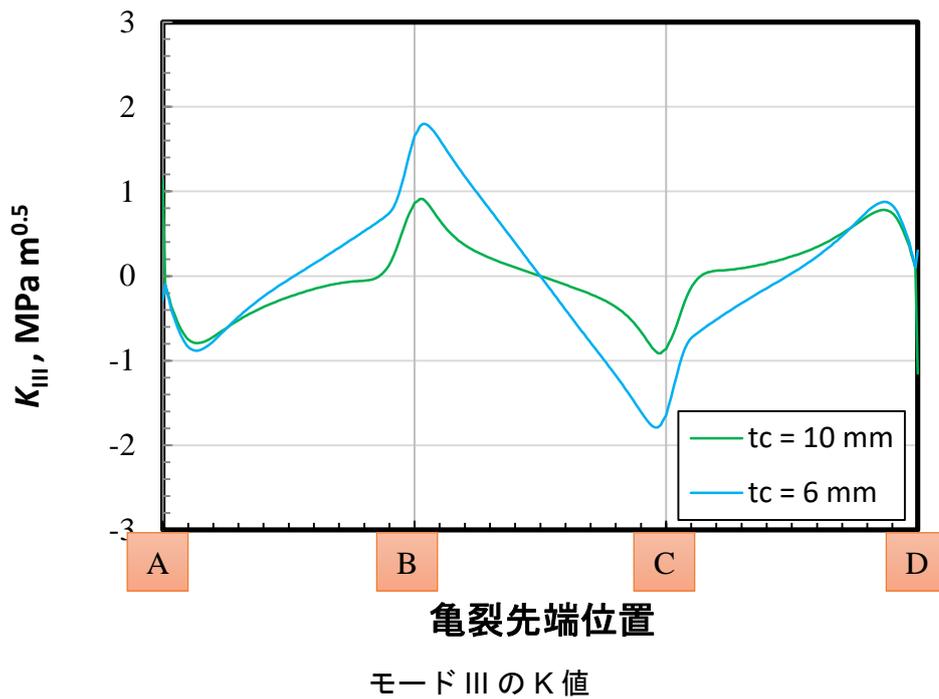
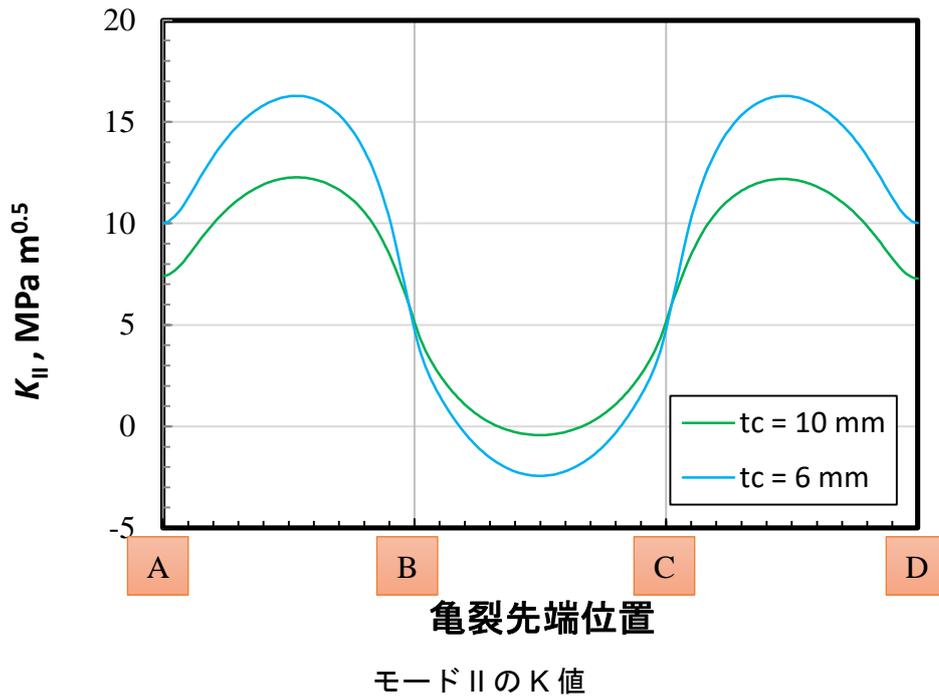


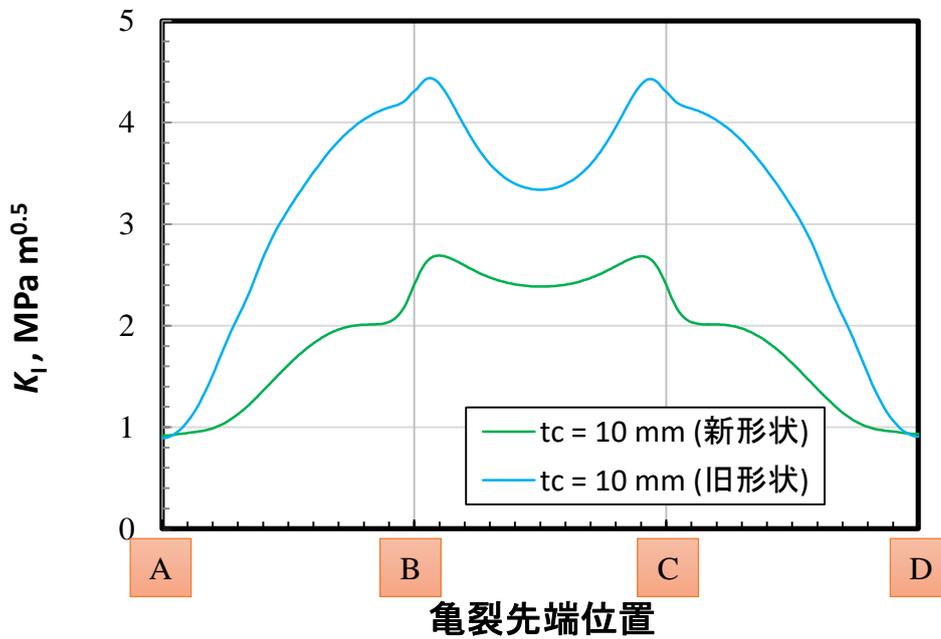
図 2.2-17 応力拡大係数（内圧 1 MPa 負荷、 $H_c = 1250 \text{ mm}$ 、 $\mu = 0$ ）

2) 外圧負荷

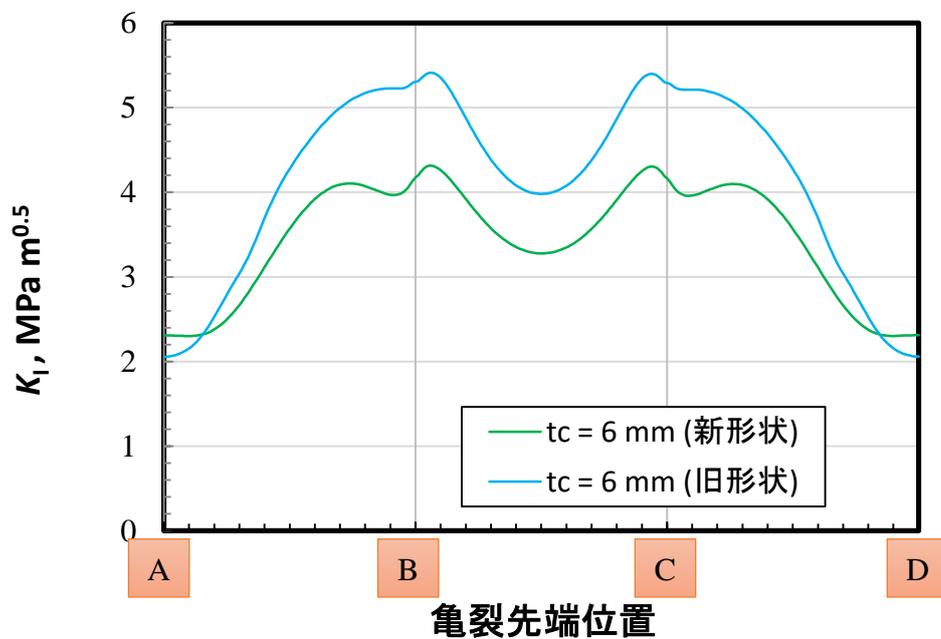
図 2.2-15 の一体型 2 重蓋構造に 1 MPa の外圧を負荷した場合のシール板の未溶接部（亀裂）前縁に沿った K 値を算出した。内圧負荷と同様に、K 値は外側の亀裂先端の各節点で算出した。モード I の K 値 (K_I) を図 2.2-18 に示す。新形状にすることで、K 値が大きく低下していることがわかる。外圧に対する K 値は内圧に対するそれよりも小さくなっている。それが、新形状に

することで、さらに低下した。

モード II とモード III の K 値を図 2.2-19 に示す。モード II とモード III の K 値は 概ね 1 MPa m^{0.5} を下回り、さらにマイナスになる場合もあった。



$t_c = 10 \text{ mm}$



$t_c = 6 \text{ mm}$

図 2.2-18 応力拡大係数 (外圧 1 MPa 負荷、 $H_c = 1250 \text{ mm}$ 、 $\mu = 0$)

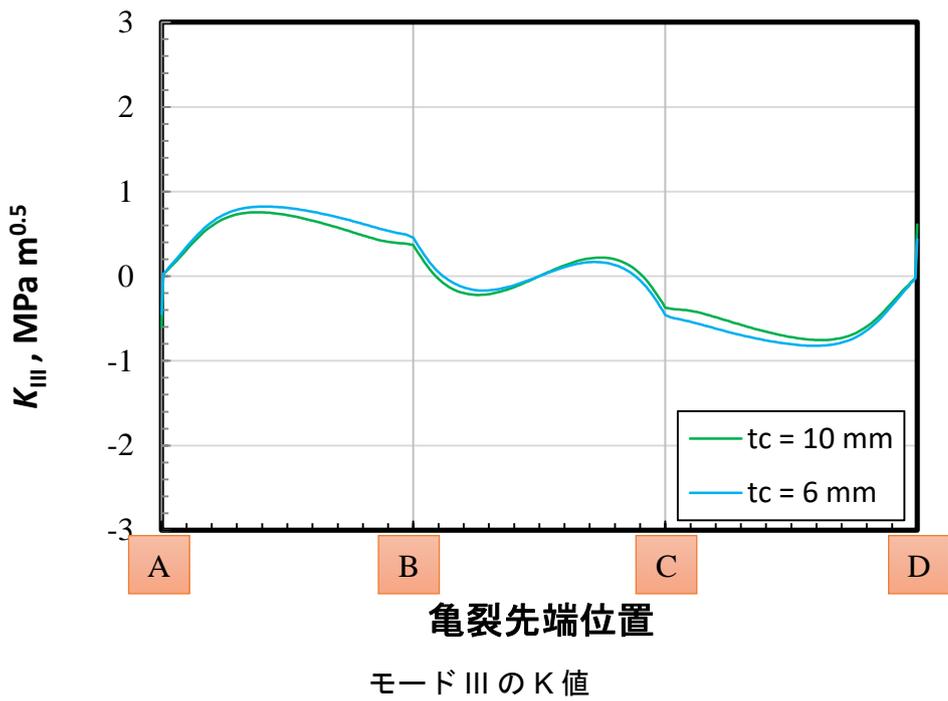
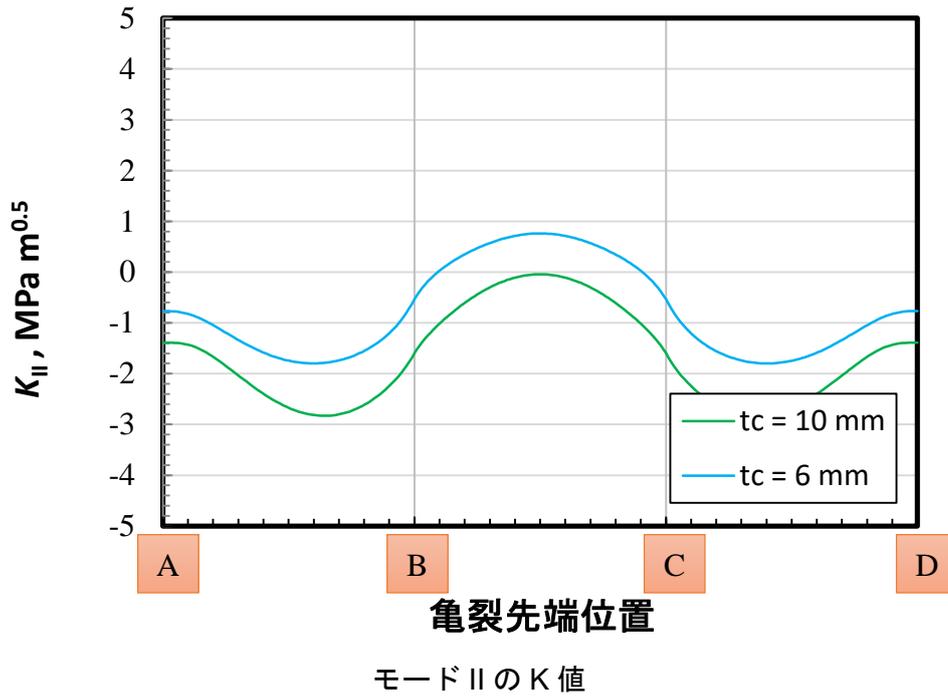


図 2.2-19 応力拡大係数 (外圧 1 MPa 負荷、 $H_c = 1250$ mm、 $\mu = 0$)

2.2.5 摩擦の影響

これまでの解析では摩擦係数は零として解析を行った。摩擦係数の影響を調べるために、 $t_c = 10 \text{ mm}$ の形状に対して摩擦係数 μ を0.2として解析を行った。図 2.2-20 に塑性崩壊解析の結果を示す。内圧に対して摩擦係数は全く影響しなかった。一方、外圧に対しては、 $\mu = 0.2$ とした方が、崩壊荷重が大きくなった。

応力拡大係数を図 2.2-21 に示す。崩壊荷重と同様に、内圧に対して摩擦係数の影響は見られなかった。一方、外圧に対しては $\mu = 0.2$ とした方の応力拡大係数が大きくなった。摩擦係数を考慮した方が保守側の評価となる。ただ、応力拡大係数が大きくなっても、内圧負荷時よりも相対的に小さい。

以上のことより、外圧荷重に対しては崩壊荷重と応力拡大係数に摩擦係数の影響が見られたが、摩擦係数を零 ($\mu = 0$) とおくことで、摩擦係数の影響を保守側に考慮できる。したがって、本編に掲載した解析では $\mu = 0$ を基本条件として実施した。

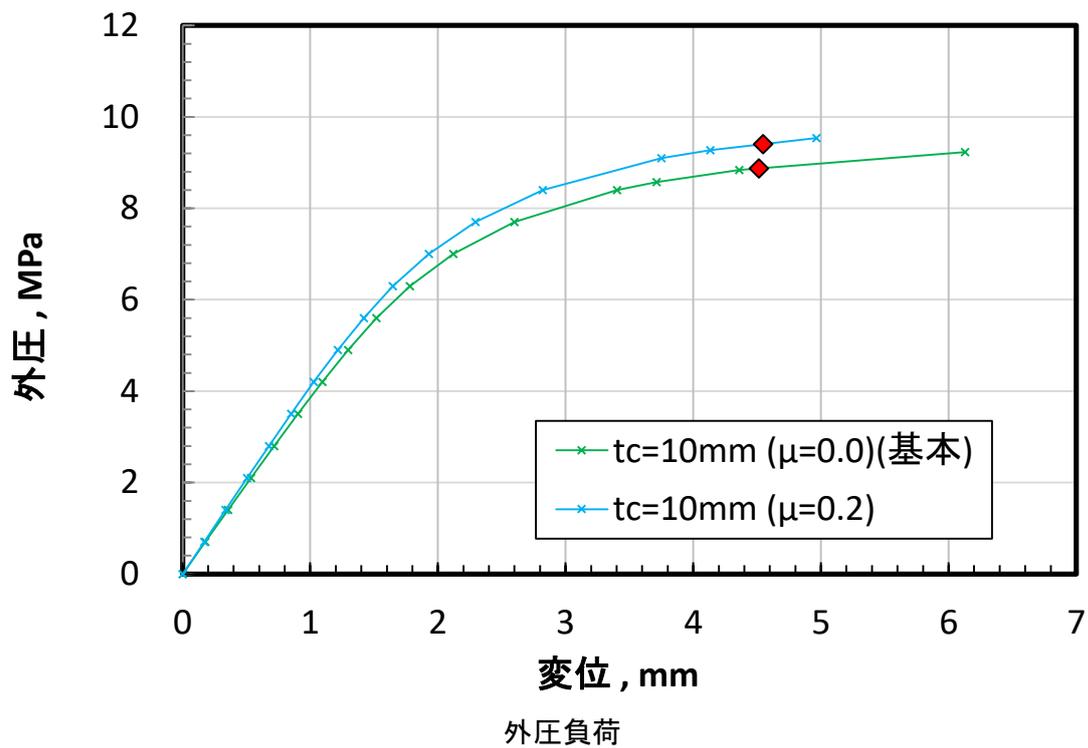
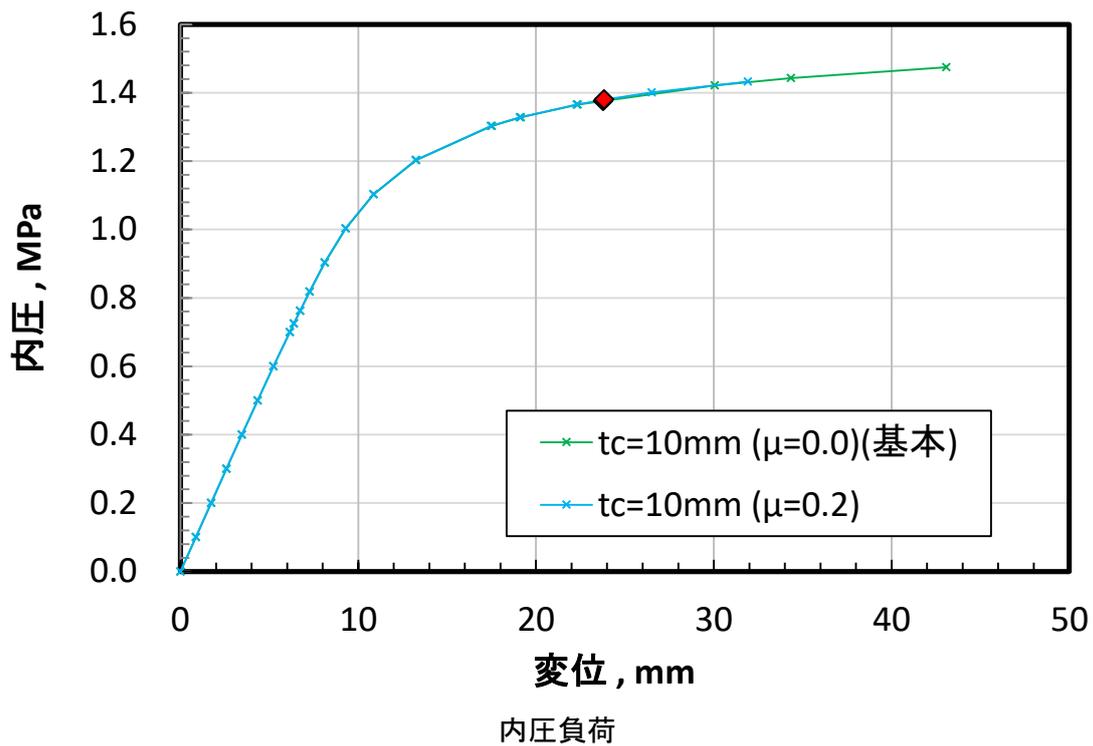


図 2.2-20 崩壊荷重に及ぼす摩擦の影響 ($t_c = 10$ mm)

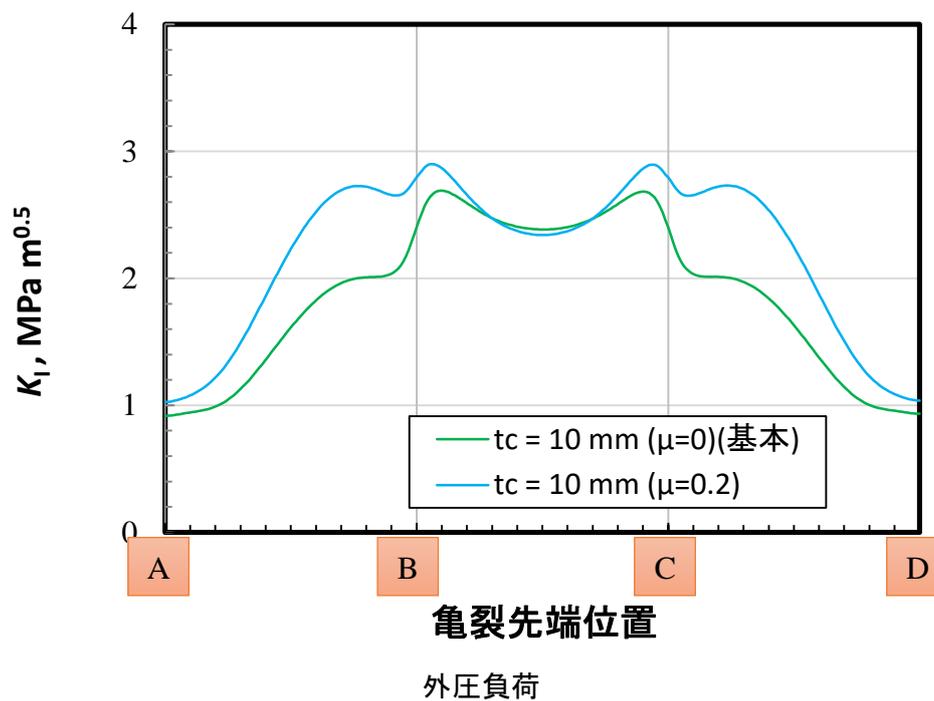
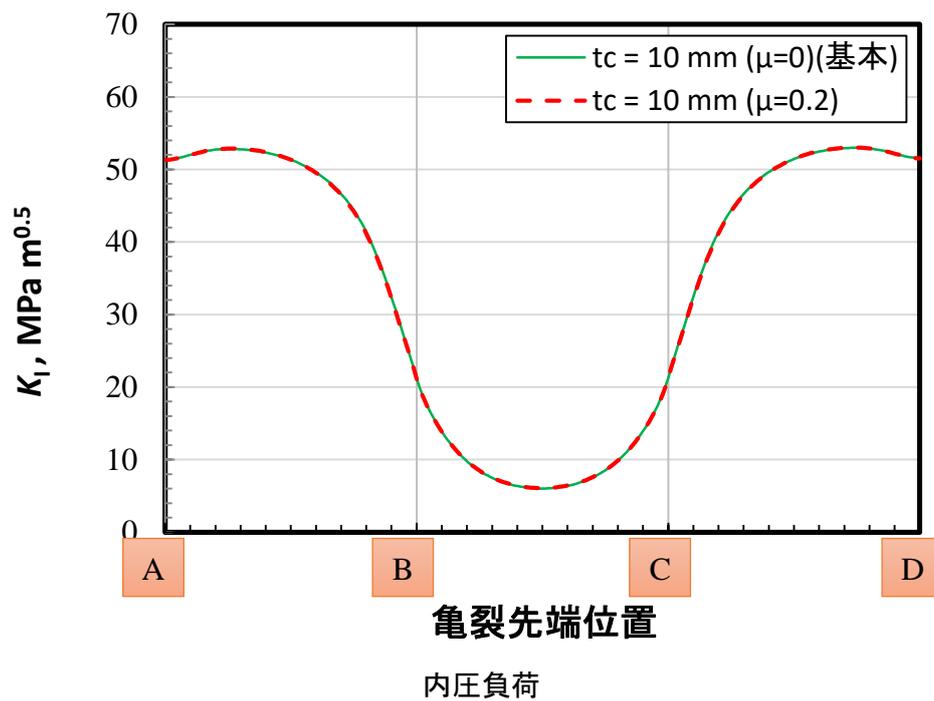


図 2.2-21 応力拡大係数に及ぼす摩擦の影響 ($t_c = 10 \text{ mm}$)

参考文献

釜谷昌幸, 北條智博, 望月正人, 中性子照射を受けた原子炉容器炉内構造物の構造健全性 (ステンレス鋼構造物の冷間加工による破壊強度変化), 日本機械学会論文集, **80**, SMM0252, 2014.

小林英男編, 構造健全性ハンドブック, 共立出版, 2005.

日本機械学会, 発電用原子力設備規格 設計・建設規格 事例規格 弾塑性有限要素解析を用いたクラス1容器に対する強度評価の代替規定, JSME S NA-CC-005, 2008.

日本機械学会, 発電用原子力設備規格維持規格, JSME S NA1-2016, 2016a.

日本機械学会, 発電用原子力設備規格設計・建設規格, JSME S NC1-2016, 2016b.

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

本補足説明資料は、紙面の都合等で報告書本編に記載できなかった実施項目ならびに試験条件等の詳細について補足するために作成するものである。

2. BPI ガラス固化体の製造とその均質性の確認

令和 2 年度に、BPI ガラス固化体からのヨウ素放出挙動に関する現象仮説を策定し、その検証に必要な浸漬試験を新たに開始することとしたことから、試験に供するガラス固化体試料を作製した。ガラスの製造には平成 22 年度に製作したガラス溶融パイロット試験装置（図 2.1-1）を使用し、ガラスの製造量は実工程として想定しているキャニスタへの封入時の約 1/3 の 2.5L サイズとした。アニール後の外観を図 2.1-3 参照に示す。

また、当初鉛原料として使用していた PbO が、環境影響等の観点から工業的に供給されなくなったことから、あらたに Pb_3O_4 を鉛原料として使用したことから、これまでに製造して試験体との相違がないこと、製造したガラスが均一なものであることを確認することとした。

2.1 BPI ガラス固化体の製造

平成 22 年度に製作したガラス溶融パイロット試験装置（図 2.1-1）を使用し、2.5L サイズの BPI ガラス固化体を製作した。原料による作製時の溶融状態を図 2.1-2 に、アニール後の外観を図 2.1-3 参照に示す。

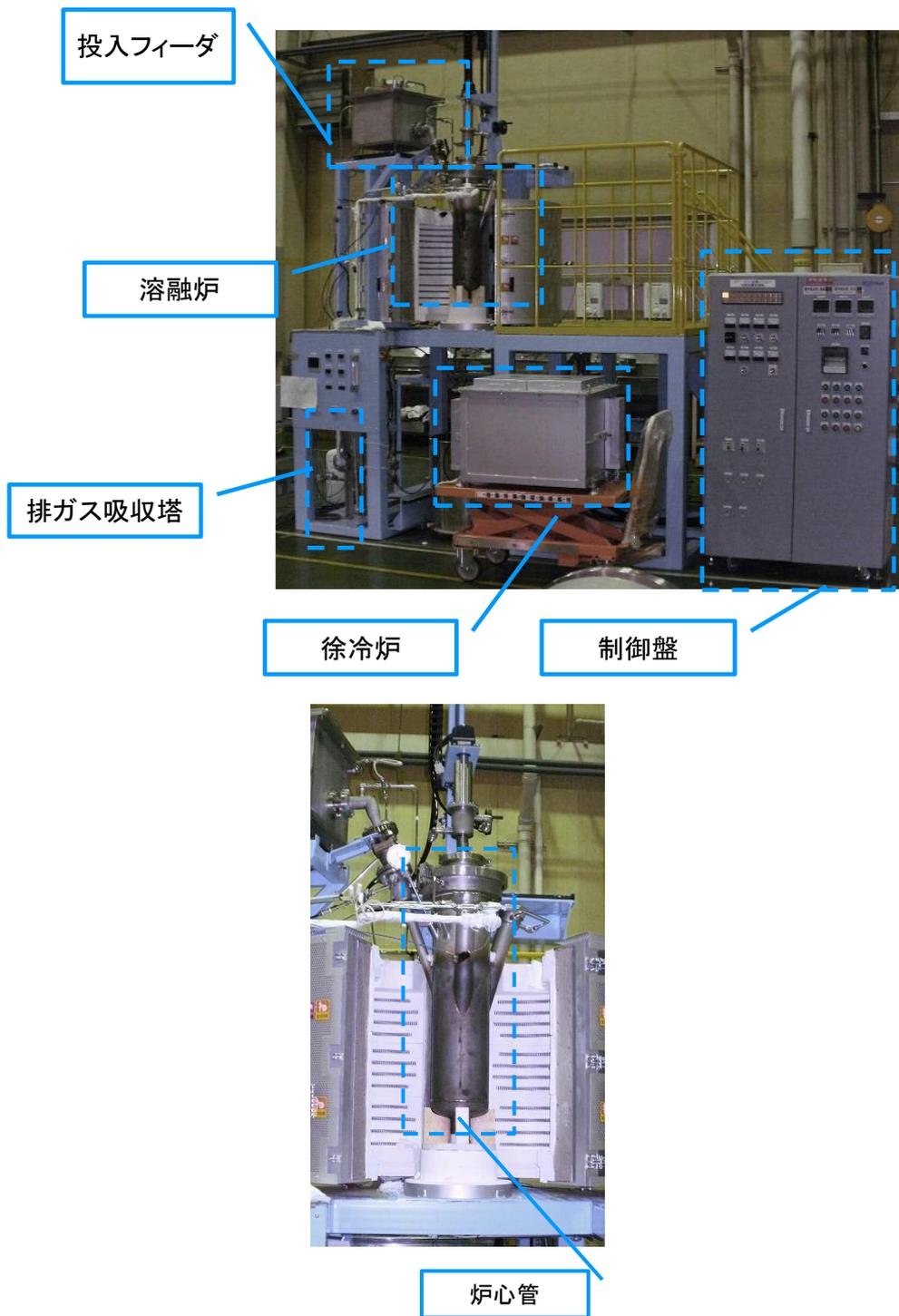
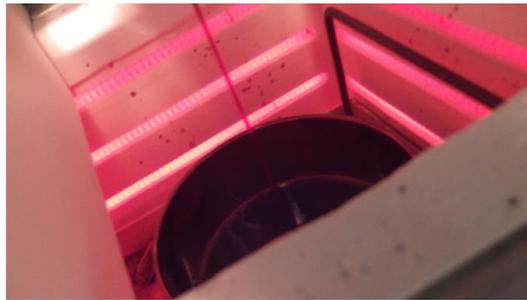


図 2.1-1 BPI ガラス溶融パイロット試験装置の全景及び溶融炉内部



溶融炉内部の状態



溶融後のBPIガラスの出湯

図 2.1-2 溶融及び出湯の状態



図 2.1-3 アニール後の BPI ガラスの外観

2.2 浸漬試験用の試験片の作製と均一性の確認

(1) BPI ガラスの密度

製造 BPI ガラス固化体から、浸漬試験用のクーポン試験片を切断加工して作製するとともに、製造したガラスの均質性を確認するため、クーポン試験片の密度を計測した。

作製した固化体を、左右¹と中央に 3 分割し、3 分割した各パートを上中下に分割した（計 9 分割）各パートから、20mm×10mm×5mm（体積 1cm³）の試験片を数個ずつ切り出し、各試験片の重量を計測することで密度を算出した。表 2.2-1 に、各パートから切り出したクーポン試験片の平均密度を示す。平均密度は 6.74g/cm³~6.76g/cm³ の範囲にあり、均質な固化体であることが確認できた。

表 2.2-1 切り出した各部分の平均密度

	左	中央	右
上	6.76	6.75	6.75
中	6.75	6.75	6.74
下	6.74	6.75	6.76

単位 g/cm³

¹ 固化体は円形なので、便宜上ある点を基準点として、基準点に対して左と右の区別をした。

(2) XRD

切り出した 9 箇所での XRD 測定を行った。測定条件は以下の通りである。結果を、図 2.1-1 に示すが、全ての箇所での非晶質であることを確認した。

【測定条件】

測定角度：5~82°

サンプリング幅：0.01

スキャンスピード：1° /min

電圧：40 kV 電流：40mA

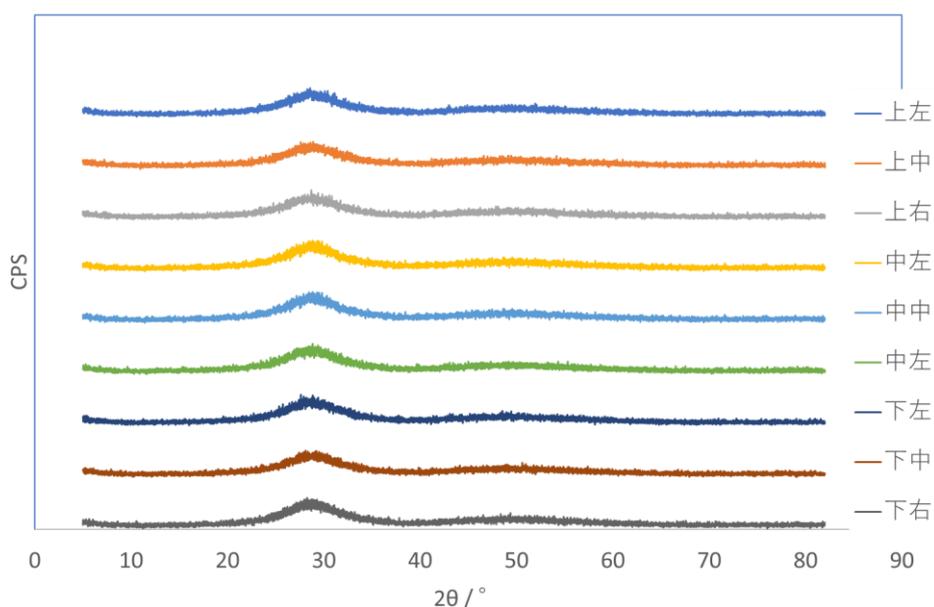


図 2.2-1 作製した BPI ガラスの XRD

(3) ヨウ素含有率

ヨウ素含有率の結果を表 2.2-2 に示す。各部分のヨウ素含有率はほぼ均一であり、その平均値は 1.81wt%であった。この値は、平成 27 年度に作製した固化体（ヨウ素含有率 1.82t%（原環センター，2016））と同等であった。

表 2.2-2 BPI ガラス固化体のヨウ素含有量測定結果

	左	中央	右
上	1.82	1.79	1.79
中	1.81	1.81	1.81
下	1.77	1.86	1.79

wt%

(4) まとめ

各箇所から切り出したクーポン試験片の密度とヨウ素含有率は、ほぼ均一となり均質な固化体であることが確認できた。また、非晶質であることを確認した。

3. BPI ガラスからのヨウ素放出挙動に関するモデル化の考え方（詳細）

3.1 溶解モデルの全体像

包括的技術報告書等、地層処分システムの長期安全性に関する Safety Case となるような図書において、BPI ガラスの溶解モデルがどのようなものとなるかは、そもそもプロセスとしての採否も含めて全く未定ではあるが、併置処分を前提とすれば、高レベル放射性廃液の固化に用いられるホウケイ酸ガラスの溶解モデルとの対比において議論されるであろうことは、想像に難くない。ここでは、同じ「ガラス」という固化媒体を切り口に、HLW のホウケイ酸ガラスと、廃銀吸着材の BPI ガラスとを、Safety Case として適用されるであろう溶解モデルについて記述することとする。2 つのガラスの評価モデル上の比較を表 3.1-1 に示す。

ホウケイ酸ガラスの場合も BPI ガラスの場合も、対象とする放射性核種に対する、基本的な閉じ込めのメカニズムは、「アモルファス状のガラス構造中に対象とする放射性核種を固溶させている」という点では、共通である。このことは、容器等による一般的な閉じ込めと異なり、ガラスそのものが破壊され（割れ）ても、ガラスが水と接しても²、そのことが直ちに閉じ込めている放射性核種の放出につながるわけではない、という点で、性能上、重要である。

ホウケイ酸ガラスと BPI ガラスでは、ガラスを構成する主成分が異なるため、その融点も大きく異なっており、前者では 1,000℃以上、後者では 550℃程度となっている。一般に融点が高い方が主成分の結合の強さが高いため、水に対する耐性も高い（溶解性が低い）と考えるのが自然である。

高レベル放射性廃液を固化するホウケイ酸ガラスでは、閉じ込めるべき放射性核種は、基本的に同廃液中の放射性核種全て（FP, CP, アクチニド）となる。したがって、Safety Case で適用されるモデルも、全ての放射性核種に適用可能な、ある意味汎用性の高い robust なモデルが選択されることとなる³。一方、廃銀吸着材の代替処理プロセスである BPI ガラスの場合は、閉じ込めるべき放射性核種は、再処理施設の換気系で捕集された放射性ヨウ素のみとなる。したがって、ヨウ素の閉じ込めが説明できるメカニズムであれば、他の放射性核種に対する閉じ込め機能は求められない。

第 2 次とりまとめ、包括的技術報告書等、Safety Case に示されているホウケイ酸ガラスの溶解モデルは、経時的に一定のガラス溶解モデルであり、HLW ガラス固化体の条件では、ホウケイ酸ガラスの寿命は 7 万年となっている。一方、Safety Case における BPI ガラスの溶解モデルは、今後議論されるべきものではあるが、開発目標としては 10 万年の寿命が掲げられている。先述の通り、ガラスの基礎物性に鑑みるに、ホウケイ酸ガラスの寿命：7 万年に対して、BPI ガラスの寿命：10 万年を主張するためには、ホウケイ酸ガラスとは異なるロジックによって、BPI ガラスの溶解モデルを構成する必要があることは明らかである。

上記の Safety Case の溶解モデルに対する閉鎖後初期の代替モデルとしては、化学親和力による溶解モデルが挙げられる。これは、①ホウケイ酸ガラスの場合は、溶液側に Si が溶解して Si の飽和濃度に達するまでは、②BPI ガラスの場合は、溶液側に Pb が溶解して Pb の飽和濃度に達するまでは、溶液側と固相側の濃度勾配（化学親和力）によって、ガラスの溶解が進行する、というモデルである。この化学親和力による初期のガラス溶解は、どちらのガラスにも共通して

² 水によるガラスマトリクス破壊・浸食がなければ、固溶している放射性核種の漏洩は起こらない。

³ 実際には、当該核種固有の析出物を形成して溶出を抑制する可能性があることを示唆する報告もあるが、評価上は後述する経時的に一定の保守的なガラス溶解速度で評価される。

適用可能な溶解モデルであると考えられるが、緩衝材によって拡散支配の場が提供されると考えられる状況では、比較的速やかに飽和に達すると考えられるため、基本的に長期のガラス溶解を説明する Safety Case では、あらわには表現されていない。

一方、経時的に一定とする Safety Case の溶解モデルに対して、ホウケイ酸ガラスの溶解速度が経時的に低下するという観察事実を説明するためのモデルとしては、例えば、水和変質モデルがある（稲垣、2005）。BPI ガラスにおいても、そのガラス溶解速度が経時的に減少する傾向があることは、様々な試験条件下で確認されている。BPI ガラスのガラス溶解速度が経時的に低下するメカニズムが、ホウケイ酸ガラスと同様の水和変質モデルであるかどうかはさらに慎重に検討しなければならないが、性能目標 10 万年を説明するためにヒントはこの辺りに隠されているものと期待される。

Safety Case におけるガラスの溶解モデルを説明する上で溶解速度と同時に重要なパラメータとして、評価上の表面積があり、ここにはガラスの割れが関係している。ホウケイ酸ガラスの場合、製造後冷却時の熱衝撃によって、ガラス固化体には、図 3.1-1 に示すように無数の割れが生じていることが観察されている（動力炉・核燃料開発事業団、1990）。これに対して、BPI ガラスでは基本的に融点が低く、(処理プロセスの選定にもよるが) アニーリングによる後処理を施すことも可能であるので、熱衝撃によるガラスの割れのリスクは低い（図 3.1-2 参照）。

ただし、ホウケイ酸ガラスにおいては、実際の割れから決まる幾何形状における表面積の増大ほどには、ガラスの溶解は促進されないことが分かっており、評価上の表面積の増大を示すファクターとして「破碎係数」を定義し、評価上は破碎係数=10 としている。同様の効果は BPI ガラスにおいても試験的に確認されており、BPI ガラスの場合、万一割れが生じた場合でも、その影響を低く抑えることができると考えられる。

表 3.1-1 ホウケイ酸ガラスと BPI ガラスの評価上のモデル比較

項目	HLW (ホウケイ酸ガラス)	廃銀吸着材 (BPI ガラス)
主成分	SiO ₂ と B ₂ O ₃	酸化鉛と B ₂ O ₃
融点	1,000°C以上	550°C
基本的な閉じ込め機構	アモルファス状のホウケイ酸ガラス中に放射性核種を固溶する。	アモルファス状の BPI ガラス中に放射性ヨウ素を固溶する。
放射性核種	高レベル廃液中の核種 (FP, CP, アクチニド)	放射性ヨウ素
Safety Case におけるガラス溶解モデル	長期的に一定の保守的なガラス溶解速度	(未定)
寿命	7 万年	10 万年 (開発目標)
代替的なガラス溶解モデル	化学親和力による溶解 (初期) 水和変質モデル (長期)	(未定)
割れ	製造過程で、割れを回避できない。	割れを極力回避可能。

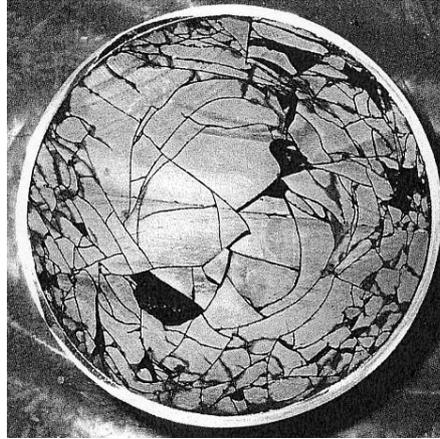


図 3.1-1 実規模固化体（ホウケイ酸ガラス）の観察例



図 3.1-2 モックアップ試験におけるアニーリング後の BPI ガラスの概観

3.2 主要元素の溶解

(1) ホウ素の溶解

Rawson (1967) によれば、ホウ素 (B) の酸化物は、それ自体単独でガラス化できる CGF (Conventional Glass Former) であり、後述する鉛 (Pb) と共に BPI ガラスの網目構造を形成していると考えられる。

BPI ガラスの微細構造において、ホウ素は 3 配位 (BO_3 : 以降 B3 と記載) あるいは 4 配位 (BO_4 : 以降 B4 と記載) 構造をとっているものと考えられ、 ^{11}B MAS NMR 分析結果によれば、ガラスフリット ($65\text{PbO} + 30\text{B}_2\text{O}_3 + 5\text{ZnO}$) 及び BPI ガラス中では、ほぼ $\text{B3} : \text{B4} = 7 : 3$ となっていることが推測される。この B3 と B4 の比は、 $\text{PbO} \cdot \text{B}_2\text{O}_3$ 二成分ガラスを対象とした Takaishi et al. (2000) の結果と整合的である。

BPI ガラスを溶液中に浸漬させ、ガラスマトリクスが破壊・浸食され、ホウ素が溶液中に放出された場合には、基本的に可溶性であり、溶液中ではホウ素はホウ酸イオンとして存在している

と考えられる⁴。ホウ酸イオンは他の元素との相互作用によって沈殿形成など、ホウ素のマスバランスを考慮する上での sink 項とはなりにくいので、溶液中のホウ素濃度の上昇分は、BPI ガラスの溶解によって生じたものとみなすことができる。また、BPI ガラスの溶解・変質によってガラス表面に変質層が形成されるが、これまでの固相分析結果からは、地層処分環境において標準的と考えられる溶液条件においては、変質層にはホウ素が存在しないことが観察されている事実は、ホウ素を BPI ガラス溶解の指標とすることの妥当性を裏づけている。

(2) 鉛の溶解

Rawson (1967) によれば、鉛 (Pb) の酸化物は、単独でのガラス化は困難であるが、他成分系とすることでガラス化できる NCGF (Non-Conventional Glass Former) であり、先述のホウ素 (Pb) と共に BPI ガラスの網目構造を形成していると考えられる。

BPI ガラスの微細構造において、鉛は複数の配位構造をとりうるものが、微視的固相分析の観察結果から示唆されている。

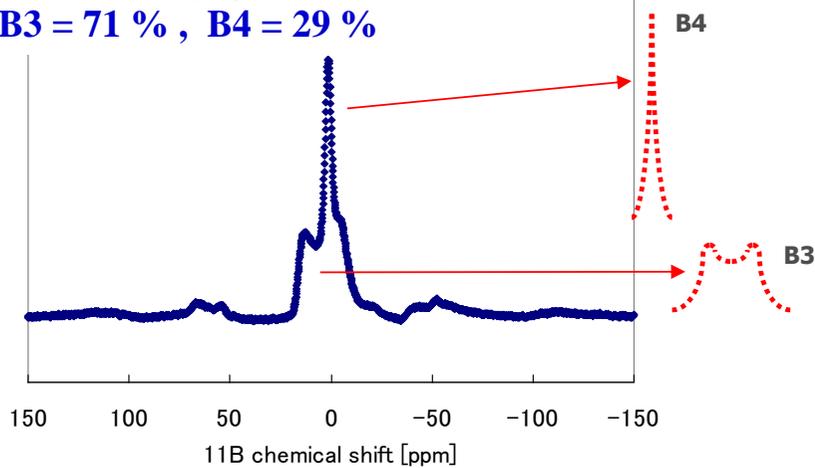
BPI ガラスを溶液中に浸漬させ、ガラスマトリクスが破壊・浸食され、鉛が溶液中に放出された場合、溶液中の他元素との複雑な相互作用を生じる。また、難溶性があることも多く、溶液中の鉛濃度が低く保たれている (濃度下限未満) ことが多い。

BPI ガラスの溶解・変質によってガラス表面に変質層が形成されるが、これまでの固相分析結果からは、地層処分環境において標準的と考えられる溶液条件においては、変質層は鉛を含む鉱物 (ハイドロセルサイト $\text{Pb}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$, セルサイト PbCO_3) から構成されていることを示す観察事実が多数確認されている。特にマイクロリアクターによる流水型浸漬試験においても、変質層がこれらの鉱物で構成されていることから、これらの鉱物は、一旦溶液中に溶解した鉛が再沈殿することによって形成されるのではなく、pristine glass が変質層を形成する過程において固相側の相変化として形成されていることが示唆されており、BPI ガラスの変質層を構成する鉱物としては蓋然性が高いものと考えられる。

⁴ $\text{BO}_3^{3-}/\text{HBO}_3^{2-}/\text{H}_2\text{BO}_3/\text{H}_3\text{BO}_3^0$ の speciation は溶液の pH によって決まる。

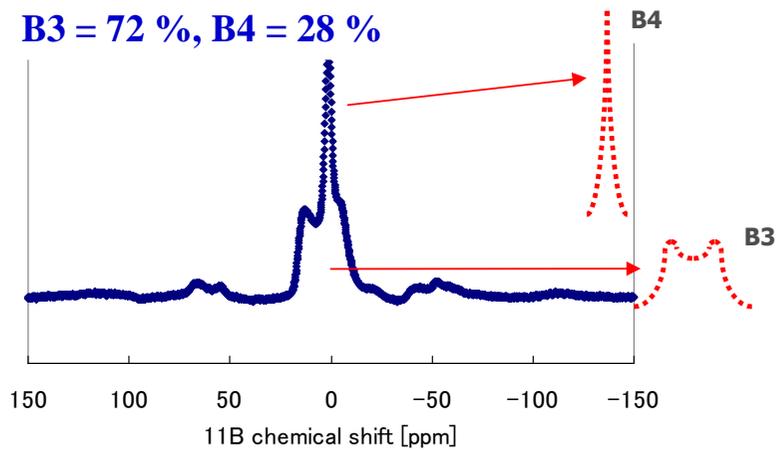
65PbO + 30B₂O₃ + 5ZnO Glass

B3 = 71 % , B4 = 29 %



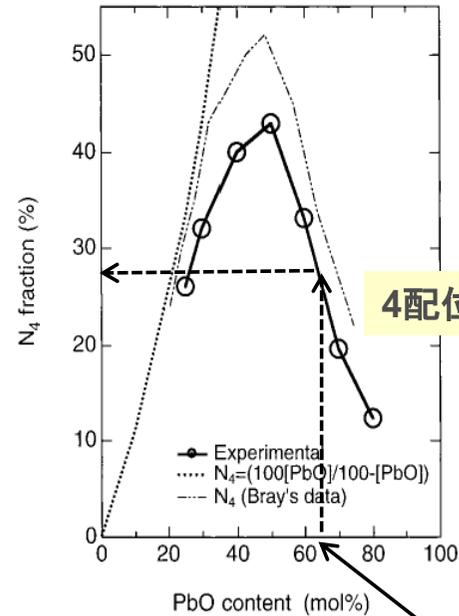
BPI Glass

B3 = 72 % , B4 = 28 %



PbO-B₂O₃ 二成分ガラスの結果

Takaishi et al. (2000)



BPIガラスに対応する
Pb含有量

B3(3配位)とB4(4配位)との比は、ガラスフリット及びBPIガラスのいずれも約7:3程度である。
PbO-B₂O₃二成分ガラスの既往研究から予想される3配位の比とも良く一致

図 3.2-1 BPI ガラスの微細構造におけるホウ素

(3) ヨウ素の溶解

ヨウ素 (I) は BPI ガラス固化処理プロセスにおいて、同マトリクス中に閉じ込めるべき対象となる元素 (放射性核種) である。ヨウ素は微量成分であり、ガラス構造そのものには与らないガラス修飾成分 (Network Modifier) である。

①BPI ガラス (ヨウ素含有量 : 2 wt%)、②BPI ガラス (ヨウ素含有量 : 1 wt%)、③KI 結晶、④PbI₂ 結晶、⑤KIO₃ 結晶を対象として XPS 分析を行い、I 3d 結合エネルギー領域の光電子スペクトルから結合エネルギー (BE) 及び半値幅 (FWHM) を求めた結果を、図 3.2-1 に示す。この結果より、BPI ガラスの微細構造における、ヨウ素の存在状況について、以下のことが示唆される。

- KI、PbI₂ 及び KIO₃ に関する測定結果から、BPI ガラス中のヨウ素の存在状態は、ヨウ化物イオン (酸化数 : -1) であると判断される。
- BPI ガラス中の I 3d 結合エネルギーは、KI に比較して低く、PbI₂ の場合もまた、I 3d 結合エネルギーが KI に比較して低いことから、BPI ガラス中のヨウ素は、PbI₂ に類似した電子状態にあり、これは、BPI ガラス中のヨウ素は選択的に Pb-I 結合を生成していることを示唆している。

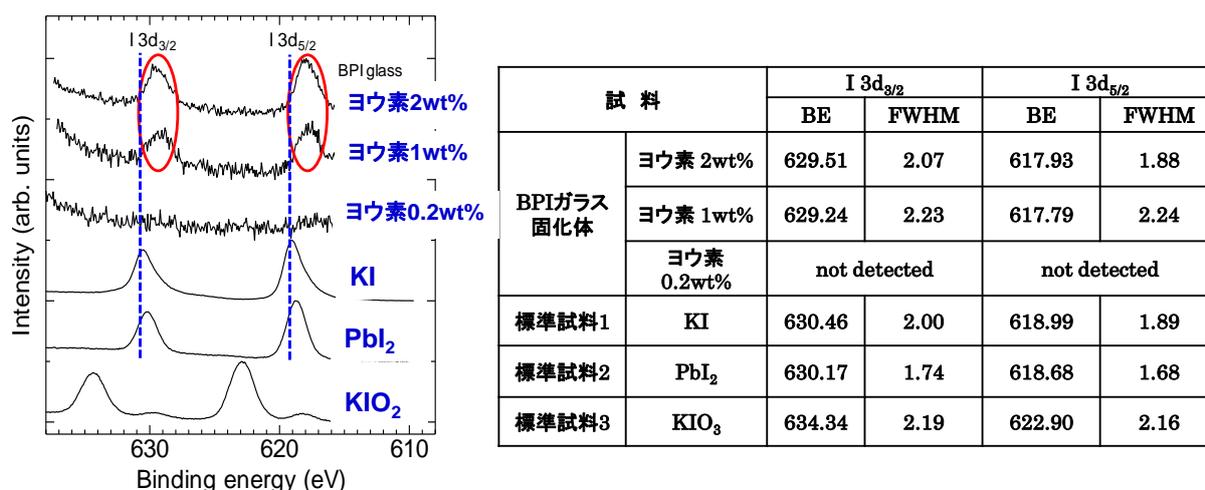


図 3.2-2 XPS 分析結果に基づく BPI ガラス中のヨウ素の存在状態の類推

すなわち、BPI ガラスの微細構造において、ヨウ素は鉛の近傍に修飾成分として存在しており、鉛による網目構造が破壊される際に、ヨウ素もガラス構造から外れていることが推測される。ヨウ素は基本的に可溶性であり、またホウ素と同様に、これまでの固相分析結果からは、地層処分環境において標準的と考えられる溶液条件においては、変質層にはヨウ素が存在しないことが観察されていることから、ガラス構造から外れたヨウ素は全て液相側に放出されているものと考えられることができる。

3.3 ヨウ素放出現象モデルの検討のための浸漬試験（詳細）

(1) 炭酸塩影響試験の条件

BPI ガラスからのヨウ素の放出は、液相に含まれる炭酸成分の濃度に依存している。そのため、その依存性を明らかにするため、表 3.3-1 及び表 3.3-2 に示す条件で浸漬試験を実施し、本年度は 200 日及び 400 日のデータを取得した。

表 3.3-1 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 10×20×5 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 3.3-2 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/m²) 及び規格化浸出率 R (g/m²/d) は、それぞれ式(3.3-1)と式(3.3-2)により算出した。

$$Q = \left(\frac{\left(\frac{A_t}{A_0} \times W_0 \right)}{S} \right) \quad (3.3-1)$$

$$R = \frac{Q}{d} \quad (3.3-2)$$

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 (m²), d : 浸漬日数 (日)

(2) ガラス表面近傍分析の結果の詳細

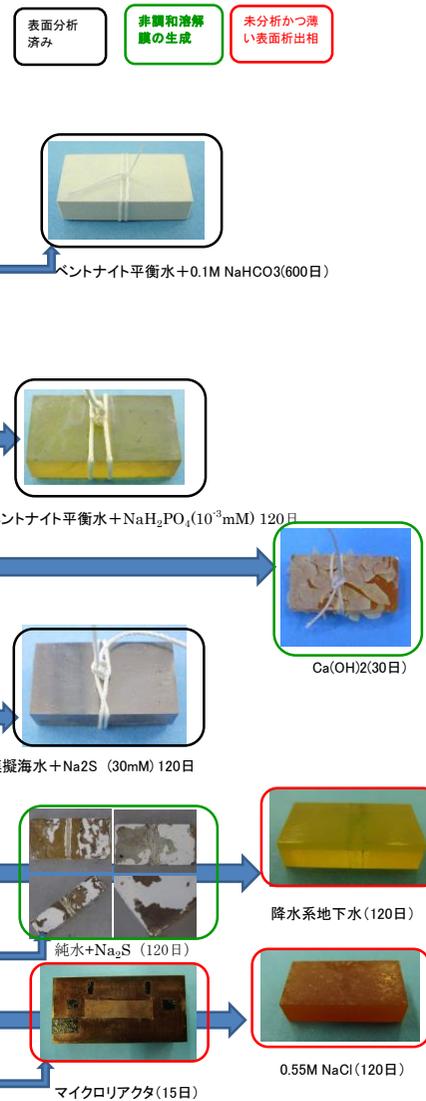
ガラス表面近傍での溶解挙動のモデル化を検討するため、浸漬試験後の BPI ガラス固化体について、表面に析出相ができないようなサンプルの表面分析を実施した。表 3.3-3 に、過去の固相分析結果の一覧を示す。表中、黒枠で囲ったサンプルは、表面分析の結果 hidroセルサイト (hidroセルサイト) やガレナ (galena)、パイロモルファイト (pyromorphite) などの変質層が生成したものである。緑枠で囲った試料は、ホウ素とヨウ素が、非調和溶解する条件で浸漬した試料で、表面に膜状の析出物が認められた。赤枠の試料が、目視上は表面に析出物は認められず、かつ未分析の試料であるので、これを分析することとした。具体的には、以下の 3 種類である。①のマイクロリアクタ通水試験は、逆反応 (析出反応) を抑制できるので、静的浸漬試験で観察される hidroセルサイトの生成の抑制が期待できる。②の降水系地下水は NaHCO₃ 濃度が低い、③の NaCl 溶液は炭酸イオンを含まないので、hidroセルサイトの生成の抑制ないしは、生成していないと判断して分析に用いた。

- ① ベントナイト平衡水を使用し、マイクロリアクタ通水試験後の試料
- ② 降水系地下水(3.55mM NaHCO₃+0.11mM CaSO₄) に浸漬後の試料
- ③ 0.55M NaCl 水溶液に浸漬後の試料

表 3.3-3 これまでに実施した固相分析結果の一覧

浸漬試料一覧 (PbO2原料)

浸漬液	最長期間 / d	調和/非調和	備考	試験時期	固相分析
ベントナイト平衡水	800	調和	-	~2013年	ハイドロセルサイト
ベントナイト平衡水 +0.01M NaHCO3	800		炭酸塩影響 (ベントナイト平衡水中)	~2016年	ハイドロセルサイト、セルサイト
ベントナイト平衡水 +0.05M NaHCO3	800			~2018年	
ベントナイト平衡水 +0.07M NaHCO3	800			~2018年	
ベントナイト平衡水 +0.1M NaHCO3	800			~2016年	
ベントナイト平衡水 +Na2S(0.5mM)	120		HS ⁻ 影響 (ベントナイト平衡水中)	2014年	ハイドロセルサイト、ガレナ
ベントナイト平衡水 +Na2S(1mM)	350		2019年		
ベントナイト平衡水 +3 × 10 ⁻³ mM NaH2PO4	120		リン酸影響 (ベントナイト平衡水中)	2016年	目視では黒みがかかるが、結晶は薄い(ハイドロセルサイト、高濃度ではハイドロキシバイロモルファイト)
ベントナイト平衡水 +3 × 10 ⁻⁴ mM NaH2PO4	120			2016年	
ベントナイト平衡水 +1mM NaH2PO4	350			2019年	
Ca(OH)2	800	非調和	-	~2013年	保管中のCO2の影響あり
模擬海水 (0.55M NaCl+0.05M NaHCO3)	800	調和	-	~2013年	NaPb2(CO3)2(OH)
模擬海水 +Na2S(0.5mM)	120		HS ⁻ 影響 (模擬海水中)	2014年	目視では、銀白色だが析出結晶は薄い(ガレナ、ハイドロセルサイト)
模擬海水 +Na2S(30mM)	350		2019年		
模擬海水 +3 × 10 ⁻⁴ mM NaH2PO4	120		リン酸影響 (模擬海水中)	2016年	未分析
模擬海水 /ベントナイト平衡水	800		模擬海水で作製したベントナイト平衡水	~2018年	NaPb2(CO3)2(OH)、ハイドロセルサイト
降水系地下水 (3.55mM NaHCO3+0.11mM CaSO)	120	調和	-	2016年	未分析
降水系地下水 +3 × 10 ⁻³ mM NaH2PO4+1.5 × 10 ⁻² mM NaCl	120	調和	リン酸影響 (模擬降水水中)	2016年	未分析
純水 +Na2S(0.5mM)	120	非調和	HS ⁻ 影響 (純水中)	2014年	膜の生成 鉛の炭酸塩検出(保管中のCO2の影響?)
0.55M NaCl	120	調和	-	2009年	未分析
ベントナイト平衡水(マイクロアクタ)	15	EPMAの表面分析で、ホウ素及びヨウ素の溶出を確認(溶液中のヨウ素は定量下限以下)		2010年	未分析



1) ベントナイト平衡水を使用したマイクロリアクタ通水試験後の試料

図 3.3-1 に、マイクロリアクタ通水試験後の BPI ガラスの断面の SEM 画像を示す。通水液と接触しない母材部分（溶液未接触部）には何も見られないが、溶液接触部には表面下 $\sim 2\mu\text{m}$ の均一な変質層が形成されている。図 3.3-2 に示す XRD の結果より、これは静的浸漬試験においても観察された、微細な hidroセルサイトであると考えられる。半値幅もそれなりに広く、また配向は見られないので、SEM 観察で見られる表面下に一様に形成された変質層に対応するものと考えられる。なお、 $2\theta=35^\circ$ 付近に金(Au)のピークが認められるが、これは平成 22 年に EPMA を測定した際に蒸着した金に由来する。

図 3.3-3 に、静的浸漬試験に用いた BPI ガラスの TEM 画像を、図 3.3-4 に、マイクロリアクタ通水試験の TEM 画像を示す。両者の変質層は、似たようなポーラスの構造をしている。図 3.3-5 には、静的浸漬試験とマイクロリアクタ通水試験におけるホウ素の溶出量から計算される変質層の厚みと SEM で観察される変質層の厚みの比較を示す。静的浸漬試験、マイクロリアクタともに、SEM 画像から計測される変質層の厚みは、浸出試験から計算されたホウ素溶出部分の厚みとほぼ一致した。静的浸漬試験の浸漬期間 30 日の変質層の厚みとマイクロリアクタの通水期間 15 日の厚みがほぼ同じとなり、浸出速度に差は有るものの、ほぼ同等の変質層が生成した。

図 3.3-6 に、マイクロリアクタ通水試験後の STEM-EDS による組成マッピングの結果を示す。変質層まで炭素 (C)が検出され、この層が炭酸塩（つまり hidroセルサイト）であることがわかる。また BPI ガラスに含まれる微量成分である I, Zn, Bi については、まずヨウ素 (I)は変質層の境界から上で明らかに検出されにくくなり、hydroセルサイトには含まれないと言える。一方亜鉛 (Zn)とビスマス (Bi)は変質層の深部から表層部に向かって徐々に減少しているように見える。

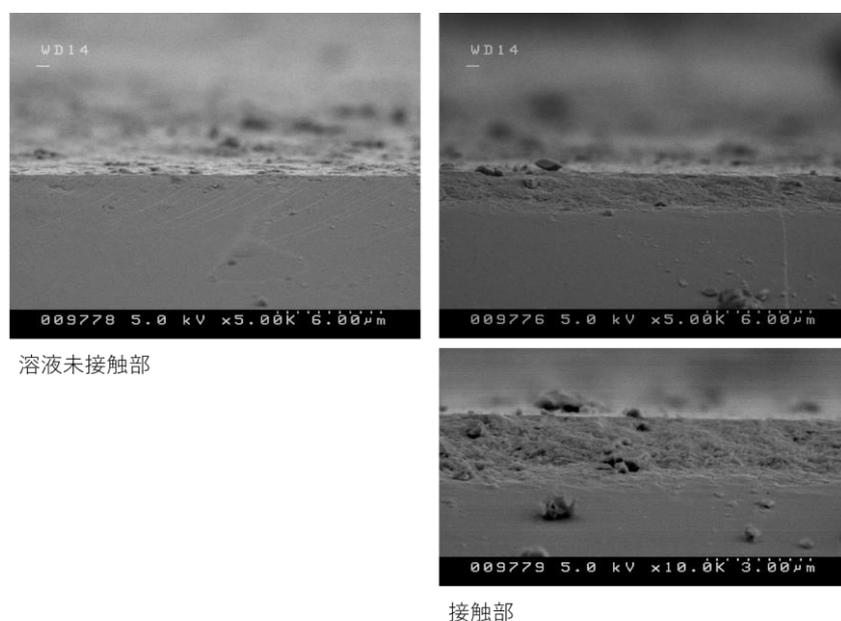


図 3.3-1 マイクロリアクタ通水試験後の BPI ガラスの断面の SEM 画像

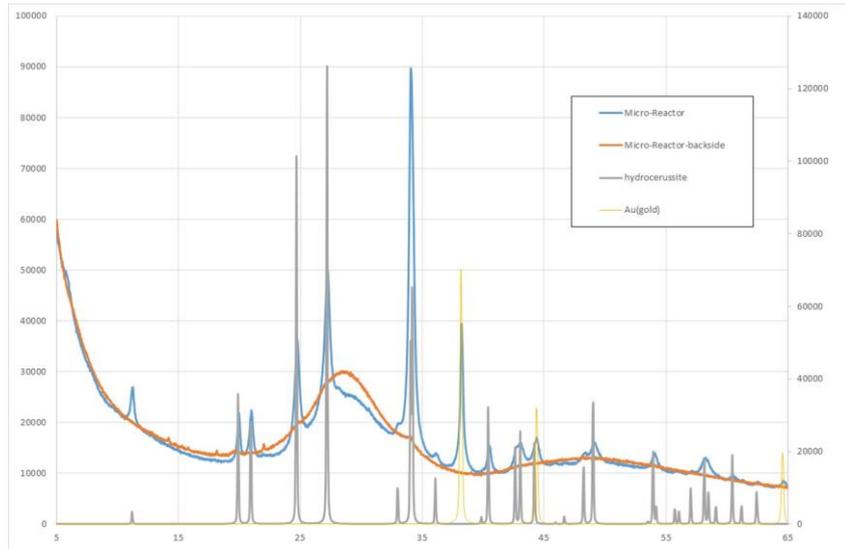


図 3.3-2 マイクロリアクタ通水試験後の BPI ガラスの XRD

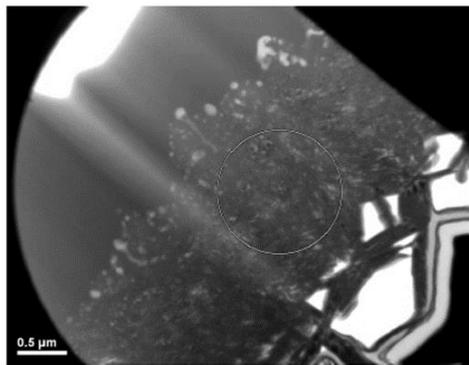


図 3.3-3 ベントナイト平衡水に浸漬した BPI ガラスの TEM 画像（静的浸漬試験）

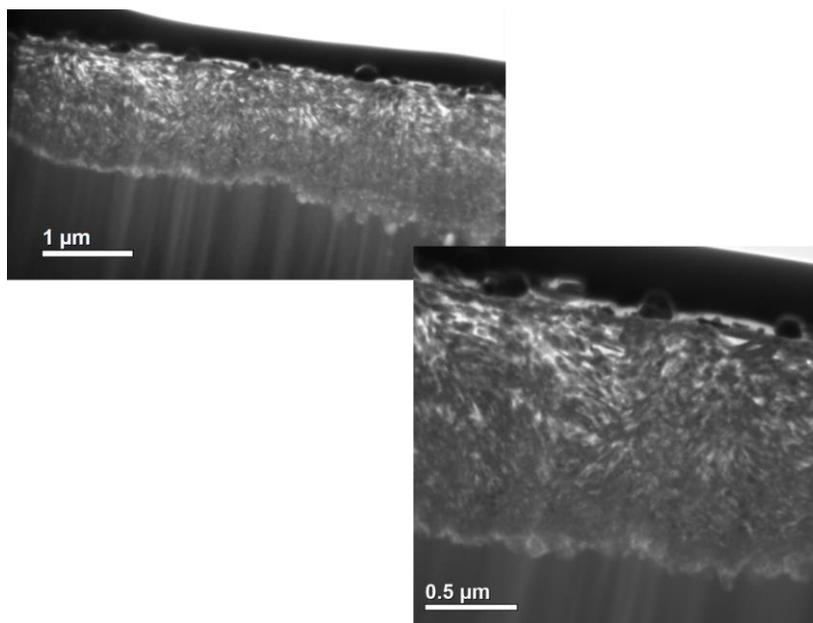


図 3.3-4 マイクロリアクタ通水試験後の BPI ガラスの TEM 画像

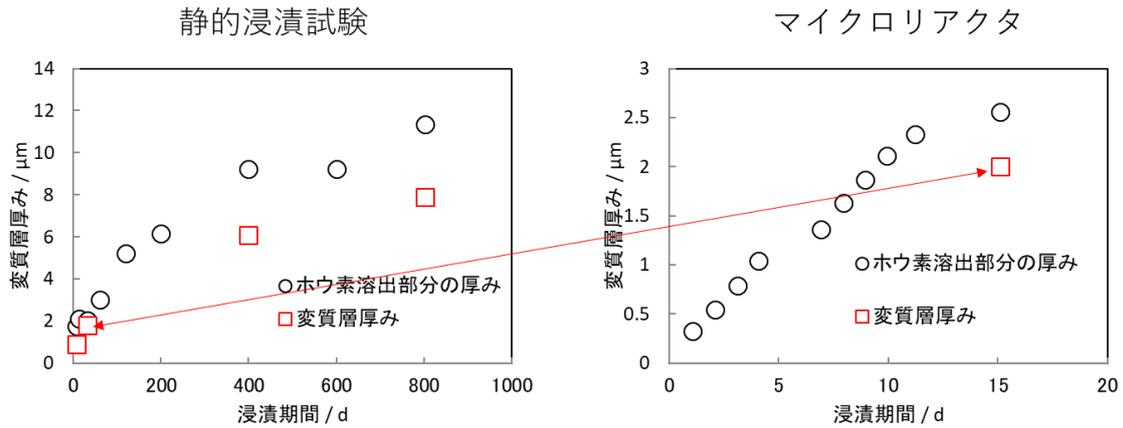


図 3.3-5 静的浸漬試験とマイクロリアクタ通水試験の変質層の厚みの比較

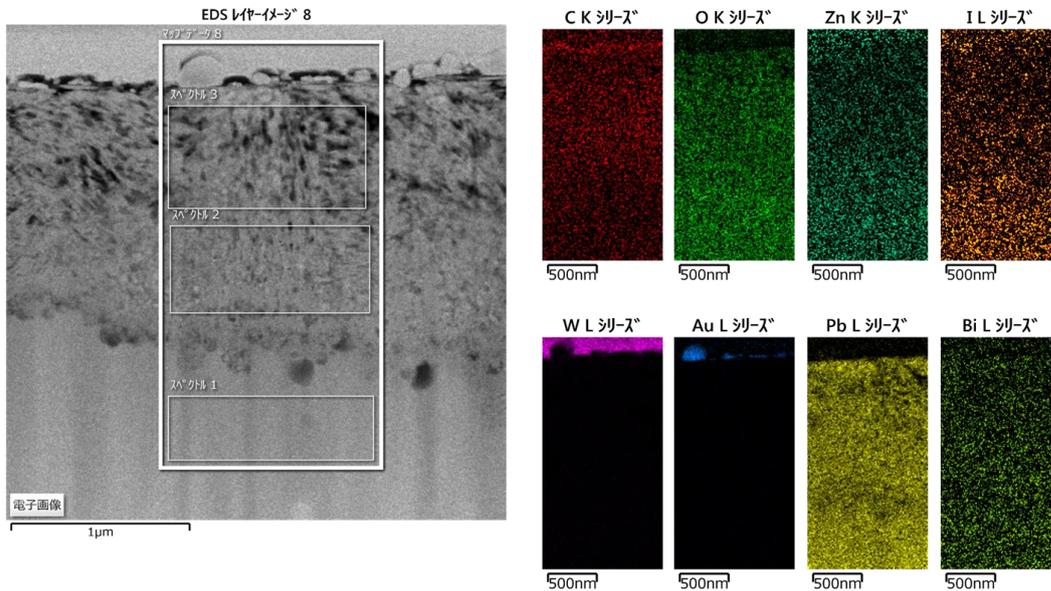


図 3.3-6 マイクロリアクタ通水試験後の BPI ガラスの STEM-EDS マッピング

2) 降水系地下水(3.55mM NaHCO₃+0.11mM CaSO₄) に浸漬後の試料

図 3.3-7 に、降水系地下水に浸漬後の BPI ガラスの XRD パターンを示す。ガラス基板の halo ピークが強く出ているので、析出した結晶は薄いと考えられる。1つのピーク (11.84°、 $d=7.48 \text{ \AA}$) 以外はすべてハイドロセルサイトに帰属できた (図中灰色が計算パターン)。半値幅もそれなりに広く、また配向は見られないので、SEM 観察 (図 3.3-8) で見られる表面下に一様に形成された変質層に対応するものと考えられる。また 11.84 \AA のピークはこれまでに炭酸 ZnAl 系複合含水酸化物 (LDH, 鉱物名はザッカーニャイト, $(\text{Zn}_{0.667} \text{Al}_{0.333})_2 (\text{OH})_4 (\text{CO}_3)_{0.333} (\text{H}_2\text{O})$, ICSD No. 92692)) と主ピークと角度が一致した。図 3.3-8 の断面の SEM 画像からは、表面下 $\sim 1.5 \mu\text{m}$ の厚さに均一な変質層が形成されている。表面の不均質な微粒子からは Zn, Al, Si, Fe などが検出されており、これが XRD における 11.84 \AA のピークに対応した物質と考えられる。

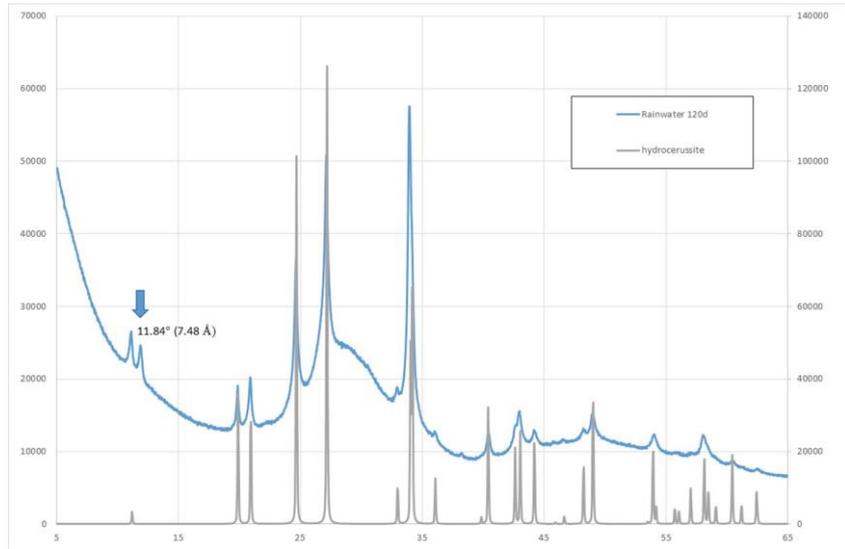


図 3.3-7 降水系地下水に浸漬した BPI ガラスの XRD

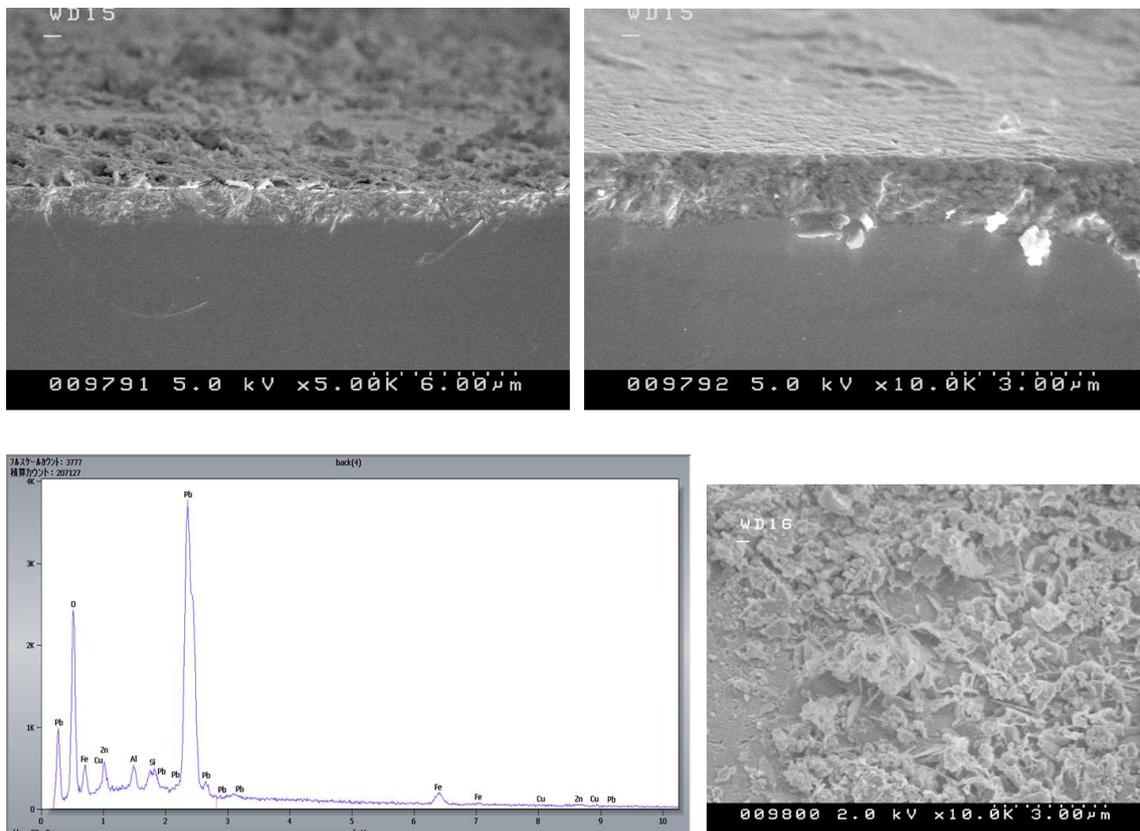


図 3.3-8 降水系地下水に浸漬した BPI ガラスの SEM-EDS

3) 0.55M NaCl 水溶液に浸漬後の試料

図 3.3-9 に、NaCl 中に浸漬した BPI ガラスの SEM 画像を、図 3.3-10 に EDS 結果を、図 3.3-11 に EDS による組成マッピングを示す。この表面上の物質からは Na が特徴的に検出された。一方、ガラスの断面を見ると、不均質な厚さで、内部に向かって凸状の変質層が形成されていた。EDS による組成マッピング (図 3.3-11) を取ると、この変質層からは Pb と Cl が特徴的に検出された。

図 3.3-12 に XRD の結果を示す。NaPb₂(CO₃)₂(OH)に帰属されるピークが認められるが、これは、表面上の物質と対応していると考えられ、保管中に大気中の CO₂ と反応したために生成したものと思われる。一方青い矢印のピークは基板内の変質層に対応すると考えられ、粉末 X 線回折相同定プログラム (Rigaku PDXL) を用いて、Pb, Cl, O, (H) を含む無機物質で検索した。その結果、Lead_oxide_chloride_hydrate (3PbO·PbCl₂·H₂O, PDF No. 00-032-0532) で主要なピークが説明できた。この物質のデータはあまり信頼性がないが、おそらくこのような物質が変質層に対応していると考えられる。

図 3.3-13 には、STEM-EDS による組成マッピングの結果を示す。SEM-EDS と同様、変質層では塩素(Cl)が特徴的に検出され、酸素もある程度検出される一方で炭素 (C) はほとんど検出されない。これは上記のような XRD (図 3.3-12) による物質同定結果を指示する。またこの変質層にはヨウ素 (I) も特に境界付近では十分に検出される。亜鉛 (Zn) とビスマスも未変質のガラスと同様に含まれていた。

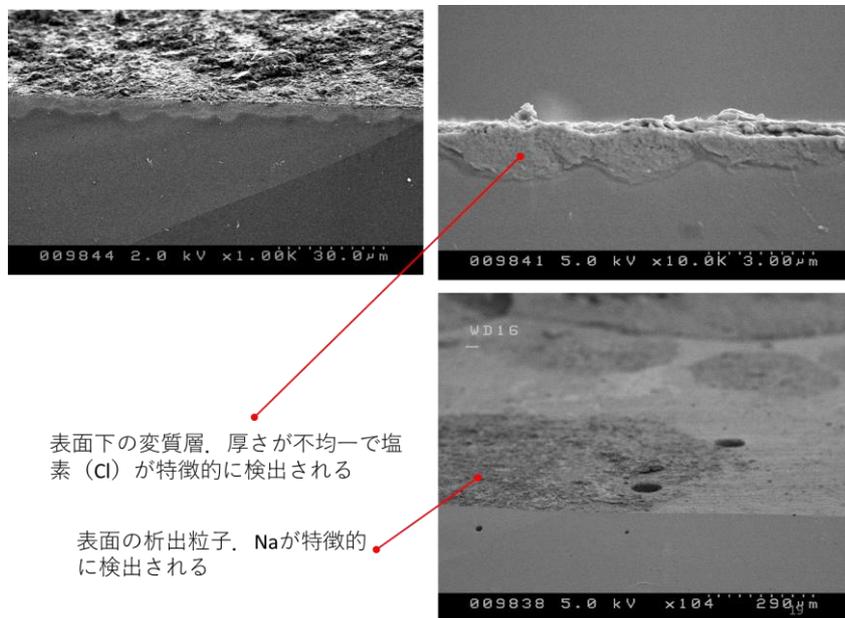


図 3.3-9 NaCl 0.55M に浸漬した BPI ガラスの SEM 画像

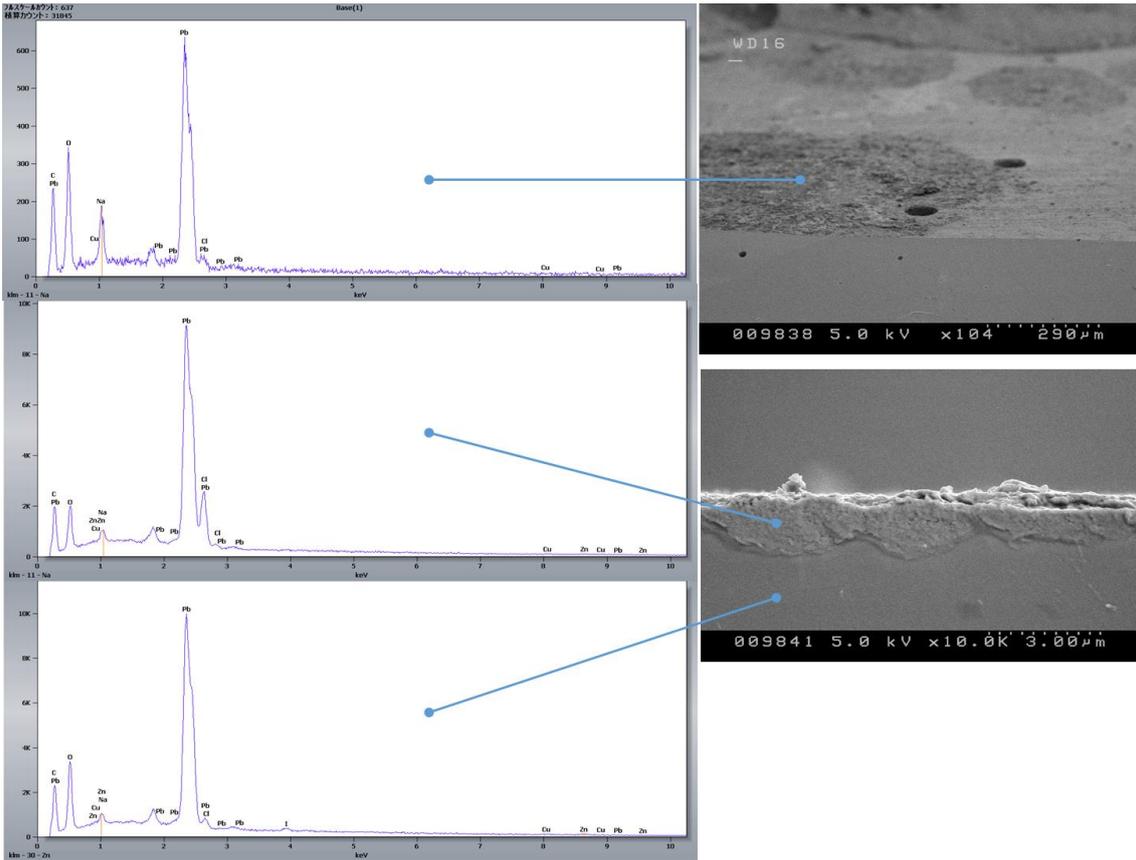


図 3.3-10 NaCl 0.55M に浸漬した BPI ガラスの EDS

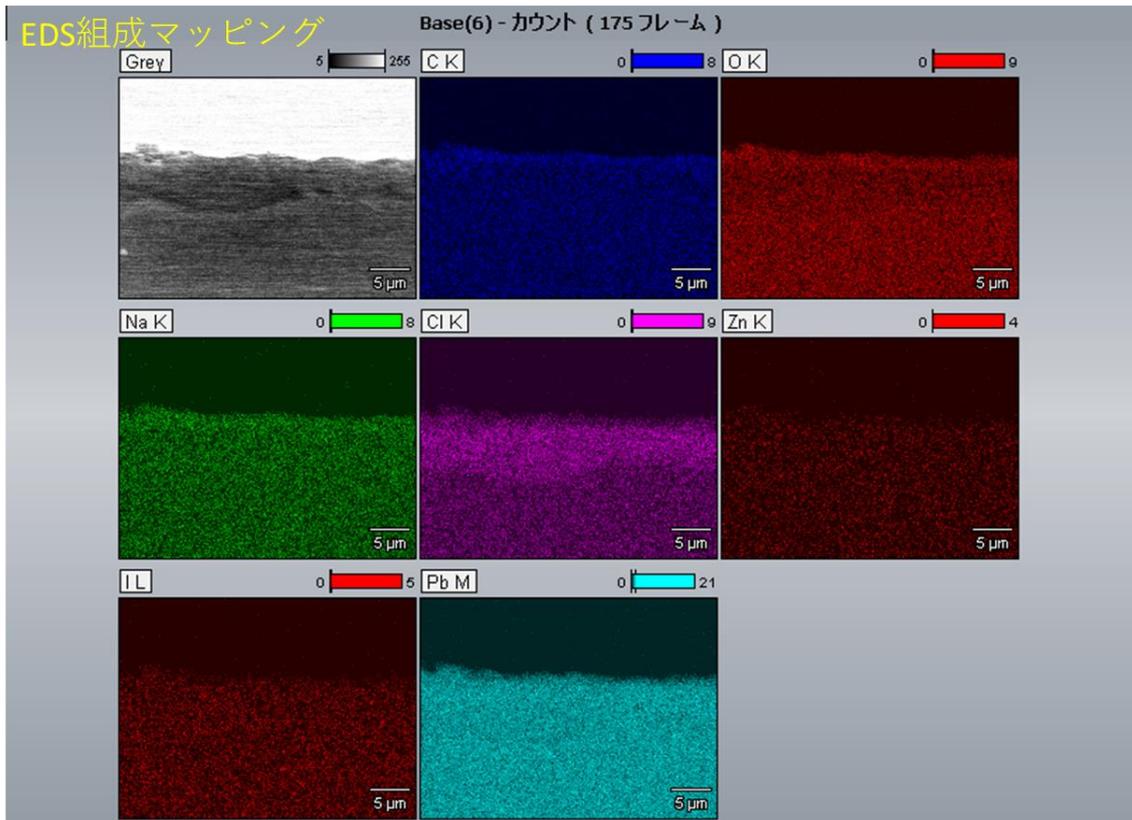


図 3.3-11 NaCl 0.55M に浸漬した BPI ガラスの EDS による組成マッピング

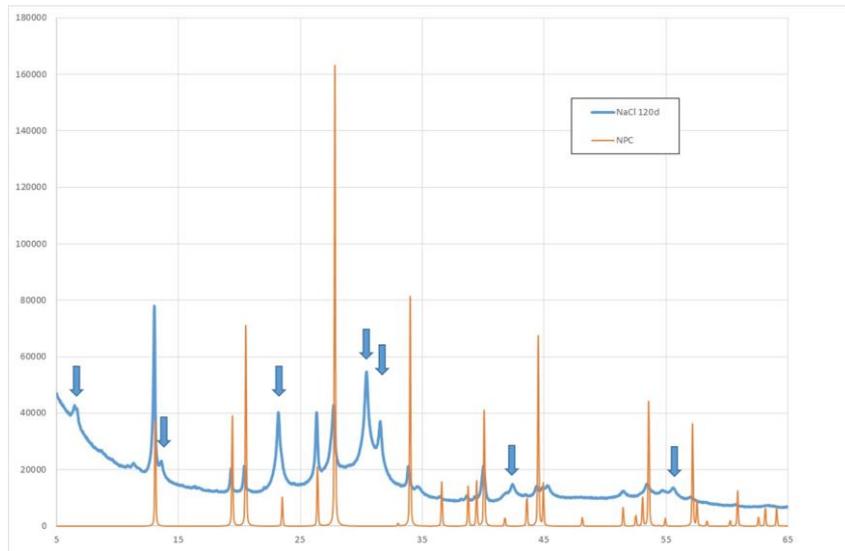


図 3.3-12 NaCl 0.55M に浸漬した BPI ガラスの XRD

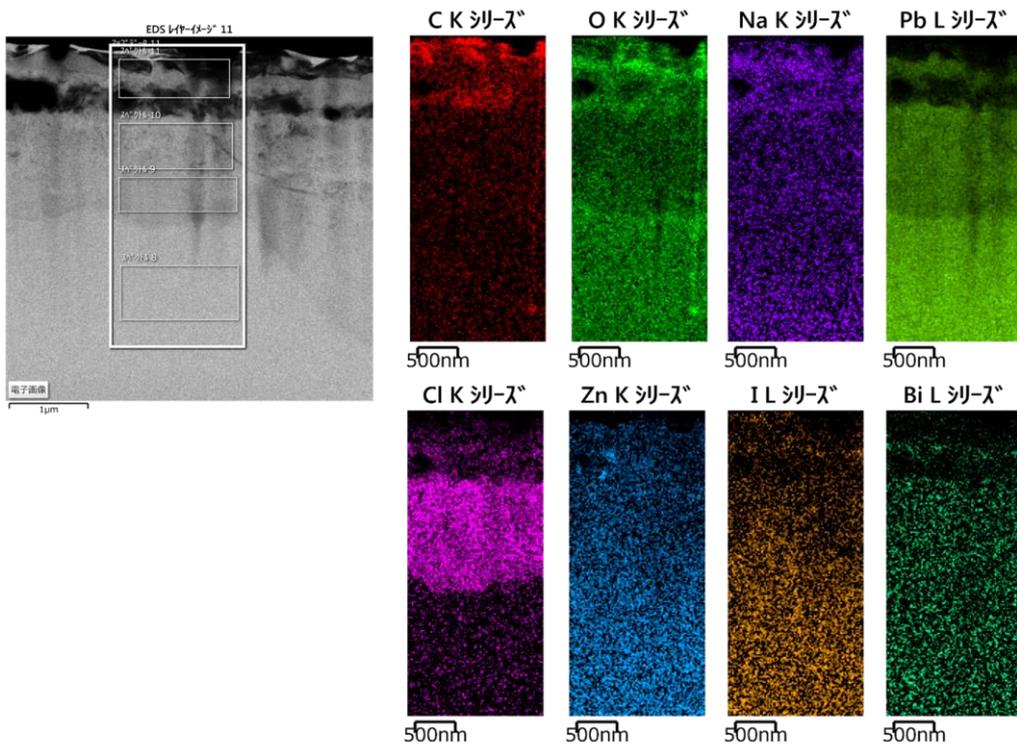


図 3.3-13 NaCl 0.55M に浸漬した BPI ガラスの STEM-EDS による組成マッピング

4. おわりに

本補足資料では、BPI ガラス固化体の開発に係るガラスの製造及び浸漬試験の内容について、報告書本編には収録しきれなかった詳細を記した。

今後、試験及びモデル化の進展に際して、試験条件や分析内容の詳細を確認する際の資料として、報告書に合わせて作製したものである。

参考文献

稲垣：ガラス固化体の長期鉍物化に関する研究（IV），JNC TJ8400 2004-019, 2005

動力炉・核燃料開発事業団：実規模ガラス固化体の浸出試験，PNC TN8410-90-068, 1990.

Rawson (1967) Inorganic Glass-Forming Systems. Academic Press Inc.

Takaishi T., Jin J., Uchino T., Yoko T., Structural Study of PbO-B₂O₃ Glasses by X-ray Diffraction and ¹¹B MAS NMR Techniques, J. Am. Ceram. Soc., vol.83, No.10, pp.2543-48 (2000).

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 (2020)では、31種類の元素、366種類の液相種、576種類の鉱物、16種類のガスについて、熱力学特性($\Delta_f G^0$ [kcal/mol], $\Delta_f H^0$ [kcal/mol], S^0 [kcal/mol/K], V^0 [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 1-14 にそれぞれ示す。

表 1-1 JAEA TDB (2020)における主な更新内容 (1/2)

Item	Description
New and/or revised entries	New and/or revised entries include 93 aqueous species/complexes, 272 mineral/solid phases and 3 gases.
Aqueous species/complexes	
Selenium (Part 1/2) (Table 2)	Selenium (Se) has been added to the JAEA TDB using SeO_3^{2-} as the basis species. Relevant hydrolysis reactions and formation reactions of selenium bearing aqueous species/complexes are also included.
Acetate (Table 3)	Acetate (CH_3CO_2^-) has been added as an 'element' using Acetate ⁻ as the basis species. Adding acetate in this way ensures that acetate does not immediately breakdown into its component C, O and H bearing species/complexes. The relevant hydrolysis reaction to form HAcetate and formation reactions of metal acetate (Me-Acetate) and non-metal acetate (R-Acetate) complexes are also included.
Gibbs energy of formation of Mg^{2+} (Part 1/2) (Table 4)	Gibbs free energy of formation of the basis species Mg^{2+} has been re-evaluated to be $\Delta_f G^0$ (Mg^{2+} , 298.15K) = $-(108.51 \pm 0.6)$ kcal/mol. This has affected the thermodynamic properties of Mg-bearing species/complexes that use this value in their derivation.
Gibbs energy of formation of Fe^{3+} (Part 1/2) (Table 5)	Gibbs free energy of formation of the redox species Fe^{3+} has been re-evaluated to be $\Delta_f G^0$ (Fe^{3+} , 298.15K) = $-(4.114 \pm 0.21)$ kcal/mol. This has significantly reduced uncertainties of Fe(III) bearing species/complexes that use this value in their derivation.
$\text{Br}_{2(l)}$ entropy corrected (Part 1/2) (Table 6)	An error in calculations that included S_{PrTr}^0 (bromine (l), 298.15K) = (36.379 ± 0.02) cal/K/mol has been corrected. This change affects the thermodynamic properties of $\text{Br}_{2(aq)}$, SnBr^+ , $\text{SnBr}_{2(aq)}$, and SnBr_3^- that are calculated from the Gibbs-Duhem relation.
Miscellaneous additions/revisions (Table 7)	Additional miscellaneous additions/revisions not already described above include the thermodynamic properties of 13 aqueous species/complexes in the JAEA-TDB.
Gibbs-Duhem equation	Gibbs energy of formation, enthalpy of formation or entropy of aqueous species/complexes that were calculated from the Gibbs-Duhem equation are now marked with "[GHS]".
Minerals and gases	
Selenium (Part 2/2) (Table 8)	Following the addition of Se to the JAEA TDB, Se-bearing minerals/solid phases and gases have also been added.
Gibbs energy of formation of Mg^{2+} (Part 2/2) (Table 9)	Re-evaluation of $\Delta_f G^0$ (Mg^{2+} , 298.15K) = $-(108.51 \pm 0.6)$ kcal/mol also affected the derivation of the thermodynamic properties of Mg-bearing minerals/solid phases.

表 1-1 JAEA TDB (2020)における主な更新内容 (2/2)

Minerals and gases	
Gibbs energy of formation of Fe ³⁺ (Part 2/2) (Table 10)	Re-evaluation of $\Delta_f G^0$ (Mg ²⁺ , 298.15K) = -(4.114 +/- 0.21) kcal/mol also affected the derivation of the thermodynamic properties of Fe(III)-bearing minerals/solid phases.
Br _{2(l)} entropy corrected (Part 2/2) (Table 11)	Corrected S^0_{PrTr} (bromine (l), 298.15K) = (36.379 ± 0.02) cal/K/mol also affects the derivation of the thermodynamic properties of CaBr _{2(s)} , KBr _(s) , NaBr _(s) , and Br _{2(g)} that were calculated from the Gibbs-Duhem relation.
Entropy estimates of Fe(II) bearing silicate minerals (Table 12)	Estimates of S^0_{PrTr} for Fe(II) bearing silicate minerals has been changed based on discussion in (Helgeson et al., 1978; Wood, 1981). This mainly affected the clay minerals.
FA Glass (Table 13)	A new fly ash (FA) has been characterized in R2 (2020) experiments. The glass component is included as "FA_glass_R2". The original entry for "FA_glass" has been renamed "FA_glass_H24" corresponding to the year it was characterized in H24 (2012) experiments. FA_glass_H24_inert, FA_glass_R2_inert and SiO2(am)_inert have also been added as unreacted pozzolanic materials in High content Fly-ash Silica fume Cement (HFSC).
Miscellaneous mineral additions/revisions (Table 14)	Additional miscellaneous additions/revisions not already described above include the thermodynamic properties of 28 minerals/solid phases in the JAEA-TDB.
Correct oxidation states in minerals and gases	Dissolution of minerals and gases are now written in terms of their component species in the correct oxidation states, e.g. Pyrrhotite + 1 H+ = + 1 Fe+2 + 1 HS-. This may not be apparent or sometimes possible, however, if the mineral contains catenated bonds or double bonds, e.g. Fe104Se_beta + 0.02 O2(aq) + 1.08 H+ = 1.04 Fe+2 + 1 HSe- + 0.04 H2O.
Gibbs-Duhem equation	Gibbs energy of formation, enthalpy of formation or entropy of minerals and gases that were calculated from the Gibbs-Duhem equation are now marked with "[GHS]".

表 1-2 JAEA TDB (2020)で追加されたセレ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}	$c_2 \times 10^{-4vii}$	$\omega^0 \times 10^{-5v}$		
SeO3-2	-86.434 ± 0.28	-121.27 ± 0.4	-2.00 ± 1.7	-61.400	1.260	3.0437	-0.3497	5.8875	-2.7645	0.3389	-15.5418	3.2733	K	[1,2,3]
HSe-	10.50 ± 0.5	3.4 ± 1	17.5 ± 4	-20.763	18.598	4.7684	3.8615	4.2324	-2.9386	6.4954	-7.2640	1.3565	R	[2,3,4]
SeO4-2	-105.31 ± 0.4	-144 ± 1	10 ± 4	-55.600	19.400	5.4645	5.5612	3.5644	-3.0089	2.0631	-14.3603	3.0915	K	[1-3]
CaSeO4(aq)	-240.16 ± 0.5	-272.8 ± 2	8.5 ± 6	-16 ± 27	10.315	3.1637	-0.0568	5.7724	-2.7767	-3.5604	-6.2938	-0.0380	K	[3,5]
H2SeO3(aq)	-101.46 ± 0.1	-120.78 ± 0.4	50.04 ± 1.4	35.200	46.535	8.1200	12.0448	1.0160	-3.2769	26.4458	4.1356	-0.0380	K	[1-3]
H2Se(aq)	5.25 ± 0.8	3.49 ± 0.4	35.39 ± 2.9	44.667	32.869	6.1952	7.3452	2.8632	-3.0827	30.5016	6.0641	-0.2000	K	[1-3]
HSeO3-	-97.887 ± 0.21	-122.47 ± 0.4	32.39 ± 1.5	6.500	31.179	6.4138	7.8790	2.6534	-3.1047	20.3957	-1.7106	1.1310	K	[1-4]
HSeO4-	-107.63 ± 0.4	-139.0 ± 1	34.1 ± 4	12.100	38.198	7.3655	10.2027	1.7401	-3.2008	23.4390	-0.5698	1.1051	K	[1-3]
MgSeO4(aq)	-216.83 ± 1.2	-254.4 ± 3	-10 ± 10	-12 ± 24	7.431	2.7690	-1.0203	6.1511	-2.7368	-1.2162	-5.4790	-0.0380	K	[3,5]
Se-2	30.96 ± 0.6	10.9 ± 3	-26 ± 10	-83.497	4.849	3.6576	1.1493	5.2984	-2.8265	-9.2633	-20.0429	3.6367	K	[3-5]

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 SUPCRT20.dat TDB. All selenium-bearing species/complexes are new entries in the JAEA-TDB (2020). † Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). ‡ Derivation of $\Delta_f G^{\circ}$: R : As reported, K : Fitted to equilibrium constant, K_{eq} data. **References:** [1] (Shock et al., 1997). [2] Using methods described in (Shock et al., 1997). [3] (Banks, 1934; Barcza and Sillén, 1971; Covington and Dobson, 1965; Dasgupta and Nara, 1990; Fabre, 1887; Ghosh and Nair, 1970; Hagiwara, 1939; Kawassiadis et al., 1967; Levy and Myers, 1990; Moriya and Sekine, 1974; Nair, 1964; Naumov et al., 1974; Olin et al., 2005; Parker et al., 1997; Sabbah and Carpeni, 1966; Schott et al., 1928; Séby et al., 2001; Sekine et al., 1968; Selivanova and Pakhorukov, 1961; Sherrill and Izard, 1928). [4] (Wagman et al., 1982). [5] Generated in the development of the JAEA TDB.

表 1-3 JAEA TDB (2020)で追加された酢酸及び酢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) (1/2)

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}	$c_2 \times 10^{-4vii}$	$\omega^0 \times 10^{-5v}$		
Acetate-	-88.27 ± 0.2	-116.19 ± 0.2	20.6 ± 2	6.312	40.501	7.7525	8.6996	7.5825	-3.1385	26.3000	-3.8600	1.3182	R	[1]
AlAcetate+2	-208.57 ± 0.4	-240.5 ± 1	-32.8 ± 5	72.900	-0.930	2.1643	-2.4961	6.7288	-2.6757	63.2437	11.8151	1.5579	K	[2-4]
Al(Acetate)2+	-299.36 ± 1.0	-352.9 ± 6	9 ± 20	169.400	48.301	8.5167	13.0156	0.6302	-3.3170	109.3239	31.4722	0.4210	K	[2-4]
BaAcetate+	-222.88 ± 1.1	-242.092	33.500	72.332	35.405	6.6253	8.3926	2.4574	-3.1259	48.9806	11.6995	0.0459	K	[3,4]
Ba(Acetate)2	-311.59 ± 2.1	-357.051	59.700	166.781	88.892	13.9186	26.2066	-4.5556	-3.8623	103.6344	30.9388	-0.0300	E	[3,5]
CaAcetate+	-221.66 ± 0.6	-245.645	12.500	83.065	29.321	5.9002	6.6232	3.1505	-3.0527	58.1976	13.8857	0.3636	K	[3]
Ca(Acetate)2	-310.31 ± 1.0	-362.453	32.300	187.722	82.114	12.9911	23.9379	-3.6556	-3.7685	115.9068	35.2043	-0.0300	E	[3,5]
CsAcetate(aq)	-158.01 ± 0.5	-176.344	57.500	40.555	73.310	11.7865	20.9974	-2.5020	-3.6469	29.6579	5.2264	-0.0300	E	[3]
Cs(Acetate)2-	-245.90 ± 0.5	-293.614	73.200	102.565	131.126	19.8839	40.7670	-10.2671	-4.4642	71.0739	17.8580	0.5208	E	[3]
CuAcetate(aq)	-76.77 ± 0.5	-99.980	28.700	85.532	40.530	7.3009	10.0483	1.7946	-3.1943	56.0175	14.3883	-0.0300	E	[3]
Cu(Acetate)2-	-164.66 ± 1.4	-219.456	37.000	190.322	94.603	15.0715	29.0205	-5.6592	-3.9786	127.5564	35.7339	1.0691	E	[3,5]
CuAcetate+	-75.64 ± 0.3	-103.138	-1.300	87.183	22.035	4.9722	4.3620	4.0290	-2.9592	62.4950	14.7244	0.5681	K	[3,4]
Cu(Acetate)2(aq)	-165.82 ± 0.9	-222.758	14.200	195.756	73.995	11.8801	21.2264	-2.5925	-3.6564	120.6150	36.8408	-0.0300	K	[3,4]
Cu(Acetate)3-	-256.54 ± 1.3	-346.111	18.990	320.019	131.888	20.2654	41.7019	-10.6422	-4.5029	206.0700	62.1534	1.3408	E	[3,5]

表 1-3 JAEA TDB (2020)で追加された酢酸及び酢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 $P = 1 \text{ bar}$)(2/2)

Species/ Complex *	$\Delta_f G^{0,i,\dagger}$	$\Delta_f H^{0,i,\dagger}$	$S^{0,ii,\dagger}$	$C_p^{0,iii,\dagger}$	$V^{0,iii}$	Revised H-K-F EoS parameters							Der ‡	Ref
						$a_1 \times 10^{iv}$	$a_2 \times 10^{-2,v}$	a_3^{vi}	$a_4 \times 10^{-4,vii}$	c_1^{ii}	$c_2 \times 10^{-4,vii}$	$\omega^0 \times 10^{-5,v}$		
FeAcetate+	-111.87 ± 1.1	-139.2 ± 3	-2 ± 10	81 ± 40	23.861	5.2242	4.9743	3.7950	-2.9846	58.9293	13.4651	0.5744	K	[4,6]
Fe(Acetate)2	-202.27 ± 1.0	-259.6 ± 3	11.5 ± 2	184 ± 10	76.132	12.1700	21.9335	-2.8706	-3.6857	113.6516	34.4462	-0.0380	K	[4,6]
HAcetate(aq)	-94.77 ± 0.2	-116.10 ± 0.2	42.7 ± 2	40.325	52.011	11.6198	5.2180	2.5088	-2.9946	42.0760	-1.5417	-0.1500	R	[1,7]
KAcetate(aq)	-155.41 ± 0.3	-175.232	47.600	59.162	59.539	9.9020	16.3937	-0.6874	-3.4566	40.5631	9.0167	-0.0300	K	[3,4]
K(Acetate)2-	-242.54 ± 1.0	-292.517	60.700	138.870	115.782	17.8481	35.7984	-8.3193	-4.2588	94.0916	25.2533	0.7097	E	[3,5]
LiAcetate(aq)	-158.675 ± 0.29	-184.341	19.500	86.657	48.475	8.3880	12.6976	0.7639	-3.3038	56.6767	14.6175	-0.0300	K	[3,4]
Li(Acetate)2-	-246.52 ± 0.9	-304.458	25.500	192.516	103.454	16.3412	32.1211	-6.8785	-4.1068	130.4373	36.1810	1.2422	E	[3,5]
MgAcetate+	-198.53 ± 0.8	-229.513	-13.100	87.992	25.433	5.4981	5.6424	3.5341	-3.0122	64.6297	14.8894	0.7483	K	[3,4]
Mg(Acetate)2(aq)	-287.65 ± 1.4	-349.146	-1.200	197.336	77.781	12.3982	22.4898	-3.0853	-3.7086	121.5413	37.1627	-0.0300	E	[3]
MnAcetate+	-145.034	-169.470	8.700	87.000	30.392	6.0633	7.0232	2.9897	-3.0693	60.9578	14.6873	0.4129	R	[3,4]
Mn(Acetate)2(aq)	-234.450	-288.325	24.200	202.780	83.306	13.1542	24.3405	-3.8236	-3.7851	124.7315	38.2716	-0.0300	R	[3,4]
Mn(Acetate)3-	-324.686	-410.446	31.500	331.892	142.262	21.6217	45.0124	-11.9409	-4.6397	211.3036	64.5717	1.1536	E	[3,5]
NH4Acetate(aq)	-107.55 ± 0.4	-147.290	50.700	90.122	69.645	11.2849	19.7719	-2.0187	-3.5963	58.7075	15.3233	-0.0300	E	[3]
NH4(Acetate)2-	-195.29 ± 1.2	-264.917	64.700	199.277	127.041	19.3685	39.5090	-9.7736	-4.4122	128.9386	37.5581	0.6495	E	[3,5]
NaAcetate(aq)	-150.71 ± 1.2	-173.574	34.200	75.092	48.207	8.3514	12.6125	0.7884	-3.3003	49.8989	12.2617	-0.0300	K	[3,4]
Na(Acetate)2-	-238.05 ± 0.9	-292.053	44.000	169.952	103.156	16.2062	31.7884	-6.7416	-4.0930	114.6437	31.5846	0.9633	E	[3,5]
NiAcetate+	-101.121	-131.487	-11.700	73.682	17.132	4.3556	2.8512	4.6343	-2.8968	56.0621	11.9745	0.7287	K	[3,4]
Ni(Acetate)2(aq)	-190.411	-251.141	0.700	169.415	68.532	11.1327	19.4031	-1.8801	-3.5810	105.1782	31.4753	-0.0300	E	[3,5]
Ni(Acetate)3-	-281.033	-375.466	1.900	275.499	125.802	19.5212	39.8827	-9.9226	-4.4277	182.3942	53.0847	1.6030	E	[3]
PbAcetate+	-97.28 ± 0.3	-115.9 ± 2	36.0 ± 5	71.432	32.062	6.1543	7.2429	2.9082	-3.0783	48.0824	11.5161	0.0057	K	[3,4]
Pb(Acetate)2(aq)	-186.91 ± 0.7	-227.7 ± 5	76 ± 16	118.274	85.168	13.4065	24.9527	-4.0573	-3.8105	75.1322	21.0578	-0.0380	K	[3-5]
Pb(Acetate)3-	-278.4 ± 1	-349.472	88.600	268.080	144.337	21.6128	44.9921	-11.9361	-4.6389	165.9232	51.5732	0.2871	E	[3,5]
RbAcetate(aq)	-155.96 ± 0.9	-174.825	53.700	47.957	65.333	10.6948	18.3352	-1.4623	-3.5369	33.9961	6.7343	-0.0300	E	[3,5]
Rb(Acetate)2-	-243.32 ± 2.0	-291.893	68.300	117.008	122.237	18.6924	37.8608	-9.1318	-4.3441	80.2139	20.8000	0.5941	E	[3,5]
SrAcetate+	-224.50 ± 0.5	-247.255	20.000	77.394	30.046	5.9602	6.7718	3.0884	-3.0588	53.8109	12.7307	0.2482	K	[3,4]
Sr(Acetate)2(aq)	-313.35 ± 0.6	-363.547	42.200	176.659	82.921	13.1015	24.2102	-3.7685	-3.7797	109.4234	32.9508	-0.0300	E	[3]
ZnAcetate+	-126.18 ± 0.8	-154.5 ± 1	-2.0 ± 1	127.300	16.376	4.2000	2.4737	4.7779	-2.8813	86.0639	22.8964	0.5744	K	[4,5]
Zn(Acetate)2(aq)	-216.61 ± 0.9	-272.3 ± 1	20.5 ± 1	210.0 ± 1	68.928	11.1843	19.5267	-1.9247	-3.5862	128.8891	39.7424	-0.0380	K	[4,5]
Zn(Acetate)3-	-306.47 ± 0.9	-394.5 ± 1	26.1 ± 2	293 ± 10	121.480	18.8027	38.1284	-9.2358	-4.3552	189.1790	56.6495	1.2262	K	[4,5]

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 SUPCRT20.dat TDB. All acetate species/complexes are new entries in the JAEA-TDB (2020). † Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). ‡ Derivation of $\Delta_f G^0$: R : As reported, E : Estimated using linear correlation methods, K : Fitted to equilibrium constant, K_{eq} data. **References:** [1] (Shock, 1995), [2] (Oelkers et al., 1995), [3] (Shock and Koretsky, 1993), [4] (Archer and Monk, 1964; Daniele et al., 1985; Fein, 1991; Giordano, 1989; Giordano and Drummond, 1991; Palmer and Bell, 1994; Palmer and Drummond, 1988; Siddhanta and Banerjee, 1958), [5] Generated in the development of the JAEA-TDB, [6] (Sverjensky et al., 1997), [7] (Wagman et al., 1982).

表 1-4 JAEA TDB (2020)で追加されたマグネシウムイオン及びマグネシ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 *	$\Delta_f G^\circ$ ^{i,†}	$\Delta_f H^\circ$ ^{i,†}	S° ^{ii,†}	C_p° ^{ii,†}	V° ⁱⁱⁱ	Revised H-K-F EoS parameters							Der [‡]	Ref
						$a_1 \times 10$ ^{iv}	$a_2 \times 10^{-2}$ ^v	a_3 ^{vi}	$a_4 \times 10^{-4}$ ^{vii}	c_1 ⁱⁱ	$c_2 \times 10^{-4}$ ^{vii}	$\omega^\circ \times 10^{-5}$ ^v		
Mg+2	-108.51 ± 0.6	-111.367 ± 0.26	-33.0 ± 2	-5.335	-21.543	-0.8217	-8.5990	8.3900	-2.3900	20.8000	-5.8920	1.5372	R	[1-3]
MgAlO2+ (+ 2 H2O = MgAl(OH)4+)	-313.24 ± 0.9	-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	[4]
MgCl+	-138.83 ± 0.7	-150.116	-19.000	25.000	1.260	2.2230	-2.3505	6.6669	-2.6818	28.6016	2.0580	0.8449	K	[5,6]
MgCO3(aq)	-238.76 ± 0.7	-270.581	-24.000	-27.400	-18.180	-0.7355	-9.5745	9.5062	-2.3831	-10.2416	-8.6159	-0.0380	K	[5]
MgF+	-178.45 ± 0.3	-191.72 ± 0.3	-28.07 ± 3.2	39.100	-17.470	-0.2975	-8.5049	9.0858	-2.4274	38.0239	4.9301	0.9706	K	[5,7]
MgFeO2+ (+ 2 H2O = MgFe(OH)4+)	-198.86 ± 0.7	-219.43 ± 2.4	-21.25 ± 7.6	126 ± 41	-17.482	-0.3346	-8.5982	9.1295	-2.4236	87.7531	22.5501	0.8659	E	[4]
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	[8]
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	[8]
MgHCO3+	-250.200	-275.760	-3.000	63.690	5.480	2.7171	-1.1469	6.2008	-2.7316	49.0065	9.9391	0.5985	R	[5,9]
MgOH+	-149.23 ± 0.6	-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	[10-12]
MgSiO3(aq) (+ H2O = MgSiO2(OH)2)	-340.67 ± 1.0	-373.363	-23.800	20.400	-38.998	-3.5832	-16.5352	12.2464	-2.0955	17.7721	1.1209	-0.0380	K	[4,5,13]
MgHSiO3+ (+ 2 H2O = MgSiO(OH)3+)	-353.13 ± 0.5	-385.823	-23.800	20.400	-9.826	0.7288	-6.0031	8.1089	-2.5309	26.5206	1.1209	0.9116	K	[4,5,13]
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	[14]

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 SUPCRT20.dat TDB. Parentheses are used to show equivalent hydrated species used in GWB20.dat and PHREEQC20.dat TDBs. [†] Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). [‡] Derivation of $\Delta_f G^\circ$: R: As reported, E: Estimated by linear correlation methods, K: Fitted to equilibrium constant, K_{eq} data. **References:** [1] (Shock and Helgeson, 1988). [2] (Wagman et al., 1982). [3] (Shin and Criss, 1979). [4] (Walker et al., 2019). [5] (Sverjensky et al., 1997). [6] (Majer and Stulik, 1982). [7] (Richardson and Holland, 1979). [8] (Shock and Koretsky, 1995). [9] Listed as unpublished Sverjensky (1990), but which appeared in (Sverjensky et al., 1997). [10] (Brown and Ekberg, 2016; Gjaldbaek, 1925; Kolthoff, 1923; Palmer and Wesolowski, 1997; Walther, 1986). [11] Using methods described in (Shock et al., 1997). [12] Generated in the development of JAEA-TDB. [13] (Santschi and Schindler, 1974). [14] (McCollom and Shock, 1997).

表 1-5 JAEA TDB (2020)で追加された鉄イオン及び鉄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}	$c_2 \times 10^{-4vii}$	$\omega^0 \times 10^{-5v}$		
Fe+3	-4.114 ± 0.21	-11.86 ± 1.6	-66.30 ± 5.2	-18.600	-37.001	-2.4256	-13.6961	11.1141	-2.2127	19.0459	-6.8233	2.5812	R	[1,2]
CaFeO2+ (+ 2 H2O = CaFe(OH)4+)	-221.13 ± 0.9	-236.33 ± 2.8	-1.10 ± 9.0	124 ± 45	-14.028	0.0349	-7.6961	8.7750	-2.4608	84.0037	22.2242	0.5607	E	[3]
FeCl+2	-37.520	-50.831	-42.700	3.369	-22.336	-0.7164	-9.5277	9.4878	-2.3851	23.8149	-2.3482	1.7013	R	[4,5]
FeF+2	-79.650	-87.169	-25.700	7.638	-41.536	-3.4294	-16.1520	12.0915	-2.1112	23.9805	-1.4787	1.4477	K	[4,5]
FeOH+2	-57.814 ± 0.25	-69.984	-25.400	-8.200	-24.901	-1.1562	-10.6009	9.9077	-2.3407	14.6102	-4.7048	1.4382	R	[2,6]
FeO+ (+ H2O = Fe(OH)2+)	-53.10 ± 0.3	-61.006	-11.100	-48.100	-41.801	-3.7143	-16.8503	12.3729	-2.0824	-15.4615	-12.8326	0.7122	R	[2,6]

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 SUPCRT20.dat TDB. Parentheses are used to show equivalent hydrated species used in GWB20.dat and PHREEQC20.dat TDBs. † Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). ‡ Derivation of $\Delta_f G^{\circ}$: R : As reported, E: Estimated by linear correlation methods, K : Fitted to equilibrium constant, K_{eq} data. **References:** [1] (Shock et al., 1989; Whittemore and Langmuir, 1972). [2] (Shock et al., 1997). [3] (Walker et al., 2019). [4] (Sverjensky et al., 1997). [5] (Turner et al., 1981). [6] (Baes and Mesmer, 1976). [7] (Diakonov et al., 1999; 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). [8] Generated as a part of development of the JAEA-TDB.

表 1-6 JAEA TDB (2020)で追加された臭素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}	$c_2 \times 10^{-4vii}$	$\omega^0 \times 10^{-5v}$		
Br2(aq) §	1.38 ± 0.2	-0.20 ± 0.2	31.1 ± 1	0.834	69.002	11.0482	19.1944	-1.7940	-3.5725	2.3189	-2.8647	-0.4707	C	[1,2]
SnBr+	-33.250 ± 0.44	-30.80 ± 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	-59.14 ± 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	-87.2 ± 4	71 ± 13	-50 ± 70	90.818	14.3772	27.3227	-4.9888	-3.9085	-18.1034	-13.2196	0.5463	K	[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 SUPCRT20.dat TDB. † Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). ‡ Derivation of $\Delta_f G^{\circ}$: C : Calorimetry, K : Fitted to log equilibrium constant, K_{eq} data. § New entry in JAEA TDB (2020). **References:** [1] Estimated using methods described in (Shock et al., 1997). [2] (Wu et al., 1963). [3] Estimated using methods described in (Sverjensky et al., 1997). [4] (Gamsjager et al., 2012).

表 1-7 JAEA TDB (2020)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 $P = 1$ bar)

Species/ Complex *	$\Delta_f G^{\circ}$ ^{i,†}	$\Delta_f H^{\circ}$ ^{i,†}	S° ^{ii,†}	C_p° ^{iii,†}	V° ⁱⁱⁱ	Revised H-K-F EoS parameters							Der [‡]	Ref
						$a_1 \times 10$ ^{iv}	$a_2 \times 10^{-2}$ ^v	a_3 ^{vi}	$a_4 \times 10^{-4}$ ^{vii}	c_1 ⁱⁱ	$c_2 \times 10^{-4}$ ^{vii}	$\omega^{\circ} \times 10^{-5}$ ^v		
BrO4-	28.2 ± 2	3.1 ± 2	47.6 ± 2	-5.200	48.701	8.7361	13.5515	0.4200	-3.3391	11.4884	-4.0937	0.9085	R	[1,3,4]
CH4(aq)	-8.235	-21.010	20.990	66.30 ± 1.4	37.301	6.7617	8.7279	2.3212	-3.1397	42.0941	10.4707	-0.3179	R	[5,6]
ClO-	-8.8 ± 2	-25.7 ± 6	10 ± 20	-27.800	0.700	2.3599	-2.0164	6.5356	-2.6955	3.4786	-8.6974	1.4767	R	[3,4]
ClO3-	-1.90 ± 0.2	-24.86 ± 0.6	38.8 ± 2	-12.300	36.901	7.1665	9.7172	1.9307	-3.1807	8.5561	-5.5401	1.0418	R	[1,3]
ClO4-	-2.04 ± 0.2	-30.91 ± 0.6	43.5 ± 2	-5.836	44.201	8.1411	15.5654	-7.8077	-3.4224	16.4500	-6.5700	0.9699	R	[1,3,4]
BaSO4(aq) [§]	-314.60 ± 0.5	-344.6 ± 1	19.9 ± 4	-31 ± 36	8.347	2.8944	-0.7143	6.0308	-2.7495	-12.3513	-9.3493	-0.0380	K	[7-9]
CO3-2	-126.191 ± 0.070	-161.385 ± 0.11	-11.950 ± 0.31	-69.500	-5.020	2.8524	-3.9844	6.4142	-2.6143	-3.3206	-17.1917	3.3914	K	[1,10]
NH3(aq)	-6.328 ± 0.07	-19.440 ± 0.06	25.77 ± 0.1	18.383	24.430	5.0911	2.7970	8.6248	-2.8946	20.3000	-1.1700	-0.0500	C	[11]
S-2 [§]	28.78 ± 2.6	7.9 ± 2	-31 ± 11	-91.817	-0.671	2.9279	-0.6325	5.9987	-2.7529	-13.4419	-21.7377	3.7124	K	[3,9,12]
SrSO4(aq) [§]	-315.62 ± 0.4	-347.7 ± 1	11.6 ± 4	-28 ± 32	4.682	2.3928	-1.9388	6.5121	-2.6989	-10.5932	-8.7382	-0.0380	K	[7,9,13]

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 SUPCRT20.dat TDB. [†] Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). [‡] Derivation of $\Delta_f G^{\circ}$: R : As reported, K : Fitted to equilibrium constant, K_{eq} data, C: Calorimetry data. [§] New entry in JAEA TDB. **References:** [1] (Shock and Helgeson, 1988). [2] (Cox, 1978). [3] (Wagman et al., 1982). [4] (Shock et al., 1997). [5] (Shock and Helgeson, 1990). [6] (Olofsson et al., 1985). [7] Estimated using methods described in (Sverjensky et al., 1997). [8] (Felmy et al., 1990; Monnin, 1999). [9] Generated as a part of the development of JAEA TDB. [10] (Berg and Vanderzee, 1978). [11] (Shock et al., 1989; Vanderzee and King, 1972). [12] (Myers, 1986). [13] (Felmy et al., 1990; Reardon and Armstrong, 1987).

表 1-8 JAEA TDB (2020)で追加されたセレン含有鉱物の固相及びガスの熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t = 25^{\circ}\text{C}$ and $P = 1 \text{ bar}$)

Mineral/Phase ^{*,†}	Composition	$\Delta_f G^{\circ}$ ^{i,†}	$\Delta_f H^{\circ}$ ^{i,†}	S° ^{ii,†}	V° ⁱⁱⁱ	C_p° ^{ii,†}	Maier-Kelley Coefficients [‡]			C_p T_{max} ^{vi}	Der [§]	Ref
							a ⁱⁱ	$b \times 10^3$ ^{iv}	$c \times 10^{-5}$ ^v			
Downeyite	SeO2	-41.06 ± 0.3	-53.87 ± 0.3	16.130 ± 0.10	26.592	13.917 ± 0.05	16.611	0.930	-2.641	600	C	[1]
Ettringite_SeO4	Ca6(Al(OH)6)2 (SeO4)3(H2O)26	-3412.82 ± 2.3	-3983.566	414.310	713.165	522.221	472.146	169.436	-0.393	363	K	[2-4]
Fe104Se_beta	Fe1.04Se	-18.13 ± 1.5	-18.02 ± 1.5	17.21 ± 0.3	28.929	13.63 ± 0.3	13.508084	5.269	-1.288	731	C,P	[5]
Fe3Se4_gamma	Fe3Se4	-63.7 ± 6	-61.5 ± 6	66.9 ± 1	74.096	52.74 ± 0.1	17.778	117.264	0	307	C,P	[5]
Fe7Se8_alpha	Fe7Se8	-134.1 ± 11	-128.0 ± 11	146.71 ± 1.2	159.054	105.76 ± 1.0	-120.382	521.497	62.806	440	C	[5]
FeSe2(s)	FeSe2	-27.6 ± 3	-29.39 ± 2.9	20.75 ± 0.2	29.906	17.42 ± 0.2	9.106438	18.410	2.511	622	C,P	[5,6]
H2SeO3(s)	H2SeO3	-99.25 ± 0.5	-125.41 ± 0.4	27.1 ± 1	42.934	24.810	29.732	2.771	-5.110	343	R	[2,7,8]
K2SeO4(s)	K2SeO4	-239.10 ± 0.4	-266.15 ± 0.4	48.30 ± 0.1	72.465	34.113 ± 0.03	37.786	5.236	-4.653	730	K	[9]
Se mono	Se	0.308 ± 0.05	0.520 ± 0.03	10.770 ± 0.10	17.952	6.00 ± 0.2	5.497817	2.224	-0.147	420	C	[10]
Selenium	Se	0 ± 0	0 ± 0	10.060 ± 0.10	16.417	5.996 ± 0.05	5.186	2.928	-0.056	303.4	C	[10]
SeO3(s)	SeO3	-20.59 ± 0.5	-38.98 ± 0.5	21.92 ± 0.2	36.905	18.46 ± 0.9	3.85	49.000	0	390	C	[6,8,11]
H2Se(g)	H2Se	3.70 ± 0.3	7.00 ± 0.3	52.35 ± 0.2	0.000	8.28 ± 0.2	7.595	3.497	-0.317	2000	R	[6,12]
Se2(g)	Se2	22.10 ± 0.7	33.72 ± 0.7	59.100 ± 0.10	0.000	9.97 ± 0.2	9.031	0.363	0.737	3000	C	[8,13]

ⁱ kcal/mol, ⁱⁱ cal/mol/K, ⁱⁱⁱ cm³/mol, ^{iv} cal/mol/K², ^v calK/mol, ^{vi} K. * Minerals/solid phases and gases as shown in SUPCRT20.dat TDB, GWB20.dat and PHREEQC20.dat. All selenium-bearing minerals/solid phases and gases are new entries in the JAEA-TDB (2020). [†] Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). [‡] $C_p = a + b \cdot T + c/T^2$ (Maier and Kelly, 1932). [§] Derivation of $\Delta_f G^{\circ}$: C : Calorimetry, K : Fitted to equilibrium constant, K_{eq} data, P : Phase relations, R : As reported. **References:** [1] (Amitin et al., 1987; Barnes and Mortimer, 1973; Gadzhiev, 1966; Gattow, 1962; Gattow and Dräger, 1966; Mal'tsev et al., 1968; McCullough, 1937; Pashinkin et al., 1971). [2] Derived using methods described in (Helgeson et al., 1978). [3] Estimated from heat capacity, C_p° of ettringite_Al reported by (Ederova and Šatava, 1979) using methods described in (Helgeson et al., 1978). [4] (Zhang, 2000). [5] (Andresen and Leciejewicz, 1964; Andresen and van Laar, 1970; Grønvold, 1968; Grønvold, 1972; Grønvold et al., 1984; Grønvold and Westrum, 1959; Grønvold and Westrum, 1962; Lemire et al., 2013; Lemire et al., 2020; Okamoto, 1991; Olin et al., 2005; Svendsen, 1972). [6] (Mills, 1974). [7] (Selivanova and Pakhorukov, 1961). [8] (Olin et al., 2005). [9] (Atake et al., 1983; Kálmán et al., 1970; Lopez-Echarri et al., 1980; Ojkova et al., 1999). [10] (Cherin and Unger, 1967; Cherin and Unger, 1972; Gaur et al., 1981). [11] (Kondrat'ev and Strizhov, 1994; Mijhoff, 1965; Trzil, 1958). [12] (Bodenstein, 1899; Flögel, 1972; Pelabon, 1898; Preuner and Brockmüller, 1913; Rau, 1967; Rawling and Toguri, 1966; Wagman et al., 1982; Yushin and Devyatykh, 1969). [13] (Grønvold et al., 1984).

表 1-9 JAEA TDB (2020)で追加されたマグネシウム含有鉱物の熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1 \text{ bar}$) (1/6)

Mineral/Phase ^{*,†}	Composition	$\Delta_f G^{\circ}$ ^{i,‡}	$\Delta_f H^{\circ}$ ^{i,‡}	S° ^{ii,‡}	V° ⁱⁱⁱ	C_p° ^{ii,‡}	Maier-Kelley Coefficients [§]			C_p T_{max} ^{vi}	Der ^a	Ref
							a ⁱⁱ	$b \times 10^3$ ^{iv}	$c \times 10^{-5}$ ^v			
Akermanite	$\text{Ca}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7$	-879.36 ± 1.0	-926.55 ± 1.0	50.03 ± 0.5	92.810	50.665	60.09	11.400	-11.400	1700	P	[1-3]
Amesite_14A	$\text{Mg}_4\text{Al}_2(\text{Al}_2\text{Si}_2)\text{O}_{10}(\text{OH})_8$	-1989.2 ± 4	-2145.625	108.900	205.400	136.143	172.59	34.980	-41.670	848	E[ph]	[1,4]
Amesite_7A	$\text{Mg}_2\text{Al}(\text{AlSi})\text{O}_5(\text{OH})_4$	-992.3 ± 2	-1071.243	52.000	103.000	65.648	81.03	24.738	-20.230	1000	E[ph]	[1,5]
Anthophyllite	$\text{Mg}_7\text{Si}_8\text{O}_{22}(\text{OH})_2$	-2715.43 ± 1.0	-2888.849	128.600	264.400	155.475	180.682	60.574	-38.462	903	P	[1]
Antigorite	$\text{Mg}_{48}\text{Si}_{34}\text{O}_{85}(\text{OH})_{62}$	-15808 ± 46	-17071.689	861.360	1749.130	1059.129	1228.45	513.760	-286.680	848	C,P	[1,6]
Artinite	$\text{Mg}_2(\text{OH})_2(\text{CO}_3)(\text{H}_2\text{O})_3$	-613.851 ± 0.16	-698.043 ± 0.15	55.670 ± 0.16	96.900	70.759 ± 0.18	70.87	27.660	-7.430	1000	C	[1,7]
Beidel_Ca(avg)	$\text{Ca}_{0.2}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{0.3}\text{Al}_{1.65})$ $(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1261.02 ± 2.6	-1347.4 ± 3	70.7 ± 1	136.779	76.292	63.99	82.977	-11.056	520	E[pm]	[4,8,9]
Beidel_Cs(avg)	$\text{Cs}_{0.4}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{0.3}\text{Al}_{1.65})$ $(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1265.75 ± 2.6	-1352.4 ± 3	75.8 ± 1	145.576	78.471	67.173	80.619	-11.324	520	E[pm]	[4,8,9]
Beidel_Fe(avg)	$\text{Fe}_{0.2}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{0.3}\text{Al}_{1.65})$ $(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1240.10 ± 2.6	-1326.1 ± 3	71.2 ± 3	135.855	76.657	64	83.197	-10.799	520	E[pm]	[4,8-10]
Beidel_K(avg)	$\text{K}_{0.4}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{0.3}\text{Al}_{1.65})$ $(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1263.52 ± 2.6	-1350.4 ± 3	73.3 ± 3	141.531	78.297	65.277	84.513	-10.825	520	E[pm]	[4,8,9]
Beidel_Mg	$\text{Mg}_{0.165}(\text{Al}_2)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67})$ $\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1279.51 ± 2.6	-1367.0 ± 3	65.7 ± 3	135.308	74.258	63.432	81.279	-11.918	520	E[pm]	[4,8,9]
Beidel_Mg(avg)	$\text{Mg}_{0.2}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{0.3}\text{Al}_{1.65})$ $(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1256.54 ± 2.6	-1342.9 ± 3	70.1 ± 1	135.704	76.084	63.611	83.131	-10.945	520	E[pm]	[4,8,9]
Beidel_MgFe(avg)	$\text{Mg}_{0.2}(\text{Fe}_{0.4}\text{Al}_{1.65})(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})$ $\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1248.62 ± 2.6	-1334.8 ± 3	70.7 ± 3	135.780	76.370	63.805	83.164	-10.872	520	E[pm]	[4,8-10]
Beidel_Na(avg)	$\text{Na}_{0.4}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{0.3}\text{Al}_{1.65})$ $(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1259.86 ± 2.6	-1346.6 ± 3	72.4 ± 1	138.455	77.569	65.225	83.761	-11.227	520	E[pm]	[4,8,9]

表 1-9 JAEA TDB (2020)で追加されたマグネシウム含有鉱物の熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1$ bar) (2/6)

Mineral/Phase ^{*,†}	Composition	$\Delta_f G^{0,i,\ddagger}$	$\Delta_f H^{0,i,\ddagger}$	$S^{0,ii,\ddagger}$	$V^{0,iii}$	$C_p^{0,ii,\ddagger}$	Maier-Kelley Coefficients [§]			C_p T_{max}^{vi}	Der ^a	Ref
							a^{ii}	$b \times 10^3$ ^{iv}	$c \times 10^{-5}$ ^v			
Beidel_NH4(avg)	(NH ₄) _{0.4} (Mg _{0.1} Fe _{0.3} Al _{1.65}) (Al _{0.45} Si _{3.55})O ₁₀ (OH) ₂	-1253.24 ± 2.6	-1345.9 ± 3	81.6 ± 2	146.156	85.548	72.846	82.783	-10.649	520	E[pm]	[4,8,9]
Beidel_SBIId-1	K _{0.104} Ca _{0.185} (Mg _{0.09} Fe _{0.112} Al _{1.812})(Al _{0.426} Si _{3.574})O ₁₀ (OH) ₂	-1280.41 ± 1.6	-1367.28 ± 1.6	70.150 ± 0.10	137.980	76.122 ± 0.08	64.754	81.957	-11.616	520	R	[11]
Brucite	Mg(OH) ₂	-198.55 ± 0.9	-220.31 ± 0.8	15.1 ± 1	24.630	18.47 ± 0.1	24.147	4.000	-6.110	900	C,So	[3,12]
Celadonite	K(MgAl)(Si ₄)O ₁₀ (OH) ₂	-1305.9 ± 2	-1394.912	74.900	157.100	66.937	80.25	25.300	-18.540	1000	E[ph]	[1,5]
Chrysotile	Mg ₃ Si ₂ O ₅ (OH) ₄	-965.0 ± 1	-1043.3 ± 1	52.90 ± 0.8	108.500	65.5 ± 1	75.82	31.600	-17.580	1000	P	[1,6,13,14]
Clinochlore_14A	Mg ₅ Al(AlSi ₃)O ₁₀ (OH) ₈	-1961.70 ± 1.0	-2117.068	111.200	207.110	136.901	166.5	42.100	-37.470	900	P	[1]
Clinochlore_7A	Mg _{2.5} Al _{0.5} (Al _{0.5} Si _{1.5})O ₅ (OH) ₄	-978.55 ± 1.0	-1056.935	53.250	105.750	65.962	81.41	25.310	-20.440	848	So,St	[1]
Cordierite	Mg ₂ Al ₃ (AlSi ₅)O ₁₈	-2061.28 ± 1.0	-2183.3 ± 1	97.33 ± 0.9	233.220	108.099	143.83	25.800	-38.600	1700	P	[1,3]
Cordierite(hyd)	Mg ₂ Al ₃ (AlSi ₅)O ₁₈ (H ₂ O)	-2121.35 ± 1.0	-2255.757	111.430	241.220	119.499	155.23	25.800	-38.600	1700	P	[1]
Diopside	CaMg(SiO ₃) ₂	-723.78 ± 1.0	-765.4 ± 1	34.20 ± 0.2	66.090	37.501	52.87	7.840	-15.740	1600	P	[1,2,3]
Dolomite	CaMg(CO ₃) ₂	-517.76 ± 1.0	-556.67 ± 1.0	37.090 ± 0.07	64.365	37.579	41.557	23.952	-9.884	1000	P	[1,2,3]
Dolomite dis	CaMg(CO ₃) ₂	-515.65 ± 1.0	-553.738	39.840	64.390	37.696	44.711	17.779	-10.948	1000	St	[1,2]
Dolomite ord	CaMg(CO ₃) ₂	-517.76 ± 1.0	-556.67 ± 1.0	37.090 ± 0.07	64.340	37.696	44.711	17.779	-10.948	1000	P	[1,2,3]
Enstatite	MgSiO ₃	-348.93 ± 1.0	-369.7 ± 1	16.20 ± 0.2	31.276	18.899	24.55	4.740	-6.280	903	P	[1],67
Forsterite	Mg ₂ SiO ₄	-491.56 ± 1.0	-520.0 ± 1	22.75 ± 0.2	43.790	28.175	35.81	6.540	-8.520	1800	P	[1,3]
Huntite	CaMg ₃ (CO ₃) ₄	-1004.65 ± 0.4	-1082.60 ± 0.4	71.590 ± 0.21	122.900	73.955 ± 0.22	84.17	42.860	-20.440	1000	C	[1,15]
Hydromagnesite	Mg ₅ (OH) ₂ (CO ₃) ₄ (H ₂ O) ₄	-1401.573 ± 0.28	-1557.090 ± 0.25	120.38 ± 0.4	208.800	136.546	141.46	65.280	-21.670	1000	C	[1,16]
Hydrotalcite_M4A	Mg ₄ Al ₂ (OH) ₁₄ (H ₂ O) ₃	-1520.1 ± 4	-1715 ± 13	120.0 ± 40	219.260	154.030	154.03	0	0	363	K	[8,17]
Hydrotalcite_M6A	Mg ₆ Al ₂ (OH) ₁₈ (H ₂ O) ₅	-2053 ± 15	-2326.683	143.600	228.000	212.744	212.744	0	0	353	K	[8,17]
Hydrotalcite_M4Ac	Mg ₄ Al ₂ (OH) ₁₂ (CO ₃) (H ₂ O) ₃	-1574.5 ± 3	-1765.817	126.864	220.214	153.216	154.999	-0.458	-1.464	353	So	[4,8,17]
Hydrotalcite_M42Ac	Mg _{4.2} Al ₂ (OH) _{12.4} (CO ₃) (H ₂ O) _{3.2}	-1625.043	-1824.314	128.952	221.556	159.087	160.22	-0.698	-0.822	353	So	[4,8,17]
Hydrotalcite_M44Ac	Mg _{4.4} Al ₂ (OH) _{12.8} (CO ₃) (H ₂ O) _{3.4}	-1675.497	-1882.632	131.338	222.781	164.959	165.441	-0.937	-0.180	353	So	[4,8,17]
Hydrotalcite_M46Ac	Mg _{4.6} Al ₂ (OH) _{13.2} (CO ₃) (H ₂ O) _{3.6}	-1725.912	-1940.874	133.852	223.903	170.830	170.661	-1.177	0.462	353	So	[4,8,17]
Hydrotalcite_M48Ac	Mg _{4.8} Al ₂ (OH) _{13.6} (CO ₃) (H ₂ O) _{3.8}	-1776.299	-1999.059	136.463	224.933	176.701	175.882	-1.417	1.104	353	So	[4,8,17]
Hydrotalcite_M50Ac	Mg ₅ Al ₂ (OH) ₁₄ (CO ₃) (H ₂ O) ₄	-1826.661	-2057.194	139.157	225.884	182.573	181.103	-1.657	1.746	353	So	[4,8,17]
Hydrotalcite_M52Ac	Mg _{5.2} Al ₂ (OH) _{14.4} (CO ₃) (H ₂ O) _{4.2}	-1876.999	-2115.281	141.931	226.766	188.444	186.324	-1.896	2.387	353	So	[4,8,17]
Hydrotalcite_M54Ac	Mg _{5.4} Al ₂ (OH) _{14.8} (CO ₃) (H ₂ O) _{4.4}	-1927.312	-2173.318	144.788	227.594	194.316	191.545	-2.136	3.029	353	So	[4,8,17]
Hydrotalcite_M56Ac	Mg _{5.6} Al ₂ (OH) _{15.2} (CO ₃) (H ₂ O) _{4.6}	-1977.597	-2231.299	147.742	228.377	200.186	196.765	-2.376	3.671	353	So	[4,8,17]

表 1-9 JAEA TDB (2020)で追加されたマグネシウム含有鉱物の熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1 \text{ bar}$) (3/6)

Mineral/Phase ^{*,†}	Composition	$\Delta_f G^{0,i,\ddagger}$	$\Delta_f H^{0,i,\ddagger}$	$S^{0,ii,\ddagger}$	$V^{0,iii}$	$C_p^{0,ii,\ddagger}$	Maier-Kelly Coefficients [§]			C_p T_{max}^{vi}	Der ^a	Ref
							a^{ii}	$b \times 10^3^{iv}$	$c \times 10^{-5}^v$			
Hydrotalcite_M58Ac	$\text{Mg}_{5.8}\text{Al}_2(\text{OH})_{15.6}(\text{CO}_3)(\text{H}_2\text{O})_{4.8}$	-2027.843	-2289.202	150.824	229.129	206.058	201.986	-2.615	4.313	353	So	[4,8,17]
Hydrotalcite_M6Ac	$\text{Mg}_6\text{Al}_2(\text{OH})_{16}(\text{CO}_3)(\text{H}_2\text{O})_5$	-2078 ± 10	-2346.927	154.204	229.862	211.930	207.207	-2.855	4.955	353	K	[4,8,17]
Hydrotalcite_M6ACl	$\text{Mg}_6\text{Al}_2(\text{OH})_{16}\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})_5$	-2018 ± 18	-2279 ± 30	160 ± 80	236.600	209.712	209.712	0	0	338	K	[4,8,17]
Hydrotalcite_M6Fc	$\text{Mg}_6\text{Fe}_2(\text{OH})_{16}(\text{CO}_3)(\text{H}_2\text{O})_5$	-1856.0 ± 7	-2122.102	163.073	237.480	220.665	220.665	0	0	353	K	[4,8,17]
Hydrotalcite	$\text{Mg}_{0.74}\text{Al}_{0.26}(\text{OH})_2(\text{CO}_3)_{0.13}(\text{H}_2\text{O})_{0.39}$	-249.21 ± 0.5	-278.676 ± 0.49	20.450 ± 0.04	36.542	24.140	24.14	0	0	298.15	C	[17]
Illite	$\text{K}_{0.6}(\text{Mg}_{0.25}\text{Al}_{1.8})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1307.1 ± 3	-1395.4 ± 3	71.7 ± 5	139.304	75.173	74.682	64.189	-16.576	480	E[pm]	[4,8,9,18]
Illite(avg)	$\text{K}_{0.65}(\text{Mg}_{0.25}\text{Fe}_{0.2}\text{Al}_{1.6})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1289.7 ± 3	-1377.4 ± 3	74.6 ± 5	139.304	76.517	74.581	65.738	-15.702	480	E[pm]	[4,8,9]
Illite_IMt-2	$\text{K}_{0.762}\text{Na}_{0.044}(\text{Mg}_{0.241}\text{Fe}_{0.376}\text{Al}_{1.427})(\text{Al}_{0.613}\text{Si}_{3.387})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1277.53 ± 2.0	-1365.02 ± 2.0	77.658 ± 0.04	139.180	78.416 ± 0.02	75.87	66.714	-15.418	483	C	[11]
Kerolite	$\text{Mg}_3\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})$	-1371.73 ± 2.5	-1474.9 ± 3	76.4 ± 5	144.250	91.280	93.882	41.614	-13.342	NR	K	[8,19]
Lizardite	$\text{Mg}_3\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$	-965.520	-1044.181	51.700	107.495	65.465	75.82	31.600	-17.580	1000	St,P	[20]
Magnesioferrite	MgFe_2O_4	-314.97 ± 0.7	-341.720 ± 0.44	29.1 ± 2	44.570	35.19 ± 0.2	23.733	38.421	0	665	C	[3,21]
Magnesite	MgCO_3	-245.66 ± 1.0	-265.6 ± 1	15.738 ± 0.20	28.018	18.128	19.731	12.539	-4.748	1000	P	[1,3]
Magnesium	Mg	0 ± 0	0 ± 0	7.811 ± 0.02	13.968	5.921	4.97	3.040	0.040	923	R	[22,23]
Merwinite	$\text{Ca}_3\text{Mg}(\text{SiO}_4)_2$	-1036.53 ± 1.0	-1090.9 ± 1	60.50 ± 0.5	104.400	60.292	72.97	11.960	-14.440	1700	C,P	[1,2,24]
Mg3(PO4)2(s)	$\text{Mg}_3(\text{PO}_4)_2$	-837.3 ± 3	-895.10 ± 2.5	45.22 ± 0.2	95.341	51.020	64.48017	15.916	-16.183	1626	C	[25]
Mg(NO3)2(s)	$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2$	-140.82 ± 0.6	-188.97 ± 0.2	39.2 ± 2	64.485	33.922	10.68	71.200	1.790	800	R	[22,26]
MgCl2(H2O)6(s)	$\text{MgCl}_2(\text{H}_2\text{O})_6$	-505.41 ± 0.2	-597.28 ± 0.2	87.50 ± 0.2	129.574	81 ± 23	-43.063	307.029	28.556	371	R	[26,27]
MgCl2(s)	MgCl_2	-141.51 ± 0.1	-153.350 ± 0.11	21.42 ± 0.2	36.210	17.06 ± 0.1	18.025459	2.452	-1.508	987	C	[28,29]
MgSO4(s)	MgSO_4	-274.4 ± 5	-301.7 ± 5	21.85 ± 0.2	45.251	22.939	24.720383	11.870	-4.729	1400	R	[28]
Monticellite	CaMgSiO_4	-512.8 ± 1	-540.8 ± 2	26.4 ± 4	51.470	29.413	36.82	5.340	-8.000	1400	P	[1,3]
Montmor_Ca	$\text{Ca}_{0.165}(\text{Mg}_{0.33}\text{Al}_{1.67})(\text{Si}_4)\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1271.3 ± 3	-1358.4 ± 3	66.8 ± 5	135.843	74.553	73.114	67.013	-16.482	520	E[pm]	[4,8-10]
Montmor_Ca(avg)	$\text{Ca}_{0.2}(\text{Mg}_{0.4}\text{Fe}_{0.2}\text{Al}_{1.45})(\text{Al}_{0.1}\text{Si}_{3.9})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1260.3 ± 3	-1346.5 ± 3	70.7 ± 3	135.843	75.944	73.809	67.716	-16.049	520	E[pm]	[4,8-10]
Montmor_Cs	$\text{Cs}_{0.33}(\text{Mg}_{0.33}\text{Al}_{1.67})(\text{Si}_4)\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1275.2 ± 3	-1361.0 ± 3	76.3 ± 5	162.728	76.324	75.813	65.034	-16.782	520	E[pm]	[4,8-10]
Montmor_Cs(avg)	$\text{Cs}_{0.4}(\text{Mg}_{0.4}\text{Fe}_{0.2}\text{Al}_{1.45})(\text{Al}_{0.1}\text{Si}_{3.9})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1265.1 ± 3	-1350.2 ± 3	80.6 ± 3	162.728	78.123	76.992	65.357	-16.317	520	E[pm]	[4,8-10]
Montmor_Fe	$\text{Fe}_{0.165}(\text{Mg}_{0.33}\text{Al}_{1.67})(\text{Si}_4)\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1254.0 ± 3	-1340.2 ± 3	69.1 ± 5	141.503	74.827	73.195	67.161	-16.349	520	E[pm]	[4,8-10]
Montmor_Fe(avg)	$\text{Fe}_{0.2}(\text{Mg}_{0.4}\text{Fe}_{0.2}\text{Al}_{1.45})(\text{Al}_{0.1}\text{Si}_{3.9})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1239.4 ± 3	-1324.7 ± 3	73.1 ± 3	141.503	76.309	73.819	67.935	-15.792	520	E[pm]	[4,8-10]

表 1-9 JAEA TDB (2020)で追加されたマグネシウム含有鉱物の熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1 \text{ bar}$) (4/6)

Mineral/Phase ^{*,†}	Composition	$\Delta_f G^0$ ^{i,‡}	$\Delta_f H^0$ ^{i,‡}	S^0 ^{ii,‡}	V^0 ⁱⁱⁱ	C_p^0 ^{ii,‡}	Maier-Kelley Coefficients [§]			C_p T_{max} ^{vi}	Der ^a	Ref
							a ⁱⁱ	$b \times 10^3$ ^{iv}	$c \times 10^{-5}$ ^v			
Montmor_K	$\text{K}_{0.33}(\text{Mg}_{0.33}\text{Al}_{1.67})(\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1273.3 ± 3	-1360.6 ± 3	69.6 ± 4	141.503	76.181	74.249	68.246	-16.370	520	E[pm]	[4,8-10]
Montmor_K(avg)	$\text{K}_{0.4}(\text{Mg}_{0.4}\text{Fe}_{0.2}\text{Al}_{1.45})(\text{Al}_{0.1}\text{Si}_{3.9}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1262.8 ± 3	-1349.4 ± 3	73.5 ± 3	141.503	77.949	75.096	69.251	-15.818	520	E[pm]	[4,8-10]
Montmor_KunipiaF	$\text{K}_{0.005}\text{Na}_{0.375}\text{Ca}_{0.06}(\text{Mg}_{0.31}\text{Fe}_{0.1}\text{Al}_{1.56})(\text{Al}_{0.09}\text{Si}_{3.91}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1269.1 ± 3	-1355.9 ± 3	71.4 ± 3	138.031	76.550	75.059	67.884	-16.666	520	E[pm]	[4,8-10]
Montmor_Mg	$\text{Mg}_{0.165}(\text{Mg}_{0.33}\text{Al}_{1.67})(\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1267.6 ± 3	-1354.1 ± 3	68.5 ± 4	142.918	74.356	72.875	67.106	-16.469	520	E[pm]	[4,8-10]
Montmor_Mg(avg)	$\text{Mg}_{0.2}(\text{Mg}_{0.4}\text{Fe}_{0.2}\text{Al}_{1.45})(\text{Al}_{0.1}\text{Si}_{3.9}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1255.8 ± 3	-1341.4 ± 3	72.2 ± 3	142.918	75.736	73.43	67.869	-15.938	520	E[pm]	[4,8-10]
Montmor_MX80(avg)	$\text{K}_{0.002}\text{Na}_{0.21}\text{Mg}_{0.018}\text{Ca}_{0.0036}(\text{Mg}_{0.24}\text{Fe}_{0.2}\text{Al}_{1.55})(\text{Al}_{0.04}\text{Si}_{3.96}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1249.9 ± 3	-1336.6 ± 3	69.5 ± 3	133.783	75.746	73.563	68.645	-16.253	520	E[pm]	[4,8-10]
Montmor_MX80(WY)	$\text{K}_{0.024}\text{Na}_{0.409}\text{Ca}_{0.009}(\text{Mg}_{0.214}\text{Fe}_{0.208}\text{Al}_{1.598})(\text{Al}_{0.262}\text{Si}_{3.738}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-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	[11]
Montmor_Na	$\text{Na}_{0.33}(\text{Mg}_{0.33}\text{Al}_{1.67})(\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1270.3 ± 3	-1357.8 ± 3	67.8 ± 4	135.843	75.578	74.199	67.642	-16.702	520	E[pm]	[4,8-10]
Montmor_Na(avg)	$\text{Na}_{0.4}(\text{Mg}_{0.4}\text{Fe}_{0.2}\text{Al}_{1.45})(\text{Al}_{0.1}\text{Si}_{3.9}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1259.2 ± 3	-1345.9 ± 3	71.9 ± 3	135.843	77.220	75.044	68.499	-16.220	520	E[pm]	[4,8-10]
Montmor_NH4	$(\text{NH}_4)_{0.33}(\text{Mg}_{0.33}\text{Al}_{1.67})(\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1264.8 ± 3	-1356.5 ± 3	77.9 ± 4	150.418	82.164	80.494	66.819	-16.225	520	E[pm]	[4,8-10]
Montmor_NH4(avg)	$(\text{NH}_4)_{0.4}(\text{Mg}_{0.4}\text{Fe}_{0.2}\text{Al}_{1.45})(\text{Al}_{0.1}\text{Si}_{3.9}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1252.5 ± 3	-1344.6 ± 3	83.1 ± 3	150.418	85.200	82.665	67.521	-15.642	520	E[pm]	[4,8-10]
MSH06	$(\text{MgO})_{0.6}(\text{SiO}_2)(\text{H}_2\text{O})_{1.08}$	-352.573	-384.886	24.753	54.949	26.447	30.686	12.029	-6.956	423	K	[4,8,30]
MSH07	$(\text{MgO})_{0.7}(\text{SiO}_2)(\text{H}_2\text{O})_{1.2}$	-374.062	-408.605	27.196	57.786	28.482	33.38	12.475	-7.660	423	K	[4,8,30]
MSH08	$(\text{MgO})_{0.8}(\text{SiO}_2)(\text{H}_2\text{O})_{1.32}$	-395.447	-432.320	29.304	60.623	30.518	36.074	12.922	-8.364	423	K	[4,8,30]
MSH09	$(\text{MgO})_{0.9}(\text{SiO}_2)(\text{H}_2\text{O})_{1.44}$	-416.758	-456.004	31.266	63.460	32.554	38.768	13.369	-9.067	423	K	[4,8,30]
MSH10	$(\text{MgO})_1(\text{SiO}_2)(\text{H}_2\text{O})_{1.56}$	-437.990	-479.643	33.115	66.297	34.589	41.462	13.815	-9.771	423	K	[4,8,30]
MSH11	$(\text{MgO})_{1.1}(\text{SiO}_2)(\text{H}_2\text{O})_{1.68}$	-459.146	-503.236	34.864	69.134	36.626	44.156	14.262	-10.474	423	K	[4,8,30]
MSH12	$(\text{MgO})_{1.2}(\text{SiO}_2)(\text{H}_2\text{O})_{1.8}$	-480.236	-526.793	36.513	71.971	38.661	46.85	14.709	-11.178	423	K	[4,8,30]
MSH13	$(\text{MgO})_{1.3}(\text{SiO}_2)(\text{H}_2\text{O})_{1.92}$	-501.281	-550.338	38.050	74.808	40.696	49.544	15.155	-11.882	423	K	[4,8,30]
MSH14	$(\text{MgO})_{1.4}(\text{SiO}_2)(\text{H}_2\text{O})_{2.04}$	-522.305	-573.906	39.440	77.645	42.732	52.238	15.602	-12.585	423	K	[4,8,30]
MSH15	$(\text{MgO})_{1.5}(\text{SiO}_2)(\text{H}_2\text{O})_{2.16}$	-543.302	-597.547	40.496	80.482	44.768	54.932	16.049	-13.289	423	K	[4,8,30]
Nesquehonite	$\text{MgCO}_3(\text{H}_2\text{O})_3$	-411.987 ± 0.12	-472.576 ± 0.11	46.760 ± 0.14	74.790	57	-1574.804	3899.173	-417.325	306.5	C	[1,16,31]
Nontro_Ca(avg)	$\text{Ca}_{0.2}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{1.65}\text{Al}_{0.3})(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1117.6 ± 3	-1201.4 ± 3	78.9 ± 2	136.191	79.656	68.461	87.024	-13.113	375	E[pm]	[4,8,32]
Nontro_CaFeX2	$\text{Ca}_{0.2}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{1.95})(\text{Fe}_{0.45}\text{Si}_{3.55}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1038.0 ± 3	-1121.2 ± 3	80.5 ± 3	137.953	82.932	66.274	93.382	-9.942	375	E[pm]	[4,8]142a

表 1-9 JAEA TDB (2020)で追加されたマグネシウム含有鉱物の熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1$ bar)(5/6)

Mineral/Phase ^{*,†}	Composition	$\Delta_f G^0$ ^{i,‡}	$\Delta_f H^0$ ^{i,‡}	S^0 ^{ii,‡}	V^0 ⁱⁱⁱ	C_p^0 ^{ii,‡}	Maier-Kelley Coefficients [§]			C_p T_{max} ^{vi}	Der ^a	Ref
							a ⁱⁱ	$b \times 10^3$ ^{iv}	$c \times 10^{-5}$ ^v			
Nontro_Cs(avg)	$\text{Cs}_{0.4}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{1.65}\text{Al}_{0.3})$ $(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1122.4 ± 3	-1206.5 ± 3	84.0 ± 2	144.988	81.834	71.644	84.665	-13.381	375	E[pm]	[4,8,32]
Nontro_CsFeX2	$\text{Cs}_{0.4}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{1.95})(\text{Fe}_{0.45}\text{Si}_{3.55})$ $\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1042.7 ± 3	-1126.3 ± 3	85.6 ± 3	146.750	85.111	69.458	91.023	-10.210	375	E[pm]	[4,8,32]
Nontro_Fe(avg)	$\text{Fe}_{0.2}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{1.65}\text{Al}_{0.3})$ $(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1096.8 ± 3	-1180.2 ± 3	79.4 ± 3	135.267	80.018	68.47	87.243	-12.857	375	E[pm]	[4,8,10,32]
Nontro_FeX3	$\text{Fe}_{0.2}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{1.95})(\text{Fe}_{0.45}\text{Si}_{3.55})$ $\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1017.1 ± 3	-1100.0 ± 3	81.1 ± 3	137.029	83.296	66.284	93.602	-9.685	375	E[pm]	[4,8,10,32]
Nontro_K(avg)	$\text{K}_{0.4}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{1.65}\text{Al}_{0.3})$ $(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1120.1 ± 3	-1204.4 ± 3	81.5 ± 2	140.943	81.659	69.748	88.559	-12.883	375	E[pm]	[4,8,32]
Nontro_KFeX2	$\text{K}_{0.4}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{1.95})(\text{Fe}_{0.45}\text{Si}_{3.55})$ $\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1040.5 ± 3	-1124.2 ± 3	83.1 ± 3	142.705	84.936	67.561	94.917	-9.711	375	E[pm]	[4,8,32]
Nontro_Mg	$\text{Mg}_{0.165}(\text{Fe}_2)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67})$ $\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1067.1 ± 3	-1151.1 ± 3	76.7 ± 4	136.248	80.461	66.007	90.836	-11.226	375	E[pm]	[4,8,32]
Nontro_Mg(avg)	$\text{Mg}_{0.2}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{1.65}\text{Al}_{0.3})$ $(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1113.2 ± 3	-1197.0 ± 3	78.3 ± 2	135.116	79.446	68.082	87.177	-13.003	375	E[pm]	[4,8,32]
Nontro_MgFe(avg)	$\text{Mg}_{0.2}(\text{Fe}_{1.75}\text{Al}_{0.3})(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})$ $\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1105.2 ± 3	-1188.8 ± 3	78.9 ± 3	135.192	79.732	68.276	87.210	-12.930	375	E[pm]	[4,8,10,32]
Nontro_MgFeX2	$\text{Mg}_{0.2}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{1.95})(\text{Fe}_{0.45}\text{Si}_{3.55})$ $\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1033.5 ± 3	-1116.8 ± 3	79.9 ± 3	136.879	82.723	65.895	93.535	-9.831	375	E[pm]	[4,8,32]
Nontro_Na(avg)	$\text{Na}_{0.4}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{1.65}\text{Al}_{0.3})$ $(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1116.5 ± 3	-1200.6 ± 3	80.6 ± 2	137.867	80.931	69.696	87.807	-13.285	375	E[pm]	[4,8,32]
Nontro_NaFeX2	$\text{Na}_{0.4}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{1.95})(\text{Fe}_{0.45}\text{Si}_{3.55})$ $\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1036.8 ± 3	-1120.4 ± 3	82.2 ± 3	139.629	84.208	67.509	94.165	-10.113	375	E[pm]	[4,8,32]
Nontro_NAu-1	$\text{K}_{0.02}\text{Ca}_{0.247}(\text{Mg}_{0.066}\text{Fe}_{1.688}\text{Al}_{0.268}\text{Ti}_{0.007})$ $(\text{Al}_{0.542}\text{Si}_{3.458})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-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	[33]
Nontro_NH4(avg)	$(\text{NH}_4)_{0.4}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{1.65}\text{Al}_{0.3})$ $(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1109.9 ± 3	-1200.0 ± 3	89.8 ± 2	145.568	88.910	77.317	86.829	-12.707	375	E[pm]	[4,8,32]
Nontro_NH4FeX2	$(\text{NH}_4)_{0.4}(\text{Mg}_{0.1}\text{Fe}_{1.95})(\text{Fe}_{0.45}\text{Si}_{3.55})$ $\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1030.2 ± 3	-1119.8 ± 3	91.4 ± 3	147.331	92.187	75.13	93.187	-9.535	375	E[pm]	[4,8,32]
Odinite_7A(avg)	$\text{Mg}_{0.85}\text{Fe}_{1.12}\text{Al}_{0.46}(\text{Al}_{0.12}\text{Si}_{1.88})$ $\text{O}_5(\text{OH})_4$	-827.3 ± 1	-902.158	58.302	107.793	66.860	71.642	36.908	-14.033	1000	E[ph]	[5,8]
Pargasite	$\text{NaCa}_2\text{Mg}_4\text{Al}_3\text{Si}_6\text{O}_{22}(\text{OH})_2$	-2846.730	-3016.763	160.000	273.500	161.738	205.8	41.660	-50.210	1000	P	[1,2]
Periclase	MgO	-136.08 ± 0.1	-143.80 ± 0.1	6.440 ± 0.04	11.248	9.034	10.18	1.740	-1.480	2100	C,P	[1,22,34]
Phlogopite	$\text{K}(\text{Mg}_3)(\text{AlSi}_3)\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1396.42 ± 1.0	-1488.392	76.100	149.660	85.004	100.61	28.780	-21.500	1000	P	[1,35]
Pyrope	$\text{Mg}_3\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$	-1417.87 ± 1.6	-1502.06 ± 1.4	62.30 ± 2.4	113.270	77.89 ± 0.2	91.69	32.640	-20.920	848	R	[7]
Ripidolite_14A	$\text{Mg}_3\text{Fe}_2\text{Al}(\text{AlSi}_3)\text{O}_{10}(\text{OH})_8$	-1799.624	-1948.467	130.407	209.634	142.625	170.384	42.764	-36.010	900	R	[36]
Ripidolite_7A	$\text{Mg}_{1.5}\text{Fe}(\text{AlSi}_{1.5})\text{O}_5(\text{OH})_4$	-897.511	-972.568	63.074	107.690	68.825	83.352	25.642	-19.710	848	R	[36]

表 1-9 JAEA TDB (2020)で追加されたマグネシウム含有鉱物の熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1 \text{ bar}$) (6/6)

Mineral/Phase ^{*,†}	Composition	$\Delta_f G^\circ$ ^{i,‡}	$\Delta_f H^\circ$ ^{i,‡}	S° ^{ii,‡}	V° ⁱⁱⁱ	C_p° ^{ii,‡}	Maier-Kelly Coefficients [§]			C_p T_{max} ^{vi}	Der ^a	Ref
							a ⁱⁱ	$b \times 10^3$ ^{iv}	$c \times 10^{-5}$ ^v			
Saponite_Ca	$\text{Ca}_{0.165}(\text{Mg}_3)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1346.4 ± 3	-1435.2 ± 3	71.5 ± 3	139.661	81.067	80.756	65.221	-17.009	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_Ca(avg)	$\text{Ca}_{0.225}(\text{Mg}_{2.8}\text{Fe}_{0.1}\text{Al}_{0.05})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1344.9 ± 3	-1433.2 ± 3	73.6 ± 3	138.879	81.105	81.937	64.649	-17.874	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_Cs	$\text{Cs}_{0.33}(\text{Mg}_3)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1350.3 ± 3	-1439.3 ± 3	75.8 ± 3	146.919	82.865	83.382	63.276	-17.230	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_Cs(avg)	$\text{Cs}_{0.45}(\text{Mg}_{2.8}\text{Fe}_{0.1}\text{Al}_{0.05})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1350.2 ± 3	-1438.8 ± 3	79.4 ± 3	148.776	83.555	85.518	61.995	-18.176	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_Fe	$\text{Fe}_{0.165}(\text{Mg}_3)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1329.2 ± 3	-1417.6 ± 3	72.0 ± 3	138.899	81.368	80.764	65.403	-16.797	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_Fe(avg)	$\text{Fe}_{0.225}(\text{Mg}_{2.8}\text{Fe}_{0.1}\text{Al}_{0.05})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1321.4 ± 3	-1409.2 ± 3	74.3 ± 3	137.840	81.514	81.948	64.896	-17.586	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_K	$\text{K}_{0.33}(\text{Mg}_3)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1348.5 ± 3	-1437.6 ± 3	73.7 ± 3	143.582	82.721	81.818	66.488	-16.819	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_K(avg)	$\text{K}_{0.45}(\text{Mg}_{2.8}\text{Fe}_{0.1}\text{Al}_{0.05})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1347.7 ± 3	-1436.5 ± 3	76.6 ± 3	144.225	83.359	83.385	66.376	-17.615	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_Mg	$\text{Mg}_{0.165}(\text{Mg}_3)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1342.7 ± 3	-1431.5 ± 3	71.0 ± 3	138.775	80.896	80.444	65.348	-16.918	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_Mg(avg)	$\text{Mg}_{0.225}(\text{Mg}_{2.8}\text{Fe}_{0.1}\text{Al}_{0.05})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1339.9 ± 3	-1428.2 ± 3	72.9 ± 3	137.670	80.870	81.511	64.821	-17.750	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_MgFe	$\text{Mg}_{0.165}(\text{Fe}_3)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1092.7 ± 9	-1175.0 ± 9	88.7 ± 3	141.031	89.482	86.27	66.344	-14.728	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_MgFe(avg)	$\text{Mg}_{0.225}(\text{Fe}_{2.9}\text{Al}_{0.05})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1105.6 ± 9	-1187.9 ± 9	89.5 ± 3	139.776	88.883	86.948	65.751	-15.706	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_Na	$\text{Na}_{0.33}(\text{Mg}_3)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1345.5 ± 3	-1434.6 ± 3	72.9 ± 3	141.044	82.121	81.775	65.868	-17.150	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_Na(avg)	$\text{Na}_{0.45}(\text{Mg}_{2.8}\text{Fe}_{0.1}\text{Al}_{0.05})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1343.6 ± 3	-1432.3 ± 3	75.5 ± 3	140.765	82.540	83.327	65.530	-18.067	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_NH4	$(\text{NH}_4)_{0.33}(\text{Mg}_3)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1340.0 ± 3	-1434.0 ± 3	80.5 ± 3	147.398	88.703	88.062	65.061	-16.674	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_NH4(avg)	$(\text{NH}_4)_{0.45}(\text{Mg}_{2.8}\text{Fe}_{0.1}\text{Al}_{0.05})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1336.2 ± 3	-1431.6 ± 3	85.9 ± 3	149.429	91.517	91.9	64.430	-17.417	520	E[pm]	[4,8,10,32]
Saponite_Sap-Ca-1	$\text{Na}_{0.394}\text{K}_{0.021}\text{Ca}_{0.038}(\text{Mg}_{2.948}\text{Fe}_{0.021}\text{Mn}_{0.001})(\text{Al}_{0.397}\text{Fe}_{0.034}\text{Si}_{3.569})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1343.74 ± 1.2	-1432.56 ± 1.2	75.19 ± 0.4	141.660	82.93 ± 0.4	82.997	65.650	-17.459	520	C	[33]
Sepiolite	$\text{Mg}_4\text{Si}_6\text{O}_{15}(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_6$	-2211.8 ± 6	-2418.748	146.600	285.600	168.003	157.92	104.300	-18.680	800	K	[1,19]
Spinel	MgAl_2O_4	-517.01 ± 1.0	-546.9 ± 1	19.27 ± 0.1	39.710	27.764	36.772808	6.415	-9.709	2000	C,P	[1,34]
Talc	$\text{Mg}_3\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1320.30 ± 1.0	-1411.1 ± 1	62.340 ± 0.15	136.250	79.880	82.482	41.614	-13.342	800	C,P	[1,3,6]
Tremolite	$\text{Ca}_2\text{Mg}_5\text{Si}_8\text{O}_{22}(\text{OH})_2$	-2770.25 ± 1.0	-2944.2 ± 1	131.190 ± 0.30	272.920	154.882	188.222	57.294	-44.822	800	C,P	[1,2,3]

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 SUPCRT20.dat TDB, GWB20.dat and PHREEQC20.dat. † Suffix notation is used to show

differences in composition. † Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). § $C_p = a + b \cdot T + c/T^2$ (Maier and Kelly, 1932).^a Derivation of $\Delta_f G^0$: C : Calorimetry. K : Fitted to equilibrium constant, K_{eq} data, P : Phase relations, R: As reported, E[pm] : Estimated using a polymer model, E[ph] : Estimated using a polyhedral model, So : determined from solubility relations, St : Determined from stability relations. **References:** [1] (Helgeson et al., 1978). [2] $\Delta_f G^0$ and $\Delta_f H^0$ corrected to be consistent with Ca+2 and CO3-2 in (Shock and Helgeson, 1988) and calcite and aragonite in (Plummer and Busenberg, 1982). [3] (Robie and Waldbaum, 1968). [4] Generated in the development of JAEA-TDB. [5] $\Delta_f G^0$ estimated using a polyhedral model. [6] Updated to be consistent with changes in $SiO_{2(aq)}$ described in (Rimstidt, 1997). [7] (Robie et al., 1978). [8] Estimated using methods described in (Helgeson et al., 1978). [9] S^0 and C_p^0 of Beidellite SBld-1, Illite IMt-2 and Smectite MX80 reported in (Gailhanou et al., 2012) are used to provide estimates of S^0 and C_p^0 for all Beidellites, Illites and Montmorillonites, respectively, using additive methods described in (Helgeson et al., 1978). [10] S^0 estimation modified as given in (Wood, 1981). [11] (Gailhanou et al., 2012). [12] (Brown et al., 1996; King et al., 1975; McGee and Hostetler, 1977; Robie and Waldbaum, 1968; Travers and Nouvel, 1929; Xiong, 2008). [13] Adjusted to be consistent with the changes to the thermodynamic properties of $SiO_2(aq)$ as described in (Rimstidt, 1997). [14] (King et al., 1967). [15] (Hemingway and Robie, 1972; Hemingway and Robie, 1973). [16] (Robie and Hemingway, 1973). [17] (Allada et al., 2005; Atkins et al., 1994; Bennett et al., 1992; Gao and Li, 2012). [18] (Helgeson and MacKenzie, 1970). [19] (Stoessell, 1988). [20] Thermodynamic properties of Lizardite based on Chrysotile as described in (Evans, 2004). [21] (Bonnicksen, 1954; Klemme and Ahrens, 2005; Koehler et al., 1961). [22] (Kelley, 1960). [23] (Cox, 1978). [24] (Pankratz and Kelley, 1964; Weller and Kelley, 1963). [25] (Oetting and McDonald, 1963). [26] (Wagman et al., 1982). [27] (Pilar et al., 2012). [28] (Chase, 1998). [29] (Kelley and Moore, 1943; Moore, 1943). [30] (Bernard et al., 2017; Lothenbach et al., 2014; Nied et al., 2016). [31] (Robie and Hemingway, 1972). [32] S^0 and C_p^0 of Nontronite NAU-1 and Saponite Sap_Ca-1 reported in (Gailhanou et al., 2013) are used to provide estimates of S^0 and C_p^0 for Nontronites and Saponites, respectively, using methods described in (Helgeson et al., 1978). [33] (Gailhanou et al., 2013). [34] (Stull and Prophet, 1971). [35] (Sverjensky et al., 1991). [36] Ripidolite treated as an ideal solid solution between Daphnite and Clinocllore end-members as described in (Wolery and Jove-Colon, 2007).

表 1-10 JAEA TDB (2020)で追加された鉄 (Ⅲ) 含有鉱物の熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t = 25^\circ C$ and $P = 1$ bar) (1/3)

Mineral/Phase (A-Z) *†	Composition	$\Delta_f G^0$ i,†	$\Delta_f H^0$ i,†	S^0 ii,†	V^0 iii	C_p^0 ii,†	Maier-Kelley Coefficients §			C_p T_{max} vi	Der ^a	Ref
							a ii	$b \times 10^3$ iv	$c \times 10^{-5}$ v			
Aegirine	NaFe(SiO ₃) ₂	-574.80 ± 0.7	-615.65 ± 0.7	37.85 ± 0.2	64.596	38.51 ± 0.4	46.14	10.220	-9.490	950	C	[1,2]
Andradite	Ca ₃ Fe ₂ (SiO ₄) ₃	-1296.82 ± 1.0	-1380.345	70.130	131.850	83.446	113.532	15.636	-30.889	1100	P	[1,3]
Beidel_CaFe(avg)	Ca _{0.2} (Fe _{0.4} Al _{1.65})(Al _{0.45} Si _{3.55}) O ₁₀ (OH) ₂	-1253.11 ± 2.6	-1339.2 ± 3	71.3 ± 3	136.854	76.578	64.184	83.011	-10.983	520	E[pm]	[4-7]
Beidel-CsFe(avg)	Cs _{0.4} (Fe _{0.4} Al _{1.65})(Al _{0.45} Si _{3.55}) O ₁₀ (OH) ₂	-1257.84 ± 2.6	-1344.3 ± 3	76.4 ± 3	145.651	78.758	67.368	80.652	-11.251	520	E[pm]	[4-7]
Beidel_FeX2(avg)	Fe _{0.2} (Fe _{0.4} Al _{1.65})(Al _{0.45} Si _{3.55}) O ₁₀ (OH) ₂	-1232.22 ± 2.6	-1318.0 ± 3	71.8 ± 3	135.930	76.943	64.194	83.230	-10.726	520	E[pm]	[4-7]
Beidel_KFe(avg)	K _{0.4} (Fe _{0.4} Al _{1.65})(Al _{0.45} Si _{3.55}) O ₁₀ (OH) ₂	-1255.61 ± 2.6	-1342.2 ± 3	73.9 ± 3	141.606	78.583	65.471	84.546	-10.752	520	E[pm]	[4-7]
Beidel_NaFe(avg)	Na _{0.4} (Fe _{0.4} Al _{1.65})(Al _{0.45} Si _{3.55}) O ₁₀ (OH) ₂	-1251.95 ± 2.6	-1338.4 ± 3	73.0 ± 3	138.530	77.855	65.419	83.794	-11.154	520	E[pm]	[4-7]
Beidel_NH4Fe(avg)	(NH ₄) _{0.4} (Fe _{0.4} Al _{1.65})(Al _{0.45} Si _{3.55}) O ₁₀ (OH) ₂	-1245.33 ± 2.6	-1337.8 ± 3	82.2 ± 3	146.232	85.834	73.04	82.816	-10.576	520	E[pm]	[4-7]
C2F	Ca ₂ Fe ₂ O ₅	-478.41 ± 0.2	-511.30 ± 0.2	45.10 ± 0.3	67.180	46.101	59.24	0	-11.680	1750	R	[8,9]
C2FH75	Ca ₂ Fe ₂ (OH) ₁₀ (H ₂ O) _{2.5}	-904.8 ± 14	-1039.963	120.180	189.590	141.929	84.829	177.333	3.759	323	E	[4,7,10]

表 1-10 JAEA TDB (2020)で追加された鉄(Ⅲ)含有鉱物の熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t = 25^{\circ}\text{C}$ and $P = 1 \text{ bar}$)(2/3)

Mineral/Phase ^{*,†}	Composition	$\Delta_f G^{\circ}$ ^{i,‡}	$\Delta_f H^{\circ}$ ^{i,‡}	S° ^{ii,‡}	V° ⁱⁱⁱ	C_p° ^{ii,‡}	Maier-Kelley Coefficients			C_p T_{max} ^{vi}	Der ^a	Ref
							a ⁱⁱ	b $\times 10^3$ ^{iv}	c $\times 10^{-5}$ ^v			
C4AF	$\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{Fe}_2\text{O}_{10}$	-1144.608	-1214.200	78.000	130.200	94.678	89.49	17.400	0	NR	R	[11]
C4FH13	$(\text{Ca}_2\text{Fe}(\text{OH})_6)_2(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_6$	-1537.0 \pm 6	-1763 \pm 30	190 \pm 100	286.000	233.047	136.004	294.228	8.284	328	K	[4,10,12]
Chalcopyrite	CuFeS_2	-44.866	-44.453	31.150	42.830	23.099	20.79	12.800	-1.340	830	C,P	[1,13]
Cronstedtite_7A	$\text{Fe}_2\text{Fe}(\text{FeSi})\text{O}_5(\text{OH})_4$	-626.8 \pm 2	-698.410	73.500	110.900	83.230	84.79	41.840	-12.476	950	E[ph]	[1]
Epidote	$\text{Ca}_2\text{FeAl}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}(\text{OH})$	-1450.912	-1544.063	75.280	139.200	85.598	117.622	12.816	-31.864	1100	P	[1,3]
Epidote_ord	$\text{Ca}_2\text{FeAl}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}(\text{OH})$	-1450.912	-1544.087	75.200	139.200	85.626	113.78	14.690	-28.920	1100	P	[1,3]
Ettringite_Fe	$\text{Ca}_6(\text{Fe}(\text{OH})_6)_2(\text{SO}_4)_3(\text{H}_2\text{O})_{26}$	-3412.70 \pm 1.6	-3979.5 \pm 6	420 \pm 21	716.594	528 \pm 16	457.299	204.956	8.457	333	K	[4,14]
Fe(OH)3(am)	$\text{Fe}(\text{OH})_3$	-168.77 \pm 0.9	-197.35 \pm 0.5	31.07 \pm 2.4	26.987	26.615	5.747	54.053	4.224	423	E	[4,15]
Fe(OH)3(mic)	$\text{Fe}(\text{OH})_3$	-169.80 \pm 0.9	-198.38 \pm 0.5	31.07 \pm 2.4	26.987	26.290	10.16	49.168	1.307	423	C,So	[15]
FeCl3(s)	$\text{FeCl}_3(\text{s})$	-79.235 \pm 0.06	-94.642 \pm 0.02	34.77 \pm 0.2	55.933	23.09 \pm 0.2	16.533	22.376	-0.104	550	C	[15]
Friedel Salt_Fe	$(\text{Ca}_2\text{Fe}(\text{OH})_6)_2(\text{Cl})_2(\text{H}_2\text{O})_4$	-1410.4 \pm 2	-1606 \pm 11	154 \pm 37	277.486	172.4 \pm 1	74.654	256.599	18.861	328	K	[4,12,16]
Goethite	FeOOH	-117.14 \pm 0.5	-134.08 \pm 0.5	14.30 \pm 0.1	20.820	18.65 \pm 0.1	4.455	49.164	-0.414	372.6	C,So	[15]
GR1CO3 ^b	$\text{Fe}_6(\text{OH})_{12}\text{CO}_3(\text{H}_2\text{O})_2$	-973.7 \pm 3	-1151.431	110.724	163.121	168.355	138.484	-16.182	30.842	353	K	[4,17]
Hematite	Fe_2O_3	-178.18 \pm 0.3	-197.72 \pm 0.3	20.94 \pm 0.3	30.274	25.04 \pm 0.4	23.49	18.600	-3.550	950	C	[1,8,18]
Hemcarbonate_Fe	$(\text{Ca}_2\text{Fe}(\text{OH})_6)_2(\text{CO}_3)_{0.5}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_{3.5}$	-1422.9 \pm 1	-1609.7 \pm 3	180.4 \pm 9	270.672	167.1 \pm 2	74.434	285.933	6.572	328	K	[4,12,16]
Katoite_Fe	$\text{Ca}_3\text{Fe}_2(\text{OH})_{12}$	-981.7 \pm 4	-1105 \pm 15	110 \pm 50	155.000	115.288	72.135	151.029	-1.668	358	K	[4,10,19]
Katoite_FeSi084	$\text{Ca}_3\text{Fe}_2(\text{SiO}_4)_{0.84}(\text{OH})_{8.64}$	-1070.2 \pm 4	-1181.461	102.485	148.800	106.478	83.588	113.570	-9.752	323	K	[4,10,19]
Katoite_FeSi134	$\text{Ca}_3\text{Fe}_2(\text{SiO}_4)_{1.34}(\text{OH})_{6.64}$	-1122.8 \pm 4	-1228.488	92.191	144.700	101.065	90.626	90.553	-14.720	323	K	[4,10,19]
Lepidocrocite	$\text{FeO}(\text{OH})$	-114.69 \pm 0.5	-131.26 \pm 0.5	15.554 \pm 0.07	22.393	16.506 \pm 0.13	13.502	16.021	-1.576	387	C	[15]
Maghemite	Fe_2O_3	-174.2 \pm 2	-193.35 \pm 2.0	22.24 \pm 0.1	29.130	25.09 \pm 0.4	25.526	15.557	-4.508	700	C	[15]
Magnetite	Fe_3O_4	-242.60 \pm 0.7	-267.250 \pm 0.44	34.8 \pm 2	44.524	36.25 \pm 0.2	21.88	48.200	0	900	C	[1,8,18]
Monocarbonate_Fe	$(\text{Ca}_2\text{Fe}(\text{OH})_6)_2(\text{CO}_3)(\text{H}_2\text{O})_6$	-1594.9 \pm 3	-1814.8 \pm 9	206 \pm 29	291.661	191.6 \pm 10	106.445	273.381	3.274	328	R	[4,14,16,20]
Monosulfate_Fe	$(\text{Ca}_2\text{Fe}(\text{OH})_6)_2(\text{SO}_4)(\text{H}_2\text{O})_6$	-1644.35 \pm 1.9	-1860 \pm 16	250 \pm 54	320.619	233.8 \pm 7	136.079	295.956	8.457	333	K	[4,10,14,21]
Nontro_Ca	$\text{Ca}_{0.165}(\text{Fe}_2)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1070.8 \pm 3	-1154.7 \pm 3	77.2 \pm 4	137.122	80.633	66.32	90.709	-11.318	375	E[pm]	[4,7,22]
Nontro_CaFe(avg)	$\text{Ca}_{0.2}(\text{Fe}_{1.75}\text{Al}_{0.3})(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1109.7 \pm 3	-1193.3 \pm 3	79.5 \pm 3	136.266	79.942	68.655	87.057	-13.040	375	E[pm]	[4,5,7,22]
Nontro_Cs	$\text{Cs}_{0.33}(\text{Fe}_2)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1074.7 \pm 3	-1158.9 \pm 3	81.4 \pm 4	144.356	82.430	68.946	88.763	-11.539	375	E[pm]	[4,7,22]
Nontro_CsFe(avg)	$\text{Cs}_{0.4}(\text{Fe}_{1.75}\text{Al}_{0.3})(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1114.5 \pm 3	-1198.4 \pm 3	84.6 \pm 3	145.063	82.120	71.838	84.698	-13.308	375	E[pm]	[4,5,7,22]
Nontro_Fe	$\text{Fe}_{0.165}(\text{Fe}_2)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1053.6 \pm 3	-1137.2 \pm 3	77.7 \pm 4	136.372	80.934	66.328	90.891	-11.106	375	E[pm]	[4,5,7,22]
Nontro_FeX2(avg)	$\text{Fe}_{0.2}(\text{Fe}_{1.75}\text{Al}_{0.3})(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1088.8 \pm 3	-1172.0 \pm 3	80.0 \pm 3	135.342	80.305	68.665	87.276	-12.784	375	E[pm]	[4,5,7,22]
Nontro_K	$\text{K}_{0.33}(\text{Fe}_2)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67})\text{O}_{10}(\text{OH})_2$	-1072.9 \pm 3	-1157.2 \pm 3	79.3 \pm 4	141.054	82.287	67.382	91.976	-11.127	375	E[pm]	[4,7,22]

表 1-10 JAEA TDB (2020)で追加された鉄(Ⅲ)含有鉱物の熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t = 25^{\circ}\text{C}$ and $P = 1 \text{ bar}$)(3/3)

Mineral/Phase ^{*,†}	Composition	$\Delta_f G^{\circ}$ ^{i,‡}	$\Delta_f H^{\circ}$ ^{i,‡}	S° ^{ii,‡}	V° ⁱⁱⁱ	C_p° ^{ii,‡}	Maier-Kelley Coefficients [§]			C_p T_{max} ^{vi}	Der ^a	Ref
							a ⁱⁱ	$b \times 10^3$ ^{iv}	$c \times 10^{-5}$ ^v			
Nontro_KFe(avg)	$\text{K}_{0.4}(\text{Fe}_{1.75}\text{Al}_{0.3})(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1112.2 ± 3	-1196.2 ± 3	82.1 ± 3	141.018	81.945	69.942	88.592	-12.810	375	E[pm]	[4,5,7,22]
Nontro_Na	$\text{Na}_{0.33}(\text{Fe}_2)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1069.8 ± 3	-1154.0 ± 3	78.6 ± 4	138.517	81.686	67.339	91.355	-11.459	375	E[pm]	[4,7,22]
Nontro_NaFe(avg)	$\text{Na}_{0.4}(\text{Fe}_{1.75}\text{Al}_{0.3})(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1108.6 ± 3	-1192.5 ± 3	81.2 ± 3	137.942	81.217	69.89	87.840	-13.212	375	E[pm]	[4,5,7,22]
Nontro_NH4	$(\text{NH}_4)_{0.33}(\text{Fe}_2)(\text{Al}_{0.33}\text{Si}_{3.67}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1064.4 ± 3	-1153.6 ± 3	86.2 ± 4	144.871	88.269	73.626	90.549	-10.982	375	E[pm]	[4,7,22]
Nontro_NH4Fe(avg)	$(\text{NH}_4)_{0.4}(\text{Fe}_{1.75}\text{Al}_{0.3})(\text{Al}_{0.45}\text{Si}_{3.55}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1102.0 ± 3	-1191.9 ± 3	90.4 ± 3	145.644	89.196	77.511	86.862	-12.634	375	E[pm]	[4,5,7,22]
Saponite_CaFe(avg)	$\text{Ca}_{0.225}(\text{Fe}_{2.9}\text{Al}_{0.05})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1110.7 ± 9	-1192.9 ± 9	90.1 ± 3	140.984	89.118	87.374	65.578	-15.830	520	E[pm]	[4,5,7,22]
Saponite_CsFe(avg)	$\text{Cs}_{0.45}(\text{Fe}_{2.9}\text{Al}_{0.05})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1116.0 ± 9	-1198.6 ± 9	95.9 ± 3	150.881	91.570	90.956	62.925	-16.132	520	E[pm]	[4,5,7,22]
Saponite_FeX2(avg)	$\text{Fe}_{0.225}(\text{Fe}_{2.9}\text{Al}_{0.05})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1087.2 ± 9	-1169.0 ± 9	90.8 ± 3	139.945	89.527	87.385	65.825	-15.542	520	E[pm]	[4,5,7,22]
Saponite_KFe(avg)	$\text{K}_{0.45}(\text{Fe}_{2.9}\text{Al}_{0.05})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1113.5 ± 9	-1196.2 ± 9	93.1 ± 3	146.331	91.374	88.823	67.306	-15.571	520	E[pm]	[4,5,7,22]
Saponite_NaFe(avg)	$\text{Na}_{0.45}(\text{Fe}_{2.9}\text{Al}_{0.05})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1109.3 ± 9	-1191.9 ± 9	92.0 ± 3	142.870	90.554	88.764	66.460	-16.023	520	E[pm]	[4,5,7,22]
Saponite_NH4Fe(avg)	$(\text{NH}_4)_{0.45}(\text{Fe}_{2.9}\text{Al}_{0.05})(\text{Al}_{0.5}\text{Si}_{3.5}\text{O}_{10}(\text{OH})_2)$	-1101.9 ± 9	-1191.2 ± 9	102.4 ± 3	151.535	99.531	97.338	65.359	-15.373	520	E[pm]	[4,5,7,22]
Stratlingite_Fe	$(\text{Ca}_2\text{Fe}(\text{OH})_6)(\text{FeSiO}_2(\text{OH})_4)(\text{H}_2\text{O})_3$	-1146 ± 10	-1300.230	137.300	227.000	158.991	98.577	195.994	1.759	353	E	[4,7,10]

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 SUPCRT20.dat TDB, GWB20.dat and PHREEQC20.dat. † Suffix notation is used to denote differences in compositional variation. ‡ 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 equilibrium constant, K_{eq} data, E[pm] : Estimated using a polymer model, So : determined from solubility relations. E[ph] : Estimated using a polyhedral model. **References:** [1] (Helgeson et al., 1978). [2] (Bennington et al., 1984). [3] $\Delta_f G^{\circ}$ and $\Delta_f H^{\circ}$ corrected to be consistent with Ca+2 and CO3-2 in (Shock and Helgeson, 1988) and calcite and aragonite in (Plummer and Busenberg, 1982). [4] Derived from the additive methods described in (Helgeson et al., 1978). [5] S° estimation modified as discussed in (Wood, 1981). [6] S° and C_p° of Beidellite SBld-1, Illite IMt-2 and Smectite MX80 reported in (Gailhanou et al., 2012) are used to provide estimates of S° and C_p° for all Beidellites, Illites and Montmorillonites, respectively, using additive methods described in (Helgeson et al., 1978). [7] Generated in the development of the JAEA TDB. [8] (Kelley, 1960). [9] (Kelley and King, 1961; Robie et al., 1978). [10] C_p of Katoite_Al, Monosulfate_Al and Ettringite_Al given in (Ederova and Šatava, 1979) were used as parents to estimate C_p values for other Katoite, AFm and AFT phases, respectively, using additive methods described in (Helgeson et al., 1978). [11] (Babushkin et al., 1985). [12] (Dilnesa, 2011). [13] (Pankratz and King, 1970). [14] (Möschner et al., 2008). [15] (Lemire et al., 2013). [16] C_p of Monocarbonate_Al given in (Bellmann et al., 2019) was used as a parents to estimate C_p values for other AFm-(Cl,CO3) phases using additive methods described in (Helgeson et al., 1978). [17] (Drissi et al., 1995). [18] (Haas and Robie, 1973). [19] (Dilnesa et al., 2014). [20] (Dilnesa et al., 2011). [21] (Dilnesa et al., 2012). [22] S° and C_p° of Nontronite NAU-1 and Saponite Sap_Ca-1 reported in (Gailhanou et al., 2013) are used to provide estimates of S° and C_p° for Nontronites and Saponites, respectively, using methods described in (Helgeson et al., 1978).

表 1-11 JAEA TDB (2020)で追加された臭素 (I) 含有液体、鉱物及びガスの熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1$ bar)

Mineral/Phase (A-Z, state) *,†	Composition	$\Delta_f G^0$ i,‡	$\Delta_f H^0$ i,‡	S^0 ii,‡	V^0 iii	C_p^0 ii,‡	Maier-Kelly Coefficients §			C_p T_{max} vi	Der ^a	Ref
							a ⁱⁱ	b × 10 ³ iv	c × 10 ⁻⁵ v			
Bromine(l)	Br ₂	0 ± 0	0 ± 0	36.379 ± 0.02	51.460	18.076	22.42	-14.570	0	333	C	[1]
CaBr ₂ (s)	CaBr ₂	-158.7 ± 1	-163.29 ± 1.0	31.0 ± 1	106.418	17.9 ± 2	16.665	4.406	-0.039	1015	C	[2]
KBr(s)	KBr	-90.92 ± 0.4	-94.12 ± 0.4	22.930 ± 0.01	43.431	12.576	9.137	6.708	1.280	1007	R	[2]
NaBr(s)	NaBr	-83.49 ± 0.1	-86.38 ± 0.1	20.75 ± 0.1	32.154	12.369	11.401	3.247	0	1020	R	[2]
Br ₂ (g)	Br ₂	0.743 ± 0.027	7.388 ± 0.026	58.666 ± 0.01	0.000	8.618 ± 0.02	8.92	0.120	-0.300	3000	R	[1]

ⁱ kcal/mol, ⁱⁱ cal/mol/K, ⁱⁱⁱ cm³/mol, ^{iv} cal/mol/K², ^v calK/mol, ^{vi} K. * Liquids, mineral/solid phases and gases as shown in SUPCRT20.dat TDB, GWB20.dat and PHREEQC20.dat. † Parentheses are used to denote state, s = solid, l = liquid, g = gas. ‡ Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). § $C_p = a + b \cdot T + c/T^2$ (Maier and Kelly, 1932).^a Derivation of $\Delta_f G^0$: C : Calorimetry, R : As reported. **References:** [1] (Cox, 1978; Kelley, 1960). [2] (Chase, 1998).

表 1-12 JAEA TDB (2020)で追加された鉄 (II) 含有ケイ酸塩の熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1$ bar)

Mineral/Phase (A-Z, state) *,†	Composition	$\Delta_f G^0$ i,‡	$\Delta_f H^0$ i,‡	S^0 ii,‡	V^0 iii	C_p^0 ii,‡	Maier-Kelly Coefficients §			C_p T_{max} vi	Der ^a	Ref
							a ⁱⁱ	b × 10 ³ iv	c × 10 ⁻⁵ v			
Beidel_Fe	Fe _{0.165} (Al ₂)(Al _{0.33} Si _{3.67}) O ₁₀ (OH) ₂	-1265.98 ± 2.7	-1353.1 ± 3	66.6 ± 4	135.433	74.731	63.752	81.334	-11.797	520	E[pm]	[1-4]
Saponite_CaFe	Ca _{0.165} (Fe ₃)(Al _{0.33} Si _{3.67}) O ₁₀ (OH) ₂	-1096.4 ± 9	-1178.7 ± 9	89.2 ± 3	141.917	89.654	86.582	66.217	-14.819	520	E[pm]	[1-3,5]
Saponite_CsFe	Cs _{0.33} (Fe ₃)(Al _{0.33} Si _{3.67}) O ₁₀ (OH) ₂	-1100.3 ± 9	-1182.8 ± 9	93.5 ± 3	149.175	91.452	89.208	64.272	-15.040	520	E[pm]	[1-3,5]
Saponite_FeX2	Fe _{0.165} (Fe ₃)(Al _{0.33} Si _{3.67}) O ₁₀ (OH) ₂	-1079.1 ± 9	-1161.1 ± 9	89.7 ± 3	141.155	89.955	86.59	66.399	-14.607	520	E[pm]	[1-3,5]
Saponite_KFe	K _{0.33} (Fe ₃)(Al _{0.33} Si _{3.67}) O ₁₀ (OH) ₂	-1098.4 ± 9	-1181.1 ± 9	91.4 ± 3	145.838	91.308	87.644	67.484	-14.629	520	E[pm]	[1-3,5]
Saponite_NaFe	Na _{0.33} (Fe ₃)(Al _{0.33} Si _{3.67}) O ₁₀ (OH) ₂	-1095.4 ± 9	-1178.0 ± 9	90.6 ± 3	143.300	90.707	87.601	66.864	-14.960	520	E[pm]	[1-3,5]
Saponite_NH4Fe	(NH ₄) _{0.33} (Fe ₃)(Al _{0.33} Si _{3.67}) O ₁₀ (OH) ₂	-1089.9 ± 9	-1177.4 ± 9	98.2 ± 3	149.654	97.289	93.888	66.057	-14.484	520	E[pm]	[1-3,5]

ⁱ kcal/mol, ⁱⁱ cal/mol/K, ⁱⁱⁱ cm³/mol, ^{iv} cal/mol/K², ^v calK/mol, ^{vi} K. * Mineral/solid phases as shown in SUPCRT20.dat TDB, GWB20.dat and PHREEQC20.dat. † Suffix notation is used to denote compositional variation. ‡ Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). § $C_p = a + b \cdot T + c/T^2$ (Maier and Kelly, 1932).^a Derivation of $\Delta_f G^0$: E[pm] : Estimated using a polymer model. **References:** [1] Derived from the additive methods described in (Helgeson et al., 1978). [2] S^0 estimation modified as discussed in (Wood, 1981). [3] Generated in the development of the JAEA TDB. [4] S^0 and C_p^0 of Beidellite SBId-1, Illite IMt-2 and Smectite MX80 reported in (Gailhanou et al., 2012) are used to provide estimates of S^0 and C_p^0 for all Beidellites, Illites and Montmorillonites, respectively, using additive methods described in (Helgeson et al., 1978). [5] S^0 and C_p^0 of Nontronite NAu-1 and Saponite Sap_Ca-1 reported in (Gailhanou et al., 2013) are used to provide estimates of S^0 and C_p^0 for Nontronites and Saponites, respectively, using methods described in (Helgeson et al., 1978).

表 1-13 JAEA TDB (2020)で追加されたフライアッシュガラスの熱力学特性及び Maier-Kelly 係数($t = 25^\circ\text{C}$ and $P = 1$ bar)

Mineral/Phase (A-Z, state) ^{*,†}	Composition	$\Delta_f G^0$ ^{i,‡}	$\Delta_f H^0$ ^{i,‡}	S^0 ^{ii,‡}	V^0 ⁱⁱⁱ	C_p^0 ^{ii,‡}	Maier-Kelley Coefficients [§]			C_p T_{max} ^{vi}	Der ^a	Ref
							a ^{ii,‡}	$b \times 10^3$ ^{iv,‡}	$c \times 10^{-5}$ ^{v,‡}			
FA_glass_H24	(K ₂ O) _{0.0765} (Na ₂ O) _{0.1612} (CaO) _{1.3108} (MgO) _{0.5568} (Al ₂ O ₃) _{1.3872} (Fe ₂ O ₃) _{0.1830} (SiO ₂) _{11.9195}	999999	999999	999999	478.500	999999	999999	999999	999999	NR	N	[1]
FA_glass_H24_inert ^b	(K ₂ O) _{0.0765} (Na ₂ O) _{0.1612} (CaO) _{1.3108} (MgO) _{0.5568} (Al ₂ O ₃) _{1.3872} (Fe ₂ O ₃) _{0.1830} (SiO ₂) _{11.9195}	999999	999999	999999	478.500	999999	999999	999999	999999	NR	N	[1]
FA_glass_R2 ^b	(K ₂ O) _{0.1727} (Na ₂ O) _{0.1323} (CaO) _{0.9557} (MgO) _{0.6425} (Fe ₂ O ₃) _{0.3482} (Al ₂ O ₃) _{2.1144} (SiO ₂) _{10.3998}	999999	999999	999999	478.500	999999	999999	999999	999999	NR	N	[1]
FA_glass_R2_inert ^b	(K ₂ O) _{0.1727} (Na ₂ O) _{0.1323} (CaO) _{0.9557} (MgO) _{0.6425} (Fe ₂ O ₃) _{0.3482} (Al ₂ O ₃) _{2.1144} (SiO ₂) _{10.3998}	999999	999999	999999	478.500	999999	999999	999999	999999	NR	N	[1]
SiO2(am) inert ^b	SiO ₂	-203.215 ± 0.43	-216.009 ± 0.97	10.59 ± 2.9	29.000	8.30 ± 4.4	25.013	10.736	-17.702	573	K	[2]

ⁱ kcal/mol, ⁱⁱ cal/mol/K, ⁱⁱⁱ cm³/mol, ^{iv} cal/mol/K², ^v calK/mol, ^{vi} K. * Fly ash glasses as shown in SUPCRT20.dat TDB, GWB20.dat and PHREEQC20.dat. † Suffix notation is used to denote the year the glasses were analyzed. ‡ Unknown values = 999999. § $C_p = a + b \cdot T + c/T^2$ (Maier and Kelly, 1932).^a Derivation of $\Delta_f G^0$: N : Not used. K : from log K_{eq} data. ^b New entry in JAEA TDB. **References:** [1] Generated in the development of the JAEA TDB. [2] (Alexander et al., 1954; Chen and Marshall, 1982; Elmer and Nordberg, 1958; Fournier and Rowe, 1977; Greenberg and Price, 1957; Gunnarsson and Arnórsson, 2000; Hitchen, 1935; Kitahara, 1960; Marshall and Warakowski, 1980; Piryutko, 1959).

表 1-14 JAEA TDB (2020)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) (1/2)

Mineral/Phase (A-Z, state) [†]	Composition	$\Delta_f G^0$ ^{i,‡,c}	$\Delta_f H^0$ ^{i,‡,c}	S^0 ^{ii,‡,c}	V^0 ⁱⁱⁱ	C_p^0 ^{ii,‡,c}	Maier-Kelley Coefficients [§]			C_p T_{max} ^{vi}	Der ^a	Ref
							a ^{ii,c}	$b \times 10^3$ ^{iv,c}	$c \times 10^{-5}$ ^{v,c}			
Anorthite	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	-954.1 ± 2	-1007.6 ± 2	49.1 ± 2	100.790	50.353	63.311	14.794	-15.440	1700	P	[1,2]
Atacamite ^b	Cu ₂ (OH) ₃ Cl	-159.95 ± 0.5	-196.56 ± 0.5	40.100 ± 0.14	56.839	38.0 ± 1	37.626	15.585	-3.781	508	K	[3,4]
Beidel_Ca	Ca _{0.165} (Al ₂)(Al _{0.33} Si _{3.67}) O ₁₀ (OH) ₂	-1283.21 ± 2.6	-1370.6 ± 3	66.2 ± 3	136.195	74.430	63.744	81.152	-12.009	520	E[pm]	[3,5,6]
Beidel_Cs	Cs _{0.33} (Al ₂)(Al _{0.33} Si _{3.67}) O ₁₀ (OH) ₂	-1287.11 ± 2.6	-1374.8 ± 3	70.4 ± 3	143.452	76.228	66.371	79.206	-12.230	520	E[pm]	[3, 5, 6]
Beidel_K	K _{0.33} (Al ₂)(Al _{0.33} Si _{3.67}) O ₁₀ (OH) ₂	-1285.28 ± 2.6	-1373.1 ± 3	68.3 ± 3	140.115	76.084	64.806	82.419	-11.819	520	E[pm]	[3, 5, 6]
Beidel_Na	Na _{0.33} (Al ₂)(Al _{0.33} Si _{3.67}) O ₁₀ (OH) ₂	-1282.26 ± 2.6	-1370.0 ± 3	67.6 ± 3	137.578	75.483	64.763	81.799	-12.150	520	E[pm]	[3, 5, 6]
Beidel_NH4	(NH ₄) _{0.33} (Al ₂)(Al _{0.33} Si _{3.67}) O ₁₀ (OH) ₂	-1276.80 ± 2.6	-1369.5 ± 3	75.1 ± 3	143.931	82.066	71.051	80.992	-11.674	520	E[pm]	[3, 5, 6]
Bornite	Cu ₅ FeS ₄	-86.70 ± 1.0	-79.922	99.290	98.600	58.700	49.76	35.080	-1.350	485	C,P	[1,7]
Buddingtonite ^b	NH ₄ AlSi ₃ O ₈	-846.0 ± 1	-919.25 ± 1.0	56.0 ± 1	112.205	57.476	60.54	46.358	-15.010	1400	C	[3,8]
Ca(NO3)2(s)	Ca(NO ₃) ₂	-177.58 ± 0.6	-224.28 ± 0.2	46.2 ± 2	65.635	35.696	29.37	36.800	-4.130	815	R	[9,10]
Chukanovite ^b	Fe ₂ (OH) ₂ (CO ₃)	-285.36 ± 0.6	-320.70 ± 0.9	49.59 ± 2.2	56.016	42.876	28.944	44.164	0.680	780	So	[3,11]
Hibbingite ^b	Fe ₂ (OH) ₃ Cl	-221.85 ± 0.8	-255.56 ± 0.8	46.92 ± 0.8	62.201	41.6 ± 1	38.81	15.969	-1.761	508	K	[3,12]

表 1-14 JAEA TDB (2020)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 $P = 1 \text{ bar}$)(2/2)

Mineral/Phase (A-Z, state) †	Composition	$\Delta_f G^0$ ^{i,†,c}	$\Delta_f H^0$ ^{i,†,c}	S^0 ^{ii,†,c}	V^0 ⁱⁱⁱ	C_p^0 ^{ii,†,c}	Maier-Kelly Coefficients [§]			C_p T_{max} ^{vi}	Der ^a	Ref
							a ^{ii,c}	$b \times 10^3$ ^{iv,c}	$c \times 10^{-5}$ ^{v,c}			
Hydroxyapatite	Ca ₁₀ (PO ₄) ₆ (OH) ₂	-3004.83 ± 1.2	-3195.75 ± 1.3	186.60 ± 0.9	319.200	184.066	228.5	39.620	-50.000	1500	R	[10,13]
K in CASH gel ^b	KO _{0.5}	999999	999999	999999	0.000	999999	999999	999999	999999	N	P	[6]
Mononitrate_Al	(Ca ₂ Al(OH) ₆) ₂ (NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₄	-1620.34 ± 1.7	-1853.7 ± 3	168.0 ± 8	296.685	216.0 ± 7	129.343	280.087	2.842	333	K	[3,14,15]
Mononitrite_Al	(Ca ₂ Al(OH) ₆) ₂ (NO ₂) ₂ (H ₂ O) ₄	-1581.3 ± 14	-1803.6 ± 14	156.0 ± 5	274.734	221.7 ± 7	144.877	235.610	5.819	333	K	[3,14,15]
Na ₂ O(s)	Na ₂ O	-89.87 ± 0.1	-99.140 ± 0.07	17.94 ± 0.2	25.000	16.457	18.25	4.890	-2.890	1000	C	[1,16,17]
Na in CASH gel ^b	NaO _{0.5}	999999	999999	999999	0.000	999999	999999	999999	999999	N	P	[6]
Nahcolite ^b	NaHCO ₃	-203.431 ± 0.26	-226.805 ± 0.10	24.40 ± 0.8	38.185	20.941	10.19	36.060	0	400	C	[10,18]
NaNO ₃ (s) ^b	NaNO ₃	-87.71 ± 0.2	-111.82 ± 0.2	27.85 ± 0.2	37.581	22.24 ± 0.2	6.34	53.320	0	549.2	R	[9,10,19]
Salammoniac ^b	NH ₄ Cl	-48.55 ± 0.4	-75.18 ± 0.2	22.7 ± 1	35.062	20.7 ± 8	9.82	36.358	0	458	C	[20]
SnO ₂ (am)	SnO ₂	-122.82 ± 0.7	-137.15 ± 1.6	13.2 ± 5	27.846	16.5 ± 5	20.953	2.728	-4.700	573	K	[3,21]
Sphalerite	ZnS	-47.93 ± 0.5	-49.00 ± 0.5	14.020 ± 0.04	23.830	10.841	11.77	1.260	-1.160	1300	R	[1,22]
Sr(OH) ₂ (s)	Sr(OH) ₂	-210.59 ± 2.3	-231.57 ± 2.2	23.2 ± 2	39.010	19.7 ± 2	23.52	6.320	-5.080	783	C	[20]
Thaumasite	Ca ₃ Si(OH) ₆ (SO ₄)(CO ₃) (H ₂ O) ₁₂	-1808.16 ± 0.9	-2077.61 ± 2.8	221.0 ± 9	331.729	255.1 ± 8	226.013	104.736	-1.893	343	K	[3,14,23]
Thermonatrite ^b	Na ₂ CO ₃ (H ₂ O)	-307.428 ± 0.18	-341.715 ± 0.13	40.19 ± 0.4	54.990	35.543	17.131	62.644	-0.236	380.8	C	[17,24]
Tobelite ^b	NH ₄ Al ₂ (AlSi ₃ O ₁₀)(OH) ₂	-1288.5 ± 4	-1398.5 ± 4	75.5 ± 3	146.045	85.778	93.119	65.251	-23.819	800	C	[3, 8]
Wustite	FeO	-60.10 ± 0.6	-65.02 ± 0.5	14.52 ± 0.4	12.000	11.931 ± 0.13	12.122	2.072	-0.750	1600	R	[1,25]

ⁱ kcal/mol, ⁱⁱ cal/mol/K, ⁱⁱⁱ cm³/mol, ^{iv} cal/mol/K², ^v calK/mol, ^{vi} K. * Mineral/solid phases as shown in SUPCRT20.dat TDB, GWB20.dat and PHREEQC20.dat. † Suffix notation is used to denote compositional variation. ‡ Known uncertainties represent the 95% confidence interval (2σ). § $C_p = a + b \cdot T + c/T^2$ (Maier and Kelly, 1932).^a Derivation of $\Delta_f G^0$: P : Phase relations, K : Fitted to log equilibrium constant, K_{eq} data, E[pm]: Estimated using a polymer model, C : Calorimetry, R : As reported, So : From solubility relations. ^b New entry in JAEA TDB. ^c 999999 = Unknown value. **References:** [1] (Helgeson et al., 1978). [2] $\Delta_f G^0$ and $\Delta_f H^0$ corrected to be consistent with Ca+2 and CO₃-2 in (Shock and Helgeson, 1988) and with calcite and aragonite in (Plummer and Busenberg, 1982). [3] Using additive methods described in (Helgeson et al., 1978). [4] (Barton and Bethke, 1960; Bisengalieva et al., 1997; Näsänen and Tamminen, 1949; Parise and Hyde, 1986). [5] S^0 and C_p^0 of Beidellite SBld-1, Illite IMt-2 and Smectite MX80 reported in (Gailhanou et al., 2012) are used to provide estimates of S^0 and C_p^0 for all Beidellites, Illites and Montmorillonites, respectively, using additive methods described in (Helgeson et al., 1978). [6] Generated in the development of JAEA-TDB. [7] (Pankratz and King, 1970). [8] (Hovis et al., 2004a; Hovis et al., 2004b). [9] (Wagman et al., 1982). [10] (Kelley, 1960). [11] (Azoulay et al., 2012; Lee and Xu, 2018; Lee and Wilkin, 2010; Nishimura and Dong, 2009). [12] (Nemer et al., 2011; Rémazeilles and Refait, 2008; Saini-Eidukat et al., 1994). [13] (Robie et al., 1978). [14] C_p of Katoite_Al, Monosulfate_Al and Ettringite_Al given in (Ederova and Šatava, 1979) were used as parents to estimate C_p values for other Katoite, AFm and AFt phases, respectively, using additive methods described in (Helgeson et al., 1978). [15] (Balonis et al., 2011). [16] (Stull and Prophet, 1971). [17] (O'Hare, 1972). [18] (Berg and Vanderzee, 1978). [19] (Paul and Pryor, 1972). [20] (Chase, 1998). [21] (Oda and Amaya, 1998). [22] (Mills, 1974). [23] (Macphee and Barnett, 2004; Matschei and Glasser, 2015; Mittermayr et al., 2013). [24] (Grønvold and Meisingset, 1983; Waterfield et al., 1968). [25] (Robie and Waldbaum, 1968).

2. 参考文献

- Alexander, G.B., Heston, W.M., and Iler, R.K. (1954) The solubility of amorphous silica in water. *Journal of Physical Chemistry*, 58(6), 453-455.
- Allada, R.K., Navrotsky, A., and 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.
- Amitin, E.B., Minenkov, Y.F., Nabutovskaya, O.A., Naumov, V.N., Pukov, I.E., and Kondrat'ev, S.N. (1987) Thermodynamic properties of selenium dioxide at 7-304K. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 61, 1375-1378.
- Andresen, A.F., and Leciejewicz, J. (1964) A neutron diffraction study of Fe₇Se₈. *Journal de Physique*, 25(5), 574-578.
- Andresen, A.F., and van Laar, B. (1970) The magnetic structure of Fe₃Se₄. *Acta Chemica Scandinavica*, 24, 2435-2439.
- Archer, D.W., and Monk, C.B. (1964) 594. Ion-association of some acetates by pH (glass electrode) measurements. *Journal of the Chemical Society*, 3117-3122.
- Atake, T., Nomoto, K., Chaudhuri, B.K., and Chihara, H. (1983) Calorimetric studies of two successive phase transitions. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 15(4), 383-394.
- Atkins, M., Glasser, F.P., Moroni, L.P., and Jack, J.J. (1994) Thermodynamic modelling of blended cements at elevated temperature (50-90°C). Department of the Environment (UK) HMIP report, DoE/HMIP/RR/94.011, 1-193.
- Azoulay, I., Rémaizeilles, C., and Refait, P. (2012) Determination of standard Gibbs free energy of chukanovite and Pourbaix diagrams of iron in carbonated media. *Corrosion Science*, 58, 229-236.
- Babushkin, V.I., Matveyev, G.M., and Mchedlov-Petrosyan, O.P. (1985) Thermodynamics of silicates. Springer-Verlag, Berlin, Germany.
- Baes, C.F., and Mesmer, R.E. (1976) The hydrolysis of cations. 490 p. John Wiley & Sons, Inc., New York, NY, USA.
- Balonis, M., Medala, M., and Glasser, F.P. (2011) Influence of calcium nitrate and nitrite on the constitution of AFm and AFt cement hydrates. *Advances in Cement Research*, 23(3), 129-143.
- Banks, W.H. (1934) The dissociation of the selenates of zinc and cadmium in water. *Journal of the Chemical Society*, 1010-1012.
- Barcza, L., and Sillén, L.G. (1971) Equilibrium studies of polyanions 19. Polyselenite equilibria in various ionic media. *Acta Chemica Scandinavica*, 25, 1250-1260.
- Barnes, D.S., and Mortimer, C.T. (1973) Enthalpies of combustion of selenium and dephenyl selenide. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 5, 371-377.
- Barton, P.B., and Bethke, P.M. (1960) Thermodynamic properties of some synthetic zinc and copper minerals. *American Journal of Science*, 258A, 21-34.
- 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.
- Bennett, D.G., Read, D., Atkins, M., and 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.
- Bennington, K.O., Brown, R.R., and Beyer, R.P. (1984) Thermodynamic properties of aegerine. United States Bureau of Mines Report of Investigations, 8912, 16.
- Berg, R.L., and Vanderzee, C.E. (1978) Thermodynamics of carbon dioxide and carbonic acid: (a) the standard enthalpies of Na₂CO_{3(s)}, NaHCO_{3(s)} and CO_{2(g)} in water at 298.15 K; (b) the standard enthalpies of formation, standard Gibbs energies of formation, and standard entropies of CO_{2(aq)}, HCO_{3⁻(aq)}, CO_{3²⁻(aq)}, NaHCO_{3(s)}, Na₂CO_{3(s)}, Na₂CO_{3·H₂O(s)}, and Na₂CO_{3·10H₂O(s)}. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 10, 1113-1136.

- Bernard, E., Lothenbach, B., Rentsch, D., Pochard, I., and Dauzères, A. (2017) Formation of magnesium silicate hydrates (M-S-H). *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 99(June), 142-157.
- Bisengalieva, M.R., Kiseleva, I.A., Melchakova, L.V., Ogorodova, L.P., and Gurevich, A.M. (1997) The molar heat capacity of hydrous copper chloride: atacamite $\text{Cu}_2\text{Cl}(\text{OH})_3$. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 29, 345-352.
- Bodenstein, M. (1899) Gasreaktionen in der chemischen Kinetik. IV. Bildung und Zersetzung von Selenwasserstoff. *Zeitschrift für Physikalische Chemie (München)*, 29, 429-448 [in German].
- Bonnicksen, K.R. (1954) High temperature heat contents of calcium and magnesium ferrites. *Journal of the American Chemical Society*, 76, 1480-1482.
- Brown, P.L., Drummond, S.E.J., and Palmer, D.A. (1996) Hydrolysis of magnesium (II) at elevated temperatures. *Journal of the Chemical Society Dalton Transactions*, 3071-3075.
- Brown, P.L., and Ekberg, C. (2016) *Hydrolysis of metal ions (Vol. 2)*. Wiley-VCH, Weinheim, Germany.
- 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.
- Chen, C.-T., A., and 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 350°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 46(2), 279-287.
- Cherin, P., and Unger, P. (1967) The crystal structure of trigonal selenium. *Inorganic Chemistry*, 6, 1589-1591.
- . (1972) Refinement of the crystal structure of α -monoclinic Se. *Acta Crystallographica B*, 28, 313-317.
- Covington, A.K., and Dobson, J.V. (1965) The dissociation constant of the biselenate ion at 25°C. *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, 27, 1435-1436.
- 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.
- Daniele, P.G., de Robertis, A., de Stefano, C., Sammartano, S., and Rigano, C. (1985) On the possibility of determining the thermodynamic parameters for the formation of weak complexes using a simple model for the dependence on ionic strength of activity coefficients: Na^+ , K^+ , and Ca^{2+} complexes of low molecular weight ligands in aqueous solution. *Journal of the Chemical Society Dalton Transactions*, 2353-2361.
- Dasgupta, P.K., and Nara, O. (1990) Measurement of acid dissociation constants of weak acids by cation exchange and conductometry. *Analytical Chemistry*, 62, 1117-1122.
- 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. (2011) Fe-containing hydrates and their fate during cement hydration: thermodynamic data and experimental study. *Laboratoire des matériaux de construction, Ph.D.*, p. 208. École Polytechnique Fédérale de Lausanne, Lausanne.
- 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.

- Dilnesa, B.Z., Lothenbach, B., Renaudin, G., Wichser, A., and Wieland, E. (2012) Stability of monosulfate in the presence of iron. *Journal of the American Ceramic Society*, 95(10), 3305-3316.
- Drissi, S.H., Refait, P., M., A., and R., G.J.-M. (1995) Preparation and thermodynamic properties of Fe(II)-Fe(III) hydroxycarbonate (green rust one); Pourbaix diagram of iron in carbonate-containing aqueous media. *Corrosion Science*, 37, 2025-2041.
- Ederova, J., and Šatava, V. (1979) Heat capacities of C_3AH_6 , $C_4A\$H_{12}$ and $C_6A\$_3H_{32}$. *Thermochimica Acta*, 31, 126-128.
- Elmer, T.H., and Nordberg, L.C. (1958) Solubility of silica in nitric acid solutions. *Journal of the American Ceramic Society*, 41(12), 517-520.
- Evans, W.E. (2004) The serpentine multisystem revisited: Chrysotile is metastable. *International Geology Review*, 46, 479-506.
- Fabre, M.C. (1887) Recherches thermiques sur les sélénieux. *Annales de Chimie et de Physique*, 10, 472-550 [in French].
- Fein, J.B. (1991) Experimental study of aluminum-, calcium-, and magnesium-acetate complexing at 80°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 55, 955-964.
- Felmy, A.R., Rai, D., and Amonette, J.E. (1990) The solubility of barite and celestite in dosium sulfate: Evaluation of thermodynamic data. *Journal of Solution Chemistry*, 19(2), 175-185.
- Flögel, P. (1972) Zur Kristallzüchtung von Cadmiumsulfid und anderen II- VI-Verbindungen. IV. Zum Gleichgewicht zwischen Selen und Wasserstoff bei 400°C. *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie*, 388, 218-228 [in German].
- Fournier, R.O., and Rowe, J.J. (1977) The solubility of amorphous silica in water at high temperatures and pressures. *American Mineralogist*, 62, 1052-1056.
- Gadzhiev, S.N. (1966) Enthalpy of formation of selenium dioxide. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 40, 241-243.
- 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.
- Gao, W., and Li, Z. (2012) Solubility and K_{sp} of $Mg_4Al_2(OH)_{14}.3H_2O$ at the various ionic strengths. *Hydrometallurgy*, 117-118, 36-46.
- Gattow, G. (1962) Die Bildungsenthalpie von SeO_2 und die Umwandlungswärmen der Selen-Modifikationen. *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie*, 317, 245-260 [in German].
- Gattow, G., and Dräger, M. (1966) Thermochemie des Selens. IV. Über die Bildungsenthalpie von SeO_2 und die Umwandlungswärmen der Selen-Modifikationen. *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie*, 343, 55-57.
- Gaur, U., Shu, H.-C., Mehta, A., and Wunderlich, B. (1981) Heat capacity and other thermodynamic properties of linear macromolecules. I. Selenium. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 10(1), 89-117.
- Ghosh, R., and Nair, V.S.K. (1970) Studies on metal complexes in aqueous solution: III. The biselenate ion and transition metal selenates. *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, 32, 3041-3051.

- Giordano, T.H. (1989) Anglesite (PbSO₄) solubility in acetate solutions: The determination of stability constants for lead acetate complexes to 85°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 53, 359-366.
- Giordano, T.H., and Drummond, S.E. (1991) The potentiometric determination of stability constants for zinc acetate complexes in aqueous solutions to 295°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 55, 2401-2415.
- 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.
- Greenberg, S.A., and Price, E.W. (1957) The solubility of silica in solution of electrolytes. *Journal of Physical Chemistry*, 61, 1539-1541.
- Grønvold, F. (1968) Heat capacities and thermodynamic properties of the iron selenides Fe_{1.04}Se, Fe₇Se₈, and Fe₃Se₄ from 298 to 1050°K. *Acta Chemica Scandinavica*, 22, 1219-1240.
- Grønvold, F. (1972) High-temperature reaction calorimeter. *Acta Chemica Scandinavica*, 26, 2085-2099.
- Grønvold, F., Drowart, J., and Westrum, E.F.J. (1984) The Chemical Thermodynamics of Actinide Elements and Compounds. Part 4: The actinide chalcogenides, p. 265. International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria.
- Grønvold, F., and Meisingset, K.K. (1983) Thermodynamic properties and phase transitions of salt hydrates between 270 and 400 K. II. Na₂CO₃·H₂O and Na₂CO₃·10H₂O. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 15, 881-889.
- Grønvold, F., and Westrum, E.F.J. (1959) Low temperature heat capacities and thermodynamic properties of the iron selenides Fe_{1.04}Se, Fe₇Se₈ and Fe₃Se₄ from 5 to 350°K. *Acta Chemica Scandinavica*, 13, 241-248.
- Grønvold, F., and Westrum, E.F.J. (1962) Heat capacities and thermodynamic functions of iron disulfide (pyrite), iron diselenide, and nickel diselenide from 5 to 350°K. The estimation of standard entropies of transition metal chalcogenides. *Inorganic Chemistry*, 1(1), 36-48.
- Gunnarsson, I., and Arnórsson, S. (2000) Amorphous silica solubility and the thermodynamic properties of H₄SiO₄^o in the range of 0° to 350°C at P_{sat}. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 64(13), 2295-2307.
- Haas, J.L., and Robie, R.A. (1973) Thermodynamic data for wustite, Fe_{0.947}O, magnetite, Fe₃O₄, and hematite, Fe₂O₃. *American Geophysical Union Transactions*, 54, 483.
- Hagisawa, H. (1939) On the ionization constant of selenous acid (glass electrode and its application Part 4). *Bulletin of the Institute of Physical and Chemical Research (RIKEN, Tokyo)*, 18, 648-656 (in Japanese).
- 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 MacKenzie, F.T. (1970) Silicate-sea water equilibria in the ocean system. *Deep Sea Research*, 17, 877-892.
- Hemingway, B.S., and Robie, R.A. (1972) The heat capacities at low temperatures and entropies at 298.15°K of huntite, CaMg₃(CO₃)₄, and artinite, Mg₂(OH)₂(CO₃)(H₂O)₃. *American Mineralogist*, 57, 1754-1767.
- Hemingway, B.S., and Robie, R.A. (1973) A calorimetric determination of the standard enthalpies of formation of huntite, CaMg₃(CO₃)₄, and artinite, Mg₂(OH)₂CO₃·3H₂O. *United States Geological Survey Journal of Research*, 1(5), 535-541.
- 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.
- Hovis, G.L., Harlov, D., and Gottschalk, M. (2004a) ERRATUM. *American Mineralogist*, 89, 1838-1839.

- Hovis, G.L., Harlov, D., and Gottschalk, M. (2004b) Solution calorimetric determination of the enthalpies of formation of NH_4 -bearing minerals buddingtonite and tobelite. *American Mineralogist*, 89, 85-93.
- Kálmán, A., Stephens, J.S., and Cruickshank, D.W.J. (1970) The crystal structure of K_2SeO_4 . *Acta Crystallographica B*, 26, 1451-1454.
- Kamnev, A.A., Ezhov, B.B., Malandin, O.G., and 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.
- Kawassiadis, C.T., Manoussakis, G.E., and Tossidis, J.A. (1967) Study of selenous acid dissociation in mixed aqueous-alcoholic solvents. *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, 29, 401-405.
- 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., 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.
- Kelley, K.K., and Moore, G.E. (1943) The specific heats at low temperatures of anhydrous chlorides of calcium, iron, magnesium, and manganese. *Journal of the American Chemical Society*, 65(7), 1264-1267.
- King, E.G., Barany, R., Weller, W.W., and Pankratz, L.B. (1967) Thermodynamic properties of forsterite and serpentine. *United States Bureau of Mines Report of Investigations*, 6962, 19.
- 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, 13.
- 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(2), 131-137.
- Klemme, S., and Ahrens, M. (2005) Low-temperature heat capacity of magnesioferrite (MgFe_2O_4). *Physics and Chemistry of Minerals*, 32, 374-378.
- Koehler, M.F., Barany, R., and 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.
- Kolthoff, I.M. (1923) Die Dissoziationskonstante der Erdalkalihydroxyde. *Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas*, 42, 973-979.
- Kondrat'ev, S.N., and Strizhov, B.V. (1994) Heat capacity and thermodynamic functions of selenium trioxide within a range of 12-307 K. *Zhurnal Fizicheskoi Khimii*, 68(7), 1190-1192.
- 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.
- Lee, S.L., and Xu, H. (2018) The crystal structure and Gibbs free energy of formation of chukanovite as an oxidation product of carbon steel in human liver. *Chemical Geology*, 488, 180-188.
- Lee, T.R., and Wilkin, R.T. (2010) Iron hydroxy carbonate formation in zerovalent iron permeable reactive barriers: Characterization and evaluation of phase stability. *Journal of Contaminant Hydrology*, 116, 47-57.
- 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.
- Lemire, R.J., Palmer, D.A., Taylor, P., and Schlenz, H. (2020) Chemical thermodynamics of Iron. Part 2. OECD Nuclear Energy Agency, Boulogne-Billancourt, France.

- Levy, D.E., and Myers, R.J. (1990) Spectroscopic determination of the second dissociation constant of H₂Se and the activity coefficients and spectral shifts of its ions. *Journal of Physical Chemistry*, 94, 7842-7847.
- Liu, X., and Millero, F.J. (1999) The solubility of iron hydroxide in sodium chloride solutions. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 63, 3487-3497.
- Lopez-Echarri, A., Tello, M.J., and Gili, P. (1980) Specific heat behaviour of K₂SeO₄ in the 48-800K temperature range. A new phase transition. *Solid State Communications*, 36, 1021-1025.
- Lothenbach, B., Nied, D., L'Hôpital, E., Achiedo, G., and Dauzères, A. (2014) Calcium and magnesium silicate hydrates. 2nd International Symposium on Cement Based Materials for Nuclear Waste (NUWCEM), p. 12, Avignon, France.
- Macphee, D.E., and Barnett, S.J. (2004) Solution properties of solids in the ettringite-thaumasite solid solution series. *Cement and Concrete Research*, 34(9), 1591-1598.
- 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.
- Mal'tsev, A.K., Pashinkin, A.S., Bakeeva, S.S., and Zhdanov, V.M. (1968) Low-temperature heat capacity and thermodynamic functions of selenium dioxide. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 42, 1381-1382.
- Marshall, W.L., and Warakomski, J.M. (1980) Amorphous silica solubilities—II. Effect of aqueous salt solutions at 25°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 44(7), 915-924.
- Matschei, T., and Glasser, F.P. (2015) Thermal stability of thaumasite. *Materials and Structures*, 48(7), 2277-2289.
- 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.
- McCullough, J. (1937) The crystal structure of selenium dioxide. *Journal of the American Chemical Society*, 59, 789-794.
- McGee, K.A., and Hostetler, P.B. (1977) Activity-product constants of brucite from 10° to 90°C. *United States Geological Survey Journal of Research*, 5(2), 227-233.
- Mijhoff, F.C. (1965) The crystal structure of tetragonal selenium trioxide. *Acta Crystallographica*, 18, 795-798.
- Mills, K.C. (1974) *Thermodynamic data for inorganic sulphides, selenides and tellurides*. 845 p. Butterworths, London, UK.
- Mittermayr, F., Baldermann, A., Kurta, C., Rinder, T., Klammer, D., Leis, A., Tritthart, J., and Dietzel, M. (2013) Evaporation - A key mechanism for the thaumasite form of sulfate attack. *Cement and Concrete Research*, 49, 55-64.
- Monnin, C. (1999) A thermodynamic model for the solubility of barite and celestite in electrolyte solutions and seawater to 200°C and to 1 kbar. *Chemical Geology*, 153, 187-209.
- Moore, G.E. (1943) Heat contents at high temperatures of the anhydrous chlorides of calcium, iron, magnesium and manganese. *Journal of the American Chemical Society*, 65(9), 1700-1703.
- Moriya, H., and Sekine, T. (1974) A solvent extraction study of zinc(II) complexes with several divalent anions of carboxylic and inorganic acids. *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, 47, 747-748.
- Möschner, G., Lothenbach, B., Rose, J., Ulrich, A., Figi, R., and Kretzschmar, R. (2008) Solubility of Fe-ettringite (Ca₆[Fe(OH)₆]₂(SO₄)₃·26H₂O). *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 72(1), 1-18.
- Myers, R.J. (1986) The new low value for the second dissociation constant for H₂S. *Journal of Chemical Education*, 63(8), 687-690.

- Nair, V.S.K. (1964) Dissociation of the biselenate ion. *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, 26, 1911-1917.
- Näsänen, R., and Tamminen, V. (1949) The equilibria of cupric hydroxysalts in mixed aqueous solutions of cupric and alkali salts at 25°. *Journal of the American Chemical Society*, 71(6), 1994-1998.
- Naumov, G.B., Ryzhenko, B.N., and Khodakovskiy, I.L. (1974) Handbook of thermodynamic data. United States National Technical Information Service (PB-226 722/AS), p. 328. United States Geological Survey, Springfield, VA, U.S.A.
- Nemer, M.B., Xiong, Y., Ismail, A.E., and Jang, J.-H. (2011) Solubility of $\text{Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$ (pure-iron end-member of hibbingite) in NaCl and Na_2SO_4 brines. *Chemical Geology*, 280, 26-32.
- Nied, D., Enemark-Rasmussen, K., L'Hôpital, E., Skibsted, J., and Lothenbach, B. (2016) Properties of magnesium silicate hydrates (M-S-H). *Cement and Concrete Research*, 79, 323-332.
- Nishimura, T., and Dong, J. (2009) Corrosion behavior of carbon steel in overpack in groundwater containing bicarbonate ions. *Journal of Power and Energy Systems*, 3(1), 23-30.
- 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(9), 4513-4516.
- Oda, C., and Amaya, T. (1998) Effect of ligands on the solubility of tin, p. 14. Japan Nuclear Cycle Development Institute, Tokai, Ibaraki, Japan.
- 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.
- Ojkova, T., Christov, C., and Mihov, D. (1999) Thermodynamic study on aqueous solutions of $(\text{NH}_4)_2\text{SeO}_4$ and K_2SeO_4 at 298.15 K. *Monatshefte für Chemie*, 130(9), 1061-1065.
- Okamoto, H. (1991) The Fe-Se (Iron-Selenium) system. *Journal of Phase Equilibria*, 12(3), 383-389.
- Olin, A., Nöling, B., Osadchii, E.G., Öhman, L.-O., and Rosén, E. (2005) Chemical thermodynamics of Selenium. 851 p. OECD Nuclear Energy Agency, Issy-les-Moulineaux, France.
- Olofsson, G., Oshodi, A.A., Qvarnstrom, E., and 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.
- Palmer, D.A., and Bell, J.L.S. (1994) Aluminum speciation and equilibria in aqueous solution: IV. A potentiometric study of aluminum acetate complexation in acidic NaCl brines to 150°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 58(2), 651-659.
- Palmer, D.A., and Drummond, S.E. (1988) Potentiometric determination of the molal formation constants of ferrous acetate complexes in aqueous solutions to high temperatures. *Journal of Physical Chemistry*, 92, 6795-6800.
- 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.
- 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.

- Pankratz, L.B., and King, E.G. (1970) High-temperature enthalpies and entropies of chalcopyrite and bornite. United States Bureau of Mines Report of Investigations, 7435, 10.
- Parise, J.B., and Hyde, B.G. (1986) The structure of atacamite and its relationship to spinel. *Acta Crystallographica C*, 42, 1277-1280.
- Parker, D.R., Tice, K.R., and Thomason, D.N. (1997) Effects of ion pairing with calcium and magnesium on selenate availability to higher plants. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 16, 565-571.
- Pashinkin, A.S., Aron, B.M., Bakeeva, S.S., Buketov, E.A., Karyakin, N.V., Krylova, G.P., Rustembekov, K.G., and Ugorets, M.Z. (1971) Measurement and calculation of certain thermodynamic and physicochemical constants of selenium dioxide. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 45, 909-910.
- Paul, G.L., and Pryor, A.W. (1972) The study of sodium nitrate by neutron diffraction. *Acta Crystallographica B*, 28, 2700-272.
- Pelabon, M.H. (1898) Ueber die Dissociation des Selenwasserstoffs. *Zeitschrift für Physikalische Chemie (München)*, 26, 659-689 [in German].
- Perera, W.N., and Hefter, G. (2003) Mononuclear cyano- and hydroxo- complexes of iron(III). *Inorganic Chemistry*, 42, 5917-5923.
- Pilar, R., Svoboda, L., Honcova, P., and Oravova, L. (2012) Study of magnesium chloride hexahydrate as heat storage material. *Thermochimica Acta*, 546, 81-86.
- Piryutko, M.M. (1959) The solubility of silicic acid in salt solutions. *Russian Chemical Bulletin*, 8(3), 355-360.
- 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.
- Preuner, G., and Brockmüller, I. (1913) Gasdruckmessungen mit Spiralmanometer aus Quarzglas. Isothermen von Selen, Schwefel, Arsen, Phosfor; Dissociation des Kupfersulfids und des Selenwasserstoffs. *Zeitschrift für Physikalische Chemie (Leipzig)*, 81, 129-170 [in German].
- Rau, H. (1967) Das Bildungsgleichgewicht des Selenwasserstoffs. *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, 71(7), 716-719 [in German].
- Rawling, J.R., and Toguri, J.M. (1966) The thermodynamic properties of hydrogen selenide. *Canadian Journal of Chemistry*, 44, 451-456.
- Reardon, E.J., and Armstrong, D.K. (1987) Celestite (SrSO₄(s)) solubility in water, seawater and NaCl solution. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 51, 63-72.
- Rémazeilles, C., and Refait, P. (2008) Formation, fast oxidation and thermodynamic data of Fe(II) hydroxychlorides. *Corrosion Science*, 50, 856-864.
- Richardson, C.K., and Holland, H.D. (1979) The solubility of fluoride in hydrothermal solutions, an experimental study. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 43(8), 1313-1325.
- Rimstidt, J.D. (1997) Quartz solubility at low temperatures. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 61(13), 2553-2558.
- Robie, R.A., and Hemingway, B.S. (1972) The heat capacities at low-temperature and entropies at 298.15 K of nesquehonite, MgCO₃·3H₂O, and hydromagnesite. *American Mineralogist*, 57, 1768-1781.
- Robie, R.A., and Hemingway, B.S. (1973) The enthalpies of formation of nequehonite, MgCO₃·3H₂O, and hydromagnesite, 5MgO·4CO₂·5H₂O. *United States Geological Survey Journal of Research*, 1(5), 543-547.
- Robie, R.A., Hemingway, B.S., and 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.
- 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.

- Sabbah, R., and Carpeni, G. (1966) Etude électrométrique des systèmes $\text{H}_2\text{SeO}_3\text{Na}_2\text{SeO}_3$ (ou K_2SeO_3) en milieux Cl^- (Na^+ ou K^+) = 3 M à 25°C. *Journal de Chimie Physique*, 63, 1549-1554 [in French].
- Saini-Eidukat, B., Kucha, H., and Keppler, H. (1994) Hibbingite $\gamma\text{-Fe}_2(\text{OH})_3\text{Cl}$, a new mineral from the Duluth Complex, Minnesota, with implications for the oxidation of Fe-bearing compounds and the transport of metals. *American Mineralogist*, 79, 555-561.
- Santschi, P.H., and 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(2)*, 181-184.
- Schott, H.F., Swift, E.H., and Yost, D.M. (1928) The reduction potential of selenium and the free energy of selenous acid. *Journal of the American Chemical Society*, 50(3), 721-727.
- Séby, F., Potin-Gautier, M., Giffaut, E., Borge, G., and Donard, O.F.X. (2001) A critical review of thermodynamic data for selenium species at 25°C. *Chemical Geology*, 171, 173-194.
- Sekine, T., Iwaki, H., Sakairi, M., and Inarida, M. (1968) Studies on the liquid-liquid partition systems: VI. Solvent extraction study of the dissociation of sulfuric, selenous and tellurous acids in acid perchlorate media. *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, 41, 1-7.
- Selivanova, N.M., and Pakhorukov, N.I. (1961) On the heats of solution of selenous acid. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Khimiya i Khimicheskaya Tekhnologiya*, 4, 355-358.
- Sergeeva, E.I., Suleimenov, O.M., and Evstigneev, A.V. (1999) Solubility of hematite, Fe_2O_3 (cr, α) at 200°C and the standard entropy of Fe^{3+} ion in aqueous solution. *Geochemistry International*, 37, 1097-1107.
- Sherrill, M.S., and Izard, E.F. (1928) Teg reduction potential of selenous acid and the free energy of aqueous selenic acid. *Journal of the American Chemical Society*, 50, 1665-1675.
- Shin, P., and 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.
- 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 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.
- Shock, E.L., Helgeson, H.C., and 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.
- Shock, E.L., and Koretsky, C.M. (1993) Metal-organic complexes in geochemical processes: Calculation of standard partial molal thermodynamic properties of aqueous acetate complexes at high pressures and temperatures. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 57, 4899-4922.
- 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.
- Siddhanta, S.K., and Banerjee, S.N. (1958) Some aliphatic monocarboxylate complexes of bivalent metals in aqueous solution. Part VII. Manganese acetate complexes. *Journal of the Indian Chemical Society*, 35, 419-423.
- Stefansson, A. (2007) Iron (III) hydrolysis and solubility at 25°C. *Environmental Science and Technology*, 41(17), 6117-6123.
- Stoessell, R.K. (1988) 25°C and 1 atm dissolution experiments of sepiolite and kerolite. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 52, 365-374.
- Stull, D.R., and Prophet, H. (1971) *JANAF Thermochemical Tables*, p. 1141. National Bureau of Standards, Washington DC, USA.
- Svendsen, S.R. (1972) Decomposition pressures and standard enthalpy of formation for the iron selenides FeSe, Fe₇Se₈, Fe₃Se₄ and FeSe₂. *Acta Chemica Scandinavica*, 26, 3757-3774.
- Sverjensky, D.A., Hemley, J.J., and D'Angelo, W.M. (1991) Thermodynamic assessment of hydrothermal alkali feldspar-mica-aluminosilicate equilibria. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 55(4), 989-1004.
- 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.
- 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.
- Travers, A., and Nouvel. (1929) Sur la solubilité de Mg(OH)₂ aux températures élevées. *Comptes Rendus Hebdomadaires des Seances de l'Academie*, 188, 499-501.
- Trzil, J. (1958) Thermodynamic constants of selenium oxide. *Sbornik Vedeckych Praci Vysoke Skoly Banske v Ostrave*, 4, 277-281.
- Turner, D.R., Whitfield, M., and 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(6), 855-881.
- Vanderzee, C.E., and King, D.L. (1972) The enthalpies of solution and formation of ammonia. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 4, 675-683.
- 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.
- Walther, J.V. (1986) Experimental determination of portlandite solubility and brucite solubilities in supercritical H₂O. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 50, 733-739.
- Waterfield, C.G., Linford, R.G., Goalby, B.B., Bates, T.R., Elyard, C.A., and Staveley, L.A.K. (1968) Thermodynamic investigation of disorder in the hydrates of sodium carbonate. *Transactions of the Faraday Society*, 64, 868-874.
- Weller, W.W., and Kelley, K.K. (1963) Low temperature heat capacities and entropies at 298.15°K of akermanite, cordierite, gehlenite, and merwinite. United States Bureau of Mines Report of Investigations, 6343, 7.
- Whittemore, D.O., and Langmuir, D. (1972) Standard electrode potential of Fe³⁺ + e⁻ = Fe²⁺ from 5-35°C. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 17(3), 288-290.
- Wolery, T.J., and Jove-Colon, C.F. (2007) Qualification of thermodynamic data for geochemical modeling of mineral-water interactions in dilute systems, p. 392. Sandia National Laboratories, Las Vegas, NV, USA.

- Wood, B.J. (1981) Crystal field electronic effects on the thermodynamic properties of Fe²⁺ minerals. In R.C. Newton, A. Navrotsky, and B.J. Wood, Eds. *Thermodynamics of Minerals and Melts*, 1, p. 63-84. Springer-Verlag, Berlin, Germany.
- Wu, C.-H., Birky, M.M., and Hepler, L.G. (1963) Thermochemistry of some bromine and iodine species in aqueous solution. *Journal of Physical Chemistry*, 67, 1202-1205.
- Xiong, Y. (2008) Thermodynamic properties of brucite determined by solubility studies and their significance to nuclear waste isolation. *Aquatic Geochemistry*, 14, 223-228.
- 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.
- Yushin, A.S., and Devyatikh, G.G. (1969) Equilibrium constant for heat of formation of hydrogen selenide from the elements. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 43, 550-552.
- 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.
- 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.

3. 更新したデータベース (PHREEQC フォーマット)

```

#-----#
# JAEA #
#-----#
# JAPAN ATOMIC ENERGY AGENCY #
# DATABASE Version : PHREEQC20.dat (v1.2) (11.Mar.2021) for PHREEQC #
# (v2.03 onwards) [1999PAR/APP] [2013PAR/APP]. #
#-----#
# Data blocks for all aqueous species/complexes, minerals and gases #
# calculated from SUPCRT20v12.dat. #
# REFERENCES and RELEASE_NOTES provided at the end of file. #
#-----#
# Please send comments to: migrationdb@jaea.go.jp #
#-----#
# The development of this thermodynamic database was funded by the #
# Ministry of Economy, Trade and Industry of Japan through the #
# project "Advanced technology development for geological disposal #
# of TRU waste" in JFY2020. #
#-----#

#-----#
# LLNL_AQUEOUS_MODEL_PARAMETERS #
#-----#
# temperatures # (deg C) #
# 0.0100 25.0000 60.0000 100.0000 #
# 150.0000 200.0000 250.0000 300.0000 #
# Psat pressures (bars) [1992J0H/OEL] #
# 1.0132 1.0132 1.0132 1.0132 #
# 4.7572 15.5365 39.7365 85.8378 #
# debye huckel A parameter (kg0.5/mol0.5) [1974HEL/KIR_a] | Eq. (2) #
# -dh_a #
# 0.4914 0.5092 0.5450 0.5998 #
# 0.6899 0.8099 0.9789 1.2559 #
# debye huckel B parameter * 10-8 (kg0.5/[mol0.5cm]) [1974HEL/KIR_a] | Eq. (3) #
# -dh_b #
# 0.3247 0.3283 0.3343 0.3422 #
# 0.3533 0.3655 0.3792 0.3966 #
# B-dot parameter [1969HEL] #
# -bdot #
# 0.0374 0.0410 0.0438 0.0460 #
# 0.0470 0.0470 0.0340 0.0000 #
# coefficients for the Drummond polynomial [1981DRU] #
# -co2_coefs #
# -1.0312 0.0012806 #
# 255.9 0.4445 #
# -0.0016060 #
#-----#

# NAMED_EXPRESSIONS #
#-----#
# Formation of O2(aq) from H2O #
# 2H2O - 4 H+ - 4 e- = 1 O2 #
# Log_K_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 #
# -Range: 0-300 #
# data source: [1982WAG/EVA] [1984OLO/OSH] [1988SHO/HEL] [1989SHO/HEL] #
# delFH0 = 3.954 +/- 0.55 kcal/mol #
# delFH0 = -2.900 +/- 0.10 kcal/mol #
# S0PrTr = 26.040 +/- 1.87 cal/K/mol #
# CpPrTr = 55.96 +/- 0.5 cal/K/mol #
# mole vol. = 30.501 cm3/mol #
# mole wt. = 31.9988 g/mol #
# date: 26.Jun.1987 #
#-----#

# SOLUTION_MASTER_SPECIES # (A-Z) #
#-----#
# element species alk gfw_formula element_gfw [1993MIL/CVI] #
# Acetate Acetate- 1.0 C2H3O2 59.0445 #
# Al Al+3 0.0 Al 26.9815 #
# Alkalinity HC03- 1.0 HC03 61.0160 #
# B B(OH)3 0.0 B 10.8110 #
# Ba Ba+2 0.0 Ba 137.3270 #
# Br Br- 0.0 Br 79.9040 #
# Br(-0.33) Br3- 0.0 Br3 #
# Br(-1) Br- 0.0 Br #
# Br(0) Br2 0.0 Br2 #
# Br(+1) Br0- 0.0 Br0 #
# Br(+5) Br03- 0.0 Br03 #
# Br(+7) Br04- 0.0 Br04 #
# C HC03- 1.0 C 12.0110 #
# C(-4) CH4 0.0 CH4 #
# C(+4) HC03- 1.0 HC03 #
# Ca Ca+2 0.0 Ca 40.0780 #
# Cl Cl- 0.0 Cl 35.4527 #
# Cl(-1) Cl- 0.0 Cl #
# Cl(+1) Cl0- 0.0 Cl0 #
# Cl(+3) Cl02- 0.0 Cl02 #
# Cl(+5) Cl03- 0.0 Cl03 #
# Cl(+7) Cl04- 0.0 Cl04 #
# Cs Cs+ 0.0 Cs 132.9055 #
# Cu Cu+2 0.0 Cu 63.5460 #
# Cu(+1) Cu+ 0.0 Cu #
# Cu(+2) Cu+2 0.0 Cu #
# Cyanide Cyanide- 1.0 CN 26.0177 #
# E e- 0.0 0.0 #
# F F- 0.0 F 18.9984 #
# Fe Fe+2 0.0 Fe 55.8470 #
# Fe(+2) Fe+2 0.0 Fe #
# Fe(+3) Fe+3 0.0 Fe #
# Formate Formate- 1.0 HC02 45.0177 #

```

H	H+	-1.0	H	1.0079
H(0)	H2	0.0	H2	
H(+1)	H+	-1.0	H	
I	I-	0.0	I	126.9045
I(-1)	I-	0.0	I	
I(-0.33)	I3-	0.0	I3	
I(+1)	I0-	0.0	I0	
I(+5)	I03-	0.0	I03	
I(+7)	I04-	0.0	I04	
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)	Mn04-2	0.0	Mn04	
Mn(+7)	Mn04-1	0.0	Mn04	
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	S04-2	0.0	S	32.0660
S(-2)	HS-	1.0	HS	
S(+2)	S203-2	0.0	S203	
S(+3)	S204-2	0.0	S204	
S(+4)	S03-2	0.0	S03	
S(+5)	S206-2	0.0	S206	
S(+6)	S04-2	0.0	S04	
S(+7)	S208-2	0.0	S208	
S(+8)	HS05-	0.0	HS05	
Se	Se03-2	0.0	Se	78.9600
Se(-2)	HSe-	0.0	HSe	
Se(+4)	Se03-2	0.0	Se03-2	
Se(+6)	Se04-2	0.0	Se04-2	
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 [1889SET] #
#         (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, 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/K/mol) at t = 25 deg C, P = 1 bar # +/- 2 sigma uncertainty. #
#         NOTE1: delfGO, delfHO or SOPrTr calculated from Gibbs-Duhem relation: #
#         delfGO = delfHO - Tr*(SOPrTr - SOPrTr_elements) #
#         are marked with *[GHS] #
# Line 13: Isobaric heat capacity, CpPrTr (cal/K/mol) 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. #
# NOTE2: Unknown values in lines 2-4 and 10-14 are identified with 999999. #
# Line 15: Molecular weight (g/mol). #
# Line 16: Date that the thermodynamic data (log_k, delfGO, 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1974HEL/KIR_b][1980UEM/FRA][1983LEV/KAM][1983PIT][1984HAA/GAL][1991JOH/NOR]
# delfGO = -56.688 +/- 0.024 kcal/mol
# delfHO = -68.317 +/- 0.025 kcal/mol
# SOPrTr = 16.712 +/- 0.020 cal/K/mol
# CpPrTr = 18.012 +/- 0.020 cal/K/mol
# mole vol. = 18.068 cm3/mol
# mole wt. = 18.0153 g/mol
# date: 13. Nov. 1991

1 Acetate- = 1 Acetate-
  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 # Invokes use of B-dot activity correction for charged aqueous species
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1995SHO]
# delfG0 = -88.27 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -116.19 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 20.6 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 6.312 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 40.501 cm3/mol
# mole wt. = 59.0445 g/mol
# date: 28.Feb.1992

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
lInl_gamma 9
#
# -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
# delfH0 = -128.681 +/- 0.36 kcal/mol
# SOPrTr = -80.800 +/- 1.60 cal/K/mol
# CpPrTr = -32.130 +/- 999999 cal/K/mol
# 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_lInl_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/K/mol
# CpPrTr = 25.666 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lInl_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/K/mol
# CpPrTr = -12.300 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lInl_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 *[GHS]
# delfH0 = -29.040 +/- 0.036 kcal/mol
# SOPrTr = 19.800 +/- 0.05 cal/K/mol
# CpPrTr = -30.408 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lInl_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 *[GHS]
# delfH0 = -129.800 +/- 0.19 kcal/mol
# SOPrTr = -13.50 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = -7.518 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lInl_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 *[GHS]
# delfH0 = -39.933 +/- 0.021 kcal/mol
# SOPrTr = 13.560 +/- 0.04 cal/K/mol
# CpPrTr = -29.425 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_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 *[GHS]
# delfH0 = -61.670 +/- 0.03 kcal/mol
# SOPrTr = 31.750 +/- 0.01 cal/K/mol
# CpPrTr = -6.283 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_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 +/- 0.21 kcal/mol *[GHS]
# delfH0 = 15.700 +/- 0.19 kcal/mol
# SOPrTr = -23.20 +/- 0.3 cal/K/mol
# CpPrTr = -2.227 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma 3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfG0 = 41.2 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = 36.0 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 22.5 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -17.700 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# No activity correction defined
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: Not used
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1999ART/SAS]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol (by convention)
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol (by convention)
# SOPrTr = 0 +/- 0 cal/K/mol (by convention)
# CpPrTr = 0 +/- 0 cal/K/mol (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
lnl_gamma 3.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -67.340 +/- 0.16 kcal/mol *[GHS]
# delfH0 = -80.150 +/- 0.16 kcal/mol
# SOPrTr = -3.150 +/- 0.13 cal/K/mol
# CpPrTr = -27.220 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma 6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], potentiometry & solubility
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1968LAR/CER][1989SHO/HEL][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -21.87 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -22.05 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = -25.30 +/- 1.4 cal/K/mol
# CpPrTr = -7.723 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
  lnln_gamma 3.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1995SHO]
# delfG0 = -83.86 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -101.73 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 21.7 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = -20.177 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
  lnln_gamma 9
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1988SHO/HEL]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol (by convention)
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol (by convention)
# SOPrTr = 0 +/- 0 cal/K/mol (by convention)
# CpPrTr = 0 +/- 0 cal/K/mol (by convention)
# mole vol. = 0 cm3/mol (by convention)
# mole wt. = 1.0079 g/mol
# date: 17.Jul.1989

1 HC03- = 1 HC03-
  log_k      0 # +/- 0 (by convention)
  delta_h    0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
  analytical_expression 0 0 0 0 0 0
  lnln_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], potentiometry & solubility
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978BER/VAN][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -140.282 +/- 0.03 kcal/mol
# delfH0 = -164.898 +/- 0.05 kcal/mol
# SOPrTr = 23.530 +/- 0.12 cal/K/mol
# CpPrTr = -8.460 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 24.600 cm3/mol
# mole wt. = 61.0168 g/mol
# date: 1.Jul.1987

1 HP04-2 = 1 HP04-2
  log_k      0 # +/- 0 (by convention)
  delta_h    0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
  analytical_expression 0 0 0 0 0 0
  lnln_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
# SOPrTr = -8.0 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -58.300 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
  lnln_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 *[GHS]
# delfH0 = -13.600 +/- 0.20 kcal/mol
# SOPrTr = 25.500 +/- 0.05 cal/K/mol
# CpPrTr = -28.233 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
  lnln_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 *[GHS]
# delfH0 = -60.270 +/- 0.02 kcal/mol
# SOPrTr = 24.150 +/- 0.06 cal/K/mol
# CpPrTr = 1.985 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
  lnln_gamma 6.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C

```

```

# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1976HEL/KIR][1988SHO/HEL][1989COX/WAG]
# delfGO = -70.009 +/- 0.03 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -66.556 +/- 0.02 kcal/mol
# SOPPr = 2.925 +/- 0.04 cal/K/mol
# CpPrTr = 14.200 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
llnl_gamma 8 0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1979SHI/CR1][1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfGO = -108.51 +/- 0.6 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -111.367 +/- 0.26 kcal/mol
# SOPPr = -33.0 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -5.335 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = -21.543 cm3/mol
# mole wt. = 24.305 g/mol
# date: 4. Sep. 2020

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
llnl_gamma 6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry & potentiometry
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1969GED/HEP][1997SHO/SAS]
# delfGO = -55.10 +/- 0.7 kcal/mol
# delfHO = -52.90 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPPr = -16.2 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -4.100 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
llnl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1995POK/HEL]
# delfGO = -62.591 +/- 0.03 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -57.432 +/- 0.02 kcal/mol
# SOPPr = 13.960 +/- 0.05 cal/K/mol
# CpPrTr = 9.077 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
llnl_gamma 2 5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfGO = -18.990 +/- 0.08 kcal/mol
# delfHO = -31.850 +/- 0.06 kcal/mol
# SOPPr = 26.57 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 16.024 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
llnl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfGO = -10.9 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -12.9 +/- 2 kcal/mol
# SOPPr = -30.8 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -11.700 +/- 999999 cal/K/mol
# 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.llnl_gamma # 3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1984OLO/OSH][1988SHO/HEL][1989SHO/HEL]
# delfGO = 3.954 +/- 0.55 kcal/mol
# delfHO = -2.900 +/- 0.10 kcal/mol
# SOPPr = 26.040 +/- 1.87 cal/K/mol
# CpPrTr = 56.000 +/- 0.5 cal/K/mol

```

```

# mole vol. = 30.380 cm3/mol
# mole wt. = 31.9888 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 0
llnl_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
# SOPrTr = 4.23 +/- 0.3 cal/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = -12.700 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 0
llnl_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 *[GHS]
# delfH0 = -60.020 +/- 0.03 kcal/mol
# SOPrTr = 28.800 +/- 0.05 cal/K/mol
# CpPrTr = -3.000 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 14.261 cm3/mol
# mole wt. = 85.4678 g/mol
# date: 29. Jun. 1987

1 SeO3-2 = 1 SeO3-2
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0 0
llnl_gamma 4
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for H2SeO3 - 2 H+ = SeO3-2
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1928SCH/SWI][1972ARN/BAR][1997SHO/SAS][1997SHO/SAS_a][2007OLI/NOL]
# delfG0 = -86.434 +/- 0.28 kcal/mol
# delfH0 = -121.27 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = -2.00 +/- 1.7 cal/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = -61.400 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 1.260 cm3/mol
# mole wt. = 126.9582 g/mol
# date: 26. Mar. 2020

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 0
co2_llnl_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][1962S1E][1964WE1/FYF]
# [1965AND/BUR][1971CRE/AND][1971MAC/GEE][1980HEM/MON][1983WAL/ORV][1993X1E/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
# SOPrTr = 9.97 + 2 H2O = 43.40 +/- 3.4 cal/K/mol
# CpPrTr = -5.110 + 2 H2O = 30.914 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 0
llnl_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 *[GHS]
# delfH0 = -2.100 +/- 0.20 kcal/mol
# SOPrTr = -4.0 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = -15.500 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = -15.600 cm3/mol
# mole wt. = 118.7100 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 SO4-2 = 1 SO4-2
log_k 0 # +/- 0 (by convention)
delta_h 0 kcal/mol # +/- 0 (by convention)
analytical_expression 0 0 0 0 0 0
llnl_gamma 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 *[GHS]
# delfH0 = -217.400 +/- 0.10 kcal/mol
# SOPrTr = 4.500 +/- 0.12 cal/K/mol
# CpPrTr = -63.920 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
  |ln|_gamma      5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1984BUS/PLU][1988SHO/HEL]
# delfGO = -134.760 +/- 0.19 kcal/mol
# delfHO = -131.670 +/- 0.12 kcal/mol
# SPrTr = -7.530 +/- 0.48 cal/K/mol
# CpPrTr = -10.050 +/- 999999 cal/K/mol
# 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_|ln|_gamma # 3 (assumed = Si(OH)4)
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for Rutile = TiO2(aq)
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1967SHU/VIN][1974VAS/VOR][1993ZIE/JON][2009SCH/VOG]
# delfGO = -200.66 + 2 H2O = -314.04 +/- 1.7 kcal/mol
# delfHO = -226.8 + 2 H2O = -363.4 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# SPrTr = -31.2 + 2 H2O = 2.2 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 30 + 2 H2O = 66 +/- 20 cal/K/mol
# 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
  |ln|_gamma      6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978COX][1997SHO/SAS]
# delfGO = -35.200 +/- 0.07 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -36.660 +/- 0.05 kcal/mol
# SPrTr = -26.20 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = -5.599 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = -24.300 cm3/mol
# mole wt. = 65.39 g/mol
# date: 15. Sep. 1997

#-----
# 2. Redox couples
#-----

+ 2 Br- + 0.5 O2 + 2 H+ - 1 H2O = + 1 Br2
# Br(0)
  log_k      5.5347 # +/- 0.3
  delta_h    -8.99 kcal/mol # +/- 0.2
  analytical_expression  1.381413E+3  2.169283E-1  -7.480167E+4  -5.018500E+2  4.632774E+6
  co2_|ln|_gamma # 3.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1983WU/BIR][1997SVE/SHO_a]
# delfGO = 1.38 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -0.20 +/- 0.2 kcal/mol
# SPrTr = 31.1 +/- 1 cal/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = 0.834 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 69.002 cm3/mol
# mole wt. = 159.8080 g/mol
# date: 7. Apr. 2020

3 Br- + 2 H+ + 0.5 O2 - 1 H2O = 1 Br3-
# Br(-0.33)
  log_k      7.0762 # +/- 0.3
  delta_h    -10.92 kcal/mol # +/- 0.2
  analytical_expression  1.374292E+3  2.183779E-1  -7.527198E+4  -4.988422E+2  4.843153E+6
  |ln|_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 = -25.59 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -31.17 +/- 0.2 kcal/mol
# SPrTr = 51.5 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 5.600 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 51.501 cm3/mol
# mole wt. = 239.712 g/mol
# date: 12. Jul. 1987

+ 1 Br- + 0.5 O2 = + 1 Br0-
# Br(+1)
  log_k      -10.9145 # +/- 1
  delta_h    8.0 kcal/mol # +/- 2
  analytical_expression  -1.542215E+2  -2.276330E-2  7.690401E+3  5.332452E+1  -6.798354E+5
  |ln|_gamma      4.0
# -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 *[GHS]
# delfHO = -22.5 +/- 2 kcal/mol
# SPrTr = 9.7 +/- 20.0 cal/K/mol
# CpPrTr = -28.000 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 0.400 cm3/mol
# mole wt. = 95.9034 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 1 Br- + 1.5 O2 = + 1 BrO3-
# Br(+5)

```

```

log_k      -17.1421 # +/- 0.6
delta_h    17.36 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression  -2.829181E+2   -4.593627E-2   1.466253E+4   9.960906E+1   -1.438487E+6
  ln_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 *[GHS]
# delFH0 = -16.03 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 38.65 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = -20.600 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 35.401 cm3/mol
# mole wt. = 127.9022 g/mol
# date: 12. Jul. 1987

+ 1 Br- + 2 O2 = + 1 BrO4-
# Br (+7)
log_k      -33.1018 # +/- 2
delta_h    37.9 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression  -3.388630E+2   -5.585506E-2   1.357561E+4   1.195901E+2   -1.692133E+6
  ln_gamma 4.0
# -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 *[GHS]
# delFH0 = 3.1 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 47.6 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -5.200 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# C (-4)
log_k      -144.1412 # +/- 999999
delta_h    206.405 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.354476E+3   2.130403E-1   -1.258458E+5   -4.856742E+2   5.486230E+6
  co2_ln_gamma 3.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1984OLO/OSH][1990SHO/HEL]
# delFGO = -8.235 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -21.010 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 20.990 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 66.30 +/- 1.4 cal/K/mol
# mole vol. = 37.301 cm3/mol
# mole wt. = 16.0426 g/mol
# date: 31. Aug. 1987

+ 1 Cl- + 0.5 O2 = + 1 ClO-
# Cl (+1)
log_k      -15.1014 # +/- 1
delta_h    15.7 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression  -1.551992E+2   -2.222684E-2   6.341518E+3   5.392700E+1   -7.096977E+5
  ln_gamma 4.0
# -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
# delFH0 = -25.7 +/- 6 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 10 +/- 20 cal/K/mol
# CpPrTr = -27.800 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 0.700 cm3/mol
# mole wt. = 51.4521 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 1 Cl- + 1 O2 = + 1 ClO2-
# Cl (+3)
log_k      -23.1080 # +/- 2
delta_h    26.9 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression  -2.285793E+2   -3.490576E-2   8.677592E+3   8.040260E+1   -1.082458E+6
  ln_gamma 4.0
# -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
# delFH0 = -15.9 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 24.2 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -19.300 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 22.100 cm3/mol
# mole wt. = 67.4515 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 1 Cl- + 1.5 O2 = + 1 ClO3-
# Cl (+5)
log_k      -17.2608 # +/- 0.6
delta_h    19.42 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression  -2.759009E+2   -4.383560E-2   1.374186E+4   9.746373E+1   -1.382113E+6
  ln_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
# delFH0 = -24.86 +/- 0.6 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 38.8 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -12.300 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 36.901 cm3/mol
# mole wt. = 83.4509 g/mol
# date: 12. Jul. 1987

+ 1 Cl- + 2 O2 = + 1 ClO4-
# Cl (+7)
log_k      -15.7091 # +/- 0.8

```

```

delta_h 14.82 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression -3.996944E+2 -6.228604E-2 2.252156E+4 1.410043E+2 -1.945617E+6
l|n|_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 +/- 0.6 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 43.5 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -5.836 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
l|n|_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/K/mol
# CpPrTr = 13.700 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 8.4855 # +/- 0.24
delta_h -23.24 kcal/mol # +/- 1.6
analytical_expression -2.318331E+2 -3.773994E-2 1.720491E+4 8.167181E+1 -7.312645E+5
l|n|_gamma 9.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1972WHI/LAN][1989SHO/HEL][1997SHO/SAS]
# delFGO = -4.114 +/- 0.21 kcal/mol
# delFHO = -11.86 +/- 1.6 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -66.30 +/- 5.2 cal/K/mol
# CpPrTr = -18.600 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = -37.001 cm3/mol
# mole wt. = 55.8470 g/mol
# date: 4. Sep. 2020

+ 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_l|n|_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/K/mol
# CpPrTr = 39.900 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
l|n|_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/K/mol
# CpPrTr = -22.597 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 20.650 cm3/mol
# mole wt. = 33.0739 g/mol
# date: 1. Jul. 1987

+ 1 SeO3-2 + 1 H+ - 1.5 O2 = + 1 HSe-
log_k -75.4007 # +/- 0.7
delta_h 120.3 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression 1.106161E+3 1.769002E-1 -9.040051E+4 -3.956791E+2 4.264849E+6
l|n|_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1887FAB][1982WAG/EVA][1997SHO/SAS_a][2005OLI/NOL]
# delFGO = 10.50 +/- 0.5 kcal/mol
# delFHO = 3.4 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 17.5 +/- 4 cal/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = -20.763 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 18.598 cm3/mol
# mole wt. = 79.9679 g/mol
# date: 6. Apr. 2020

+ 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
l|n|_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]

```

```

# delfG0 = -152.370 +/- 0.32 kcal/mol
# delfH0 = -185.380 +/- 0.16 kcal/mol
# SOPPrTr = 50.70 +/- 0.9 cal/K/mol
# CpPrTr = 36.900 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
|ln|_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 = -12.3 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -12.3 +/- 2 kcal/mol
# SOPPrTr = 57.2 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 13.100 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 57.201 cm3/mol
# mole wt. = 380.7134 g/mol
# date: 12. Jul. 1987

+ 0.5 O2 + 1 I- = + 1 IO-
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
|ln|_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
# SOPPrTr = -1.4 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -34.600 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = -12.500 cm3/mol
# mole wt. = 142.9039 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 1 I- + 1.5 O2 = + 1 IO3-
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
|ln|_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
# SOPPrTr = 28.3 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -16.200 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 25.900 cm3/mol
# mole wt. = 174.9027 g/mol
# date: 12. Jul. 1987

+ 1 I- + 2 O2 = + 1 IO4-
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
|ln|_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
# SOPPrTr = 53 +/- 20 cal/K/mol
# CpPrTr = -2.000 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
|ln|_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
# SOPPrTr = -74.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -25.600 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
|ln|_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
# SOPPrTr = 46.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -1.800 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_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 = -120.4 +/- 2 kcal/mol
# delFHO = -156.6 +/- 20 kcal/mol
# SOPrTr = 15.5 +/- 20 cal/K/mol
# CpPrTr = -66.400 +/- 999999 cal/K/mol
# 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_lnln_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 *[GHS]
# SOPrTr = 22.900 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 56.000 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_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/K/mol
# CpPrTr = -23.3 +/- 2 cal/K/mol
# 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
lnln_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/K/mol
# CpPrTr = -16.079 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 29.001 cm3/mol
# mole wt. = 62.0049 g/mol
# date: 15. Dec. 2017

+ 2 SO4-2 + 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
lnln_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/K/mol
# CpPrTr = -57.300 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 28.501 cm3/mol
# mole wt. = 112.1302 g/mol
# date: 3. Jul. 1987

+ 2 SO4-2 + 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
lnln_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/K/mol
# CpPrTr = -50.100 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 28.800 cm3/mol
# mole wt. = 128.1296 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

2 H+ + 2 SO4-2 - 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
lnln_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C

```

```

# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1952LAT][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -231.000 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -280.400 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 30.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -45.300 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 40.401 cm3/mol
# mole wt. = 160.1284 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

0.5 O2 + 2 H+ + 2 SO4-2 - 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
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 = -266.5 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -321.4 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 58.4 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -25.000 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 79.001 cm3/mol
# mole wt. = 192.1272 g/mol
# date: 3. Jul. 1987

+ 1 SeO3-2 + 0.5 O2 = + 1 SeO4-2
log k      15.2854 # +/- 0.4
delta_h    -21.3 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  -9.873921E+1  -1.647456E-2  1.092035E+4  3.541716E+1  -4.735756E+5
lnln_gamma  4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for H2SeO3(aq) - H+ = HSeO3-
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1928SHE/LZA][1965COV/DOB][1970GHO/NA1][1997SVE/SHO][1997SVE/SHO_a][2005OL1/NOS]
# delfG0 = -105.31 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -144 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 10 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = -55.600 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 19.400 cm3/mol
# mole wt. = 142.9576 g/mol
# date: 3. Apr. 2020

1 SO4-2 - 0.5 O2 = 1 SO3-2
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
lnln_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/K/mol
# CpPrTr = -67.500 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_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_a][2011RAI/YUI]
# delfG0 = 0.590 +/- 0.42 kcal/mol
# delfH0 = -6.8 +/- 15 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -75 +/- 50 cal/K/mol
# CpPrTr = -23.1 +/- 5 cal/K/mol
# 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
lnln_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/K/mol
# CpPrTr = 16.441 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_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
# S0PrTr = -17.00 +/- 2.9 cal/K/mol
# CpPrTr = 36.200 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 WATEO 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
# S0PrTr = -6.50 + 1 H2O = 10.21 +/- 2.7 cal/K/mol
# CpPrTr = 41.316 + 1 H2O = 59.328 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lInl_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
# S0PrTr = -7.00 + 2 H2O = 26.42 +/- 0.3 cal/K/mol
# CpPrTr = -9.709 + 2 H2O = 26.315 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 Acetate- = + 1 AlAcetate+2
log k      2.7502 # +/- 0.10
delta_h    4.4 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression 9.099454E+2 1.439506E-1 -5.387577E+4 -3.268065E+2 3.488701E+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: [1993SHO/KER][1994PAL/BEL][1995OEL/HEL]
# delfG0 = -208.57 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -240.5 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = -32.8 +/- 5 cal/K/mol
# CpPrTr = 72.900 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = -0.930 cm3/mol
# mole wt. = 86.0260 g/mol
# date: 15. Jan. 1998

+ 1 Al+3 + 2 Acetate- = + 1 Al(Acetate)2+
log k      4.6011 # +/- 0.6
delta_h    8.2 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression 1.866926E+3 2.922280E-1 -1.103830E+5 -6.705889E+2 7.120191E+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: [1993SHO/KER][1994PAL/BEL][1995OEL/HEL]
# delfG0 = -299.36 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -352.9 +/- 6 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 9 +/- 20 cal/K/mol
# CpPrTr = 169.400 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 48.301 cm3/mol
# mole wt. = 145.0705 g/mol
# date: 15. Jan. 1998

+ 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
lInl_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 *[GHS]
# S0PrTr = -12.0 + 1 H2O = 4.7 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = -5 + 1 H2O = 13 +/- 10 cal/K/mol
# 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
lInl_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/K/mol
# CpPrTr = -5.600 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_gamma 4
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1995POK/SCH]
# delfGO = -275.61 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -321.23 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPPr = 24.5 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -2.572 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 25.869 cm3/mol
# mole wt. = 78.8404 g/mol
# date: 20. Jan. 1998

+ 1 Ba+2 + 1 Acetate- = + 1 BaAcetate+
log_k      0.9822 # +/- 0.7
delta_h    1.878 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  9.870155E+2   1.512455E-1   -5.764002E+4   -3.553107E+2   3.679156E+6
lnln_gamma 4.0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1964ARC/MON][1993SHO/KER]
# delfGO = -222.88 +/- 1.1 kcal/mol
# delfHO = -242.092 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 33.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 72.332 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 35.405 cm3/mol
# mole wt. = 196.3715 g/mol
# date: 17. Aug. 1992

+ 1 Ba+2 + 2 Acetate- = + 1 Ba(Acetate)2
log_k      1.3077 # +/- 1.5
delta_h    3.109 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.775723E+3   2.707314E-1   -1.053148E+5   -6.382088E+2   6.871015E+6
gamma      3.0 0.041
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER][Unpublished]
# delfGO = -311.59 +/- 2.1 kcal/mol
# delfHO = -357.051 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 59.700 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 166.781 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 88.892 cm3/mol
# mole wt. = 255.4160 g/mol
# date: 8. Feb. 2021

+ 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
lnln_gamma 4.0
#
# -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][1995PAR_a][1997SVE/SHO]
# delfGO = -164.03 +/- 0.5 kcal/mol
# delfHO = -166.1 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 19 +/- 10 cal/K/mol
# CpPrTr = 6.963 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_gamma 4
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1986BUS/PLU][1995PAR_a][1997SVE/SHO]
# delfGO = -263.14 +/- 0.4 kcal/mol
# delfHO = -285.750 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 14.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -34.400 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_gamma 4
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], potentiometry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982MAJ/STU][1995PAR_a][1997SVE/SHO]
# delfGO = -200.37 +/- 0.5 kcal/mol
# delfHO = -212.890 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 5.800 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 10.932 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
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 = -219.775 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -228.954 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 34.547 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 20.000 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfGO = -304.769 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -330.020 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 62.275 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 41.800 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS]
# delfGO = -171.58 +/- 0.5 kcal/mol
# delfHO = -175.150 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 27.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = -22.400 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 9.200 cm3/mol
# mole wt. = 154.3343 g/mol
# date: 20. Jun. 2016

+ 1 Ba+2 + 1 SO4-2 = + 1 BaSO4
log_k 2.4922 # +/- 0.2
delta_h 0.6 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression 1.685629E+3 2.581113E-1 -9.344546E+4 -6.099336E+2 5.560806E+6
gamma 3.0 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: [1990FEL/RAI][1999MON][1997SVE/SHO_a][Unpublished]
# delfGO = -314.60 +/- 0.5 kcal/mol
# delfHO = -344.6 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 19.9 +/- 4 cal/K/mol
# CpPr = -31 +/- 36 cal/K/mol
# mole vol. = 8.347 cm3/mol
# mole wt. = 233.3906 g/mol
# date: 27. Aug. 2020

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
lnl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO 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]
# delfGO = -171.39 +/- 0.3 kcal/mol
# delfHO = -182.680 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = -3.400 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 12.876 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 4.356 cm3/mol
# mole wt. = 57.0853 g/mol
# date: 27. Dec. 2017

+ 1 Ca+2 + 1 Acetate- = + 1 CaAcetate+
log_k 0.9309 # +/- 0.1
delta_h 0.345 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.124813E+2 1.424026E-1 -5.321869E+4 -3.291328E+2 3.458245E+6
gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1985DAN/DER][1991FEI][1993SHO/KER]
# delfGO = -221.66 +/- 0.6 kcal/mol
# delfHO = -245.645 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 12.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 83.065 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 29.321 cm3/mol
# mole wt. = 99.1225 g/mol
# date: 5. Apr. 1993

+ 1 Ca+2 + 2 Acetate- = + 1 Ca(Acetate)2
log_k 1.2117 # +/- 0.6
delta_h -0.273 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.800373E+3 2.783059E-1 -1.062671E+5 -6.485296E+2 7.024574E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER][Unpublished]
# delfGO = -310.31 +/- 1.0 kcal/mol
# delfHO = -362.453 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 32.300 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 187.722 +/- 999999 cal/K/mol

```

```

# mole vol. = 82.114 cm3/mol
# mole wt. = 158.1670 g/mol
# date: 9. Feb. 2021

+ 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
lnl_gamma  4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as CaAlO2+
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfGO = -333.20 + 2 H2O = -446.58 +/- 1.1 kcal/mol
# delfHO = -351.12 + 2 H2O = -487.75 +/- 2.3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -9.99 + 2 H2O = 23.43 +/- 6.7 cal/K/mol
# CpPrTr = 56 + 2 H2O = 92 +/- 31 cal/K/mol
# 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
lnl_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] [1985ALL] [1985SIM/BUS] [1989WIL/SEW] [1992GIL/OSC] [1997SVE/SHO]
# delfGO = -163.100 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -168.610 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 4.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 17.470 +/- 999999 cal/K/mol
# 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  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1989WIL/SEW] [1997SVE/SHO]
# delfGO = -194.000 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -211.060 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 6.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 30.960 +/- 999999 cal/K/mol
# 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  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for Ca+2 + CO3-2 = CaCO3
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982PLU/BUS] [1997SVE/SHO]
# delfGO = -262.850 +/- 0.3 kcal/mol
# delfHO = -287.390 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 2.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -29.600 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_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: [1979RIC/HOL] [1997SVE/SHO]
# delfGO = -200.390 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -208.600 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -9.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 30.100 +/- 999999 cal/K/mol
# 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      -20.8756 # +/- 0.7
delta_h    41.96 kcal/mol # +/- 3.2
analytical_expression  8.470769E+2    1.345019E-1    -5.889415E+4    -3.024172E+2    3.359347E+6
lnl_gamma  4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as CaFeO2+
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfGO = -221.13 + 2 H2O = -334.51 +/- 0.9 kcal/mol
# delfHO = -236.33 + 2 H2O = -372.96 +/- 2.8 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -1.10 + 2 H2O = 32.32 +/- 9.0 cal/K/mol
# CpPrTr = 124 + 2 H2O = 160 +/- 45 cal/K/mol
# 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
|ln|_gamma 4 0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfGO = -217.933 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -232.047 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 13.005 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 30.700 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfGO = -302.982 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -335.151 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 34.084 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 62.700 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
|ln|_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO 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]
# delfGO = -273.86 +/- 0.5 kcal/mol
# delfHO = -294.040 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 17.200 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 57.000 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 12.000 cm3/mol
# mole wt. = 101.0951 g/mol
# date: 26.Feb.2018

+ 1 Ca+2 + 1 SeO4-2 = + 1 CaSeO4
log_k 2.0011 # +/- 0.5
delta_h 1.0 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression 1.656853E+3 2.580025E-1 -9.132974E+4 -6.006858E+2 5.413051E+6
gamma 3 0 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: [1997PAR/TIC][2005OLI/NOS][Unpublished]
# delfGO = -240.16 +/- 0.5 kcal/mol
# delfHO = -272.8 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 8.5 +/- 6 cal/K/mol
# CpPrTr = -16 +/- 27 cal/K/mol
# mole vol. = 10.315 cm3/mol
# mole wt. = 183.0356 g/mol
# date: 7.Apr.2020

+ 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 [delfGO from log K data] from CSH165 & Portlandite equilibrium
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as CaSiO3(aq)
# data source: [2016WAL/SUT][2019WAL/ANR]
# delfGO = -362.04 + 1 H2O = -418.73 +/- 1.1 kcal/mol
# delfHO = -392.3 + 1 H2O = -460.6 +/- 4 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = -13.5 + 1 H2O = 3.2 +/- 8 cal/K/mol
# CpPrTr = 6 + 1 H2O = 24 +/- 15 cal/K/mol
# 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
|ln|_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
# SOPPrTr = -1.100 + 1 H2O = 15.612 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 15.505 + 1 H2O = 33.517 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 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]

```

```

# delfG0 = -312.93 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -345.91 +/- 0.7 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 5.0 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -25.000 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 4.700 cm3/mol
# mole wt. = 136.1416 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

1 HC03- + 1 H+ - 1 H2O = 1 C02
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
gamma      3
-Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1989SHO/HEL]
# delfG0 = -92.3 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -98.9 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 28.1 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 58.100 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 32.801 cm3/mol
# mole wt. = 44.0098 g/mol
# date: 27. Jul. 2015

1 HC03- - 1 H+ = 1 C03-2
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
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: [1978BER/VAN][1988SHO/HEL]
# delfG0 = -126.191 +/- 0.070 kcal/mol
# delfH0 = -161.385 +/- 0.11 kcal/mol
# SOPrTr = -11.950 +/- 0.31 cal/K/mol
# CpPrTr = -69.500 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = -5.020 cm3/mol
# mole wt. = 60.0092 g/mol
# date: 1. Jul. 1987

+ 1 Cs+ + 1 Acetate- = + 1 CsAcetate
log_k      0.0220 # +/- 0.4
delta_h    1.516 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  7.673786E+2  1.130316E-1  -4.467142E+4  -2.758453E+2  2.785029E+6
gamma      3.0  0.041
-Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER]
# delfG0 = -158.01 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -176.344 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 57.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 40.555 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 73.310 cm3/mol
# mole wt. = 191.9500 g/mol
# date: 19. Aug. 1992

+ 1 Cs+ + 2 Acetate- = + 1 Cs(Acetate)2-
log_k      -0.2566 # +/- 0.5
delta_h    0.436 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.213405E+3  1.792413E-1  -7.190494E+4  -4.358467E+2  4.670353E+6
gamma      4.0
-Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER]
# delfG0 = -245.90 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -293.614 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 73.200 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 102.565 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 131.126 cm3/mol
# mole wt. = 250.9945 g/mol
# date: 10. Sep. 1992

1 Cs+ + 1 Br- = 1 CsBr
log_k      0.0220 # +/- 999999
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 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1988OEL/HEL][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -94.610 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -89.020 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 57.300 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -26.570 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1988OEL/HEL][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -100.90 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -99.23 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 52.600 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -24.000 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1989OEL/HEL][1997SVE/SHO]
# delfGO = -83.460 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -75.690 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 60.300 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -24.400 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1997SHO/SAS]
# delfGO = -105.000 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -112.300 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 35.900 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -31.900 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 28.601 cm3/mol
# mole wt. = 149.9128 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

+ 1 Cu+ + 1 Acetate- = + 1 CuAcetate
log_k      0.3299 # +/- 0.4
delta_h     16.193 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  8.593671E+2  1.303155E-1  -4.996107E+4  -3.098159E+2  3.226448E+6
gamma      3  0.041
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER]
# delfGO = -76.77 +/- 0.5 kcal/mol
# delfHO = -99.980 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 28.700 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 85.532 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 40.530 cm3/mol
# mole wt. = 122.5905 g/mol
# date: 19. Aug. 1992

+ 1 Cu+ + 2 Acetate- = + 1 Cu(Acetate)2-
log_k      0.0542 # +/- 1.0
delta_h     12.907 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.093739E+3  1.664659E-1  -6.714945E+4  -3.927463E+2  4.776131E+6
lnln_gamma  4  0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER] [Unpublished]
# delfGO = -164.66 +/- 1.4 kcal/mol
# delfHO = -219.456 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 37.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 190.322 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 94.603 cm3/mol
# mole wt. = 181.6350 g/mol
# date: 9. Feb. 2021

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 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfGO = -22.610 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -26.340 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 22.100 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 19.644 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_gamma  4  0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfGO = -58.040 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -72.900 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 27.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 32.986 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_gamma  4  0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C

```

```

# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -89.960 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -118.520 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 23.300 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 53.723 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 76.859 cm3/mol
# mole wt. = 169.9041 g/mol
# date: 2. Jun. 2016

+ 1 Cu+2 + 1 Acetate- = + 1 CuAcetate+
log_k 2.2320 # +/- 0.1
delta_h -2.648 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.323683E+2 1.432441E-1 -5.399957E+4 -3.361000E+2 3.549167E+6
lnl_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: [1964ARC/MON][1993SHO/KER]
# delfG0 = -75.64 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -103.138 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -1.300 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 87.183 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 22.035 cm3/mol
# mole wt. = 122.5905 g/mol
# date: 19. Aug. 1992

+ 1 Cu+2 + 2 Acetate- = + 1 Cu(Acetate)2
log_k 3.6320 # +/- 0.6
delta_h -6.078 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.858401E+3 2.859372E-1 -1.085855E+5 -6.698045E+2 7.250091E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Cu(Acetate)+ + Acetate = Cu(Acetate)2(aq)
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1964ARC/MON][1993SHO/KER]
# delfG0 = -165.82 +/- 0.9 kcal/mol
# delfH0 = -222.758 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 14.200 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 195.756 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 73.995 cm3/mol
# mole wt. = 181.6350 g/mol
# date: 19. Aug. 1992

+ 1 Cu+2 + 3 Acetate- = + 1 Cu(Acetate)3-
log_k 5.4279 # +/- 0.8
delta_h -13.241 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 2.029223E+3 3.128676E-1 -1.224790E+5 -7.294033E+2 8.763166E+6
lnl_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER][Unpublished]
# delfG0 = -256.54 +/- 1.3 kcal/mol
# delfH0 = -346.111 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 18.990 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 320.019 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 131.888 cm3/mol
# mole wt. = 240.6795 g/mol
# date: 9. Feb. 2021

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
lnl_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 = -16.25 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -23.85 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -6.5 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 29.394 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1972NIK/YER][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -46.140 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -64.160 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 0.800 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 54.224 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_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 = -75.340 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -106.850 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -2.200 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 72.388 +/- 999999 cal/K/mol

```

```

# 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
lnl_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1972NIK/YER][1997SVE/SHO]
# delFGO = -103.580 +/- 999999 kcal/mol
# delFH0 = -152.530 +/- 999999 kcal/mol
# S0PrTr = -18.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 83.887 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_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 = -53.740 +/- 999999 kcal/mol
# delFH0 = -64.280 +/- 999999 kcal/mol
# S0PrTr = -18.800 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 33.663 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma  4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delFGO = -70.888 +/- 999999 kcal/mol
# delFH0 = -88.343 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = -0.220 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 34.800 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delFGO = -156.551 +/- 999999 kcal/mol
# delFH0 = -193.278 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 16.777 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 70.800 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981BAE/MES][1997SHO/SAS]
# delFGO = -30.200 +/- 999999 kcal/mol
# delFH0 = -41.700 +/- 999999 kcal/mol
# S0PrTr = -6.100 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 16.000 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as CuO(aq)
# data source: [1971SIL/MAR][1997SHO/SAS]
# delFGO = -20.800 + 1 H2O = -77.488 +/- 999999 kcal/mol
# delFH0 = -34.200 + 1 H2O = -102.495 +/- 999999 kcal/mol
# S0PrTr = -12.400 + 1 H2O = 4.312 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -1.400 + 1 H2O = 16.612 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
  ln_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HCuO2-
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS][1997SVE/SHO_a]
# delfGO = -60.100 + 1 H2O = -116.788 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -86.304 + 1 H2O = -154.630 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 0.300 + 1 H2O = 17.012 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -24.700 + 1 H2O = -6.688 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 96.5527 + 1 H2O = 114.5679 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
  ln_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as CuO2-
# data source: [1971SIL/MAR][1997SHO/SAS]
# delfGO = -41.200 + 2 H2O = -154.576 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -74.400 + 2 H2O = -211.034 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = -23.100 + 2 H2O = 10.324 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -53.500 + 2 H2O = -17.476 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
  ln_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], solubility for reaction Fe+2 + B(OH)4- = FeB(OH)4+
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2018XIO/KIR]
# delfGO = -302.53 +/- 0.5 kcal/mol
# delfHO = -347.4 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 2.2 +/- 9 cal/K/mol
# CpPrTr = 66 +/- 20 cal/K/mol
# 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
  ln_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1976RAM][1990HEI/SEW][1992FE1/HEM][1993PAL/HYD][1997SVE/SHO]
# [1997ZHA][2001ZHA/PAN]
# delfGO = -52.90 +/- 0.3 kcal/mol
# delfHO = -61.09 +/- 0.4 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -9.9 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 21.200 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1992FE1/HEM][1992DIN/SEY][1997SVE/SHO_a][2001ZHA/PAN]
# delfGO = -81.66 +/- 0.7 kcal/mol
# delfHO = -92.8 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 22.4 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 38.700 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], solubility for reaction Siderite = FeCO3(aq)
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2013LEM/BER]
# delfGO = -155.045 +/- 0.71 kcal/mol
# delfHO = -183.2 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -13 +/- 10 cal/K/mol
# CpPrTr = -30 +/- 30 cal/K/mol
# 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
  ln_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WH1][1997SVE/SHO]

```

```

# delfG0 = -91.160 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -101.450 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPrTr = -20.900 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 20.838 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_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 *[GHS]
# SOPPrTr = -3.492 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 29.400 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPPrTr = 12.495 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 60.200 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 46.700 cm3/mol
# mole wt. = 145.8824 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

+ 1 Fe+2 + 1 HP04-2 + 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
lnln_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: [1972NR1_b][1997SVE/SHO_a]
# delfG0 = -285.86 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -324.72 +/- 2.5 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = -0.3 +/- 8 cal/K/mol
# CpPrTr = 58 +/- 20 cal/K/mol
# mole vol. = 11.559 cm3/mol
# mole wt. = 152.8342 g/mol
# date: 2. Jul. 2019

+ 1 Fe+2 + 1 HP04-2 = + 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: [1972NR1_b][1997SVE/SHO_a]
# delfG0 = -287.09 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -329.11 +/- 2.1 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = -10.9 +/- 7 cal/K/mol
# CpPrTr = -19 +/- 27 cal/K/mol
# 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
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: [1970SWE/BAE][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -65.870 +/- 0.71 kcal/mol
# delfH0 = -78.10 +/- 1.7 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = -10.0 +/- 5 cal/K/mol
# CpPrTr = 15.000 +/- 999999 cal/K/mol
# 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  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
# SOPPrTr = -10 + 1 H2O = 7 +/- 6 cal/K/mol
# CpPrTr = 0.000 + 1 H2O = 18.012 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_gamma 4.0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL] as HFeO2-
# data source: [1970SWE/BAE][1997SHO/SAS]
# delfGO = -95.40 + 1 H2O = -152.09 +/- 2.0 kcal/mol
# delfHO = -125.70 + 1 H2O = -194.08 +/- 3.6 kcal/mol
# SOPPr = -15.0 + 1 H2O = 1.7 +/- 7 cal/K/mol
# CpPr = 22.000 + 1 H2O = 40.012 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 Acetate- = + 1 FeAcetate+
log_k      1.2703 # +/- 0.8
delta_h    -1.0 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression 9.177009E+2   1.415222E-1   -5.344479E+4   -3.308317E+2   3.488912E+6
lnln_gamma 4.0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1988PAL/DRU][1997SVE/SHO]
# delfGO = -111.87 +/- 1.1 kcal/mol
# delfHO = -139.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -2 +/- 10 cal/K/mol
# CpPr = 81 +/- 40 cal/K/mol
# mole vol. = 23.861 cm3/mol
# mole wt. = 114.8915 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

+ 1 Fe+2 + 2 Acetate- = + 1 Fe(Acetate)2
log_k      2.8301 # +/- 0.7
delta_h    -5.2 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression 1.842340E+3   2.838263E-1   -1.075563E+5   -6.643004E+2   7.144958E+6
gamma      3.0   0.041
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1988PAL/DRU][1997SVE/SHO]
# delfGO = -202.27 +/- 1.0 kcal/mol
# delfHO = -259.6 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 11.5 +/- 2 cal/K/mol
# CpPr = 184 +/- 10 cal/K/mol
# mole vol. = 76.132 cm3/mol
# mole wt. = 173.9360 g/mol
# date: 12. Sep. 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 delfGO used], solubility for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a][2013LEM/BER]
# delfGO = -203.133 +/- 0.19 kcal/mol
# delfHO = -237.5 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -2.9 +/- 5 cal/K/mol
# CpPr = -25 +/- 29 cal/K/mol
# 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      1.4858 # +/- 999999
delta_h    0.962 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.409613E+2   1.336643E-1   -4.730739E+4   -3.044981E+2   2.915612E+6
lnln_gamma 4.5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfGO = -37.520 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -50.831 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -42.700 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 3.369 +/- 999999 cal/K/mol
# 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      6.0077 # +/- 999999
delta_h    4.841 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.318193E+2   1.468499E-1   -5.259876E+4   -3.349407E+2   3.165269E+6
lnln_gamma 4.5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1997SVE/SHO]
# delfGO = -79.650 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -87.169 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -25.700 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 7.638 +/- 999999 cal/K/mol
# 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      -2.1900 # +/- 0.04
delta_h    10.193 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.983038E+2   2.971577E-2   -1.207885E+4   -7.051297E+1   5.012429E+5
lnln_gamma 4.5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C

```

```

# gflag: 1 [reported delfGO used] potentiometry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1976BAE/AMES][1997SHO/SAS]
# delfGO = -57.814 +/- 0.25 kcal/mol
# delfHO = -69.984 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -25.400 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = -8.200 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = -24.901 cm3/mol
# mole wt. = 72.8543 g/mol
# date: 27. Aug. 2020

+ 1 Fe+3 + 2 H2O - 2 H+ = + 1 Fe(OH)2+
log k -5.6454 # +/- 0.1
delta_h 19.171 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 3.179195E+2 4.784359E-2 -1.815756E+4 -1.142383E+2 5.106337E+5
lnl_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used] potentiometry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as FeO+
# data source: [1976BAE/AMES][1997SHO/SAS]
# delfGO = -53.10 + 1 H2O = -109.79 +/- 0.3 kcal/mol
# delfHO = -61.006 + 1 H2O = -129.323 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -11.100 + 1 H2O = 5.612 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = -48.100 + 1 H2O = -30.088 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = -41.801 + 1 H2O = -23.733 cm3/mol
# mole wt. = 71.8464 + 1 H2O = 89.8616 g/mol
# date: 1. May. 1997

+ 1 Fe+3 + 3 H2O - 3 H+ = + 1 Fe(OH)3
log k -14.2932 # +/- 0.5
delta_h 18.0 kcal/mol # +/- 6
analytical_expression 5.763632E+2 8.928811E-2 -3.472462E+4 -2.101944E+2 1.715682E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HFeO2(aq)
# data source: [1999LIU/MIL][2007STE]
# delfGO = -97.99 + 1 H2O = -154.68 +/- 0.7 kcal/mol
# delfHO = -130.5 + 1 H2O = -198.8 +/- 5 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -37.8 + 1 H2O = -21.1 +/- 18 cal/K/mol
# CpPr = 17.700 + 1 H2O = 35.712 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 -21.9825 # +/- 0.2
delta_h 41.6 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -8.962222E+1 -1.468042E-2 -3.327263E+3 3.530853E+1 -3.723108E+5
lnl_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][2014DL/LOT]
# delfGO = -87.50 + 2 H2O = -200.88 +/- 0.4 kcal/mol
# delfHO = -106.9 + 2 H2O = -243.5 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 6.1 + 2 H2O = 39.5 +/- 9 cal/K/mol
# CpPr = 17.0 + 2 H2O = 53.0 +/- 10 cal/K/mol
# 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 HPO4-2 + 1 H+ = 1 H2PO4-
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
lnl_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
# SOPPr = 21.6 +/- 2 cal/K/mol
# CpPr = -7.000 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 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
# SOPPr = 30.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 42.833 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 34.921 cm3/mol
# mole wt. = 34.0819 g/mol
# date: 30. Aug. 2015

1 S2O3-2 + 2 H+ = 1 H2S2O3
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 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
# SOPPr = 45.000 +/- 999999 cal/K/mol

```

```

# CpPrTr = 27.500 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 42.201 cm3/mol
# mole wt. = 114.1460 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 S2O4-2 + 2 H+ = 1 H2S2O4
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
# SOPrTr = 51.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 37.400 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 51.401 cm3/mol
# mole wt. = 130.1454 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 1 SeO3-2 + 2 H+ = + 1 H2SeO3
log_k      11.0149 # +/- 0.22
delta_h    0.49 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression 1.418844E+3 2.207488E-1 -8.045120E+4 -5.095474E+2 5.069069E+6
gamma      3 0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for Se(s) + 2 I2(s) + 3 H2O = H2SeO3(aq) + 4 H+ + 4 I-
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1928SCH/SWI][1961SEL/PAK][1997SVE/SHO][1997SVE/SHO_a][2005OLI/NOS]
# delfGO = -101.46 +/- 0.1 kcal/mol
# delfHO = -120.78 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 50.04 +/- 1.4 cal/K/mol
# CpPrTr = 35.200 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 46.535 cm3/mol
# mole wt. = 128.9740 g/mol
# date: 3. Apr. 2020

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 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
# SOPrTr = 38.0 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 23.600 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 48.101 cm3/mol
# mole wt. = 97.9952 g/mol
# date: 11. Jul. 1987

+ 1 H+ + 1 Acetate- = + 1 HAcetate
log_k      4.7645 # +/- 0.7
delta_h    0.09 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression 6.529026E+2 1.043468E-1 -3.608329E+4 -2.356501E+2 2.210830E+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]
# delfGO = -94.77 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -116.10 +/- 0.2 kcal/mol * [GHS]
# SOPrTr = 42.7 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 40.325 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 52.011 cm3/mol
# mole wt. = 60.0524 g/mol
# date: 6. Mar. 1992

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 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
# delfHO = -27.0 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 33.8 +/- 20 cal/K/mol
# CpPrTr = 9.000 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 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: [1997TAG/ZOT]
# delfGO = -30.411 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -42.895 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 0.421 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 35.740 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 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 = -19.1 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -28.9 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 34 +/- 20 cal/K/mol
# CpPrTr = 9.100 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 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 = 1.4 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -12.4 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 45.0 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 27.500 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 44.000 cm3/mol
# mole wt. = 68.4594 g/mol
# date: 9. Oct. 2019

+ 1 Cyanide- + 1 H+ = + 1 HCN
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 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1995OEL/HEL]
# delfGO = 28.6 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = 25.6 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 29.8 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 40.666 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 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]
# delfGO = -71.660 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -76.840 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 22.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 14.000 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_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 = -138.16 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -155.34 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 22.1 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -33.200 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 22.800 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]

```

```

# delfG0 = -23.70 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -33.00 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 22.8 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -9.200 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 15.600 cm3/mol
# mole wt. = 143.9118 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 I03- + 1 H+ = 1 HI03
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 delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -31.7 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -50.5 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 39.9 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 19.000 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 37.701 cm3/mol
# mole wt. = 175.9106 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 N02- + 1 H+ = 1 HN02
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 delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -12.1 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -28.5 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 32.4 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 6.700 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 30.701 cm3/mol
# mole wt. = 47.0135 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 N03- + 1 H+ = 1 HN03
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 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1989SHO/HEL][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -24.730 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -45.410 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 42.700 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 18.000 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 40.201 cm3/mol
# mole wt. = 63.0129 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 S203-2 + 1 H+ = 1 HS203-
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
lnln_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1953PAG][1997SHO/SAS]
# delfG0 = -127.200 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -153.900 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 30.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 3.500 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 29.500 cm3/mol
# mole wt. = 113.1381 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

1 S204-2 + 1 H+ = 1 HS204-
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
lnln_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 = -146.90 +/- 0.2 kcal/mol
# delfH0 = -179.100 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 36.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 13.400 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 40.101 cm3/mol
# mole wt. = 129.1375 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 1 HSe- + 1 H+ = + 1 H2Se
log_k      3.8483 # +/- 0.5
delta_h    0.09 kcal/mol # +/- 1.1
analytical_expression  7.899728E+2  1.226586E-1  -4.563918E+4  -2.840085E+2  2.945559E+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: [1974NAU/RYZ][1971DUB/SIS][1982WAG/EVA][1990LEV/MYE][Unpublished]
# delfG0 = 5.25 +/- 0.8 kcal/mol
# delfH0 = 3.49 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 35.39 +/- 2.9 cal/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = 44.667 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 32.869 cm3/mol
# mole wt. = 80.9758 g/mol
# date: 7. Apr. 2020

```

```

+ 1 SeO3-2 + 1 H+ = + 1 HSeO3-
log_k      8.3951 # +/- 0.25
delta_h    -1.20 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression  8.362599E+2    1.314892E-1    -4.730621E+4    -3.001196E+2    3.041963E+6
lnln_gamma  4.0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for H2SeO3(aq) - H+ = HSeO3-
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1939HAG][1966SAB/CAR][1967KAN/MAN][1968SEK/IWA][1971BAR/SIL][1972ARN/BAR][1997SVE/SHO]
#               [1982WAG/EVA][1990DAS/NAR][1997SVE/SHO_a][2001SEB/POT][2005OLI/NOS]
# delfGO = -97.887 +/- 0.21 kcal/mol
# delfHO = -122.47 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 32.39 +/- 1.5 cal/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = 6.500 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 31.179 cm3/mol
# mole wt. = 127.9661 g/mol
# date: 3. Apr. 2020

+ 1 SeO4-2 + 1 H+ = + 1 HSeO4-
log_k      1.7006 # +/- 0.4
delta_h     5.0 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  8.249142E+2    1.295922E-1    -4.823575E+4    -2.966714E+2    3.024352E+6
lnln_gamma  4.0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for L2(aq) + H2SeO3(aq) + H2O = 3 H+ + HSeO4- + 2 L-, where L = Br and Cl
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1928SHE/IZA][1964NAI][1965COV/DOB][1970GHO/NAI][1997SVE/SHO][1997SVE/SHO_a][2005OLI/NOS]
# delfGO = -107.63 +/- 0.4 kcal/mol
# delfHO = -139.0 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 34.1 +/- 4 cal/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = 12.100 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 38.198 cm3/mol
# mole wt. = 143.9655 g/mol
# date: 6. Apr. 2020

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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delfGO = -126.13 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -149.67 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 33.4 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -1.400 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1988SHO/HEL]
# delfGO = -180.63 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -212.50 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 30.0 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 5.300 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 0.041
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used]
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as K2SiO3
# data source: [Unpublished]
# delfGO = -359.530 + 1 H2O = -416.218 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -399.340 + 1 H2O = -467.657 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -24.600 + 1 H2O = -7.888 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -59.970 + 1 H2O = -41.958 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 Acetate- = + 1 KAcetate
log_k      -0.2712 # +/- 0.2
delta_h     1.228 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  7.801919E+2    1.176748E-1    -4.542233E+4    -2.810574E+2    2.867205E+6
gamma      3.0 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: [1985DAN/DER][1993SHO/KER]
# delfGO = -155.41 +/- 0.3 kcal/mol
# delfHO = -175.232 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 47.600 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 59.162 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 59.539 cm3/mol
# mole wt. = 98.1428 g/mol
# date: 17. Aug. 1992

+ 1 K+ + 2 Acetate- = + 1 K(Acetate)2-
log_k      -1.1054 # +/- 0.7
delta_h     0.133 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.142389E+3    1.721567E-1    -6.885955E+4    -4.105396E+2    4.621042E+6
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: [1993SHO/KER] [Unpublished]
# delfG0 = -242.54 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -292.517 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 60.700 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 138.870 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 115.782 cm3/mol
# mole wt. = 157.1873 g/mol
# date: 9. Feb. 2021

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
# SOPPr = 35.700 + 2 H2O = 69.124 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 4.318 + 2 H2O = 40.342 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# SOPPr = 47.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = -7.970 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# SOPPr = 39.100 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 11.098 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 40.074 cm3/mol
# mole wt. = 74.5510 g/mol
# date: 15. Sep. 1997

+ 1 K+ + 1 HCO3- - 1 H+ = + 1 KCO3-
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
ln_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 *[GHS]
# SOPPr = 34 +/- 11 cal/K/mol
# CpPr = -22 +/- 14 cal/K/mol
# 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 -22.8401 # +/- 0.7
delta_h 44.71 kcal/mol # +/- 2.8
analytical_expression 7.236885E+2 1.106278E-1 -5.079647E+4 -2.580061E+2 2.602762E+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 KFeO2(aq)
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfG0 = -153.84 + 2 H2O = -267.22 +/- 0.9 kcal/mol
# delfH0 = -164.05 + 2 H2O = -300.68 +/- 2.4 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 36.78 + 2 H2O = 70.20 +/- 7.4 cal/K/mol
# CpPr = 76.7 + 2 H2O = 112.7 +/- 23 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPPr = 48.668 +/- 999999 cal/K/mol

```

```

# CpPrTr = 6.800 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma 4 0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -234.866 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -264.657 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 63.193 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 13.900 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 85.500 cm3/mol
# mole wt. = 129.1337 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

1 K+ + 1 HCO3- = 1 KHC03
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 [1992.JOH/OEL]
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfG0 = -206.94 +/- 1.5 kcal/mol
# delfH0 = -224.09 +/- 3.1 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 48.47 +/- 9.0 cal/K/mol
# CpPrTr = 26.7 +/- 14 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1976HEL/KIR] [1997SVE/SHO]
# delfG0 = -243.400 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -267.400 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 55.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 57.720 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO]
# delfG0 = -77.740 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -71.830 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 49.200 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -5.800 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for K+ + OH- = KOH
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1997POK/HEL_b]
# delfG0 = -103.88 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -112.100 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 28.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 1.298 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma 4
# -Range: 0 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/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 *[GHS]
# SOPrTr = 31.7 + 1 H2O = 48.4 +/- 12 cal/K/mol
# CpPrTr = -24.0 + 1 H2O = -6.0 +/- 15 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPPr = 37.38 + 1 H2O = 54.09 +/- 6.5 cal/K/mol
# CpPr = -3.9 + 1 H2O = 14.1 +/- 20 cal/K/mol
# 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
lnl_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
# SOPPr = 35.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = -10.900 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 27.800 cm3/mol
# mole wt. = 135.1619 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

+ 1 Li+ + 1 Acetate- = + 1 LiAcetate
log_k 0.2903 # +/- 0.15
delta_h -1.595 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.716138E+2 1.325235E-1 -5.048687E+4 -3.145111E+2 3.265276E+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: [1985DAN/DER][1993SHO/KER]
# delfG0 = -158.675 +/- 0.29 kcal/mol
# delfH0 = -184.341 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 19.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 86.657 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 48.475 cm3/mol
# mole wt. = 65.9855 g/mol
# date: 17. Aug. 1992

+ 1 Li+ + 2 Acetate- = + 1 Li(Acetate)2-
log_k -0.0235 # +/- 0.6
delta_h -5.522 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.049256E+3 1.598812E-1 -6.458611E+4 -3.769287E+2 4.654527E+6
lnl_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER][Unpublished]
# delfG0 = -246.52 +/- 0.9 kcal/mol
# delfH0 = -304.458 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 25.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 192.516 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 103.454 cm3/mol
# mole wt. = 125.0300 g/mol
# date: 9. Feb. 2021

+ 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 0.041
# -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 *[GHS]
# SOPPr = 12.30 +/- 0.7 cal/K/mol
# CpPr = 22.896 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 0.041
# -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/GRO][1997SVE/SHO_a][1998HO/PAL][2000HO/PAL]
# delfG0 = -107.80 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -121.01 +/- 1.3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 2.8 +/- 4 cal/K/mol
# CpPr = 5.808 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_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 *[GHS]
# SOPPrTr = 12 +/- 10 cal/K/mol
# CpPrTr = 11.0 +/- 7 cal/K/mol
# mole vol. = 22.945 cm3/mol
# mole wt. = 103.0046 g/mol
# date: 22. Nov. 2019

+ 1 Mg+2 + 1 Acetate- = + 1 MgAcetate+
log k 1.2828 # +/- 0.3
delta_h -1.956 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.358456E+2 1.427851E-1 -5.476369E+4 -3.370975E+2 3.615098E+6
lnl_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: [1964ARC/MON][1993SHO/KER]
# delfG0 = -198.53 +/- 0.8 kcal/mol
# delfH0 = -229.513 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = -13.100 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 87.992 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 25.433 cm3/mol
# mole wt. = 83.3495 g/mol
# date: 17. Mar. 1993

+ 1 Mg+2 + 2 Acetate- = + 1 Mg(Acetate)2
log k 1.9073 # +/- 0.9
delta_h -5.399 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.877283E+3 2.886913E-1 -1.101052E+5 -6.768784E+2 7.354450E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER] [Unpublished]
# delfG0 = -287.65 +/- 1.4 kcal/mol
# delfH0 = -349.146 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = -1.200 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 197.336 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 77.781 cm3/mol
# mole wt. = 142.3940 g/mol
# date: 9. Feb. 2021

+ 1 Mg+2 + 1 Al+3 + 4 H2O - 4 H+ = + 1 MgAl(OH)4+
log k -18.4633 # +/- 0.8
delta_h 40.33 kcal/mol # +/- 1.9
analytical_expression 8.000381E+2 1.235864E-1 -5.388009E+4 -2.855736E+2 2.844596E+6
lnl_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 = -313.24 + 2 H2O = -426.62 +/- 0.9 kcal/mol
# delfH0 = -336.35 + 2 H2O = -472.98 +/- 1.8 kcal/mol
# SOPPrTr = -29.5 + 2 H2O = 3.9 +/- 5 cal/K/mol
# CpPrTr = 62 + 2 H2O = 98 +/- 28 cal/K/mol
# 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 -0.7763 # +/- 0.5
delta_h 1.184 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 8.632846E+2 1.352402E-1 -4.951735E+4 -3.124877E+2 3.104687E+6
lnl_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][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -138.83 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -150.116 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = -19.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 25.000 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 1.260 cm3/mol
# mole wt. = 59.7577 g/mol
# date: 6. Sep. 2015

+ 1 Mg+2 + 1 HCO3- - 1 H+ = + 1 MgCO3
log k -7.3535 # +/- 0.5
delta_h 5.684 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.697979E+2 1.481125E-1 -5.323071E+4 -3.537129E+2 2.885380E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Mg+2 + CO3-2 = MgCO3(aq)
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1974REA/LAN][1977SIE/HOS][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -238.76 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -270.581 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = -24.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -27.400 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 -0.20 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression 9.555338E+2 1.481127E-1 -5.487370E+4 -3.447550E+2 3.496363E+6
lnl_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: [1979RIC/HOL][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -178.45 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -191.72 +/- 0.3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = -28.07 +/- 3.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 39.100 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = -17.470 cm3/mol
# mole wt. = 43.3034 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

```

```

+ 1 Mg+2 + 1 Fe+3 + 4 H2O - 4 H+ = + 1 MgFe(OH)4+
log_k      -19.8934 # +/- 0.7
delta_h    40.43 kcal/mol # +/- 2.9
analytical_expression  8.978725E+2    1.388082E-1    -6.187141E+4    -3.199946E+2    3.571191E+6
lnln_gamma  4.0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as MgFeO2+
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfGO = -198.86 + 2 H2O = -312.24 +/- 0.7 kcal/mol
# delfHO = -219.43 + 2 H2O = -356.06 +/- 2.4 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -21.25 + 2 H2O = 12.17 +/- 7.6 cal/K/mol
# CpPr = 125.6 + 2 H2O = 161.6 +/- 41.0 cal/K/mol
# 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      1.4279 # +/- 999999
delta_h    -2.627 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  9.409340E+2    1.396975E-1    -5.423803E+4    -3.388391E+2    3.483848E+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 = -194.318 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -215.724 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -13.582 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 35.700 +/- 999999 cal/K/mol
# 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      2.2994 # +/- 999999
delta_h    -6.447 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.869902E+3    2.789089E-1    -1.072525E+5    -6.742828E+2    6.883067E+6
gamma      4.0  0.041
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfGO = -279.367 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -321.274 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -0.709 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 72.400 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 47.500 cm3/mol
# mole wt. = 114.3404 g/mol
# date: 8. Oct. 2019

+ 1 Mg+2 + 1 HCO3- = + 1 MgHCO3+
log_k      1.0321 # +/- 999999
delta_h    0.505 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  9.035901E+2    1.396612E-1    -5.261156E+4    -3.256898E+2    3.391970E+6
lnln_gamma  4.0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1990SVE][1997SVE/SHO]
# delfGO = -250.200 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -275.760 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -3.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 63.690 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 5.480 cm3/mol
# mole wt. = 85.3221 g/mol
# date: Jan. 1991

+ 1 Mg+2 + 1 SeO4-2 = + 1 MgSeO4
log_k      2.2027 # +/- 0.7
delta_h    1.0 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression  1.725933E+3    2.665297E-1    -9.541986E+4    -6.251423E+2    5.663217E+6
gamma      3.0  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: [1997PAR/TIC][2005OLI/NOS][Unpublished]
# delfGO = -216.83 +/- 1.2 kcal/mol
# delfHO = -254.4 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -10 +/- 10 cal/K/mol
# CpPr = -12 +/- 24 cal/K/mol
# mole vol. = 7.431 cm3/mol
# mole wt. = 167.2626 g/mol
# date: 7. Apr. 2020

+ 1 Mg+2 + 1 Si(OH)4 - 2 H+ = + 1 MgSiO2(OH)2
log_k      -17.6352 # +/- 0.5
delta_h    18.831 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  7.397478E+2    1.013602E-1    -4.693280E+4    -2.664305E+2    2.584569E+6
gamma      4.0  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: [1974SAN/SCH][1997SVE/SHO][Unpublished]
# delfGO = -340.67 + 1 H2O = -397.36 +/- 1.0 kcal/mol
# delfHO = -373.363 + 1 H2O = -441.680 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -23.800 + 1 H2O = -7.088 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 20.400 + 1 H2O = 38.412 +/- 999999 cal/K/mol
# 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      -8.4997 # +/- 0.3
delta_h    6.371 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  5.401041E+2    6.791263E-2    -3.401930E+4    -1.930478E+2    2.038718E+6
lnln_gamma  4.0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C

```

```

# gflag: 3 [delfGO 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]
# delfGO = -353.13 + 1 H2O = -409.82 +/- 0.5 kcal/mol
# delfHO = -385.823 + 1 H2O = -454.140 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -23.800 + 1 H2O = -7.088 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 20.400 + 1 H2O = 38.412 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = -9.826 + 1 H2O = 8.242 cm3/mol
# mole wt. = 101.3966 + 1 H2O = 119.4118 g/mol
# date: 9. Aug. 2017

+ 1 Mg+2 + 1 H2O - 1 H+ = + 1 MgOH+
log k      -11.7044 # +/- 0.15
delta_h    16.79 kcal/mol # +/- 1.4
analytical_expression  2.337438E+2    3.332512E-2    -1.696187E+4    -8.387483E+1    8.044146E+5
lnln_gamma  4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1923KOL][1925GJA][1986WAL][1997PAL/WES][1997SHO/SAS_b][2016BRO/EKB][Unpublished]
# delfGO = -149.23 +/- 0.6 kcal/mol
# delfHO = -162.89 +/- 1.4 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -13.5 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = 20 +/- 30 cal/K/mol
# 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      2.2430 # +/- 3
delta_h    1.392 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.758966E+3    2.699281E-1    -9.748480E+4    -6.366049E+2    5.777303E+6
gamma      3.0    0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997McC/SHO]
# delfGO = -289.5 +/- 4 kcal/mol
# delfHO = -327.375 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -13.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -21.720 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 1.330 cm3/mol
# mole wt. = 120.3686 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Mn+2 + 1 Acetate- = + 1 MnAcetate+
log k      1.2197 # +/- 999999
delta_h    -0.380 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  9.421914E+2    1.456917E-1    -5.48893E+4    -3.396620E+2    3.572746E+6
lnln_gamma  4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1958SID/BAN][1993SHO/KER]
# delfGO = -145.034 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -169.470 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 8.700 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 87.000 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 30.392 cm3/mol
# mole wt. = 113.9825 g/mol
# date: 17. Aug. 1992

+ 1 Mn+2 + 2 Acetate- = + 1 Mn(Acetate)2
log k      2.0597 # +/- 999999
delta_h    -3.045 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.852568E+3    2.857828E-1    -1.092334E+5    -6.673785E+2    7.292478E+6
gamma      3.0    0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1958SID/BAN][1993SHO/KER]
# delfGO = -234.450 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -288.325 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 24.200 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 202.780 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 83.306 cm3/mol
# mole wt. = 173.0270 g/mol
# date: 10. Sep. 1992

+ 1 Mn+2 + 3 Acetate- = + 1 Mn(Acetate)3-
log k      3.5008 # +/- 999999
delta_h    -8.976 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  2.082979E+3    3.222677E-1    -1.267450E+5    -7.484143E+2    9.017723E+6
lnln_gamma  4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER][Unpublished]
# delfGO = -324.686 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -410.446 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 31.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 331.892 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 142.262 cm3/mol
# mole wt. = 232.0715 g/mol
# date: 9. Feb. 2021

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
lnln_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO]
# delfGO = -86.290 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -88.290 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 12.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 25.120 +/- 999999 cal/K/mol

```

```

# 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
lnl_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 = -123.640 +/- 999999 kcal/mol
# delFH0 = -132.450 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -13.300 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 29.388 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma  4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delFGO = -140.681 +/- 999999 kcal/mol
# delFH0 = -155.779 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 7.415 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 38.400 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delFGO = -226.030 +/- 999999 kcal/mol
# delFH0 = -259.697 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 26.769 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 77.800 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_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][1981BAE/MES][1997SHO/SAS]
# delFGO = -97.341 +/- 0.06 kcal/mol
# delFH0 = -106.81 +/- 1.0 kcal/mol
# SOPrTr = 0.43 +/- 3.4 cal/K/mol
# CpPrTr = 8.510 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used], stability relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as MnO(aq)
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS]
# delFGO = -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/K/mol
# CpPrTr = -12.700 + 1 H2O = 5.312 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delFGO used], stability relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as Hmno2-
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS]
# delFGO = -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/K/mol
# CpPrTr = -3.300 + 1 H2O = 14.712 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
  ln_gamma
  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as MnO2-2
# data source: [1976BAE/AMES][1997SHO/SAS]
# delfGO = -102.60 + 2 H2O = -215.98 +/- 0.7 kcal/mol
# delfHO = -133.340 + 1 H2O = -201.657 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPrTr = -15.200 + 1 H2O = 1.512 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -71.500 + 1 H2O = -53.488 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
  ln_gamma
  3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI][1988WHE/CAR][1997SVE/SHO]
# delfGO = -235.640 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -267.950 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPrTr = 5.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -20.600 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 2.800 cm3/mol
# mole wt. = 151.0016 g/mol
# date: 1. Jun. 2016

+ 1 NH4+ - 1 H+ = + 1 NH3
  log_k -9.2410 # +/- 0.08
  delta_h 12.410 kcal/mol # +/- 0.08
  analytical_expression 5.656157E+1 1.028736E-2 -5.635470E+3 -2.096162E+1 1.688191E+5
  gamma
  3, 0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1972VAN/KIN][1989SHO/HEL]
# delfGO = -6.328 +/- 0.07 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -19.440 +/- 0.06 kcal/mol
# SOPPrTr = 25.77 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 18.383 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 24.430 cm3/mol
# mole wt. = 17.0304 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

+ 1 NH4+ + 1 Acetate- = + 1 NH4Acetate
  log_k 0.2126 # +/- 0.3
  delta_h 0.750 kcal/mol # +/- 999999
  analytical_expression 8.005587E+2 1.204249E-1 -4.734733E+4 -2.877655E+2 3.076349E+6
  gamma
  3, 0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER]
# delfGO = -107.55 +/- 0.4 kcal/mol
# delfHO = -147.290 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 50.700 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 90.122 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 69.645 cm3/mol
# mole wt. = 77.0828 g/mol
# date: 10. Sep. 1992

+ 1 NH4+ + 2 Acetate- = + 1 NH4(Acetate)2-
  log_k -0.1730 # +/- 0.8
  delta_h -0.687 kcal/mol # +/- 999999
  analytical_expression 1.229290E+3 1.862511E-1 -7.562101E+4 -4.407201E+2 5.260071E+6
  ln_gamma
  4, 0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER] [Unpublished]
# delfGO = -195.29 +/- 1.2 kcal/mol
# delfHO = -264.917 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 64.700 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 199.277 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 127.041 cm3/mol
# mole wt. = 136.1273 g/mol
# date: 10. Feb. 2021

#+ 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 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as Na2SiO3(aq)
# data source: [Unpublished]
# delfGO = -349.670 + 1 H2O = -406.358 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -383.740 + 1 H2O = -452.057 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPrTr = -11.700 + 1 H2O = 5.012 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -46.700 + 1 H2O = -28.688 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 Acetate- = + 1 NaAcetate
  log_k -0.1107 # +/- 0.15
  delta_h 0.048 kcal/mol # +/- 999999
  analytical_expression 8.621183E+2 1.286536E-1 -5.035697E+4 -3.103469E+2 3.221606E+6
  gamma
  3, 0 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: [1985DAN/DER][1993SHO/KER]
# delfGO = -150.71 +/- 1.2 kcal/mol

```

```

# delfH0 = -173.574 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 34.200 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 75.092 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 49.207 cm3/mol
# mole wt. = 82.0343 g/mol
# date: 17. Aug. 1992

+ 1 Na+ + 2 Acetate- = + 1 Na(Acetate)2-
log_k -0.7960 # +/- 0.6
delta_h -2.241 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.125006E+3 1.687599E-1 -6.884167E+4 -4.037363E+2 4.782165E+6
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: [1993SHO/KER] [Unpublished]
# delfG0 = -238.05 +/- 0.9 kcal/mol
# delfH0 = -292.053 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 44.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 169.952 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 103.156 cm3/mol
# mole wt. = 141.0788 g/mol
# date: 10. Feb. 2021

+ 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 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 *[GHS]
# SOPrTr = 11.100 + 2 H2O = 44.524 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 41.073 + 2 H2O = 77.096 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 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/K/mol
# CpPrTr = 35.093 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 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/K/mol
# CpPrTr = 7.970 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 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/K/mol
# CpPrTr = 8.508 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_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 *[GHS]
# SOPrTr = 14.3 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = -29.5 +/- 20 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1979RIC/HOL][1997SVE/SHO]
# delfGO = -128.570 +/- 0.26 kcal/mol
# delfHO = -135.860 +/- 999999 cal/K/mol
# SOPrTr = 12.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 11.200 +/- 999999 cal/K/mol
# 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      -22.2617 # +/- 0.4
delta_h    41.88 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression  7.876680E+2  1.183437E-1  -5.374076E+4  -2.813967E+2  2.785170E+6
gamma      3  0  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as NaFe02(aq)
# data source: [2019WAL/ANR]
# delfGO = -149.71 + 2 H2O = -263.09 +/- 0.5 kcal/mol
# delfHO = -164.05 + 2 H2O = -300.68 +/- 2.7 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 19.7 + 2 H2O = 53.1 +/- 9 cal/K/mol
# CpPrTr = 77 + 2 H2O = 113 +/- 23 cal/K/mol
# mole vol. = 3.575 + 2 H2O = 39.711 cm3/mol
# mole wt. = 110.8356 + 2 H2O = 146.8660 g/mol
# date: 12. Dec. 2018

+ 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  0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfGO = -146.521 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -159.326 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 35.333 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 22.800 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma  4  0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfGO = -230.001 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -264.122 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 45.473 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 45.000 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971NAK][1970BUT/HJS][2006CRE/DeS][2013STE/BEN]
# delfGO = -203.04 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -222.54 +/- 2.5 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 37.40 +/- 8.5 cal/K/mol
# CpPrTr = 34.2 +/- 15 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [Unpublished]
# delfGO = -238.790 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -265.620 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 43.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 55.608 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO 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/K/mol
# CpPrTr = 10.140 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPrTr = 6.0 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 34.730 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
llnl_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 *[GHS]
# SOPrTr = 11.0 + 1 H2O = 27.7 +/- 12 cal/K/mol
# CpPrTr = -34.4 + 1 H2O = -16.4 +/- 17 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 22.000 + 1 H2O = 40.012 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
llnl_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/K/mol
# CpPrTr = 4.876 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 19.074 cm3/mol
# mole wt. = 119.0534 g/mol
# date: 20. Jan. 1998

+ 1 Ni+2 + 1 Acetate- = + 1 NiAcetate+
log_k 1.4301 # +/- 999999
delta_h -2.397 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.021599E+2 1.388667E-1 -5.224459E+4 -3.255049E+2 3.425468E+6
llnl_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: [1964ARC/MON][1993SHO/KER]
# delfG0 = -101.121 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -131.487 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -11.700 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 73.682 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 17.132 cm3/mol
# mole wt. = 117.7379 g/mol
# date: 17. Aug. 1992

+ 1 Ni+2 + 2 Acetate- = + 1 Ni(Acetate)2
log_k 2.1778 # +/- 999999
delta_h -5.861 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.826941E+3 2.815497E-1 -1.060890E+5 -6.594510E+2 7.011982E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER][Unpublished]
# delfG0 = -190.411 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -251.141 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 0.700 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 169.415 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 68.532 cm3/mol

```

```

# mole wt. = 176.7824 g/mol
# date: 10. Feb. 2021
+ 1 Ni+2 + 3 Acetate- = + 1 Ni(Acetate)3-
log_k      3.9018 # +/- 999999
delta_h    -13.996 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  1.923644E+3    2.957789E-1    -1.151437E+5    -6.925752E+2    8.177836E+6
lnl_gamma  4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER] [Unpublished]
# delfGO = -281.033 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -375.466 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 1.900 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 275.499 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 125.802 cm3/mol
# mole wt. = 235.8269 g/mol
# date: 10. Feb. 2021

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
lnl_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1986SEW/RUA] [1997SVE/SHO]
# delfGO = -40.920 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -51.400 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -17.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 8.100 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma  4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1981TUR/WHI] [1997SVE/SHO]
# delfGO = -79.770 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -92.320 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -26.400 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 12.513 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma  4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfGO = -97.313 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -117.624 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -10.582 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 21.300 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfGO = -182.853 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -223.390 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 3.217 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 44.400 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL] as NiO(aq)
# data source: [1980TRE/LEB] [1997SHO/SAS_a] [2011PAL/BEN] [2016BRO/EKB]
# delfGO = -38.72 + 1 H2O = -95.41 +/- 2.1 kcal/mol
# delfHO = -51.44 + 1 H2O = -119.76 +/- 3.7 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -11 + 1 H2O = 6 +/- 10 cal/K/mol
# CpPrTr = -40 + 1 H2O = -22 +/- 15 cal/K/mol
# 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

```

```

# llnl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HNiO2-
# data source: [1980TRE/LEB][1997SHO/SAS]
# delfGO = -81.980 + 1 H2O = -138.668 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -118.760 + 1 H2O = -187.077 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -36.000 + 1 H2O = -19.288 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 48.000 + 1 H2O = 66.012 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
llnl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as NiO2-
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS]
# delfGO = -64.200 + 2 H2O = -177.576 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -101.850 + 2 H2O = -238.484 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -38.900 + 2 H2O = -5.476 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -17.500 + 2 H2O = 18.524 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
llnl_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: [1964PER][1980TRE/LEB][1997SHO/SAS]
# delfGO = -52.850 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -67.660 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -18.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 31.000 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
llnl_gamma 3.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfGO = -23.3 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -35.8 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 22.5 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -17.650 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
llnl_gamma 3.5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978COX][1988SHO/HEL]
# delfGO = -37.595 +/- 0.019 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -54.977 +/- 0.011 kcal/mol
# SOPrTr = -2.560 +/- 0.05 cal/K/mol
# CpPrTr = -32.763 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = -4.180 cm3/mol
# mole wt. = 17.0073 g/mol
# date: 29. Apr. 1997

+ 1 Pb+2 + 1 Acetate- = + 1 PbAcetate+
log_k 2.3999 # +/- 0.1
delta_h 0.1 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression 1.014157E+3 1.557265E-1 -5.860766E+4 -3.652577E+2 3.750196E+6
llnl_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1989G10][1993SHO/KER]
# delfGO = -97.28 +/- 0.3 kcal/mol
# delfHO = -115.9 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 36.0 +/- 5 cal/K/mol
# CpPrTr = 71.432 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 32.062 cm3/mol
# mole wt. = 266.2445 g/mol
# date: 16. Feb. 1991

+ 1 Pb+2 + 2 Acetate- = + 1 Pb(Acetate)2
log_k 3.3968 # +/- 0.4
delta_h 4.5 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression 1.738913E+3 2.628926E-1 -1.012575E+5 -6.247925E+2 6.375778E+6
gamma 3.0 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: [1989G10][1993SHO/KER][Unpublished]
# delfGO = -186.91 +/- 0.7 kcal/mol
# delfHO = -227.7 +/- 5 kcal/mol *[GHS]

```

```

# SOPPrTr = 76 +/- 16 cal/K/mol
# CpPrTr = 118.274 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 85.168 cm3/mol
# mole wt. = 325.2890 g/mol
# date: 10. Feb. 2021

+ 1 Pb+2 + 3 Acetate- = + 1 Pb(Acetate)3-
log k      5.7519 # +/- 0.8
delta_h    -1.122 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 2.436917E+3 3.709552E-1 -1.452047E+5 -8.745934E+2 9.722467E+6
lnln_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER] [Unpublished]
# delfGO = -278.4 +/- 1 kcal/mol
# delfHO = -349.472 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 88.600 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 268.080 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 144.337 cm3/mol
# mole wt. = 384.3335 g/mol
# date: 10. Feb. 2021

+ 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 [delfGO 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] [2013WOO/MIL]
# delfGO = -141.358 +/- 0.37 kcal/mol
# delfHO = -162.80 +/- 1.0 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 18.5 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = -34.285 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO 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]
# delfGO = -272.201 +/- 0.26 kcal/mol
# delfHO = -316.026 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 49.569 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -52.121 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO 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]
# delfGO = -172.30 +/- 0.6 kcal/mol
# delfHO = -203.898 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 26.700 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -42.478 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO 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]
# delfGO = -186.17 +/- 0.6 kcal/mol
# delfHO = -223.315 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 21.570 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -73.884 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997SVE/SHO_a] [Unpublished]
# delfGO = -8.7 +/- 4 kcal/mol
# delfHO = -6.6 +/- 4 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 30.22 +/- 1.3 cal/K/mol
# CpPrTr = 16 +/- 15 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1953HEM][1997SVE/SHO_a]
# delfGO = -20.084 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -21.945 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 55.800 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 36.477 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma  3.0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1953HEM][1997SVE/SHO_a]
# delfGO = -18.998 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -29.034 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 67.277 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 52.823 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma  4.0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO 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]
# delfGO = -39.175 +/- 0.21 kcal/mol
# delfHO = -39.21 +/- 0.5 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 26.40 +/- 1.6 cal/K/mol
# CpPrTr = 8.321 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO 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]
# delfGO = -71.359 +/- 0.22 kcal/mol
# delfHO = -78.43 +/- 1.8 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 45.1 +/- 6 cal/K/mol
# CpPrTr = 9.959 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma  4.0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO 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]
# delfGO = -102.533 +/- 0.32 kcal/mol
# delfHO = -118.66 +/- 3.0 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 57 +/- 10 cal/K/mol
# CpPrTr = -8.878 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma  4.0
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1963MIR/KUL][1969HEL][1972FED/SHI][1984SEW][1991MGA/FUR][1999LOT/OCH]
# delfGO = -132.95 +/- 1.9 kcal/mol
# delfHO = -157.8 +/- 4 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 70 +/- 10 cal/K/mol
# CpPrTr = -47.098 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPPr = 23.3 +/- 5 cal/K/mol
# CpPr = 7.0 +/- 7 cal/K/mol
# 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
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: [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 *[GHS]
# SOPPr = 8.0 +/- 4 cal/K/mol
# CpPr = 12 +/- 33 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPPr = 1.065 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 11.902 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_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 *[GHS]
# SOPPr = 37.138 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 19.100 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPPr = 65.665 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 40.000 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 54.900 cm3/mol
# mole wt. = 297.2354 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 1 HP04-2 + 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
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: [1972NRI_a][1997SVE/SHO_a]
# delfG0 = -268.09 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -299.1 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 35.1 +/- 6 cal/K/mol
# CpPr = 48 +/- 25 cal/K/mol
# 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
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: [1992NEH][1997SVE/SO_a][2009POW/BRO][2017HUM]
# delfG0 = -150.13 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -166.0 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 37.2 +/- 6 cal/K/mol
# CpPr = 45 +/- 25 cal/K/mol
# mole vol. = 17.079 cm3/mol
# mole wt. = 268.2171 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

+ 1 Pb+2 + 1 HP04-2 = + 1 PbHP04
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: [1972NR1_a][1974RAM/MAN][1997SVE/SO_a][2009POW/BRO]
# delfG0 = -270.96 +/- 1.8 kcal/mol
# delfH0 = -307.02 +/- 2.3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 18.03 +/- 4.7 cal/K/mol
# CpPr = -27 +/- 34 cal/K/mol
# 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
lnl_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/SO_a][1999LOT/OCH]
# delfG0 = -33.72 +/- 0.8 kcal/mol
# delfH0 = -47.59 +/- 2.5 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 49.8 +/- 8 cal/K/mol
# CpPr = 32 +/- 27 cal/K/mol
# 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 # +/- 99999
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/SO_a][1999LOT/OCH]
# delfG0 = -60.78 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -91.160 +/- 99999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 106.482 +/- 99999 cal/K/mol
# CpPr = 61.858 +/- 99999 cal/K/mol
# 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 # +/- 99999
analytical_expression 1.718907E+3 2.577445E-1 -1.014202E+5 -6.156760E+2 6.097921E+6
lnl_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/SO_a][1999LOT/OCH]
# delfG0 = -86.28 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -131.082 +/- 99999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 170.172 +/- 99999 cal/K/mol
# CpPr = 81.061 +/- 99999 cal/K/mol
# 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
lnl_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: [1910W00][1937CRA/BRO][1945PED][1960OL1][1964HUG][1975TUG/GAN][1978LIN][1980SYL/BRO]
# [1993CRU/VAN][1997SHO/SAS_a][2000KAN/AIZ][2009POW/BRO][2016BRO/EKB]
# delfG0 = -52.230 +/- 0.16 kcal/mol
# delfH0 = -54.94 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPPr = 30.91 +/- 1.4 cal/K/mol *[GHS]
# CpPr = 5.300 +/- 99999 cal/K/mol
# 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 PbO(aq)
# data source: [1939GAR/VEL][1960CAR/OL1][1975TUG/GAN][1978LIN][1980SYL/BRO][1993CRU/VAN]
# [1997SHO/SAS_a][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
# SOPPr = 15.03 + 1 H2O = 31.74 +/- 1.1 cal/K/mol *[GHS]

```

```

# CpPrTr = 5.813 + 1 H2O = 23.825 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_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 HPb02-
# data source: [1921GLA][1923HEY][1928RAN/SPE][1929TOP][1939GAR/VEL][1955VLC][1960CAR/OLI]
# [1961NYM/ROE][1975TUG/GAN][1978LIN][1987FER/GRE][1997SHO/SAS_a][20052IE/PAL]
# [2009POM/BRO][2016BRO/EKB]
# delfGO = -80.901 + 1 H2O = -137.589 +/- 0.14 kcal/mol
# delfHO = -104.05 + 1 H2O = -172.37 +/- 0.7 kcal/mol
# SOPrTr = 18.11 + 1 H2O = 34.82 +/- 2.4 cal/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = -33.786 + 1 H2O = -15.774 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_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 Pb02-2
# data source: [2001PER/HEF][1997SHO/SAS_a]
# delfGO = -66.11 + 2 H2O = -179.49 +/- 0.8 kcal/mol
# delfHO = -89.142 + 2 H2O = -225.776 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 18.504 + 2 H2O = 51.928 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -148.391 + 2 H2O = -112.368 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1970GAR/NAN][1972BON/HEF][1982ROH][1985G10][1989NYH/WIK]
# delfGO = -187.213 +/- 0.31 kcal/mol
# delfHO = -217.1 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 21 +/- 10 cal/K/mol
# CpPrTr = -32.038 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960VAN/KOL][1985G10][1997SVE/SHO_a]
# delfGO = -366.37 +/- 0.6 kcal/mol
# delfHO = -429.0 +/- 4 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 48 +/- 15 cal/K/mol
# CpPrTr = -40.961 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 26.775 cm3/mol
# mole wt. = 399.3272 g/mol
# date: 16. Oct. 2019

1 HP04-2 - 1 H+ = 1 P04-3
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
lnl_gamma 4
# -Range: 0 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1989WAG/EVA][1997SHO/SAS]
# delfGO = -243.2 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -305.3 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = -53.7 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -130 +/- 50 cal/K/mol
# mole vol. = -30.286 cm3/mol
# mole wt. = 94.9714 g/mol
# date: 27. Feb. 2019

+ 1 Rb+ + 1 Acetate- = + 1 RbAcetate
log k -0.0836 # +/- 0.7
delta_h 1.385 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 7.701423E+2 1.149937E-1 -4.476571E+4 -2.771935E+2 2.802598E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER][Unpublished]
# delfGO = -155.96 +/- 0.9 kcal/mol
# delfHO = -174.825 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 53.700 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 47.957 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 65.333 cm3/mol
# mole wt. = 144.5123 g/mol
# date: 10. Feb. 2021

```

```

+ 1 Rb+ + 2 Acetate- = + 1 Rb(Acetate)2-
log_k -0.7447 # +/- 1.5
delta_h 0.507 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.181776E+3 1.764091E-1 -7.047075E+4 -4.246886E+2 4.631694E+6
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: [1993SHO/KER] [Unpublished]
# delfG0 = -243.32 +/- 2.0 kcal/mol
# delfH0 = -291.893 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 68.300 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 117.008 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 122.237 cm3/mol
# mole wt. = 203.5568 g/mol
# date: 10. Feb. 2021

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
# S0PrTr = 54.200 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -19.190 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# S0PrTr = 48.600 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -20.000 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# S0PrTr = 31.600 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -16.000 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# S0PrTr = 56.300 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -17.020 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# S0PrTr = 32.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -27.500 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 20.700 cm3/mol
# mole wt. = 102.4751 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

+ 1 HS- - 1 H+ = + 1 S-2
log_k -18.9995 # +/- 2.0
delta_h 11.8 kcal/mol # +/- 1000
analytical_expression -8.145472E+2 -1.278295E-1 4.363748E+4 2.912365E+2 -2.964026E+6
lnln_gamma 5.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown

```

```

# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1986MYE][1982WAG/EVA][Unpublished]
# delFGO = 29.78 +/- 2.6 kcal/mol
# delFHO = 7.9 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = -31 +/- 11 cal/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = -31.817 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = -0.671 cm3/mol
# mole wt. = 32.0660 g/mol
# date: 6. Apr. 2020

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
lnln_gamma 4
-mass_balance S(-2)2
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delFGO = 19.0 +/- 2 kcal/mol
# delFHO = 7.2 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 6.8 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -65.100 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1952LAT][1988SHO/HEL]
# delFGO = -189.0 +/- 1 kcal/mol
# delFHO = -232.000 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 25.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -48.300 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_gamma 4
-mass_balance S(-2)3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delFGO = 17.6 +/- 2 kcal/mol
# delFHO = 6.2 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 15.8 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -57.900 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_gamma 4
-mass_balance S(+4)3
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1952LAT][1988SHO/HEL]
# delFGO = -229.0 +/- 1 kcal/mol
# delFHO = -279.000 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 33.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -43.500 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_gamma 4
-mass_balance S(-2)4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1988SHO/HEL]
# delFGO = 16.5 +/- 2 kcal/mol
# delFHO = 5.5 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 24.7 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -50.700 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_gamma 4
-mass_balance S(+4)4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO 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/K/mol
# CpPrTr = -26.400 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_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/K/mol
# CpPrTr = -43.600 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 47.001 cm3/mol
# mole wt. = 160.3300 g/mol
# date: 3. Jul. 1987

8 H+ + 5 SO3-2 - 4 H2O - 2.5 O2 = 1 S5O6-2
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
lnln_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/K/mol
# CpPrTr = -39.300 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 45.501 cm3/mol
# mole wt. = 256.3264 g/mol
# date: 11. Sep. 1997

+ 1 Cyanide- + 1 S2O3-2 - 1 SO3-2 = + 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
lnln_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/K/mol
# CpPrTr = -9.6 +/- 2 cal/K/mol
# mole vol. = 35.700 cm3/mol
# mole wt. = 58.0837 g/mol
# date: 7. Oct. 2019

+ 1 HSe- - 1 H+ = + 1 Se-2
log k      -14.9973 # +/- 0.2
delta_h    7.5 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression  -8.097574E+2  -1.280857E-1  4.389675E+4  2.902351E+2  -2.884242E+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: [1974NAU/RYZ][1982WAG/EVA][1990LEV/MYE][Unpublished]
# delfG0 = 30.96 +/- 0.6 kcal/mol
# delfH0 = 10.9 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -26 +/- 10 cal/K/mol
# CpPrTr = -83.497 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 4.849 cm3/mol
# mole wt. = 78.9600 g/mol
# date: 7. Apr. 2020

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
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 = -525.7 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -571.0 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 29.2 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -47.100 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
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] as HS103-
# data source: [1934FLI/WEL][1940ROL/ERV][1957GRE/PR1][1958GRE][1958SCH/MUL][1959ING][1959LAW]
# [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 *[GHS]
# SOPrTr = 4.0 + 1 H2O = 20.7 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = -8 + 1 H2O = 10 +/- 10 cal/K/mol

```

```

# 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
lnl_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 SiO3-2
# data source: [1959ING][1959LAG][1965AVE][1977BUS/MES][1981SJO/NOR][1983SJO/HAG]
# delfGO = -224.609 + 1 H2O = -281.297 +/- 0.47 kcal/mol
# delfHO = -264.0 + 1 H2O = -332.3 +/- 6 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -23 + 1 H2O = -6 +/- 20 cal/K/mol
# CpPrTr = -70 + 1 H2O = -52 +/- 20 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as Sn0(aq)
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS_a]
# delfGO = -53.60 + 1 H2O = -110.29 +/- 0.5 kcal/mol
# delfHO = -60.15 + 1 H2O = -128.47 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 14.800 + 1 H2O = 31.512 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -32.400 + 1 H2O = -14.388 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma 4 5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO 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_a]
# delfGO = -58.60 + 1 H2O = -115.29 +/- 0.7 kcal/mol
# delfHO = -59.800 + 1 H2O = -128.117 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 1.500 + 1 H2O = 18.212 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -62.510 + 1 H2O = -44.498 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as HSno2-
# data source: [1976BAE/MES][1997SHO/SAS_a]
# delfGO = -97.30 + 1 H2O = -153.99 +/- 0.4 kcal/mol
# delfHO = -122.080 + 1 H2O = -190.397 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 9.400 + 1 H2O = 26.112 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -45.400 + 1 H2O = -27.388 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO 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: [1973KLI/BAR][1982WAG/EVA][1984HOU/KEL][1985JAC/HEL_a][1987BRO/WAN][1988PHI/HAL]
# [1997SHO/SAS_a]
# delfGO = -113.97 + 1 H2O = -170.66 +/- 0.8 kcal/mol
# delfHO = -124.490 + 1 H2O = -192.807 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 26.000 + 1 H2O = 42.712 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -83.280 + 1 H2O = -65.268 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data] for Sn+4 + 4 H2O - 4 H+ = Sn(OH)4(aq)
# extrapolation algorithm: OptimB [2015SHV], SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as SnO2(aq)
# data source: [1952LAT][1963FEI/SCH][1973KLI/BAR][1984HOU/KEL][1985GAL][1985JAC/HEL_a]
# [1987BRO/WAN][1988PHI/HAL][1995SOR/DAD][2011RAI/YUI]
# delfGO = -112.94 + 2 H2O = -226.32 +/- 0.7 kcal/mol
# delfHO = -127.0 + 2 H2O = -263.6 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 14 + 2 H2O = 47 +/- 10 cal/K/mol
# CpPrTr = -49.784 + 2 H2O = -13.760 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_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_a][1998ODA/AMA]
# delfG0 = -158.5 + 2 H2O = -271.9 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -193.100 + 2 H2O = -329.734 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 1.000 + 2 H2O = 34.424 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -26.280 + 2 H2O = 9.744 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_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_a][1998ODA/AMA]
# delfG0 = -144.63 + 3 H2O = -314.69 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -198.930 + 3 H2O = -403.881 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = -65.100 + 3 H2O = -14.964 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -68.935 + 3 H2O = -14.899 +/- 999999 cal/K/mol
# 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    0.34 kcal/mol # +/- 0.7
analytical_expression  8.787524E+2   1.379700E-1   -4.931263E+4   -3.181483E+2   3.028509E+6
lnl_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 = -30.80 +/- 0.7 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 23.01 +/- 2.0 cal/K/mol
# CpPrTr = 1 +/- 30 cal/K/mol
# mole vol. = 15.600 cm3/mol
# mole wt. = 198.6140 g/mol
# date: 2. Apr. 2020

+ 1 Sn+2 + 2 Br- = + 1 SnBr2
log_k      1.9688 # +/- 0.21
delta_h    1.04 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 = -59.14 +/- 2.7 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 48.1 +/- 9 cal/K/mol
# CpPrTr = -11 +/- 50 cal/K/mol
# mole vol. = 51.200 cm3/mol
# mole wt. = 278.5180 g/mol
# date: 2. Apr. 2020

+ 1 Sn+2 + 3 Br- = + 1 SnBr3-
log_k      1.9271 # +/- 0.27
delta_h    2.0 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  1.900323E+3   2.939509E-1   -1.054705E+5   -6.881723E+2   6.270374E+6
lnl_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: [1997SVE/SHO_a][2012GAM/GAJ]
# delfG0 = -83.800 +/- 0.53 kcal/mol
# delfH0 = -87.2 +/- 4 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 71 +/- 13 cal/K/mol
# CpPrTr = -50 +/- 70 cal/K/mol
# mole vol. = 90.818 cm3/mol
# mole wt. = 358.4220 g/mol
# date: 2. Apr. 2020

+ 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
lnl_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 *[GHS]
# SOPPr = 17.46 +/- 1.3 cal/K/mol
# CpPrTr = -0.7 +/- 7 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPrTr = 32.57 +/- 1.6 cal/K/mol
# CpPrTr = -9.3 +/- 8 cal/K/mol
# 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
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: [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 *[GHS]
# SOPrTr = 41.6 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = -34.0 +/- 8 cal/K/mol
# 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
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 = -134.86 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -166.37 +/- 1.1 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 44.4 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = -67.1 +/- 3 cal/K/mol
# 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
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 = -81.072 +/- 0.47 kcal/mol
# delfH0 = -87.26 +/- 0.6 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 0.08 +/- 1.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 3.8 +/- 5 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPrTr = -6.29 +/- 1.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 6.2 +/- 5 cal/K/mol
# 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
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: [1997SVE/SHO_a][2012GAM/GAJ]
# delfG0 = -224.28 +/- 1.5 kcal/mol
# delfH0 = -262.37 +/- 1.5 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -27.20 +/- 1.3 cal/K/mol
# CpPrTr = -30.7 +/- 7 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPrTr = 38.80 +/- 5.0 cal/K/mol
# CpPrTr = 26 +/- 25 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPPr = 84.01 +/- 5.7 cal/K/mol
# CpPr = 76.0 +/- 70 cal/K/mol
# 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
lnl_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_b]
# delfG0 = -58.60 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -63.830 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 19.200 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = -12.900 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_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 *[GHS]
# SOPPr = -25.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = -8.700 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 SnOHC1
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 0.041
# -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 *[GHS]
# SOPPr = 30 +/- 20 cal/K/mol
# CpPr = -12.640 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPPr = 15.78 +/- 3.2 cal/K/mol
# CpPr = -35.5 +/- 20 cal/K/mol
# 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 delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1982WAG/EVA][1989SHO/HEL]
# delfG0 = -71.980 +/- 0.02 kcal/mol
# delfH0 = -77.194 +/- 0.02 kcal/mol
# SOPPr = 38.7 +/- 2 cal/K/mol
# CpPr = 46.600 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 38.501 cm3/mol
# mole wt. = 64.0648 g/mol
# date: 13. Jul. 1987

+ 1 Sr+2 + 1 Acetate- = + 1 SrAcetate+
log_k      1.0797 # +/- 0.3
delta_h    0.605 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.505586E+2 1.461216E-1 -5.550562E+4 -3.423833E+2 3.584544E+6

```

```

# llnl_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1964ARC/MON][1993SHO/KER]
# delfG0 = -224.50 +/- 0.5 kcal/mol
# delfH0 = -247.255 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 20.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 77.394 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 30.046 cm3/mol
# mole wt. = 146.6645 g/mol
# date: 17. Aug. 1992

+ 1 Sr+2 + 2 Acetate- = + 1 Sr(Acetate)2
log_k 1.5019 # +/- 0.3
delta_h 0.503 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.806234E+3 2.764994E-1 -1.067172E+5 -6.499130E+2 7.015784E+6
gamma 3.0 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used] by linear correlation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1993SHO/KER] [Unpublished]
# delfG0 = -313.35 +/- 0.6 kcal/mol
# delfH0 = -363.547 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 42.200 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 176.659 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 82.921 cm3/mol
# mole wt. = 205.7090 g/mol
# date: 10. Sep. 1992

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
llnl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1982MAJ/STU][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -165.800 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -169.790 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 11.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 11.840 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 0.041
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for Sr+2 + CO3-2 = SrCO3
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1984BUS/PLU][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -264.860 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -288.620 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 8.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -32.100 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
llnl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1982MAJ/STU][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -202.290 +/- 0.25 kcal/mol
# delfH0 = -210.670 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = -6.200 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 16.110 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
llnl_gamma 4.0
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -220.518 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -233.210 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 21.145 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 25.100 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1995SHO/KOR]
# delfG0 = -305.513 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -335.511 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]

```

```

# SOPrTr = 44.736 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 51.700 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1976BAE/MES][1997SVE/SHO]
# delfG0 = -173.30 +/- 0.3 kcal/mol
# delfH0 = -180.200 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 14.600 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -7.600 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 7.200 cm3/mol
# mole wt. = 104.6273 g/mol
# date: 12. Sep. 1997

+ 1 Sr+2 + 1 SO4-2 = + 1 SrSO4
log_k      2.1477 # +/- 0.3
delta_h    1.4 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  1.707779E+3   2.619914E-1   -9.474367E+4   -6.180086E+2   5.621672E+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: [1987REA/ARM][1990FEL/RAI][1997SVE/SHO_a][Unpublished]
# delfG0 = -315.62 +/- 0.4 kcal/mol
# delfH0 = -347.7 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 11.6 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = -28 +/- 32 cal/K/mol
# mole vol. = 4.682 cm3/mol
# mole wt. = 183.6836 g/mol
# date: 27. Aug. 2020

+ 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
lnln_gamma 5, 0
# -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][1969LOB/SAV][1971NAZ/ANT][1974VAS/VOR][1997SHO/SAS_a][2015PIC][2019PIC/PRO]
# delfG0 = -146.97 +/- 2.2 kcal/mol
# delfH0 = -164.5 +/- 6 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -58 +/- 20 cal/K/mol
# CpPrTr = 28.920 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_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 TiO+2
# data source: [1963LB/CHI][1974VAS/VOR][1993ZIE/JON][1997SHO/SAS_a][2009SCH/VOG][2019PIC/PRO]
# delfG0 = -150.30 + 1 H2O = -206.99 +/- 1.7 kcal/mol
# delfH0 = -159.4 + 1 H2O = -227.7 +/- 5 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -30 + 1 H2O = -13 +/- 14 cal/K/mol
# CpPrTr = -26.600 + 1 H2O = -8.588 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
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] as HTiO3+
# data source: [1963LB/CHI][1964NAB/LUK][1969LOB/SAV][1974VAS/VOR][1997SHO/SAS_a][2001KNA/D1B][2009SCH/VOG][2019PIC/PRO]
# delfG0 = -203.53 + 1 H2O = -260.22 +/- 3.0 kcal/mol
# delfH0 = -223.9 + 1 H2O = -292.2 +/- 5 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -12 + 1 H2O = 5 +/- 13 cal/K/mol
# CpPrTr = 3.360 + 1 H2O = 21.372 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
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] as HTiO3-
# data source: [1993ZIE/JON][1997SHO/SAS_a][2001KNA/D1B][2006RYZ/KOV][2009SCH/VOG]
# delfG0 = -241.11 + 2 H2O = -354.49 +/- 1.9 kcal/mol
# delfH0 = -279.3 + 2 H2O = -415.9 +/- 6 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = -16 + 2 H2O = 17 +/- 20 cal/K/mol
# CpPrTr = 10 + 2 H2O = 50 +/- 40 cal/K/mol
# 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 Acetate- = + 1 ZnAcetate+
log_k      1.9864 # +/- 0.6
delta_h    -1.7 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  9.936989E+2    1.540837E-1    -5.949507E+4    -3.572182E+2    4.071943E+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: [1991G10/DRU] [Unpublished]
# delfG0 = -126.18 +/- 0.8 kcal/mol
# delfH0 = -154.5 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = -2.0 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 127.300 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 16.376 cm3/mol
# mole wt. = 124.4345 g/mol
# date: 10. Feb. 2021

+ 1 Zn+2 + 2 Acetate- = + 1 Zn(Acetate)2
log_k      3.5697 # +/- 0.7
delta_h    -3.3 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  1.895338E+3    2.917060E-1    -1.119361E+5    -6.820335E+2    7.497143E+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: [1991G10/DRU] [Unpublished]
# delfG0 = -216.61 +/- 0.9 kcal/mol
# delfH0 = -272.3 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 20.5 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 210.0 +/- 1 cal/K/mol
# mole vol. = 68.928 cm3/mol
# mole wt. = 183.4790 g/mol
# date: 10. Feb. 2021

+ 1 Zn+2 + 3 Acetate- = + 1 Zn(Acetate)3-
log_k      4.7352 # +/- 0.8
delta_h    -9.3 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  2.046376E+3    3.141105E-1    -1.231020E+5    -7.353117E+2    8.629158E+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: [1991G10/DRU] [Unpublished]
# delfG0 = -306.47 +/- 0.9 kcal/mol
# delfH0 = -394.5 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 26.1 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 293 +/- 10 cal/K/mol
# mole vol. = 121.480 cm3/mol
# mole wt. = 242.5235 g/mol
# date: 10. Feb. 2021

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
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: [1986RUA/SEW] [1997SVE/SHO]
# delfG0 = -66.850 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -66.251 +/- 999999 kcal/mol
# S0PrTr = 23.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 19.900 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfG0 from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1963MAR/MAY] [1986RUA/SEW] [1987BOU/BAR] [1997SVE/SHO]
# delfG0 = -98.300 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -109.110 +/- 999999 kcal/mol
# S0PrTr = 27.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 34.700 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
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: [1986RUA/SEW] [1997SVE/SHO]
# delfG0 = -129.310 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -153.320 +/- 999999 kcal/mol
# S0PrTr = 25.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 41.970 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnln_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
# SOPPr = 36.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 43.300 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_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
# SOPPr = -21.800 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 24.438 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_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 *[GHS]
# SOPPr = -4.310 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 33.500 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPPr = 11.424 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 68.100 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_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
# SOPPr = 15.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 10.000 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 = ZnO(aq)
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] as ZnO(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
# SOPPr = -2.000 + 1 H2O = 14.712 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = -10.000 + 1 H2O = 8.012 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
lnl_gamma 4
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfG0 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]
# delfG0 = -110.720 + 1 H2O = -167.408 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -142.380 + 1 H2O = -210.697 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = -16.000 + 1 H2O = 0.712 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 20.000 + 1 H2O = 38.012 +/- 999999 cal/K/mol

```

```

# 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
l1n1_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
# S0PrTr = -40.000 + 2 H2O = -6.576 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = -15.000 + 2 H2O = 21.024 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = -26.400 + 2 H2O = 9.736 cm3/mol
# mole wt. = 97.3888 + 2 H2O = 133.4194 g/mol
# date: 2. Jun. 2016

+ 1 Zn+2 + 1 SeO4-2 = + 1 ZnSeO4
log_k      2.1624 # +/- 0.6
delta_h    4.7 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  1.717184E+3  2.649211E-1  -9.556589E+4  -6.210455E+2  5.622362E+6
gamma      3.0  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: [1934BAN][1974MOR/SEK][2005OLI/NOS][Unpublished]
# delfGO = -143.46 +/- 0.7 kcal/mol
# delfHO = -176.0 +/- 4 kcal/mol
# S0PrTr = 9 +/- 14 cal/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = -13 +/- 24 cal/K/mol
# mole vol. = 5.147 cm3/mol
# mole wt. = 208.3476 g/mol
# date: 6. Apr. 2020

#-----
# 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.
# Line 4: Enthalpy of reaction, delrHO (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, S0PrTr (cal/K/mol) at t = 25 deg C, P = 1 bar # +/- 2 sigma uncertainty.
# NOTE1: delfGO, delfHO or S0PrTr calculated from Gibbs-Duhem relation:
#         delfGO = delfHO - Tr*(S0PrTr - S0PrTr_elements)
#         are marked with *[GHS]
# Line 13: Isobaric heat capacity, CpPrTr (cal/K/mol) 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.
# NOTE2: Unknown values in Lines 3-6 and 10-14 are identified with 999999.
# Line 15: Molecular weight (g/mol).
# Line 16: Date that the thermodynamic data (log_k, delfGO, delfHO, S0PrTr, CpPrTr, and/or molar volume) were derived.
#####

#-----
# 1. Minerals
#-----

Aegirine
NaFe(SiO3)2 + 4 H+ + 2 H2O = + 1 Na+ + 1 Fe+3 + 2 Si(OH)4
log_k      3.1874 # +/- 0.8
delta_h    -15.30 kcal/mol # +/- 2.0
analytical_expression  -1.20877E+3  -1.647824E-1  7.222121E+4  4.305848E+2  -4.141679E+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 = -574.80 +/- 0.7 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -615.65 +/- 0.7 kcal/mol
# S0PrTr = 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. Nov. 2020

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
# S0PrTr = 69.148 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 72.550 +/- 999999 cal/K/mol
# 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      45.8240 # +/- 1.1
delta_h    -74.39 kcal/mol # +/- 1.5
analytical_expression -1.454456E+3   -2.056831E-1   9.793725E+4   5.204286E+2   -4.857681E+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
# SOPPr = 50.03 +/- 0.5 cal/K/mol
# CpPr = 50.665 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 = + 1 Al+3 + 3 NO3- + 6 H2O
log_k      7.0363 # +/- 1.4
delta_h    -5.65 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression -2.282781E+3   -3.474204E-1   1.292279E+5   8.271828E+2   -7.718611E+6
#
# -Range: 25 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax = 298.15K, assumed Cp = constant
# data source: [1982WAG/EVA]
# delFGO = -526.60 +/- 0.2 kcal/mol
# delFHO = -681.28 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 111.8 +/- 2 cal/K/mol
# CpPr = 103.5 +/- 2 cal/K/mol
# mole vol. = 179.763 cm3/mol
# mole wt. = 321.0874 g/mol
# date: 1. May. 2020

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 [delFGO 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]
# delFGO = -275.04 +/- 0.2 kcal/mol
# delFHO = -301.1 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 39.6 +/- 6 cal/K/mol
# CpPr = 21.922 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 32.000 cm3/mol
# mole wt. = 78.0034 g/mol
# date: 09. Feb. 2019

Alabandite
MnS + 1 H+ = + 1 Mn+2 + 1 HS-
log_k      0.0586 # +/- 0.6
delta_h    -5.75 kcal/mol # +/- 1,000.0
analytical_expression -1.028507E+3   -1.594204E-1   5.821739E+4   3.715791E+2   -3.432001E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1974MIL][1978HEL/DEL]
# delFGO = -52.16 +/- 0.5 kcal/mol
# delFHO = -51.00 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPPr = 19.20 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPr = 11.94 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 21.460 cm3/mol
# mole wt. = 87.0040 g/mol
# date: 1. May. 2020

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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1959KIN][1962KEL][1968BOU/PEA][1998CHA]
# delFGO = -246.25 +/- 0.5 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -266.320 +/- 0.46 kcal/mol
# SOPPr = 26.20 +/- 0.3 cal/K/mol
# CpPr = 21.52 +/- 0.2 cal/K/mol
# 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 delFGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1974OPE][1978HEL/DEL]
# delFGO = -886.31 +/- 1.0 kcal/mol
# delFHO = -939.720 +/- 1.0 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 49.510 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPr = 48.959 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO 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/K/mol
# CpPrTr = 48.959 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPrTr = 49.510 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 48.959 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 100.070 cm3/mol
# mole wt. = 262.2230 g/mol
# date: 18. Sep. 2018

AlCl3(s)
AlCl3 = 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 *[GHS]
# delfH0 = -168.65 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 26.12 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 21.781 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# -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/K/mol
# CpPrTr = 86.500 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPrTr = 81.88 +/- 0.3 cal/K/mol
# CpPrTr = 82.00 +/- 0.4 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 5.823 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 91.63 +/- 1.8 cal/K/mol
# mole vol. = 293.600 cm3/mol
# mole wt. = 414.2022 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

```

```

Amesite_14A
Mg4Al2(Al2Si2)O10(OH)8 + 20 H+ = + 4 Mg+2 + 4 Al+3 + 2 Si(OH)4 + 10 H2O
log_k      76.0143 # +/- 4
delta_h    -196.023 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -3.889319E+3    -5.856164E-1    2.490380E+5    1.388685E+3    -1.169441E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfGO used], polyhedral model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][Unpublished]
# delfGO = -1989.2 +/- 4 kcal/mol
# delfHO = -2145.625 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 108.900 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 136.143 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 205.400 cm3/mol
# mole wt. = 557.3694 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Amesite_7A
Mg2Al(AlSi)O5(OH)4 + 10 H+ = + 2 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 Si(OH)4 + 5 H2O
log_k      39.6931 # +/- 2
delta_h    -99.581 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.951131E+3    -2.935536E-1    1.251629E+5    6.968824E+2    -5.852913E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfGO used], polyhedral model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][Unpublished]
# delfGO = -992.3 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -1071.243 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 52.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 65.648 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 103.000 cm3/mol
# mole wt. = 278.6847 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

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 delfGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1955KIN_c][1978HEL/DEL_a][1997RIM_a]
# delfGO = -738.50 +/- 1.0 kcal/mol
# delfHO = -790.6 +/- 1 kcal/mol
# SOPPr = 56.00 +/- 0.6 cal/K/mol
# CpPr = 50.698 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], phase relations & calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1962BAR][1978HEL/DEL]
# delfGO = -674.989 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -714.678 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 41.900 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 39.298 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 89.100 cm3/mol
# mole wt. = 202.1387 g/mol
# date: 5. May. 1978

Analcime_11
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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -739.0 +/- 1 kcal/mol
# delfHO = -790.9 +/- 2 kcal/mol
# SOPPr = 56.7 +/- 8 cal/K/mol
# CpPr = 49.776 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2010VIE][2011ART/SAS_a][2014ODA/WAL]
# delfGO = -1274.8 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -1365.8 +/- 3 kcal/mol
# SOPPr = 102.8 +/- 12 cal/K/mol
# CpPr = 88.908 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1946NAY][1983BOW/HEL][1998CHA]
# delfGO = -212.68 +/- 0.8 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -225.93 +/- 0.8 kcal/mol
# SOPPr = 11.929 +/- 0.08 cal/K/mol
# CpPr = 13.49 +/- 0.3 cal/K/mol
# 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 delfGO used], calorimetry and phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][1995ROB/HEM][1997RIM_a]
# delfGO = -583.60 +/- 0.5 kcal/mol
# delfHO = -619.02 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPPr = 21.84 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPr = 28.94 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 51.520 cm3/mol
# mole wt. = 162.0456 g/mol
# date: 7. Sep. 2016

Andradite
Ca3Fe2(SiO4)3 + 12 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Fe+3 + 3 Si(OH)4
log k 34.0843 # +/- 1.3
delta_h -80.207 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.627424E+3 -3.858904E-1 1.616761E+5 9.413089E+2 -8.436900E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], phase relations, SSAS end-member
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfGO = -1296.82 +/- 1.0 kcal/mol
# delfHO = -1380.345 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 70.130 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 83.446 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 131.850 cm3/mol
# mole wt. = 508.1773 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 delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978COX][1982DEK]
# delfGO = -194.31 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -219.871 +/- 0.22 kcal/mol
# SOPPr = 35.490 +/- 0.10 cal/K/mol
# CpPr = 24.67 +/- 0.5 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978HEL/DEL][1982WAG/EVA]
# delfGO = -315.93 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -342.76 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPPr = 25.5 +/- 2 cal/K/mol
# CpPr = 23.82 +/- 0.2 cal/K/mol
# 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 delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1987GAR/PAR]
# delfGO = -314.02 +/- 0.3 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -340.60 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPPr = 25.908 +/- 0.04 cal/K/mol
# CpPr = 23.950 +/- 0.14 cal/K/mol
# 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 delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1987GAR/PAR]
# delfGO = -312.89 +/- 0.3 kcal/mol
# delfHO = -339.65 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPPr = 25.908 +/- 0.04 cal/K/mol
# CpPr = 23.671 +/- 0.14 cal/K/mol

```

```

# 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 delFGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL]
# delFGO = -1147.16 +/- 1.0 kcal/mol
# delFHO = -1232.195 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 95.200 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 93.583 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 27.0618 # +/- 2
delta_h -77.9 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -1.848062E+3 -2.737212E-1 1.182979E+5 6.578465E+2 -6.030333E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delFGO = -954.1 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -1007.6 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 49.1 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 50.353 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 100.790 cm3/mol
# mole wt. = 278.2072 g/mol
# date: 1. May. 2020

Anthophyllite
Mg7Si8O22(OH)2 + 14 H+ + 8 H2O = + 7 Mg+2 + 8 Si(OH)4
log_k 68.8218 # +/- 4
delta_h -137.338 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -4.767139E+3 -6.448375E-1 3.026871E+5 1.696575E+3 -1.645133E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delFGO = -2715.43 +/- 1.0 kcal/mol
# delFHO = -2888.849 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 128.600 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 155.475 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 264.400 cm3/mol
# mole wt. = 780.8204 g/mol
# date: 5. May. 1978

Antigorite
Mg48Si34O85(OH)62 + 96 H+ = + 48 Mg+2 + 34 Si(OH)4 + 11 H2O
log_k 485.8835 # +/- 24
delta_h -896.307 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.651856E+4 -3.654633E+0 1.676835E+6 9.473442E+3 -8.635894E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1997RIM_a]
# delFGO = -15808 +/- 46 kcal/mol
# delFHO = -17071.689 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 861.360 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 1059.129 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 1749.130 cm3/mol
# mole wt. = 4535.9486 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 delFGO used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS]
# delFGO = -269.683 +/- 0.16 kcal/mol
# delFHO = -288.556 +/- 0.37 kcal/mol
# SOPrTr = 21.560 +/- 1.36 cal/K/mol
# CpPrTr = 19.4 +/- 8 cal/K/mol
# 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 19.7102 # +/- 0.9
delta_h -31.17 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression -1.187307E+3 -1.810574E-1 7.029692E+4 4.304784E+2 -3.552735E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1978ROB/HEM]
# delFGO = -613.851 +/- 0.16 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -698.043 +/- 0.15 kcal/mol
# SOPrTr = 55.670 +/- 0.16 cal/K/mol
# CpPrTr = 70.759 +/- 0.18 cal/K/mol
# mole vol. = 96.900 cm3/mol
# mole wt. = 196.6794 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Atacamite
Cu2(OH)3Cl + 3 H+ = + 2 Cu+2 + 1 Cl- + 3 H2O
log_k 7.4343 # +/- 0.15

```

```

delta_h -16.92 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression -8.858130E+2 -1.422215E-1 5.028344E+4 3.218656E+2 -2.616697E+6
#
# -Range: 0.01 - 235 deg C
#
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for Atacamite = 2 Cu+2 + Cl- + 3 OH-
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 508K
# data source: [1949NAS/TAM][1960BAR/BET][1986PAR/HYD][1997BIS/KIS]
# delfGO = -159.95 +/- 0.5 kcal/mol
# delfHO = -196.56 +/- 0.5 kcal/mol *
# SOPPr = 40.100 +/- 0.14 cal/K/mol
# CpPr = 38.0 +/- 1 cal/K/mol
# mole vol. = 56.839 cm3/mol
# mole wt. = 213.5666 g/mol
# date: 19. Nov. 2020

Azurite
Cu3(OH)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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982WAG/EVA]
# delfGO = -334.4 +/- 3 kcal/mol
# delfHO = -390.1 +/- 2 kcal/mol
# SOPPr = 67.0 +/- 5 cal/K/mol
# CpPr = 58.934 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfGO = -285.07 +/- 0.5 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -303.99 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPPr = 12.90 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPr = 14.96 +/- 2.1 cal/K/mol
# 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
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfGO = -205.44 +/- 1.6 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -226.17 +/- 1.5 kcal/mol
# SOPPr = 25.60 +/- 2.0 cal/K/mol
# CpPr = 24.28 +/- 1.0 cal/K/mol
# 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
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1995PAR]
# delfGO = -124.360 +/- 0.40 kcal/mol
# delfHO = -131.000 +/- 0.40 kcal/mol
# SOPPr = 17.225 +/- 0.09 cal/K/mol
# CpPr = 11.36 +/- 0.1 cal/K/mol
# 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
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1968ROB/WAL]
# delfGO = -325.3 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -352.1 +/- 2 kcal/mol
# SOPPr = 31.60 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPr = 24.32 +/- 0.2 cal/K/mol
# 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
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1995PAR][1998CHA]
# delfGO = 0 +/- 0 kcal/mol

```

```

# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 14.93 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 6.54 +/- 1.3 cal/K/mol
# mole vol. = 37.936 cm3/mol
# mole wt. = 137.3270 g/mol
# date: 20. Jun. 2016

Beidel_Ca
CaO.165(A12)(A10.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.165 Ca+2 + 2.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log k 4.8221 # +/- 2.3
delta_h -48.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.277062E+3 -3.253657E-1 1.386049E+5 8.088383E+2 -7.770313E+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 = -1283.21 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1370.6 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 66.2 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 74.430 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 136.195 cm3/mol
# mole wt. = 366.5622 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Beidel_Ca(avg)
CaO.2(Mg0.1Fe0.3Al1.65)(A10.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.2 Ca+2 + 0.1 Mg+2 + 0.3 Fe+3 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k 6.1105 # +/- 2.3
delta_h -52.6 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.322172E+3 -3.326804E-1 1.414311E+5 8.250170E+2 -7.853243E+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 = -1261.02 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1347.4 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 70.7 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.292 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 136.779 cm3/mol
# mole wt. = 377.5735 g/mol
# date: 24. Apr. 2020

Beidel_CaFe(avg)
CaO.2(Fe0.4Al1.65)(A10.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.2 Ca+2 + 0.1 Fe+2 + 0.3 Fe+3 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k 5.5578 # +/- 2.3
delta_h -51.9 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.318770E+3 -3.323410E-1 1.410728E+5 8.238240E+2 -7.844568E+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][1981W00][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1253.11 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1339.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 71.3 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.578 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 136.854 cm3/mol
# mole wt. = 380.7277 g/mol
# date: 7. May. 2020

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 2.8463 # +/- 2.3
delta_h -43.6 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.263808E+3 -3.222529E-1 1.372419E+5 8.042246E+2 -7.785463E+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 = -1287.11 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1374.8 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 70.4 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.228 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 143.452 cm3/mol
# mole wt. = 403.8081 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Beidel_Cs(avg)
Cs0.4(Mg0.1Fe0.3Al1.65)(A10.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 Cs+ + 0.1 Mg+2 + 0.3 Fe+3 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k 3.7135 # +/- 2.3
delta_h -46.4 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.305926E+3 -3.288858E-1 1.397674E+5 8.193608E+2 -7.870831E+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 = -1265.75 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1352.4 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 75.8 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 78.471 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 145.576 cm3/mol
# mole wt. = 422.7201 g/mol
# date: 1. May. 2020

Beidel_CsFe(avg)
Cs0.4(Fe0.4Al1.65)(A10.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 Cs+ + 0.1 Fe+2 + 0.3 Fe+3 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k 3.1609 # +/- 2.3
delta_h -45.5 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.302708E+3 -3.285710E-1 1.394200E+5 8.182335E+2 -7.862834E+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][1981W00][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1257.84 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1344.3 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 76.4 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 78.758 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 145.651 cm3/mol
# mole wt. = 425.8743 g/mol
# date: 7. May. 2020

```

```

Beidel_Fe
Fe0.165(AI2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.165 Fe+2 + 2.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log k 4.1175 # +/- 2.3
delta_h -48.6 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.285611E+3 -3.264136E-1 1.390273E+5 8.116995E+2 -7.800481E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1265.98 +/- 2.7 kcal/mol
# delfH0 = -1353.1 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 66.6 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = 74.731 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 135.433 cm3/mol
# mole wt. = 369.1640 g/mol
# date: 23. Apr. 2020

Beidel_Fe(avg)
Fe0.2(Mg0.1Fe0.3Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.2 Fe+2 + 0.1 Mg+2 + 0.3 Fe+3 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k 5.2822 # +/- 2.3
delta_h -52.4 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.332293E+3 -3.339229E-1 1.419358E+5 8.283995E+2 -7.888729E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1240.10 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1326.1 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 71.2 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.657 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 135.855 cm3/mol
# mole wt. = 380.7273 g/mol
# date: 24. Apr. 2020

Beidel_FeX2(avg)
Fe0.2(Fe0.4Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.3 Fe+2 + 0.3 Fe+3 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k 4.7075 # +/- 2.3
delta_h -51.6 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.328930E+3 -3.335930E-1 1.415719E+5 8.272220E+2 -7.880005E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1232.22 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1318.0 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 71.8 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.943 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 135.930 cm3/mol
# mole wt. = 383.8815 g/mol
# date: 7. May. 2020

Beidel_K
K0.33(AI2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 K+ + 2.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log k 3.6555 # +/- 2.3
delta_h -44.9 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.257291E+3 -3.219566E-1 1.368740E+5 8.021171E+2 -7.727353E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1285.28 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1373.1 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 68.3 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.084 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 140.115 cm3/mol
# mole wt. = 372.8517 g/mol
# date: 23. Apr. 2020

Beidel_K(avg)
K0.4(Mg0.1Fe0.3Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 K+ + 0.1 Mg+2 + 0.3 Fe+3 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k 4.7031 # +/- 2.3
delta_h -47.8 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.298154E+3 -3.285436E-1 1.393334E+5 8.168481E+2 -7.800767E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1263.52 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1350.4 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 73.3 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 78.297 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 141.531 cm3/mol
# mole wt. = 385.1972 g/mol
# date: 7. May. 2020

Beidel_KFe(avg)
K0.4(Fe0.4Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 K+ + 0.1 Fe+2 + 0.3 Fe+3 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k 4.1504 # +/- 2.3
delta_h -47.1 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.294484E+3 -3.281695E-1 1.389591E+5 8.155598E+2 -7.791085E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1255.61 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1342.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 73.9 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 78.583 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 141.606 cm3/mol
# mole wt. = 388.3514 g/mol
# date: 7. May. 2020

Beidel_Mg
Mg0.165(AI2)(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 4.6787 # +/- 2.3
delta_h -49.5 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.291024E+3 -3.269423E-1 1.395073E+5 8.135887E+2 -7.814059E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]

```

```

# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1279.51 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1367.0 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 65.7 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 74.258 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 135.308 cm3/mol
# mole wt. = 363.9596 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Beidel_Mg(avg)
Mg0.2(Mg0.1Fe0.3Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.3 Mg+2 + 0.3 Fe+3 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k 5.9331 # +/- 2.3
delta_h -53.5 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.338842E+3 -3.345621E-1 1.425077E+5 8.306856E+2 -7.905136E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1256.54 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1342.9 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 70.1 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.084 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 135.704 cm3/mol
# mole wt. = 374.4189 g/mol
# date: 1. May. 2020

Beidel_MgFe(avg)
Mg0.2(Fe0.4Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.2 Mg+2 + 0.1 Fe+2 + 0.3 Fe+3 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k 5.3870 # +/- 2.3
delta_h -52.6 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.350132E+3 -3.358905E-1 1.431216E+5 8.346267E+2 -7.964725E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981W00][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1248.62 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1334.8 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 70.7 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.370 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 135.780 cm3/mol
# mole wt. = 377.5731 g/mol
# date: 7. May. 2020

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 4.6793 # +/- 2.3
delta_h -47.0 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.276803E+3 -3.240165E-1 1.383593E+5 8.088651E+2 -7.774476E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1282.26 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1370.0 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 67.6 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 75.483 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 137.578 cm3/mol
# mole wt. = 367.5359 g/mol
# date: 30. Nov. 2020

Beidel_Na(avg)
Na0.4(Mg0.1Fe0.3Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 Na+ + 0.1 Mg+2 + 0.3 Fe+3 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k 5.9436 # +/- 2.3
delta_h -50.5 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.321847E+3 -3.310459E-1 1.411339E+5 8.250462E+2 -7.858133E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1259.86 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1346.6 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 72.4 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 77.569 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 138.455 cm3/mol
# mole wt. = 378.7538 g/mol
# date: 30. Nov. 2020

Beidel_NaFe(avg)
Na0.4(Fe0.4Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 Na+ + 0.1 Fe+2 + 0.3 Fe+3 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k 5.3910 # +/- 2.3
delta_h -49.7 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.318552E+3 -3.307206E-1 1.407820E+5 8.238915E+2 -7.849865E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981W00][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1251.95 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1338.4 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 73.0 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 77.855 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 138.530 cm3/mol
# mole wt. = 381.9080 g/mol
# date: 30. Nov. 2020

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 -1.8652 # +/- 2.3
delta_h -39.1 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.242946E+3 -3.202552E-1 1.347285E+5 7.965721E+2 -7.679044E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1276.80 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -1369.5 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 75.1 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 82.066 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 143.931 cm3/mol

```

```

# mole wt. = 365.9019 g/mol
# date: 30. Nov. 2020
Beidel_NH4 (avg)
(NH4)0.4(Mg0.1Fe0.3Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 NH4+ + 0.1 Mg+2 + 0.3 Fe+3 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -1.9878 # +/- 2.3
delta_h -40.9 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.280952E+3 -3.265021E-1 1.367478E+5 8.101881E+2 -7.742948E+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 = -1253.24 +/- 2.6 kcal/mol
# delFH0 = -1345.9 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 81.6 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 85.548 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 146.156 cm3/mol
# mole wt. = 376.7732 g/mol
# date: 30. Nov. 2020
Beidel_NH4Fe (avg)
(NH4)0.4(Fe0.4Al1.65)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 NH4+ + 0.1 Fe+2 + 0.3 Fe+3 + 2.1 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log_k -2.5405 # +/- 2.3
delta_h -40.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.277588E+3 -3.261681E-1 1.363917E+5 8.090089E+2 -7.734398E+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][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1245.33 +/- 2.6 kcal/mol
# delFH0 = -1337.8 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 82.2 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 85.834 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 146.232 cm3/mol
# mole wt. = 379.9274 g/mol
# date: 30. Nov. 2020
Beidel_SBIId-1 # Black Jack Mine. Parent mineral for other beidellites.
K0.104Ca0.185(Mg0.09Fe0.112Al1.812)(Al0.426Si3.574)O10(OH)2 + 7.704 H+ + 2.296 H2O = + 0.185 Ca+2 + 0.104 K+ + 0.09 Mg+2 + 0.112 Fe+3 +
2.238 Al+3 + 3.574 Si(OH)4
log_k 7.5324 # +/- 1.7
delta_h -53.32 kcal/mol # +/- 2.5
analytical_expression -2.342872E+3 -3.347669E-1 1.431441E+5 8.324303E+2 -7.972711E+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 *[GHS]
# delFH0 = -1367.28 +/- 1.6 kcal/mol
# SOPPr = 70.150 +/- 0.10 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.122 +/- 0.08 cal/K/mol
# mole vol. = 137.980 cm3/mol
# mole wt. = 374.6937 g/mol
# date: 7. May. 2020
Berndtite
SnS2 + 2 H+ = + 1 Sn+4 + 2 HS-
log_k -30.0606 # +/- 1
delta_h 22.200 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.872071E+3 -2.980099E-1 9.726761E+4 6.762956E+2 -6.117704E+6
#
# -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 *[GHS]
# delFH0 = -36.7 +/- 1 kcal/mol
# SOPPr = 20.900 +/- 0.04 cal/K/mol
# CpPrTr = 16.760 +/- 0.15 cal/K/mol
# mole vol. = 40.960 cm3/mol
# mole wt. = 182.8420 g/mol
# date: 7. May. 2020
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
# SOPPr = 72.302 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 71.372 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# SOPPr = 8.890 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPrTr = 12.97 +/- 0.1 cal/K/mol
# mole vol. = 19.535 cm3/mol
# mole wt. = 59.9883 g/mol
# date: 29. Apr. 1997
Bonattite
CuS04(H2O)3 = + 1 Cu+2 + 1 S04-2 + 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 390K
# data source: [1960KEL][1968ZAH/BAU][1982WAG/EVA]
# delFGO = -334.60 +/- 0.2 kcal/mol
# delFHO = -402.58 +/- 0.6 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 52.9 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 49.000 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 79.871 cm3/mol
# mole wt. = 213.6552 g/mol
# date: 25. Jun. 2019

Bornite
Cu5FeS4 + 4 H+ = + 4 Cu+ + 1 Cu+2 + 1 Fe+2 + 4 HS-
log_k -102.4340 # +/- 1.0
delta_h 126.692 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -4.263668E+3 -6.524351E-1 2.076308E+5 1.542334E+3 -1.395806E+7
#
# -Range: 0.01 - 212 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1970PAN/KIN][1978HEL/DEL]
# delFGO = -86.70 +/- 1.0 kcal/mol
# delFHO = -79.922 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 99.290 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 58.700 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 98.600 cm3/mol
# mole wt. = 501.8410 g/mol
# date: 7. May. 2020

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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1978COX][1998CHA]
# delFGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delFHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPPr = 1.410 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPrTr = 2.70 +/- 0.2 cal/K/mol
# 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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL], Tmax for Cp = 333K
# data source: [1971STU/PRO][1978COX]
# delFGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delFHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPPr = 36.379 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPrTr = 18.076 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 17.1050 # +/- 0.2
delta_h -27.69 kcal/mol # +/- 0.8
analytical_expression -3.410670E+2 -5.007539E-2 2.373225E+4 1.228335E+2 -9.280195E+5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1929TRA/NOU][1968ROB/WAL][1975KIN/FER][1977McG/HOS][1996BRO/DRU][2008X10]
# delFGO = -198.55 +/- 0.9 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -220.31 +/- 0.8 kcal/mol
# SOPPr = 15.1 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 18.47 +/- 0.1 cal/K/mol
# mole vol. = 24.630 cm3/mol
# mole wt. = 58.3196 g/mol
# date: 4. Sep. 2020

Brushite
CaHPO4(H2O)2 = 1 Ca+2 + 1 HPO4-2 + 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not given
# data source: [1982WAG/EVA]
# delFGO = -514.94 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -574.47 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPPr = 45.28 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 47.10 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 74.123 cm3/mol
# mole wt. = 172.0877 g/mol
# date: 1. Dec. 2017

Buddingtonite
NH4AlSi3O8 + 4 H+ + 4 H2O = + 1 NH4+ + 1 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k 1.1006 # +/- 1
delta_h -15.45 kcal/mol # +/- 1.8
analytical_expression -1.411084E+3 -1.943587E-1 8.475019E+4 5.020622E+2 -5.017442E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry & estimation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][2004HOV/HAR_a][2004HOV/HAR_b]
# delFGO = -846.0 +/- 1 kcal/mol *[GHS]

```

```

#   delfH0 = -919.25 +/- 1.0 kcal/mol
#   S0PrTr = 56.0 +/- 1 cal/K/mol
#   CpPrTr = 57.476 +/- 999999 cal/K/mol
#   mole vol. = 112.205 cm3/mol
#   mole wt. = 257.2715 g/mol
#   date: 22. Jan. 2021

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 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -50.57 +/- 0.1 kcal/mol
# delfH0 = -57.30 +/- 0.1 kcal/mol
# S0PrTr = 9.080 +/- 0.04 cal/K/mol
# CpPrTr = 10.591 +/- 999999 cal/K/mol
# 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_b][1960KEL][1961GRJ/HER]
# delfG0 = -4412.865 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# delfH0 = -4643.480 +/- 999999 kcal/mol
# S0PrTr = 249.70 +/- 1.5 cal/K/mol
# CpPrTr = 259.279 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# S0PrTr = 87.20 +/- 5.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 99.69 +/- 6.8 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# S0PrTr = 109.94 +/- 4.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 123.64 +/- 6.8 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# S0PrTr = 114.10 +/- 3.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 128.42 +/- 6.8 cal/K/mol
# mole vol. = 187.522 cm3/mol
# mole wt. = 358.2376 g/mol
# date: 24. Jan. 2019

C2F # Ferrite
Ca2Fe2O5 + 10 H+ = + 2 Ca+2 + 2 Fe+3 + 5 H2O
log k      56.8143 # +/- 2.4
delta_h    -113.6 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -1.564900E+3 -2.452024E-1 1.058445E+5 5.618435E+2 -4.482540E+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 *[GHS]
# delfH0 = -511.30 +/- 0.2 kcal/mol
# S0PrTr = 45.10 +/- 0.3 cal/K/mol
# CpPrTr = 46.101 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 67.180 cm3/mol
# mole wt. = 271.8470 g/mol
# date: 8. May. 2020

```

```

C2FH75
Ca2Fe2(OH)10(H2O)2.5 + 10 H+ = + 2 Ca+2 + 2 Fe+3 + 12.5 H2O
log_k      55.9111 # +/- 11
delta_h    -97.296 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.615236E+3 -2.506075E-1 1.040852E+5 5.844108E+2 -4.384489E+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 = -1039.963 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 120.180 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 141.929 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 189.590 cm3/mol
# mole wt. = 406.9610 g/mol
# date: 8. May. 2020

#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
# SOPPr = 124.100 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 148.365 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# SOPPr = 30.50 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPr = 30.732 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# SOPPr = 29.232 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 26.740 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# SOPPr = 49.10 +/- 0.3 cal/K/mol
# CpPr = 50.135 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# SOPPr = 40.30 +/- 0.3 cal/K/mol
# CpPr = 41.002 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 73.180 cm3/mol
# mole wt. = 228.3165 g/mol
# date: 08. Oct. 2015

C4AF
Ca4Al2Fe2O10 + 20 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 2 Fe+3 + 10 H2O
log_k      140.7924 # +/- 999999
delta_h    -269.230 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.155050E+3 -4.953512E-1 2.232756E+5 1.131035E+3 -9.245401E+6
#
# -Range: Not given

```

```

# gflag: 1 [reported delfG0 used], Tmax for Cp not reported
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not given
# data source: [1985BAB/MAT]
# delfG0 = -1144.608 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# delfH0 = -1214.200 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 78.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 94.678 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 130.200 cm3/mol
# mole wt. = 485.9630 g/mol
# date: 8. May. 2020

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
# SOPPr = 141 +/- 15 cal/K/mol *[GHS]
# CpPr = 201 +/- 10 cal/K/mol
# 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 1.538889E+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
# SOPPr = 157 +/- 15 cal/K/mol *[GHS]
# CpPr = 220 +/- 10 cal/K/mol
# 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_A109 = Monosulfate_A1105 - 1.5 H2O
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 328K
# data source: [1943WEL/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 *[GHS]
# SOPPr = 228 +/- 14 cal/K/mol
# CpPr = 278 +/- 10 cal/K/mol
# 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 + 14 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Fe+3 + 20 H2O
log_k 97.8376 # +/- 4
delta_h -146 kcal/mol # +/- 30
analytical_expression -2.110685E+3 -3.297591E-1 1.393921E+5 7.685859E+2 -5.555484E+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][1979EDE/SAT_a][2011DIL]
# delfG0 = -1537.0 +/- 6 kcal/mol
# delfH0 = -1763 +/- 30 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 190 +/- 100 cal/K/mol
# CpPr = 233.047 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 286.000 cm3/mol
# mole wt. = 618.1994 g/mol
# date: 8. May. 2020

Ca(NO3)2(s)
Ca(NO3)2 = + 1 Ca+2 + 2 NO3-
log_k 5.5415 # +/- 1.0
delta_h -4.42 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression -1.350954E+3 -2.171391E-1 7.614706E+4 4.920172E+2 -4.589055E+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 +/- 0.6 kcal/mol *[GHS]
# delfH0 = -224.28 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPPr = 46.2 +/- 2 cal/K/mol
# CpPr = 35.696 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 65.635 cm3/mol
# mole wt. = 164.0878 g/mol
# date: 8. May. 2020

CA
CaAl2O4 + 8 H+ = 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 *[GHS]
# delfH0 = -556.00 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPPr = 27.30 +/- 0.2 cal/K/mol

```

```

# CpPrTr = 28.822 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 53.829 cm3/mol
# mole wt. = 158.0386 g/mol
# date: 1. Dec. 2017

CA2
CaAl407 + 14 H+ = 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 delfGO used] Phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1981ELI/ELI]
# delfGO = -901.94 +/- 0.7 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -950.70 +/- 0.7 kcal/mol
# SOPrTr = 45.11 +/- 0.4 cal/K/mol
# CpPrTr = 47.700 +/- 999999 cal/K/mol
# 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      16.9721 # +/- 0.2
delta_h    -24.59 kcal/mol # +/- 1.0
analytical_expression -1.540585E+3 -2.434557E-1 9.185953E+4 5.585543E+2 -5.338281E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry & estimation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfGO = -158.7 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -163.29 +/- 1.0 kcal/mol
# SOPrTr = 31.0 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 17.9 +/- 2 cal/K/mol
# mole vol. = 106.418 cm3/mol
# mole wt. = 199.8860 g/mol
# date: 2. Apr. 2020

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 delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 390K
# data source: [1986MEI/GRO][1987GAR/PAR]
# delfGO = -297.34 +/- 0.5 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -335.56 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 46.58 +/- 0.8 cal/K/mol
# CpPrTr = 40.920 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO]
# delfGO = -178.80 +/- 0.4 kcal/mol
# delfHO = -190.20 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 25.00 +/- 1.0 cal/K/mol
# CpPrTr = 17.38 +/- 0.1 cal/K/mol
# mole vol. = 52.338 cm3/mol
# mole wt. = 110.9840 g/mol
# date: 6. Jul. 2015

CAH10
CaAl2(OH)8(H2O)6 + 8 H+ = 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 [delfGO from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 303K
# data source: [1958BUT/TAY][1958CAR][1959PER/TAY][1966FAU][1978HEL/DEL_a]
# [1979EDE/SAT_a][2012LOT/PEL]
# delfGO = -1106.55 +/- 0.8 kcal/mol
# delfHO = -1270.2 +/- 15 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 130 +/- 50 cal/K/mol
# CpPrTr = 122.594 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfGO = -127.41 +/- 0.5 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -128.30 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 34.725 +/- 0.05 cal/K/mol
# CpPrTr = 18.35 +/- 0.1 cal/K/mol
# 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 delfGO used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1961KEL/KIN][1978HEL/DEL][1982PLU/BUS]
# delfGO = -269.880 +/- 0.21 kcal/mol
# delfHO = -288.552 +/- 0.37 kcal/mol
# SOPrTr = 22.150 +/- 2.03 cal/K/mol
# CpPrTr = 19.57 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 9.94 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 6.276 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 26.195 cm3/mol
# mole wt. = 40.0780 g/mol
# date: 29. Oct. 2015

Cassiterite
SnO2 + 4 H+ = + 1 Sn+4 + 2 H2O
log_k      -8.4190 # +/- 0.3
delta_h    -4.6 kcal/mol # +/- 15
analytical_expression  -6.423202E+2      -1.005555E-1      3.399322E+4      2.304122E+2      -1.801998E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1929HUT/MAG][1936KAP/ZIL][1978COX][2004GUR/GAV]
# delfGO = -124.271 +/- 0.13 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -138.810 +/- 0.10 kcal/mol
# SOPrTr = 12.50 +/- 0.3 cal/K/mol
# CpPrTr = 13.043 +/- 0.21 cal/K/mol
# mole vol. = 21.534 cm3/mol
# mole wt. = 150.7088 g/mol
# date: 8. May. 2020

Celadonite
K(MgAl)(Si4)O10(OH)2 + 6 H+ + 4 H2O = + 1 K+ + 1 Mg+2 + 1 Al+3 + 4 Si(OH)4
log_k      8.4573 # +/- 2
delta_h    -28.715 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -2.084172E+3      -2.804765E-1      1.264440E+5      7.413941E+2      -7.322697E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used], polyhedral model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][Unpublished]
# delfGO = -1305.9 +/- 2 kcal/mol
# delfHO = -1394.912 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 74.900 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 66.937 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 157.100 cm3/mol
# mole wt. = 396.7354 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

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 [delfGO 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]
# delfGO = -321.619 +/- 0.25 kcal/mol
# delfHO = -348.76 +/- 0.6 kcal/mol
# SOPrTr = 28.0 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 25.765 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data] for Pb+2 + CO3-2 = PbCO3
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1934AND][1959UGG][1961NAS/MER][1976HEM][1979PAT/ORB][1982BIL/SCH][1984TAY/LOP]
# [1989DOR/MAR][1992CHE/GIE][1999LOT/OCH][2012BIS/GOG]
# delfGO = -149.893 +/- 0.12 kcal/mol
# delfHO = -167.90 +/- 0.3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 30.0 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 20.84 +/- 0.3 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 301.55K
# data source: [1978COX][1998CHA]
# delfGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPPr = 20.37 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPr = 7.75 +/- 0.4 cal/K/mol
# 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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92.JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001CHI/APP][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -3303.0 +/- 4 kcal/mol
# delfHO = -3601.4 +/- 9 kcal/mol
# SOPPr = 343.4 +/- 35 cal/K/mol
# CpPr = 270.753 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 499.333 cm3/mol
# mole wt. = 994.4395 g/mol
# date: 10. Aug. 2016

Chabazite_dia
K0.6667Na1.2333Ca0.4(Al2.75Si9.3024)(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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92.JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001CHI/APP][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -3324.1 +/- 4 kcal/mol
# delfHO = -3622.9 +/- 9 kcal/mol
# SOPPr = 344.7 +/- 34 cal/K/mol
# CpPr = 273.713 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -3429.4 +/- 4 kcal/mol
# delfHO = -3740.3 +/- 8 kcal/mol
# SOPPr = 296.8 +/- 29 cal/K/mol
# CpPr = 273.234 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 483.498 cm3/mol
# mole wt. = 1012.9354 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

#Chabazite_Ca11
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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_b][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -3429.4 +/- 4 kcal/mol
# delfHO = -3737.839 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 305.800 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 281.552 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -3440.3 +/- 4 kcal/mol
# delfHO = -3732.2 +/- 8 kcal/mol
# SOPPr = 403.3 +/- 31 cal/K/mol
# CpPr = 301.481 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -3409.5 +/- 4 kcal/mol
# delfHO = -3710.4 +/- 8 kcal/mol
# SOPPr = 360.4 +/- 31 cal/K/mol

```

```

# CpPrTr = 281.933 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL] Tmax for Cp = 369K
# data source: [1960KEL][1975BAC/TIT][1982WAG/EVA]
# delfGO = -449.270 +/- 0.02 kcal/mol
# delfHO = -544.85 +/- 0.6 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 71.8 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 66.922 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [92JOH/OEL]
# data source: [1966FOU/ROW][1978HEL/DEL][1983ARN/GUN]
# delfGO = -204.335 +/- 0.53 kcal/mol
# delfHO = -217.3 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 10.04 +/- 4.0 cal/K/mol
# CpPrTr = 10.627 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 22.688 cm3/mol
# mole wt. = 60.0843 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Chalcocite
Cu2S + 1 H+ = + 2 Cu+ + 1 HS-
log_k -34.7225 # +/- 0.4
delta_h 49.410 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -4.635612E+2 -8.340167E-2 1.241568E+4 1.721824E+2 -1.243598E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1974MIL][1978HEL/DEL]
# delfGO = -20.61 +/- 0.3 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -19.00 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 28.9 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 18.241 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 27.480 cm3/mol
# mole wt. = 159.1580 g/mol
# date: 8. May. 2020

Chalcopyrite
CuFeS2 + 2 H+ = + 1 Cu+ + 1 Fe+3 + 2 HS-
log_k -42.8193 # +/- 999999
delta_h 42.023 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.699908E+3 -2.727403E-1 8.276425E+4 6.151286E+2 -5.447265E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1970PAN/KIN][1978HEL/DEL]
# delfGO = -44.866 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -44.453 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 31.150 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 23.099 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 42.830 cm3/mol
# mole wt. = 183.5250 g/mol
# date: 5. May. 1978

Chlorapatite
Ca10(PO4)6Cl2 + 6 H+ = + 10 Ca+2 + 6 HPO4-2 + 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 delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1958GOT][1989TAC/STO][1991BEN/SOM][1991ZHU/SVE][2005CRU/MIN][2008KRI/JEN]
# [2010DAC/HAR][2011BAB/JEN]
# delfGO = -2974 +/- 20 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -3155 +/- 20 kcal/mol
# SOPrTr = 191.98 +/- 1.5 cal/K/mol
# CpPrTr = 180.43 +/- 2.1 cal/K/mol
# 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 31.5417 # +/- 2
delta_h -57.4 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -1.620217E+3 -2.237497E-1 1.028047E+5 5.789888E+2 -5.245559E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1967KIN/BAR][1978HEL/DEL][1997RIM_a]
# delfGO = -965.0 +/- 1 kcal/mol
# delfHO = -1043.3 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 52.90 +/- 0.8 cal/K/mol
# CpPrTr = 65.5 +/- 1 cal/K/mol
# mole vol. = 108.500 cm3/mol
# mole wt. = 277.1122 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Chukanovite

```

$\text{Fe}_2(\text{OH})_2(\text{CO}_3) + 3 \text{H}^+ = + 2 \text{Fe}^{2+} + 1 \text{HCO}_3^- + 2 \text{H}_2\text{O}$
 log_k 8.8235 # +/- 0.5
 delta_h -24.93 kcal/mol # +/- 3.3
 analytical_expression -1.146543E+3 -1.810793E-1 6.679933E+4 4.143299E+2 -3.548686E+6
 # -Range: 0.01 - 300 deg C
 # gflag: 1 [reported delFGO used], solubility
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
 # data source: [1978HEL/DEL_a] [2009NIS/DON] [2010LEE/WIL] [2012AZO/REM] [2018LEE/XU]
 # delFGO = -285.36 +/- 0.6 kcal/mol
 # delFHO = -320.70 +/- 0.9 kcal/mol *
 # SOPPr = 49.59 +/- 2.2 cal/K/mol
 # CpPr = 42.876 +/- 999999 cal/K/mol
 # mole vol. = 56.016 cm3/mol
 # mole wt. = 205.7178 g/mol
 # date: 18. Nov. 2020

Clinochlore_14A
 $\text{Mg}_5\text{Al}(\text{AlSi}_3)\text{O}_{10}(\text{OH})_8 + 16 \text{H}^+ = + 5 \text{Mg}^{2+} + 2 \text{Al}^{3+} + 3 \text{Si}(\text{OH})_4 + 6 \text{H}_2\text{O}$
 log_k 68.0095 # +/- 2.5
 delta_h -154.462 kcal/mol # +/- 999999
 analytical_expression -3.562136E+3 -5.161840E-1 2.270788E+5 1.271961E+3 -1.110876E+7
 # -Range: 0.01 - 300 deg C
 # gflag: 1 [reported delFGO used], phase relations
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
 # data source: [1978HEL/DEL]
 # delFGO = -1961.70 +/- 1.0 kcal/mol
 # delFHO = -2117.068 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
 # SOPPr = 111.200 +/- 999999 cal/K/mol
 # CpPr = 136.901 +/- 999999 cal/K/mol
 # mole vol. = 207.110 cm3/mol
 # mole wt. = 655.7969 g/mol
 # date: 5. May. 1978

Clinochlore_7A
 $\text{Mg}_2.5\text{AlO}_5(\text{AlO}_5\text{Si}_1.5\text{O}_5)(\text{OH})_4 + 8 \text{H}^+ = + 2.5 \text{Mg}^{2+} + 1 \text{Al}^{3+} + 1.5 \text{Si}(\text{OH})_4 + 3 \text{H}_2\text{O}$
 log_k 35.6907 # +/- 1.4
 delta_h -78.830 kcal/mol # +/- 999999
 analytical_expression -1.781266E+3 -2.583124E-1 1.137657E+5 6.363586E+2 -5.531637E+6
 # -Range: 0.01 - 300 deg C
 # gflag: 1 [reported delFGO used], solubility & stability relations
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
 # data source: [1978HEL/DEL]
 # delFGO = -978.55 +/- 1.0 kcal/mol
 # delFHO = -1056.935 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
 # SOPPr = 53.250 +/- 999999 cal/K/mol
 # CpPr = 65.962 +/- 999999 cal/K/mol
 # mole vol. = 105.750 cm3/mol
 # mole wt. = 277.8985 g/mol
 # date: 1. Feb. 2021

Clinoptilolite_alk
 $\text{K}_2.3\text{Na}_1.7\text{Ca}_1.4(\text{Al}_6.8\text{Si}_9.2072)(\text{H}_2\text{O})_{26} + 27.2 \text{H}^+ + 18.8 \text{H}_2\text{O} = + 2.3 \text{K}^+ + 1.7 \text{Na}^+ + 1.4 \text{Ca}^{2+} + 6.8 \text{Al}^{3+} + 29.2 \text{Si}(\text{OH})_4$
 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 delFGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
 # data source: [2001CHI/APP] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
 # delFGO = -9315.4 +/- 13 kcal/mol
 # delFHO = -10093.1 +/- 29 kcal/mol
 # SOPPr = 852 +/- 110 cal/K/mol
 # CpPr = 708.457 +/- 999999 cal/K/mol
 # mole vol. = 1264.100 cm3/mol
 # mole wt. = 2809.0436 g/mol
 # date: 4. Apr. 2016

Clinoptilolite_dia
 $\text{K}_0.8\text{Na}_0.4\text{Ca}_2.8(\text{Al}_6.8\text{Si}_9.2072)(\text{H}_2\text{O})_{26} + 27.2 \text{H}^+ + 18.8 \text{H}_2\text{O} = + 0.8 \text{K}^+ + 0.4 \text{Na}^+ + 2.8 \text{Ca}^{2+} + 6.8 \text{Al}^{3+} + 29.2 \text{Si}(\text{OH})_4$
 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 delFGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
 # data source: [2001CHI/APP] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
 # delFGO = -9317.8 +/- 13 kcal/mol
 # delFHO = -10106.1 +/- 29 kcal/mol
 # SOPPr = 791 +/- 110 cal/K/mol
 # CpPr = 695.037 +/- 999999 cal/K/mol
 # mole vol. = 1264.100 cm3/mol
 # mole wt. = 2776.6186 g/mol
 # date: 4. Apr. 2016

Clinoptilolite_Ca
 $\text{Ca}_3(\text{Al}_6\text{Si}_9\text{O}_{72})(\text{H}_2\text{O})_{20} + 24 \text{H}^+ + 28 \text{H}_2\text{O} = + 3 \text{Ca}^{2+} + 6 \text{Al}^{3+} + 30 \text{Si}(\text{OH})_4$
 log_k -14.4663 # +/- 13
 delta_h -87.6 kcal/mol # +/- 33
 analytical_expression -1.27276E+4 -1.709043E+0 7.630035E+5 4.536859E+3 -4.599971E+7
 # -Range: 0.01 - 227 deg C
 # gflag: 2 [estimated delFGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
 # extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
 # data source: [2001ARM/GUN] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
 # delFGO = -8915.3 +/- 13 kcal/mol
 # delFHO = -9635.2 +/- 29 kcal/mol
 # SOPPr = 669 +/- 110 cal/K/mol
 # CpPr = 622.140 +/- 999999 cal/K/mol
 # mole vol. = 1257.605 cm3/mol
 # mole wt. = 2636.9510 g/mol
 # date: 25. Jul. 2016

Clinoptilolite_K
 $\text{K}_6(\text{Al}_6\text{Si}_9\text{O}_{72})(\text{H}_2\text{O})_{20} + 24 \text{H}^+ + 28 \text{H}_2\text{O} = + 6 \text{K}^+ + 6 \text{Al}^{3+} + 30 \text{Si}(\text{OH})_4$
 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 delFGO 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/K/mol
# CpPrTr = 664.512 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 1257.605 cm3/mol
# mole wt. = 2751.3068 g/mol
# date: 25. Jul. 2016

Clinoptilolite Na
Na6(Al6Si30O72)(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/K/mol
# CpPrTr = 635.190 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 1257.605 cm3/mol
# mole wt. = 2654.6557 g/mol
# date: 25. Jul. 2016

Clinzoisite
Ca2Al3Si3012(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/K/mol
# CpPrTr = 83.099 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 10.407 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 5.857 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 53.5599 # +/- 2.1
delta_h -163.2 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -4.058494E+3 -5.900004E-1 2.596698E+5 1.441772E+3 -1.338276E+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 = -2183.3 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 97.33 +/- 0.9 cal/K/mol
# CpPrTr = 108.099 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 233.220 cm3/mol
# mole wt. = 584.9527 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Cordierite (hyd)
Mg2Al3(AlSi5)O18(H2O) + 16 H+ + 1 H2O = + 2 Mg+2 + 4 Al+3 + 5 Si(OH)4
log k 51.0807 # +/- 2.1
delta_h -159.104 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -4.061054E+3 -5.890177E-1 2.588334E+5 1.442727E+3 -1.336217E+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 = -2255.757 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 111.430 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 119.499 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 241.220 cm3/mol
# mole wt. = 602.9679 g/mol

```

```

# date: 1. Feb. 2021
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 delFGO used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995POK/HEL]
# delFGO = -378.167 +/- 0.31 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -400.500 +/- 0.31 kcal/mol
# SOPrTr = 12.170 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPrTr = 16.304 +/- 0.05 cal/K/mol
# 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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delFGO = -75.08 +/- 0.3 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -85.90 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 32.50 +/- 0.5 cal/K/mol
# CpPrTr = 18.42 +/- 0.4 cal/K/mol
# mole vol. = 47.068 cm3/mol
# mole wt. = 278.1054 g/mol
# date: 23. Oct. 2019

Covellite
CuS + 1 H+ = + 1 Cu+2 + 1 HS-
log k      -22.8222 # +/- 1
delta_h    24.350 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -9.499967E+2   -1.488246E-1   4.674175E+4   3.433956E+2   -3.105377E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1974MIL][1978HEL/DEL]
# delFGO = -12.6 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -12.5 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 15.90 +/- 0.4 cal/K/mol
# CpPrTr = 11.387 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 20.420 cm3/mol
# mole wt. = 95.6120 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 delFGO used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 543K
# data source: [1971STU/PRO][1977WAL/HEL][1978HEL/DEL][Unpublished]
# delFGO = -204.04 +/- 0.4 kcal/mol
# delFHO = -216.91 +/- 0.4 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 10.372 +/- 0.03 cal/K/mol
# CpPrTr = 10.79 +/- 0.2 cal/K/mol
# 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 delFGO used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1977WAL/HEL][1978HEL/DEL]
# delFGO = -204.0 +/- 1 kcal/mol
# delFHO = -216.9 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 10.372 +/- 0.03 cal/K/mol
# CpPrTr = 10.690 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1977WAL/HEL][1978HEL/DEL]
# delFGO = -203.4 +/- 1 kcal/mol
# delFHO = -215.792 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 11.963 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 6.357 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 27.380 cm3/mol
# mole wt. = 60.0843 g/mol
# date: 20. Mar. 2019

Cronstedtite_7A
Fe2Fe(FeSi)O5(OH)4 + 10 H+ = + 2 Fe+2 + 2 Fe+3 + 1 Si(OH)4 + 5 H2O
log k      15.7780 # +/- 2
delta_h    -60.138 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.887289E+3   -2.836599E-1   1.134143E+5   6.753253E+2   -5.671505E+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 = -826.8 +/- 2 kcal/mol
# delfH0 = -698.410 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 73.500 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 83.230 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 110.900 cm3/mol
# mole wt. = 399.4997 g/mol
# date: 8. May. 2020

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
# SOPPrTr = 35.10 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 20.971 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# delfH0 = -105.84 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPPrTr = 24.183 +/- 0.05 cal/K/mol
# CpPrTr = 12.534 +/- 999999 cal/K/mol
# 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: [1985GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [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 *[GHS]
# SOPPrTr = 50.339 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 44.255 +/- 999999 cal/K/mol
# 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: [1985GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [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 *[GHS]
# SOPPrTr = 48.200 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 42.158 +/- 999999 cal/K/mol
# 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: [1985GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [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 *[GHS]
# SOPPrTr = 46.046 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 40.061 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1985GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
#               [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
#               [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
#               [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
#               [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfGO = -527.102 +/- 0.50 kcal/mol
# delfHO = -574.046 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 43.873 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 37.965 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1985GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
#               [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
#               [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
#               [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
#               [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfGO = -505.602 +/- 0.50 kcal/mol
# delfHO = -550.511 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 41.676 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 35.867 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1985GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
#               [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
#               [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
#               [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
#               [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfGO = -484.060 +/- 0.50 kcal/mol
# delfHO = -526.945 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 39.447 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 33.770 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1985GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
#               [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
#               [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
#               [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
#               [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfGO = -462.455 +/- 0.50 kcal/mol
# delfHO = -503.329 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 37.171 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 31.674 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data], SSAS between CSH08333 & Portlandite
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1985GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
#               [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
#               [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [2005HEN] [2007WAL/SAV] [2008SUG] [1994ATK/GLA]
#               [2014PLU] [2014LHO] [2015HAA/NON] [2015MYE/LHO_a] [2015MYE/LHO_b] [2015R00]
#               [2016SWA/HEA] [2016WAL/SUT] [Unpublished]
#
# delfGO = -451.617 +/- 0.50 kcal/mol
# delfHO = -491.493 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 36.008 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 30.625 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1995GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [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 *[GHS]
# SOPrTr = 34.819 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 29.577 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1995GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [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 *[GHS]
# SOPrTr = 33.592 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 28.529 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1995GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [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 *[GHS]
# SOPrTr = 32.286 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 27.481 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1995GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [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/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = 27.16 +/- 6.5 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1995GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAN] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [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 *[GHS]
# SOPrTr = 31.276 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 26.378 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K

```

```

# data source: [1965GRE/CHA] [1981FUJ/KON] [1989GRU/BEN] [1991ATK/HEA] [1992ATK/GLA]
# [1999GLA/TYR] [2000COU] [2000PO1] [2002BAR] [2002HAR/MAI] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [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 *[GHS]
# SOPrTr = 30.317 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 25.247 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/MAI] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [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 *[GHS]
# SOPrTr = 28.174 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 22.988 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/MAI] [2004CHE/THO]
# [2005CHA/HEA] [2005SWA/FA1] [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 *[GHS]
# SOPrTr = 25.856 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 20.728 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# delfH0 = -99.60 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 23.60 +/- 1.0 cal/K/mol
# CpPrTr = 16.227 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 40.737 cm3/mol
# mole wt. = 149.9128 g/mol
# date: 04. Apr. 2016

Cuprite
Cu2O + 2 H+ = + 2 Cu+ + 1 H2O
log_k -1.9002 # +/- 0.4
delta_h 6.77 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression -2.323455E+2 -3.099634E-2 1.044289E+4 8.518378E+1 -5.440232E+5
# -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 *[GHS]
# delfH0 = -40.83 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 22.08 +/- 1.0 cal/K/mol
# CpPrTr = 14.978 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 23.437 cm3/mol
# mole wt. = 143.0914 g/mol
# date: 5. May. 1978

CuS04(s)
CuS04 = + 1 Cu+2 + 1 S04-2
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 *[GHS]
# delfH0 = -184.30 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 26.10 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 23.630 +/- 0.21 cal/K/mol
# 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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -6208.1 +/- 9 kcal/mol
# delfHO = -6742.3 +/- 19 kcal/mol
# SOPPr = 524.1 +/- 72 cal/K/mol
# CpPrTr = 463.078 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1993SAC/SEY]
# delfGO = -1551.52 +/- 1.7 kcal/mol
# delfHO = -1696.56 +/- 1.7 kcal/mol
# SOPPr = 139.2 +/- 8 cal/K/mol
# CpPrTr = 151.211 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 213.420 cm3/mol
# mole wt. = 713.4974 g/mol
# date: 20. Jul. 2016

Daphnite_7A # Chamosite_7A
Fe2.5AlO.5(AlO.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 delfGO used], stability relation
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1993SAC/SEY]
# delfGO = -773.46 +/- 1.0 kcal/mol
# delfHO = -846.016 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 69.450 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 73.118 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978ROB/HEM][2007BEN/PAL]
# delfGO = -426.86 +/- 0.7 kcal/mol
# delfHO = -469.37 +/- 0.7 kcal/mol
# SOPPr = 31.55 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 34.082 +/- 0.07 cal/K/mol
# 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 delfGO used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995POK/HEL]
# delfGO = -220.150 +/- 0.30 kcal/mol
# delfHO = -238.924 +/- 0.30 kcal/mol
# SOPPr = 8.446 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPrTr = 12.904 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 21.4679 # +/- 1.1
delta_h -37.4 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression -1.188772E+3 -1.646548E-1 7.576409E+4 4.247043E+2 -4.061217E+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 = -723.78 +/- 1.0 kcal/mol
# delfHO = -765.4 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 34.20 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 37.501 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 66.090 cm3/mol
# mole wt. = 216.5504 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Dolomite
CaMg(CO3)2 + 2 H+ = + 1 Ca+2 + 1 Mg+2 + 2 HCO3-
log_k 2.5172 # +/- 0.9
delta_h -14.29 kcal/mol # +/- 1.1
analytical_expression -1.603145E+3 -2.596735E-1 8.959191E+4 5.819306E+2 -5.098439E+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 = -517.76 +/- 1.0 kcal/mol

```

```

# delfH0 = -556.67 +/- 1.0 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 37.090 +/- 0.07 cal/K/mol
# CpPr = 37.579 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 64.365 cm3/mol
# mole wt. = 184.4014 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Dolomite_dis
CaMg(CO3)2 + 2 H+ = + 1 Ca+2 + 1 Mg+2 + 2 HCO3-
log_k      4.0638 # +/- 0.9
delta_h    -17.225 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.599782E+3 -2.590501E-1 9.003096E+4 5.804798E+2 -5.088172E+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 = -553.738 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 39.840 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 37.696 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 64.390 cm3/mol
# mole wt. = 184.4014 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Dolomite_ord
CaMg(CO3)2 + 2 H+ = + 1 Ca+2 + 1 Mg+2 + 2 HCO3-
log_k      2.5172 # +/- 0.9
delta_h    -14.29 kcal/mol # +/- 1.1
analytical_expression -1.598831E+3 -2.590035E-1 8.937013E+4 5.803546E+2 -5.086919E+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 = -556.67 +/- 1.0 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 37.090 +/- 0.07 cal/K/mol
# CpPr = 37.696 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 64.340 cm3/mol
# mole wt. = 184.4014 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Downeyite
SeO2 + 1 H2O = + 1 SeO3-2 + 2 H+
log_k      -8.2930 # +/- 0.3
delta_h    0.92 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression -2.558759E+3 -3.724871E-1 1.480850E+5 9.173785E+2 -9.344207E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1937MCC][1962GAT][1966GAD][1966GAT/DRA][1968MAL/PAS][1971PAS/ARO]
# [1973BAR/MOR][1987AMI/MIN]
# delfG0 = -41.06 +/- 0.3 kcal/mol *[GHS]
# delfH0 = -53.87 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPPr = 16.130 +/- 0.10 cal/K/mol
# CpPr = 13.917 +/- 0.05 cal/K/mol
# mole vol. = 26.592 cm3/mol
# mole wt. = 110.9588 g/mol
# date: 9. Apr. 2020

Enstatite
MgSiO3 + 2 H+ + 1 H2O = + 1 Mg+2 + 1 Si(OH)4
log_k      11.5806 # +/- 0.9
delta_h    -22.5 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression -6.374193E+2 -8.702242E-2 4.113878E+4 2.268897E+2 -2.174231E+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 *[GHS]
# SOPPr = 16.20 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPr = 18.899 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 31.276 cm3/mol
# mole wt. = 100.3887 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Epidote
Ca2FeAl2Si3O12(OH) + 13 H+ = + 2 Ca+2 + 1 Fe+3 + 2 Al+3 + 3 Si(OH)4 + 1 H2O
log_k      33.6751 # +/- 999999
delta_h    -100.498 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.932833E+3 -4.342068E-1 1.821756E+5 1.047110E+3 -9.428014E+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 = -1450.912 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# delfH0 = -1544.063 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 75.280 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 85.598 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 139.200 cm3/mol
# mole wt. = 483.2226 g/mol
# date: 7. Jul. 2015

Epidote_ord
Ca2FeAl2Si3O12(OH) + 13 H+ = + 2 Ca+2 + 1 Fe+3 + 2 Al+3 + 3 Si(OH)4 + 1 H2O
log_k      33.6751 # +/- 999999
delta_h    -100.474 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.932875E+3 -4.343631E-1 1.825928E+5 1.048901E+3 -9.458471E+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 = -1450.912 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# delfH0 = -1544.087 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 75.200 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 85.626 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 139.200 cm3/mol
# mole wt. = 483.2226 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/K/mol
# CpPrTr = 453.003 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 810.454 cm3/mol
# mole wt. = 1843.8782 g/mol
# date: 25. Jul. 2016

#Epistilbite_11
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/K/mol
# CpPrTr = 451.893 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 762.417 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 761.171 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 796.856 +/- 999999 cal/K/mol
# 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_Al32".
# 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/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = 519 +/- 10 cal/K/mol
# mole vol. = 706.200 cm3/mol
# mole wt. = 1255.1046 g/mol
# date: 23. Jan. 2019

Ettringite_Al13
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_AH13 = Ettringite_AH32 - 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
# SOPPr = 225 +/- 46 cal/K/mol *[GHS]
# CpPr = 337 +/- 30 cal/K/mol
# mole vol. = 410.600 cm3/mol
# mole wt. = 912.8158 g/mol
# date: 23. Jan. 2019

Ettringite_A130
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_A130 = Ettringite_A132 - 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
# SOPPr = 378 +/- 21 cal/K/mol *[GHS]
# CpPr = 500 +/- 16 cal/K/mol
# mole vol. = 706.200 cm3/mol
# mole wt. = 1219.0742 g/mol
# date: 23. Jan. 2019

Ettringite_A132
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_A132"
# 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
# SOPPr = 410 +/- 21 cal/K/mol *[GHS]
# CpPr = 519 +/- 10 cal/K/mol
# 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: [1985BER][1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][2007MAT/LOT]
# delfG0 = -3483.35 +/- 1.3 kcal/mol
# delfH0 = -4011.94 +/- 1.4 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 456.10 +/- 2.3 cal/K/mol
# CpPr = 506.44 +/- 6.8 cal/K/mol
# 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 + 12 H+ = + 6 Ca+2 + 2 Fe+3 + 3 SO4-2 + 38 H2O
log k 55.8428 # +/- 0.3
delta_h -71.3 kcal/mol # +/- 7
analytical_expression -6.082354E+3 -9.453275E-1 3.458739E+5 2.212350E+3 -1.905199E+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 = -3412.70 +/- 1.6 kcal/mol
# delfH0 = -3979.5 +/- 6 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 420 +/- 21 cal/K/mol
# CpPr = 528 +/- 16 cal/K/mol
# mole vol. = 716.594 cm3/mol
# mole wt. = 1312.8356 g/mol
# date: 12. May. 2020

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][1979EDE/SAT_a][2000ZHA]
# delfG0 = -3821.38 +/- 2.6 kcal/mol
# delfH0 = -4392.7 +/- 7 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 370 +/- 24 cal/K/mol
# CpPr = 527 +/- 18 cal/K/mol
# 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
# -Range: Not given
# gflag: Not used
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a]
# delfG0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol

```

```

# SOPrTr = 389 +/- 27 cal/K/mol
# CpPrTr = 588 +/- 21 cal/K/mol
# mole vol. = 672.303 cm3/mol
# mole wt. = 1210.6386 g/mol
# date: 21. May. 2019

Ettringite_SeO4
Ca6(Al(OH)6)2(SeO4)3(H2O)26 + 12 H+ = + 6 Ca+2 + 2 Al+3 + 3 SeO4-2 + 38 H2O
log k      60.8756 # +/- 0.8
delta_h    350.936 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -8.047672E+3 -1.207379E+0 4.643021E+5 2.912994E+3 -2.637532E+7
#
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfG from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][2000ZHA]
# delfG0 = -3412.82 +/- 2.3 kcal/mol
# delfH0 = -3983.566 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 414.310 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 522.221 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 713.165 cm3/mol
# mole wt. = 1395.7866 g/mol
# date: 14. Apr. 2020

FA_glass_H24
(K2O)0.0765(Na2O)0.1612(CaO)1.3108(MgO)0.5568(Al2O3)1.3872(Fe2O3)0.1830(SiO2)11.9195 + 13.6318 H+ + 17.0231 H2O = + 0.153 K+ + 0.3224 Na+
+ 1.3108 Ca+2 + 0.5568 Mg+2 + 2.7744 Al+3 + 0.366 Fe+3 + 11.9195 Si(OH)4
log k      999999 # +/- 999999
delta_h    999999 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.999990E+5
#
# -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/K/mol
# CpPrTr = 999999 +/- 999999 cal/K/mol
# mol vol. = 478.5 cm3/mol
# mol wt. = 999.9838 g/mol
# date: 14. Feb. 2018

FA_glass_H24_inert
(K2O)0.0765(Na2O)0.1612(CaO)1.3108(MgO)0.5568(Al2O3)1.3872(Fe2O3)0.1830(SiO2)11.9195 + 13.6318 H+ + 17.0231 H2O = + 0.153 K+ + 0.3224 Na+
+ 1.3108 Ca+2 + 0.5568 Mg+2 + 2.7744 Al+3 + 0.366 Fe+3 + 11.9195 Si(OH)4
log k      999999 # +/- 999999
delta_h    999999 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.999990E+5
#
# -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/K/mol
# CpPrTr = 999999 +/- 999999 cal/K/mol
# mol vol. = 478.5 cm3/mol
# mol wt. = 999.9838 g/mol
# date: 10. Mar. 2021

FA_Glass_R2
(K2O)0.1727(Na2O)0.1323(CaO)0.9557(MgO)0.6425(Fe2O3)0.3482(Al2O3)2.1144(SiO2)10.3998 + 18.582 H+ + 11.5086 H2O = + 0.3454 K+ + 0.2646 Na+
+ 0.9557 Ca+2 + 0.6425 Mg+2 + 0.6964 Fe+3 + 4.2288 Al+3 + 10.3998 Si(OH)4
log k      999999 # +/- 999999
delta_h    999999 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.999990E+5
#
# -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/K/mol
# CpPrTr = 999999 +/- 999999 cal/K/mol
# mol vol. = 478.5 cm3/mol
# mol wt. = 1000.0125 g/mol
# date: 14. Feb. 2021

FA_Glass_R2_inert
(K2O)0.1727(Na2O)0.1323(CaO)0.9557(MgO)0.6425(Fe2O3)0.3482(Al2O3)2.1144(SiO2)10.3998 + 18.582 H+ + 11.5086 H2O = + 0.3454 K+ + 0.2646 Na+
+ 0.9557 Ca+2 + 0.6425 Mg+2 + 0.6964 Fe+3 + 4.2288 Al+3 + 10.3998 Si(OH)4
log k      999999 # +/- 999999
delta_h    999999 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 9.999990E+5
#
# -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/K/mol
# CpPrTr = 999999 +/- 999999 cal/K/mol
# mol vol. = 478.5 cm3/mol
# mol wt. = 1000.0125 g/mol
# date: 10. Mar. 2021

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/K/mol
# CpPrTr = 157.324 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [1966DEE/HOW] [2010VIE] [2011ART/SAS_a]
# delFGO = -1818.1 +/- 2 kcal/mol
# delFHO = -1991.7 +/- 4 kcal/mol
# SOPPr = 214.0 +/- 16 cal/K/mol
# CpPr = 161.675 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 19.3634 # +/- 0.8
delta_h -39.1 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -9.203927E+2 -1.318925E-1 5.953811E+4 3.286434E+2 -3.006278E+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]
# delFGO = -330.23 +/- 1.0 kcal/mol
# delFHO = -354.1 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 35.45 +/- 0.4 cal/K/mol
# CpPr = 31.764 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 46.390 cm3/mol
# mole wt. = 203.7771 g/mol
# date: 7. Jul. 2015

Fe104Se_beta
Fe1.04Se + 0.02 O2 + 1.08 H+ = + 1.04 Fe+2 + 1 HSe- + 0.04 H2O
log_k -2.5938 # +/- 1.2
delta_h -4.19 kcal/mol # +/- 2.5
analytical_expression -8.765530E+2 -1.392263E-1 4.890361E+4 3.167999E+2 -2.884844E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1959GR0/WES_b] [1968GR0] [1972GR0] [1972SVE] [2020LEM/PAL]
# delFGO = -18.13 +/- 1.5 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -18.02 +/- 1.5 kcal/mol
# SOPPr = 17.21 +/- 0.3 cal/K/mol
# CpPr = 13.63 +/- 0.3 cal/K/mol
# mole vol. = 28.929 cm3/mol
# mole wt. = 137.0409 g/mol
# date: 30. Nov. 2020

Fe3Se4_gamma
Fe3Se4 + 4 H+ = + 1 Fe+2 + 2 Fe+3 + 4 HSe-
log_k -55.4080 # +/- 5
delta_h 29.3 kcal/mol # +/- 8
analytical_expression -5.199497E+3 -7.797747E-1 2.856758E+5 1.866810E+3 -1.785324E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1959GR0/WES_b] [1968GR0] [1970AND/VAN] [1972GR0] [1972SVE] [2020LEM/PAL]
# delFGO = -63.7 +/- 6 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -61.5 +/- 6 kcal/mol
# SOPPr = 66.9 +/- 1 cal/K/mol
# CpPr = 52.74 +/- 0.1 cal/K/mol
# mole vol. = 74.096 cm3/mol
# mole wt. = 483.3810 g/mol
# date: 30. Nov. 2020

Fe7Se8_alpha
Fe7Se8 + 6 H+ + 1 H2O = + 0.5 O2 + 7 Fe+2 + 8 HSe-
log_k -90.6544 # +/- 9
delta_h 67.7 kcal/mol # +/- 18
analytical_expression -6.783109E+3 -1.084223E+0 3.546093E+5 2.454904E+3 -2.205765E+7
# -Range: 0.01 - 167 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 440K
# data source: [1959GR0/WES_b] [1964AND/LEC] [1968GR0] [1972GR0] [1972SVE] [2020LEM/PAL]
# delFGO = -134.1 +/- 11 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -128.0 +/- 11 kcal/mol
# SOPPr = 146.71 +/- 1.2 cal/K/mol
# CpPr = 105.76 +/- 1.0 cal/K/mol
# mole vol. = 159.054 cm3/mol
# mole wt. = 1022.6090 g/mol
# date: 30. Nov. 2020

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 delFGO 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]
# delFGO = -116.01 +/- 1.0 kcal/mol
# delFHO = -135.6 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 21 +/- 10 cal/K/mol
# CpPr = 21.811 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 561K
# data source: [1910LAMI][1930ELD][1932MUR][1932RAN/FRA][1943VON/RTH][1953LEU/KOL]
# [1964DAU/DAU][1978HEL/DEL_a][1995ZIE/JON][1999REF/BON]
#
# delFGO = -117.92 +/- 1.2 kcal/mol
# delFHO = -137.50 +/- 2.9 kcal/mol
# SOPrTr = 21.1 +/- 11 cal/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = 21.811 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 561K
# data source: [1995ZIE/JON][2013LEM/BER]
#
# delFGO = -120.1 +/- 2 kcal/mol
# delFHO = -140.0 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 20.0 +/- 7 cal/K/mol
# CpPrTr = 10.362 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 + 3 H+ = + 1 Fe+3 + 3 H2O
# log_k 3.9679 # +/- 0.7
# delta_h -19.46 kcal/mol # +/- 1.6
# analytical_expression -5.254010E+2 -8.050042E-2 3.095866E+4 1.881100E+2 -1.416192E+6
#
# -Range: 0.01 - 150 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delFGO used], stability relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 423K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013LEM/BER]
#
# delFGO = -168.77 +/- 0.9 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -197.35 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 31.07 +/- 2.4 cal/K/mol
# CpPrTr = 26.615 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 26.987 cm3/mol
# mole wt. = 106.8689 g/mol
# date: 30. Nov. 2020

Fe(OH)3(mic) # Ferrihydrite (6 line)
#
# Fe(OH)3 + 3 H+ = + 1 Fe+3 + 3 H2O
# log_k 3.2129 # +/- 0.7
# delta_h -18.43 kcal/mol # +/- 1.6
# analytical_expression -5.192078E+2 -8.000817E-2 3.029750E+4 1.859989E+2 -1.385414E+6
#
# -Range: 0.01 - 150 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 423K
# data source: [2013LEM/BER]
#
# delFGO = -169.80 +/- 0.9 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -198.38 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 31.07 +/- 2.4 cal/K/mol
# CpPrTr = 26.290 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 26.987 cm3/mol
# mole wt. = 106.8689 g/mol
# date: 30. Nov. 2020

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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [2013LEM/BER]
#
# delFGO = -72.225 +/- 0.13 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -81.628 +/- 0.12 kcal/mol
# SOPrTr = 28.25 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 18.35 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 40.112 cm3/mol
# mole wt. = 126.7524 g/mol
# date: 5. Sep. 2017

FeCl3(s)
#
# FeCl3(s) = + 1 Fe+3 + 3 Cl-
# log_k 13.9433 # +/- 0.17
# delta_h -37.01 kcal/mol # +/- 1.6
# analytical_expression -2.110295E+3 -3.461788E-1 1.231790E+5 7.649541E+2 -6.979627E+6
#
# -Range: 0.01 - 277 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 550K
# data source: [2013LEM/BER]
#
# delFGO = -79.235 +/- 0.06 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -94.642 +/- 0.02 kcal/mol
# SOPrTr = 34.77 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 23.09 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 55.933 cm3/mol
# mole wt. = 162.2051 g/mol
# date: 25. Jan. 2021

Ferrosilite
#
# FeSiO3 + 2 H+ + 1 H2O = 1 Fe+2 + 1 Si(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 delFGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1985HEL]

```

```

# delfG0 = -267.59 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -285.658 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 21.630 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 21.758 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 32.952 cm3/mol
# mole wt. = 131.9287 g/mol
# date: 22. Aug. 2016

FeSe2(s)
FeSe2 + 1 H2O = + 1 Fe+2 + 2 HSe- + 0.5 O2
log k -62.5949 # +/- 2.3
delta_h 81.0 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.461173E+3 -3.586868E-1 1.229363E+5 8.852171E+2 -8.639958E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1962GR0/WES][1968GR0][1972SVE][1974MIL][1991OKA][2020LEM/PAT]
# delfG0 = -27.6 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# delfH0 = -29.39 +/- 2.9 kcal/mol
# SOPrTr = 20.75 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 17.42 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 29.906 cm3/mol
# mole wt. = 213.7670 g/mol
# date: 14. Apr. 2020

FeS04(s)
FeS04 = + 1 Fe+2 + 1 S04-2
log k 1.9058 # +/- 2
delta_h -17.4 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.727697E+3 -4.016636E-1 1.599736E+5 9.788702E+2 -9.717517E+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 *[GHS]
# delfH0 = -222.0 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 28.91 +/- 0.3 cal/K/mol
# CpPrTr = 23.582 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 41.619 cm3/mol
# mole wt. = 151.9106 g/mol
# date: 11. Sep. 2017

Fluorapatite
Ca10(P04)6F2 + 6 H+ = 10 Ca+2 + 6 HP04-2 + 2 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/K/mol
# CpPrTr = 179.632 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 315.120 cm3/mol
# mole wt. = 1008.6052 g/mol
# date: 13. Dec. 2016

Fluorite
CaF2 = 1 Ca+2 + 2 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 *[GHS]
# delfH0 = -293.00 +/- 1.5 kcal/mol
# SOPrTr = 16.390 +/- 0.08 cal/K/mol
# CpPrTr = 16.999 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 24.542 cm3/mol
# mole wt. = 78.0748 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Forsterite
Mg2Si04 + 4 H+ = + 2 Mg+2 + 1 Si(OH)4
log k 28.1229 # +/- 1.2
delta_h -51.9 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression -9.819258E+2 -1.381918E-1 6.566049E+4 3.502551E+2 -3.169898E+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 *[GHS]
# SOPrTr = 22.75 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 28.175 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 43.790 cm3/mol
# mole wt. = 140.6931 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Foshagite
Ca4Si309(OH)2(H2O)0.5 + 8 H+ + 0.5 H2O = + 4 Ca+2 + 3 Si(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/K/mol
# CpPrTr = 73.944 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPrTr = 144.8 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 158.92 +/- 1.1 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPrTr = 144.8 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 158.92 +/- 1.1 cal/K/mol
# 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 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Fe+3 + 2 Cl- + 16 H2O
# log_k 70.4284 # +/- 1
# delta_h -109.8 kcal/mol # +/- 12
# analytical_expression -3.236648E+3 -5.082240E-1 1.947267E+5 1.176851E+3 -9.471408E+6
# -Range: 0.01 - 55 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] fo 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 *[GHS]
# SOPrTr = 154 +/- 37 cal/K/mol
# CpPrTr = 172.4 +/- 1 cal/K/mol
# mole vol. = 277.486 cm3/mol
# mole wt. = 619.0598 g/mol
# date: 25. Jan. 2021

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][1979G10/BAR][1987NOD/MAS][1999LOT/OCH]
# delfG0 = -23.06 +/- 1.1 kcal/mol *[GHS]
# delfH0 = -23.46 +/- 1.1 kcal/mol
# SOPrTr = 21.80 +/- 0.3 cal/K/mol
# CpPrTr = 11.833 +/- 0.28 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 49.116 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPrTr = 16.360 +/- 0.03 cal/K/mol
# CpPrTr = 21.92 +/- 1.5 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 378.488 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 629.977 cm3/mol
# mole wt. = 1401.0739 g/mol
# date: 4. Apr. 2016

Goethite
FeOOH + 3 H+ = + 1 Fe+3 + 2 H2O
log k 0.2561 # +/- 0.4
delta_h -14.40 kcal/mol # +/- 1.7
analytical_expression -3.724039E+2 -5.916989E-2 2.185498E+4 1.327095E+2 -1.011702E+6
# -Range: 0.01 - 123 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 396K
# data source: [2013LEM/BER]
# delfG0 = -117.14 +/- 0.5 kcal/mol *[GHS]
# delfH0 = -134.08 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 14.30 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 18.65 +/- 0.1 cal/K/mol
# mole vol. = 20.820 cm3/mol
# mole wt. = 88.8537 g/mol
# date: 25. Jan. 2021

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/K/mol
# CpPrTr = 2.075 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 5.298 cm3/mol
# mole wt. = 12.0110 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

GR1C03
Fe6(OH)12CO3(H2O)2 + 13 H+ = + 4 Fe+2 + 2 Fe+3 + 1 HCO3- + 14 H2O
log k 40.9971 # +/- 2
delta_h -81.802 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.793984E+3 -4.159374E-1 1.676751E+5 1.006780E+3 -8.409296E+6
# -Range: 0.01 - 80 deg C
# gflag: 3 [delfG0 from log K data] for reaction GR1C03 = 6 Lepidocrocite + HCO3- + 2 H2O + 4 e- + 5 H+
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [1981WOO] [1995DRI/REF]
# delfG0 = -973.7 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1151.431 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 110.724 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 168.355 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 163.121 cm3/mol
# mole wt. = 635.2092 g/mol
# date: 16. Feb. 2021

Greenalite_7A
Fe3Si2O5(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/K/mol
# CpPrTr = 74.057 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# delfH0 = -1583.78 +/- 3.5 kcal/mol
# SOPrTr = 61.52 +/- 2.7 cal/K/mol
# CpPrTr = 78.85 +/- 0.4 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 44.742 +/- 0.18 cal/K/mol
# mole vol. = 74.509 cm3/mol
# mole wt. = 172.1662 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Gyrolite
Ca2Si3O7.5(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 delfGO used], polyhedral model
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [2010BLA/BOU][2012ART/SAS]
# delfGO = -1087.577 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -1175.483 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 73.824 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 77.902 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1978HEL/DEL]
# delfGO = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 9.600 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 9.567 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# -Range: Not given
# gflag: 1 [reported delfGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: Not used, Tmax for Cp not given
# data source: [1978HEL/DEL]
# delfGO = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 14.100 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 11.400 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 8.000 cm3/mol
# mole wt. = 18.0152 g/mol
# date: 18. Aug. 2017

H2SeO3(s) # Selenious acid
H2SeO3 = + 2 H+ + 1 SeO3-2
log k      -9.3942 # +/- 0.4
delta_h    4.14 kcal/mol # +/- 0.6
analytical_expression  -2.550022E+3   -3.705250E-1   1.467292E+5   9.146796E+2   -9.272882E+6
# -Range: 0.01 - 70 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 343.15K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1961SEL/PAK][20050LI/NOS]
# delfGO = -99.25 +/- 0.5 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -125.41 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 27.1 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 24.810 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 42.934 cm3/mol
# mole wt. = 128.9740 g/mol
# date: 14. Apr. 2020

H3BO3(s) # Boric acid
H3BO3 = 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 441K
# data source: [1998CHA]
# delfGO = -231.48 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -261.47 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 21.21 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 19.449 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1978HEL/DEL]
# delfGO = -91.807 +/- 0.08 kcal/mol
# delfHO = -98.260 +/- 0.08 kcal/mol
# SOPrTr = 17.240 +/- 0.05 cal/K/mol
# CpPrTr = 12.143 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 27.015 cm3/mol
# mole wt. = 58.4428 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Halloysite

```

```

Al2Si2O5(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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978ROB/HEM][1978HEL/DEL]
# delfGO = -903.63 +/- 0.7 kcal/mol
# delfHO = -980.29 +/- 0.7 kcal/mol
# SOPPr = 48.52 +/- 0.3 cal/K/mol
# CpPr = 57.267 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfGO = -639.00 +/- 1.0 kcal/mol
# delfHO = -678.276 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 40.700 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 40.360 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 68.270 cm3/mol
# mole wt. = 248.0904 g/mol
# date: 5. Mar. 1990

Hematite
Fe2O3 + 6 H+ = + 2 Fe+3 + 3 H2O
log_k      0.0903 # +/- 0.4
delta_h    -30.93 kcal/mol # +/- 3.2
analytical_expression -9.792741E+2   -1.540547E-1   5.687385E+4   3.498134E+2   -2.760124E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1973HAA/ROB][1978HEL/DEL]
# delfGO = -178.18 +/- 0.3 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -197.72 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPPr = 20.94 +/- 0.3 cal/K/mol
# CpPr = 25.04 +/- 0.4 cal/K/mol
# mole vol. = 30.274 cm3/mol
# mole wt. = 159.6922 g/mol
# date: 5. May. 1978

Hemicarbonate_A1
(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 [delfGO 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]
# delfGO = -1755.22 +/- 1.2 kcal/mol
# delfHO = -1972.80 +/- 2.1 kcal/mol
# SOPPr = 189.3 +/- 8 cal/K/mol *[GHS]
# CpPr = 178.15 +/- 1.0 cal/K/mol
# mole vol. = 284.527 cm3/mol
# mole wt. = 564.4581 g/mol
# date: 23. Jan. 2019

Hemicarbonate_A109
(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 [delfGO from log K data] for Hemicarbonate_A109 = Hemicarbonate_A1105 - 1.5 H2O
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2015BAQ/MAT]
# delfGO = -1578.70 +/- 1.5 kcal/mol
# delfHO = -1753.41 +/- 2.5 kcal/mol
# SOPPr = 165.9 +/- 10 cal/K/mol *[GHS]
# CpPr = 149.42 +/- 3.3 cal/K/mol
# mole vol. = 249.300 cm3/mol
# mole wt. = 510.4125 g/mol
# date: 24. Jan. 2019

Hemicarbonate_A1105
(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 [delfGO from log K data] for Hemicarbonate_A1105 = Hemicarbonate_A112 - 1.5 H2O
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2015BAQ/MAT]
# delfGO = -1667.82 +/- 1.2 kcal/mol
# delfHO = -1863.82 +/- 2.3 kcal/mol
# SOPPr = 178.1 +/- 9 cal/K/mol *[GHS]
# CpPr = 163.79 +/- 2.5 cal/K/mol
# mole vol. = 261.300 cm3/mol
# mole wt. = 537.4353 g/mol
# date: 23. Jan. 2019

Hemicarbonate_A112
(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 [delfGO 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/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = 178.15 +/- 1.0 cal/K/mol
# 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 + 13.5 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Fe+3 + 0.5 HCO3- + 16.5 H2O
log_k      87.4538 # +/- 1
delta_h    -142.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.404662E+3 -3.727946E-1 1.543104E+5 8.722270E+2 -6.450171E+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 *[GHS]
# SOPrTr = 180.4 +/- 9 cal/K/mol
# CpPrTr = 167.1 +/- 2 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 29.67 +/- 0.2 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 28.58 +/- 0.2 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 29.67 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 61.730 cm3/mol
# mole wt. = 145.1433 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

Herzenbergite
SnS + 1 H+ = + 1 Sn+2 + 1 HS-
log_k      -15.8623 # +/- 0.5
delta_h    19.850 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -8.496085E+2 -1.356209E-1 4.287920E+4 3.082817E+2 -2.885221E+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 *[GHS]
# delfH0 = -25.80 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 18.40 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 11.773 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 699.897 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -9374.9 +/- 12 kcal/mol
# delfHO = -10155.2 +/- 26 kcal/mol
# SOPPr = 713.0 +/- 98 cal/K/mol
# CpPr = 679.504 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 1257.605 cm3/mol
# mole wt. = 2765.8174 g/mol
# date: 26. Jul. 2016
#
#Heulandite Ca11
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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_b][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -9297.2 +/- 12 kcal/mol
# delfHO = -10070.405 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 729.600 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 690.634 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -9330.1 +/- 13 kcal/mol
# delfHO = -10087.3 +/- 27 kcal/mol
# SOPPr = 856 +/- 100 cal/K/mol
# CpPr = 699.080 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 1257.605 cm3/mol
# mole wt. = 2792.3743 g/mol
# date: 26. Jul. 2016
#
#Hibbingite
Fe2(OH)3Cl + 3 H+ = + 2 Fe+2 + 1 Cl- + 3 H2O
log_k 17.1026 # +/- 0.5
delta_h -33.42 kcal/mol # +/- 3.3
analytical_expression -1.168835E+3 -1.839731E-1 7.020841E+4 4.228889E+2 -3.653540E+6
#
# -Range: 0.01 - 235 deg C
#
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 508K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][1994SAI/KUC][2008REM/REF][2011NEM/X10]
# delfGO = -221.85 +/- 0.8 kcal/mol
# delfHO = -255.56 +/- 0.8 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 46.92 +/- 0.8 cal/K/mol
# CpPr = 41.6 +/- 1 cal/K/mol
# mole vol. = 62.201 cm3/mol
# mole wt. = 198.1686 g/mol
# date: 19. Nov. 2020
#
#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 delfGO used], polyhedral model
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [2010BLA/BOU][2012ART/SAS]
# delfGO = -593.273 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -636.398 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 42.927 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 42.414 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 10.3559 # +/- 1.4
delta_h -40.89 kcal/mol # +/- 0.9
analytical_expression -3.286638E+3 -5.282635E-1 1.862752E+5 1.191079E+3 -1.044624E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1972HEM/ROB][1973HEM/ROB][1978HEL/DEL]
# delfGO = -1004.65 +/- 0.4 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -1082.60 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPPr = 71.590 +/- 0.21 cal/K/mol
# CpPr = 73.955 +/- 0.22 cal/K/mol
# mole vol. = 122.900 cm3/mol
# mole wt. = 353.0298 g/mol
# date: 1. Feb. 2021
#
#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 delfGO used], solubility & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1957GAR][1978HEL/DEL_a][1995MAR/MAC][1998MER/ROC]
# delfGO = -406.37 +/- 0.4 kcal/mol
# delfHO = -465.038 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 79.791 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 61.383 +/- 999999 cal/K/mol
# 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      30.9558 # +/- 2.2
delta_h    -69.238 kcal/mol # +/- 1.32
analytical_expression -3.711215E+3    -5.822915E-1    2.148121E+5    1.343807E+3    -1.154342E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1973ROB/HEM][1978HEL/DEL]
# delfGO = -1401.573 +/- 0.28 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -1557.090 +/- 0.25 kcal/mol
# SOPPr = 120.38 +/- 0.4 cal/K/mol
# CpPr = 136.546 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 208.800 cm3/mol
# mole wt. = 467.6372 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Hydrotalcite_M4A
Mg4Al2(OH)14(H2O)3 + 14 H+ = + 4 Mg+2 + 2 Al+3 + 17 H2O
log k      81.1564 # +/- 2.5
delta_h    -149 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.375324E+3    -3.449654E-1    1.569200E+5    8.518804E+2    -6.658322E+6
# -Range: 0.01 - 90 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K, Cp = constant
# data source: [1978HEL/DEL_a][1992BEN/REA][1994ATK/GLA][2005ALL/NAV_a][2012GAO/LI]
# delfGO = -1520.1 +/- 4 kcal/mol
# delfHO = -1715 +/- 13 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 120.0 +/- 40 cal/K/mol
# CpPr = 154.030 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 219.260 cm3/mol
# mole wt. = 443.3308 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Hydrotalcite_M6A
Mg6Al2(OH)18(H2O)5 + 18 H+ = + 6 Mg+2 + 2 Al+3 + 23 H2O
log k      98.9291 # +/- 11
delta_h    -170.166 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.110317E+3    -4.481202E-1    2.005975E+5    1.118616E+3    -8.702276E+6
# -Range: 0.01 - 80 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K, Cp = constant
# data source: [1978HEL/DEL_a][1992ATK/GLA][2005ALL/NAV_a]
# delfGO = -2053 +/- 15 kcal/mol
# delfHO = -2326.683 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 143.600 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 212.744 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 228.000 cm3/mol
# mole wt. = 596.0004 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Hydrotalcite_M4Ac
Mg4Al2(OH)12(CO3)(H2O)3 + 13 H+ = + 4 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 15 H2O
log k      61.0036 # +/- 1
delta_h    -126.662 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.873767E+3    -4.289059E-1    1.795129E+5    1.032515E+3    -8.385131E+6
# -Range: 0.01 - 80 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2003JOH/GLA][2005ALL/NAV_a][Unpublished]
# delfGO = -1574.5 +/- 3 kcal/mol
# delfHO = -1765.817 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 126.864 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 153.216 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 220.214 cm3/mol
# mole wt. = 469.3254 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Hydrotalcite_M42Ac
Mg4.2Al2(OH)12.4(CO3)(H2O)3.2 + 13.4 H+ = + 4.2 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 15.6 H2O
log k      64.7944 # +/- 999999
delta_h    -131.429 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.948060E+3    -4.391612E-1    1.845453E+5    1.059444E+3    -8.596028E+6
# -Range: 0.01 - 80 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO 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]
# delfGO = -1625.043 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -1824.314 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 128.952 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 159.087 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 221.556 cm3/mol
# mole wt. = 484.5924 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Hydrotalcite_M44Ac
Mg4.4Al2(OH)12.8(CO3)(H2O)3.4 + 13.8 H+ = + 4.4 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 16.2 H2O
log k      68.6505 # +/- 999999
delta_h    -136.374 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.022499E+3    -4.494249E-1    1.896225E+5    1.086401E+3    -8.807380E+6
# -Range: 0.01 - 80 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO 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]
# delfGO = -1675.497 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -1882.632 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 131.338 +/- 999999 cal/K/mol

```

```

# CpPrTr = 164.959 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 222.781 cm3/mol
# mole wt. = 499.8593 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Hydrotalcite_M46Ac
Mg4.6Al2(OH)13.2(CO3)(H2O)3.6 + 14.2 H+ = + 4.6 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 16.8 H2O
log k 72.5351 # +/- 999999
delta_h -141.396 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.096762E+3 -4.596716E-1 1.947014E+5 1.113289E+3 -9.017567E+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 = -1725.912 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1940.874 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 133.852 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 170.830 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 223.903 cm3/mol
# mole wt. = 515.1263 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Hydrotalcite_M48Ac
Mg4.8Al2(OH)13.6(CO3)(H2O)3.8 + 14.6 H+ = + 4.8 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 17.4 H2O
log k 76.4403 # +/- 999999
delta_h -146.474 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.171138E+3 -4.699259E-1 1.997999E+5 1.140208E+3 -9.228339E+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 = -1776.299 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -1999.059 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 136.463 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 176.701 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 224.933 cm3/mol
# mole wt. = 530.3932 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Hydrotalcite_M50Ac
Mg5Al2(OH)14(CO3)(H2O)4 + 15 H+ = + 5 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 18 H2O
log k 80.3638 # +/- 999999
delta_h -151.603 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.246144E+3 -4.802643E-1 2.049445E+5 1.167346E+3 -9.441242E+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 = -1826.661 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -2057.194 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 139.157 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 182.573 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 225.884 cm3/mol
# mole wt. = 545.6602 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Hydrotalcite_M52Ac
Mg5.2Al2(OH)14.4(CO3)(H2O)4.2 + 15.4 H+ = + 5.2 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 18.6 H2O
log k 84.3049 # +/- 999999
delta_h -156.779 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.320488E+3 -4.905162E-1 2.100584E+5 1.194244E+3 -9.651504E+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 = -1876.999 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -2115.281 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 141.931 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 188.444 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 226.766 cm3/mol
# mole wt. = 560.9272 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

Hydrotalcite_M54Ac
Mg5.4Al2(OH)14.8(CO3)(H2O)4.4 + 15.8 H+ = + 5.4 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 19.2 H2O
log k 88.2644 # +/- 999999
delta_h -162.005 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.395446E+3 -5.008466E-1 2.152186E+5 1.221353E+3 -9.864014E+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 = -1927.312 +/- 999999 kcal/mol
# delfH0 = -2173.318 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 144.788 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 194.316 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 227.594 cm3/mol
# mole wt. = 576.1941 g/mol
# date: 1. Feb. 2021

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 92.2443 # +/- 999999
delta_h -167.288 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.470086E+3 -5.111288E-1 2.203722E+5 1.248340E+3 -1.007540E+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 = -2231.299 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 147.742 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 200.186 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 228.377 cm3/mol
# mole wt. = 591.4611 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

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      96.2529 # +/- 999999
delta_h    -172.648 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -3.545025E+3    -5.214536E-1    2.255569E+5    1.275427E+3    -1.028754E+7
#
# -Range: 0.01 - 80 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfGO 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]
# delfGO = -2027.843 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -2289.202 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 150.824 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 206.058 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 229.129 cm3/mol
# mole wt. = 606.7280 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

#Hydrotalcite_M6Ac
Mg6Al2(OH)16(CO3)(H2O)5 + 17 H+ = + 6 Mg+2 + 2 Al+3 + 1 HCO3- + 21 H2O
log_k      100.3266 # +/- 10
delta_h    -178.187 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -3.619847E+3    -5.317552E-1    2.307693E+5    1.302448E+3    -1.049897E+7
#
# -Range: 0.01 - 80 deg C
#
# gflag: 3 [delfGO 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]
# delfGO = -2078 +/- 10 kcal/mol
# delfHO = -2346.927 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 154.204 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 211.930 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 229.862 cm3/mol
# mole wt. = 621.9950 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

#Hydrotalcite_M6AC1
Mg6Al2(OH)16Cl2(H2O)5 + 16 H+ = + 6 Mg+2 + 2 Al+3 + 2 Cl- + 21 H2O
log_k      87.4814 # +/- 13
delta_h    -161 kcal/mol # +/- 30
analytical_expression  -4.190661E+3    -6.286652E-1    2.586082E+5    1.510805E+3    -1.246124E+7
#
# -Range: 0.01 - 65 deg C
#
# gflag: 3 [delfGO from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 338K, Cp = constant
# data source: [1978HEL/DEL_a][2005ALL/NAV_a][2013ROZ/CUR]
# delfGO = -2018 +/- 18 kcal/mol
# delfHO = -2279 +/- 30 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 160 +/- 80 cal/K/mol
# CpPr = 209.712 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 236.600 cm3/mol
# mole wt. = 632.8912 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

#Hydrotalcite_M6Fc
Mg6Fe2(OH)16(CO3)(H2O)5 + 17 H+ = + 6 Mg+2 + 2 Fe+3 + 1 HCO3- + 21 H2O
log_k      98.2405 # +/- 4
delta_h    -169.350 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -3.600300E+3    -5.266769E-1    2.276019E+5    1.296747E+3    -1.035830E+7
#
# -Range: 0.01 - 80 deg C
#
# gflag: 3 [delfGO from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 353K, Cp = constant
# data source: [1978HEL/DEL_a][2005ALL/NAV_a][2010ROZ/BER][2011ROZ/BER]
# delfGO = -1856.0 +/- 7 kcal/mol
# delfHO = -2122.102 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 163.073 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 220.665 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 237.480 cm3/mol
# mole wt. = 679.7260 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

#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      11.0749 # +/- 0.5
delta_h    -21.91 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression  -4.494833E+2    -6.643780E-2    2.854825E+4    1.613787E+2    -1.307198E+6
#
# -Range: 0.01 - 25 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 298.15K, Cp = constant
# data source: [2005ALL/NAV]
# delfGO = -249.21 +/- 0.5 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -278.676 +/- 0.49 kcal/mol
# SOPPr = 20.450 +/- 0.04 cal/K/mol
# CpPr = 24.140 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 36.542 cm3/mol
# mole wt. = 73.8426 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

#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 delfGO used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
# data source: [2006LOT/WIN][2008LOT/MAT][2012ART/SAS]
# delfGO = -1530.231 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -1721.717 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 131.160 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 155.414 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 220.200 cm3/mol
# mole wt. = 443.3308 g/mol
# date: 13. Jul. 2015

#Hydrotalcite_CO3
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 delfGO 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/K/mol
# CpPrTr = 122.514 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 115.000 cm3/mol
# mole wt. = 310.9982 g/mol
# date: 13. Jul. 2015

#Hydrotalcite_G0311
# 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/K/mol
# CpPrTr = 155.074 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 124.587 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 119.000 cm3/mol
# mole wt. = 339.8617 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

#Hydrotalcite_Fe11
# 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/K/mol
# CpPrTr = 161.557 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 HPO4-2 + 2 H2O
log k = -6.1532 # +/- 1.9
delta_h = -91.80 kcal/mol # +/- 2.6
analytical_expression = -9.555120E+3 -1.567137E+0 5.391854E+5 3.459700E+3 -3.137798E+7
#
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978ROB/HEM]
# delfG0 = -3004.83 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -3195.75 +/- 1.3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 186.60 +/- 0.9 cal/K/mol
# CpPrTr = 184.066 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 319.200 cm3/mol
# mole wt. = 1004.6230 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

Illiite
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 = 7.6082 # +/- 2.5
delta_h = -49.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression = -2.292032E+3 -3.276208E-1 1.393468E+5 8.152110E+2 -7.755009E+6
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 480K
# data source: [1970HEL/MaC][1978HEL/DEL_a][2012GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1307.1 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1395.4 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 71.7 +/- 5 cal/K/mol
# CpPrTr = 75.173 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 139.304 cm3/mol
# mole wt. = 383.9005 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

Illiite(avg)
K0.65(Mg0.25Fe0.2Al1.6)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 0.65 K+ + 0.25 Mg+2 + 0.05 Fe+2 + 0.15 Fe+3 + 2.1 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log k = 7.0060 # +/- 2
delta_h = -48.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression = -2.289080E+3 -3.265137E-1 1.388784E+5 8.142422E+2 -7.747604E+6
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 480K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2012GA1/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1289.7 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1377.4 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 74.6 +/- 5 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.517 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 139.304 cm3/mol
# mole wt. = 391.6285 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

```

```

Illite IMt-2 # from Silver Hill. Parent mineral for other illites.
K0.762Na0.044Mg0.241Fe0.376Al1.427 (AlO.613Si3.387)O10(OH)2 + 8.452 H+ + 1.548 H2O = + 0.292 Fe+3 + 0.084 Fe+2 + 0.241 Mg+2 + 0.762 K+ +
2.04 Al+3 + 3.387 Si(OH)4 + 0.044 Na+
log_k 11.4839 # +/- 1.9
delta_h -54.89 kcal/mol # +/- 2.7
analytical_expression -2.318858E+3 -3.319199E-1 1.416220E+5 8.252361E+2 -7.795408E+6
#
# -Range: 0.01 - 210 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 483K
# data source: [2012GAI/BLA]
# delFGO = -1277.53 +/- 2.0 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -1365.02 +/- 2.0 kcal/mol
# SOPPr = 77.658 +/- 0.04 cal/K/mol
# CpPr = 78.416 +/- 0.02 cal/K/mol
# mole vol. = 139.180 cm3/mol
# mole wt. = 401.8369 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delFGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delFHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPPr = 27.758 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPr = 13.138 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978ROB/HEM]
# delFGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delFHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPPr = 6.520 +/- 0.03 cal/K/mol
# CpPr = 5.97 +/- 0.1 cal/K/mol
# 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 delFGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
# delFGO = -679.45 +/- 1.0 kcal/mol
# delFHO = -722.1 +/- 1 kcal/mol
# SOPPr = 31.90 +/- 0.3 cal/K/mol
# CpPr = 38.212 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used], polyhedral model
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [2010BLA/BOU][2012ART/SAS]
# delFGO = -1546.565 +/- 999999 kcal/mol
# delFHO = -1666.682 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 77.928 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 82.433 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 174.380 cm3/mol
# mole wt. = 510.6789 g/mol
# date: 15. Jul. 2015

Jennite
Ca9Si6018(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 [delFGO 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]
# delFGO = -3313.01 +/- 3.1 kcal/mol
# delFHO = -3591.6 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 310 +/- 30 cal/K/mol
# CpPr = 380 +/- 70 cal/K/mol
# mole vol. = 457.400 cm3/mol
# mole wt. = 1063.3696 g/mol
# date: 25. Jul. 2015

#Jennite(gel) # Superseded by CSH165
Ca1.6667SiO3.6667(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 delFGO used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
# data source: [2008LOI/MAT][2012ART/SAS]
# delFGO = -593.334 +/- 999999 kcal/mol
# delFH0 = -651.263 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 33.617 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 50.384 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delFGO = -254.43 +/- 0.5 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -274.90 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 37.17 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 27.326 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1978HEL/DEL]
# delFGO = -76.98 +/- 0.7 kcal/mol
# delFH0 = -86.80 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 22.50 +/- 1.5 cal/K/mol
# CpPrTr = 20.099 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 40.380 cm3/mol
# mole wt. = 94.1960 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

K2SeO4(s)
K2SeO4 = + 2 K+ + 1 SeO4-2
log k      0.9016 # +/- 0.1
delta_h    145.47 kcal/mol # +/- 0.4
analytical expression  -2.807689E+3   -4.061787E-1   1.627398E+5   1.009864E+3   -1.021809E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delFGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1970KAL/STE][1980LOP/TEL][1983ATA/NOM][19990JK/CHR]
# delFGO = -239.10 +/- 0.4 kcal/mol
# delFH0 = -266.15 +/- 0.4 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 48.30 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 34.113 +/- 0.03 cal/K/mol
# mole vol. = 72.465 cm3/mol
# mole wt. = 221.1542 g/mol
# date: 10. Apr. 2020

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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978ROB/HEM]
# delFGO = -315.390 +/- 0.13 kcal/mol
# delFH0 = -343.619 +/- 0.13 kcal/mol
# SOPrTr = 41.960 +/- 0.08 cal/K/mol
# CpPrTr = 31.073 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 65.500 cm3/mol
# mole wt. = 174.2542 g/mol
# date: 21. Jul. 2015

K_Feldspar # Orthoclase
KAISi3O8 + 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 delFGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1991SVE/HEM]
# delFGO = -895.61 +/- 1.0 kcal/mol
# delFH0 = -949.459 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 51.130 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 44.216 +/- 999999 cal/K/mol
# 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   9.99999E+05
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used] Modeling phase
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [Unpublished]
# delFGO = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# delFH0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 999999 +/- 999999 cal/K/mol

```

```

# CpPrTr = 999999 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 47.0980 g/mol
# date: 6. Feb. 2019

K_in_CASH_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 9.99999E+05
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used] Modeling phase
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [Unpublished]
# delfGO = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 999999 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 999999 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 47.0980 g/mol
# date: 30. Mar. 2020

Kalsilite
KA1SiO4 + 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 delfGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL_a][1997RIM_a]
# delfGO = -482.85 +/- 1.0 kcal/mol
# delfHO = -510.6 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 31.850 +/- 0.30 cal/K/mol
# CpPrTr = 28.621 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][1995ROB/HEM][1997RIM_a]
# delfGO = -908.37 +/- 1.0 kcal/mol
# delfHO = -985.2 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 47.90 +/- 0.5 cal/K/mol
# CpPrTr = 58.19 +/- 0.6 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 473K
# data source: [1936VON/MOS][1943WEL/CLA][1954PEP/WEL][1958CAR][1966FAU][1968ROB][1979EDE/SAT][1992ATK/BEN][1992BEN/REA]
# [1994QU1/MAJ][1999GLA/TYR][2000COU][2000ZHA][2007MAT/LOT][2010BAL/LOT][2012GEI/DAC][2014DIL/LOT][Unpublished]
# delfGO = -1199.14 +/- 0.9 kcal/mol
# delfHO = -1326.05 +/- 0.9 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 99.31 +/- 0.9 cal/K/mol
# CpPrTr = 107 +/- 11 cal/K/mol
# mole vol. = 149.619 cm3/mol
# mole wt. = 378.2846 g/mol
# date: 10. Feb. 2019

Katoite_AlSi01
Ca3Al2(SiO4)0.2(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 [delfGO 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][1994QU1/MAJ][2007MAT/LOT][2014DIL/LOT][Unpublished]
# delfGO = -1209.263 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -1334.637 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 98.652 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 105.646 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 148.686 cm3/mol
# mole wt. = 380.6900 g/mol
# date: 11. Feb. 2019

Katoite_AlSi02
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 [delfGO 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][1994QU1/MAJ][2007MAT/LOT][2014DIL/LOT][Unpublished]
# delfGO = -1219.324 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -1343.229 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 97.783 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 104.722 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 147.754 cm3/mol
# mole wt. = 383.0954 g/mol
# date: 11. Feb. 2019

Katoite_AlSi03

```

```

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 [delfGO from log K data] SSAS between Grossular & Katoite Al
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
# data source: [1992BEN/REA] [1992.JAP/GLA] [1994ATK/GLA] [1994QUI/MAJ] [2007MAT/LOT] [2014DIL/LOT] [Unpublished]
# delfGO = -1229.370 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -1351.820 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 96.867 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 103.797 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data] SSAS between Grossular & Katoite Al
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
# data source: [1992BEN/REA] [1992.JAP/GLA] [1994ATK/GLA] [1994QUI/MAJ] [2007MAT/LOT] [2014DIL/LOT] [Unpublished]
# delfGO = -1239.412 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -1360.411 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 95.936 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 102.873 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 145.897 cm3/mol
# mole wt. = 387.9062 g/mol
# date: 11.Feb.2019

Katoite_AlSiO8
Ca3Al2(SiO4)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 [delfGO from log K data] SSAS between Grossular & Katoite Al
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
# data source: [1992BEN/REA] [1992.JAP/GLA] [1994ATK/GLA] [1994QUI/MAJ] [2007MAT/LOT] [2014DIL/LOT] [Unpublished]
# delfGO = -1279.576 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -1394.775 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 92.199 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 99.176 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 142.236 cm3/mol
# mole wt. = 397.5277 g/mol
# date: 11.Feb.2019

Katoite_AlSiO9
Ca3Al2(SiO4)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 [delfGO from log K data] SSAS between Grossular & Katoite Al
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
# data source: [1992BEN/REA] [1992.JAP/GLA] [1994ATK/GLA] [1994QUI/MAJ] [2007MAT/LOT] [2014DIL/LOT] [Unpublished]
# delfGO = -1289.617 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -1403.367 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 91.263 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 98.251 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 141.336 cm3/mol
# mole wt. = 399.9331 g/mol
# date: 11.Feb.2019

Katoite_AlSi10
Ca3Al2(SiO4)(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 [delfGO from log K data] SSAS between Grossular & Katoite Al
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
# data source: [1992BEN/REA] [1992.JAP/GLA] [1994ATK/GLA] [1994QUI/MAJ] [2007MAT/LOT] [2014DIL/LOT] [Unpublished]
# delfGO = -1299.656 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -1411.958 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 90.322 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 97.327 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 140.443 cm3/mol
# mole wt. = 402.3385 g/mol
# date: 11.Feb.2019

Katoite_Fe
Ca3Fe2(OH)12 + 12 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Fe+3 + 12 H2O
log_k      75.6115 # +/- 3
delta_h    -128 kcal/mol # +/- 20
analytical_expression -1.837753E+3 -2.851574E-1 1.216675E+5 6.650549E+2 -4.917843E+6
#
# -Range: 0.01 - 85 deg C
#
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 358K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [1979EDE/SAT_a] [2014DIL/LOT]
# delfGO = -981.7 +/- 4 kcal/mol
# delfHO = -1105 +/- 15 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 110 +/- 50 cal/K/mol
# CpPrTr = 115.288 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 155.000 cm3/mol
# mole wt. = 436.0156 g/mol
# date: 25.Jan.2021

Katoite_FeSiO84
Ca3Fe2(SiO4)0.84(OH)8.64 + 12 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Fe+3 + 0.84 Si(OH)4 + 8.64 H2O
log_k      63.7886 # +/- 3
delta_h    -115.177 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.059752E+3 -3.133937E-1 1.330572E+5 7.424409E+2 -5.904070E+6
#
# -Range: 0.01 - 50 deg C
#
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 323K

```

```

# data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][2014D1L/LOT]
# delfG0 = -1070.2 +/- 4 kcal/mol
# delfH0 = -1181.461 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 102.485 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 106.478 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 148.800 cm3/mol
# mole wt. = 456.2209 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Katoite_FeSi134
Ca3Fe2(SiO4)1.34(OH)6.64 + 12 H+ = + 3 Ca+2 + 2 Fe+3 + 1.34 Si(OH)4 + 6.64 H2O
log k 56.8088 # +/- 3
delta_h -106.088 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.190531E+3 -3.301592E-1 1.394656E+5 7.884690E+2 -6.489884E+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: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][2014D1L/LOT]
# delfG0 = -1122.8 +/- 4 kcal/mol
# delfH0 = -1228.488 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 92.191 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 101.065 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 144.700 cm3/mol
# mole wt. = 468.2478 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

KBr (s)
KBr = + 1 K+ + 1 Br-
log k 1.0680 # +/- 0.3
delta_h 4.810 kcal/mol # +/- 0.40
analytical_expression -7.182375E+2 -1.124848E-1 3.992136E+4 2.617197E+2 -2.547553E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = -90.92 +/- 0.4 kcal/mol *[GHS]
# delfH0 = -94.12 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 22.930 +/- 0.01 cal/K/mol
# CpPrTr = 12.576 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 43.431 cm3/mol
# mole wt. = 119.0023 g/mol
# date: 2. Apr. 2020

Kerolite
Mg3Si4O10(OH)2(H2O) + 6 H+ + 3 H2O = + 3 Mg+2 + 4 Si(OH)4
log k 25.9210 # +/- 0.3
delta_h -50.8 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.221594E+3 -2.960713E-1 1.390568E+5 7.906656E+2 -7.739369E+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 *[GHS]
# SOPrTr = 76.4 +/- 5 cal/K/mol
# CpPrTr = 91.280 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 144.250 cm3/mol
# mole wt. = 397.2808 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

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 *[GHS]
# delfH0 = -78.37 +/- 0.1 kcal/mol
# SOPrTr = 25.4 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 12.609 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 53.206 cm3/mol
# mole wt. = 166.0028 g/mol
# date: 20. May. 2016

KN02 (s)
KN02 = + 1 K+ + 1 N02-
log k 1.4220 # +/- 5
delta_h 3.22 kcal/mol # +/- 2.0
analytical_expression -5.698981E+2 -9.201018E-2 3.193964E+4 2.080867E+2 -2.068442E+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 *[GHS]
# delfH0 = -88.49 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 36.35 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 25.67 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 44.441 cm3/mol
# mole wt. = 85.1038 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

KN03 (s)
KN03 = + 1 K+ + 1 N03-
log k -0.2565 # +/- 0.6
delta_h 8.53 kcal/mol # +/- 0.2
analytical_expression -1.828942E+2 -4.500675E-2 6.867241E+3 7.222716E+1 -5.067526E+5
#
# -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 *[GHS]
# delfH0 = -118.25 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 31.8 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 23.017 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 48.144 cm3/mol
# mole wt. = 101.1032 g/mol

```

```

# date: 26. Jan. 2021
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 *[GHS]
# delfH0 = -101.51 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 18.86 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 15.428 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# SOPrTr = 176 +/- 20 cal/K/mol
# CpPrTr = 221.874 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# SOPrTr = 160.74 +/- 2.3 cal/K/mol
# CpPrTr = 221.87 +/- 6.8 cal/K/mol
# 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
# SOPrTr = 19.79 +/- 0.5 cal/K/mol
# CpPrTr = 29.07 +/- 0.2 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# delfH0 = -551.42 +/- 0.6 kcal/mol
# SOPrTr = 30.50 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 30.732 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# SOPrTr = 478.2 +/- 59 cal/K/mol
# CpPrTr = 467.331 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/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
# SOPrTr = 464.150 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 470.393 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/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
# SOPrTr = 493.3 +/- 59 cal/K/mol
# CpPrTr = 484.344 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/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/K/mol
# CpPrTr = 471.904 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 830.200 cm3/mol
# mole wt. = 1881.7483 g/mol
# date: 23. Aug. 2016

#Lawsonite
CaAl2Si2O7(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 [1992.JOH/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/K/mol
# CpPrTr = 70.473 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delFG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delFH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 15.490 +/- 0.07 cal/K/mol
# CpPrTr = 6.384 +/- 0.05 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/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/K/mol
# CpPrTr = 449.104 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/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/K/mol

```

```

# CpPrTr = 442.928 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 813.985 cm3/mol
# mole wt. = 1845.7177 g/mol
# date: 28. Jul. 2016

Lepidocrocite
FeO(OH) + 3 H+ = + 1 Fe+3 + 2 H2O
log k      2.0564 # +/- 0.4
delta_h    -17.22 kcal/mol # +/- 1.7
analytical_expression -4.939782E+2 -7.695348E-2 2.897249E+4 1.766801E+2 -1.367079E+6
#
# -Range: 0.01 - 114 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 387K
# data source: [2013LEM/BER]
# delFGO = -114.69 +/- 0.5 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -131.26 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 15.554 +/- 0.07 cal/K/mol
# CpPrTr = 16.506 +/- 0.13 cal/K/mol
# mole vol. = 22.393 cm3/mol
# mole wt. = 88.8537 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Leucite
KAlSi2O6 + 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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978ROB/HEM]
# delFGO = -687.354 +/- 0.68 kcal/mol
# delFH0 = -726.255 +/- 0.66 kcal/mol
# SOPrTr = 47.850 +/- 0.40 cal/K/mol
# CpPrTr = 39.230 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1968ROB/WAL]
# delFGO = -134.33 +/- 0.5 kcal/mol
# delFH0 = -143.10 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 8.980 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPrTr = 12.950 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1956HUB/HOL][1960KEL][1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
# delFGO = -144.353 +/- 0.26 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -151.790 +/- 0.21 kcal/mol
# SOPrTr = 9.50 +/- 0.5 cal/K/mol
# CpPrTr = 10.24 +/- 0.4 cal/K/mol
# 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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1998CHA]
# delFGO = -104.91 +/- 0.1 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -115.90 +/- 0.1 kcal/mol
# SOPrTr = 10.234 +/- 0.05 cal/K/mol
# CpPrTr = 11.893 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 16.440 cm3/mol
# mole wt. = 23.9484 g/mol
# date: 11. Mar. 2016

Litharge # PbO 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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delFGO = -45.24 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -52.44 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 15.85 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 10.93 +/- 0.4 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 453.7K
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delFGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delFH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 6.960 +/- 0.05 cal/K/mol
# CpPrTr = 5.894 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 12.974 cm3/mol
# mole wt. = 6.9410 g/mol
# date: 11. Mar. 2016

Lizardite
Mg3Si205(OH)4 + 6 H+ = + 1 H2O + 3 Mg+2 + 2 Si(OH)4
log_k      31.1605 # +/- 999999
delta_h    -56.525 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.620741E+3   -2.238782E-1   1.026532E+5   5.792770E+2   -5.247715E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used], phase and stability relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [2004EVAL]
# delFGO = -965.520 +/- 999999 kcal/mol
# delFH0 = -1044.181 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 51.700 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 65.465 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 107.495 cm3/mol
# mole wt. = 277.1122 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

Maghemite
Fe2O3 + 6 H+ = + 2 Fe+3 + 3 H2O
log_k      3.0076 # +/- 1.5
delta_h    -35.30 kcal/mol # +/- 3.8
analytical_expression -9.773800E+2   -1.538443E-1   5.769114E+4   3.490546E+2   -2.751520E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [2013LEM/BER]
# delFGO = -174.2 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -193.35 +/- 2.0 kcal/mol
# SOPrTr = 22.24 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 25.09 +/- 0.4 cal/K/mol
# mole vol. = 29.130 cm3/mol
# mole wt. = 159.6922 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Magnesioferrite
MgFe2O4 + 8 H+ = + 1 Mg+2 + 2 Fe+3 + 4 H2O
log_k      20.9133 # +/- 0.8
delta_h    -66.614 kcal/mol # +/- 3.24
analytical_expression -1.338816E+3   -2.070263E-1   8.369505E+4   4.783614E+2   -3.816524E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1954BON][1961KOE/BAR][1968ROB/WAL][2005KLE/AHR]
# delFGO = -314.97 +/- 0.7 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -341.720 +/- 0.44 kcal/mol
# SOPrTr = 29.1 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 35.19 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 44.570 cm3/mol
# mole wt. = 199.9966 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Magnesite
MgCO3 + 1 H+ = + 1 Mg+2 + 1 HCO3-
log_k      2.2958 # +/- 0.9
delta_h    -10.7 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression -8.442348E+2   -1.347434E-1   4.790283E+4   3.056063E+2   -2.681360E+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]
# delFGO = -245.66 +/- 1.0 kcal/mol
# delFH0 = -265.6 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 15.738 +/- 0.20 cal/K/mol
# CpPrTr = 18.128 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 28.018 cm3/mol
# mole wt. = 84.3142 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

Magnesium
Mg + 2 H+ + 0.5 O2 = + 1 Mg+2 + 1 H2O
log_k      122.5402 # +/- 0.5
delta_h    -178.234 kcal/mol # +/- 0.26
analytical_expression -4.613398E+2   -6.970205E-2   6.430699E+4   1.641751E+2   -1.534777E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delFGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delFH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 7.811 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPrTr = 5.921 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 13.968 cm3/mol
# mole wt. = 24.3050 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

Magnetite
Fe3O4 + 8 H+ = + 2 Fe+3 + 1 Fe+2 + 4 H2O
log_k      10.4533 # +/- 0.6
delta_h    -51.767 kcal/mol # +/- 3.61
analytical_expression -1.311286E+3   -2.049278E-1   7.881500E+4   4.689629E+2   -3.726893E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1954BON][1961KOE/BAR][1968ROB/WAL][2005KLE/AHR]

```

```

# delfG0 = -242.60 +/- 0.7 kcal/mol *[GHS]
# delfH0 = -267.250 +/- 0.44 kcal/mol
# SOPrTr = 34.9 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 36.25 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 44.524 cm3/mol
# mole wt. = 231.5386 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

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: [1974R[C/BRO][1978HEL/DEL][1982WAG/EVA]
# delfG0 = -214.18 +/- 0.8 kcal/mol
# delfH0 = -251.90 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 44.5 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 39.306 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 6.314 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 10.70 +/- 0.2 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 75.820 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 129.400 cm3/mol
# mole wt. = 398.1839 g/mol
# date: 14. Jul. 2015

Massicot # PbO 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 *[GHS]
# delfH0 = -52.117 +/- 0.15 kcal/mol
# SOPrTr = 16.420 +/- 0.05 cal/K/mol
# CpPrTr = 10.940 +/- 0.10 cal/K/mol
# 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][1974OPE][1978HEL/DEL][1991SVE/HEM]
# delfG0 = -895.61 +/- 1.0 kcal/mol
# delfH0 = -949.489 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 51.130 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 48.496 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 308K
# data source: [1949LYO/GIA] [1968ROB/WAL] [2013LEM/BER]
# delFGO = -599.359 +/- 0.15 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -720.007 +/- 0.14 kcal/mol
#
# SOPrTr = 97.78 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 94.39 +/- 0.7 cal/K/mol
#
# 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      69.0147 # +/- 1.1
delta_h    -108.2 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression  -1.719825E+3      -2.480007E-1      1.190404E+5      6.169183E+2      -5.600812E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1963WEL/KEL] [1964PAN/KEL] [1978HEL/DEL] [1982PLU/BUS_a]
# delFGO = -1036.53 +/- 1.0 kcal/mol
# delFH0 = -1090.9 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
#
# SOPrTr = 60.50 +/- 0.5 cal/K/mol
# CpPrTr = 60.292 +/- 999999 cal/K/mol
#
# mole vol. = 104.400 cm3/mol
# mole wt. = 328.7052 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

Mg3 (PO4)2 (s)
Mg3 (PO4)2 + 2 H+ = + 3 Mg+2 + 2 HPO4-2
log_k      6.4871 # +/- 3
delta_h    -56.64 kcal/mol # +/- 2.6
analytical_expression  -3.337258E+3      -5.359592E-1      1.939787E+5      1.202796E+3      -1.096059E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1963OET/MCD] [1968NOR/KIE]
# delFGO = -837.3 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -895.10 +/- 2.5 kcal/mol
#
# SOPrTr = 45.22 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 51.020 +/- 999999 cal/K/mol
#
# mole vol. = 95.341 cm3/mol
# mole wt. = 262.8578 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

Mg (NO3)2 (s)
Mg (NO3)2 = + 1 Mg+2 + 2 NO3-
log_k      15.1806 # +/- 1.1
delta_h    -21.30 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression  -1.329386E+3      -2.133361E-1      7.806939E+4      4.834571E+2      -4.440527E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL] [1982WAG/EVA]
# delFGO = -140.82 +/- 0.6 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -188.97 +/- 0.2 kcal/mol
#
# SOPrTr = 39.2 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 33.922 +/- 999999 cal/K/mol
#
# mole vol. = 64.485 cm3/mol
# mole wt. = 148.3148 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

MgCl2 (H2O)6 (s)
MgCl2 (H2O)6 = + 1 Mg+2 + 2 Cl- + 6 H2O
log_k      4.3865 # +/- 0.5
delta_h    -3.85 kcal/mol # +/- 0.4
analytical_expression  -1.579647E+3      -2.529216E-1      8.565638E+4      5.766403E+2      -4.863029E+6
#
# -Range: 0.01 - 98 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 371K
# data source: [1982WAG/EVA] [2012PIL/SVO]
# delFGO = -505.41 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -597.28 +/- 0.2 kcal/mol
#
# SOPrTr = 87.50 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 81 +/- 23 cal/K/mol
#
# mole vol. = 129.574 cm3/mol
# mole wt. = 203.3016 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

MgCl2 (s)
MgCl2 = + 1 Mg+2 + 2 Cl-
log_k      21.8128 # +/- 0.4
delta_h    -37.883 kcal/mol # +/- 0.28
analytical_expression  -1.421975E+3      -2.300704E-1      8.632768E+4      5.156945E+2      -4.730056E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1943KEL/MOO] [1943MOO] [1998CHA]
# delFGO = -141.51 +/- 0.1 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -153.350 +/- 0.11 kcal/mol
#
# SOPrTr = 21.42 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 17.06 +/- 0.1 cal/K/mol
#
# mole vol. = 36.210 cm3/mol
# mole wt. = 95.2104 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

MgSO4 (s)
MgSO4 = + 1 Mg+2 + 1 SO4-2
log_k      8.8254 # +/- 4
delta_h    -27.1 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression  -1.530163E+3      -2.440541E-1      9.037038E+4      5.523473E+2      -5.164307E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C

```

```

# gflag: 1 [reported delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfGO = -274.4 +/- 5 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -301.7 +/- 5 kcal/mol
# SOPrTr = 21.85 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 22.939 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 45.251 cm3/mol
# mole wt. = 120.3686 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

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 delfGO used], polyhedral model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL] [Unpublished]
# delfGO = -1070.1 +/- 3 kcal/mol
# delfHO = -1153.4 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 83.5 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 88.471 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1976BAE/MES] [1978HEL/DEL_a] [1997SHO/SAS]
# delfGO = -147.8 +/- 1 kcal/mol
# delfHO = -167.1 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 23.10 +/- 5.0 cal/K/mol
# CpPrTr = 20.127 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 27.088 cm3/mol
# mole wt. = 88.9527 g/mol
# date: 7. Apr. 2016

Monetite
CaHPO4 = 1 Ca+2 + 1 HPO4-2
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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not given
# data source: [1982WAG/EVA]
# delfGO = -401.80 +/- 0.2 kcal/mol
# delfHO = -433.65 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 26.60 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 26.30 +/- 0.2 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2000ZHA]
# delfGO = -1882.5 +/- 8 kcal/mol
# delfHO = -2111.6 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 191.5 +/- 8 cal/K/mol
# CpPrTr = 185.8 +/- 2 cal/K/mol
# mole vol. = 285.180 cm3/mol
# mole wt. = 586.2709 g/mol
# date: 21. May. 2019

Monoborate_Al12
(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 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1978HEL/DEL_a] [2000ZHA]
# delfGO = -1882.5 +/- 8 kcal/mol
# delfHO = -2111.6 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 191.5 +/- 8 cal/K/mol
# CpPrTr = 185.8 +/- 2 cal/K/mol
# mole vol. = 285.180 cm3/mol
# mole wt. = 586.2709 g/mol
# date: 21. May. 2019

Monocarbonate_Al
(Ca2Al(OH)6)2(C03)(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 [delfGO from log K data] for reaction shown. Same entry as "Monocarbonate_Al11".
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [1943WEL/GLA] [1953DAN/EIC] [1954PEP/WEL] [1958CAR] [1960CAR/BER] [1980ZHA/ZHO]
# [1994DAM/STR] [1999GLA/TYR] [2001HOB] [2007MAT/LOT] [2011DIL/LOT] [2019BEL/MAJ]
# delfGO = -1755.46 +/- 1.1 kcal/mol
# delfHO = -1969.7 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 170 +/- 10 cal/K/mol

```

```

# CpPrTr = 172.0 +/- 1 cal/K/mol
# mole vol. = 260.774 cm3/mol
# mole wt. = 568.4478 g/mol
# date: 11. Jan. 2019

Monocarbonate_A109
(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_A109 = Monocarbonate_A111 - 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
# SOPPrTr = 165 +/- 12 cal/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = 152.9 +/- 3 cal/K/mol
# mole vol. = 233.557 cm3/mol
# mole wt. = 532.4174 g/mol
# date: 11. Jan. 2019

Monocarbonate_A111
(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_A1".
# 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 *[GHS]
# SOPPrTr = 170 +/- 10 cal/K/mol
# CpPrTr = 172.0 +/- 1 cal/K/mol
# 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 + 13 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Fe+3 + 1 HCO3- + 18 H2O
log k      75.1192 # +/- 2
delta_h    -122.7 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.654066E+3 -4.110247E-1 1.636102E+5 9.636112E+2 -7.236629E+6
#
# -Range: 0.01 - 55 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 328K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2008MOS/LOT][2011DIL/LOT][2019BEL/MAJ_a]
# delfG0 = -1594.9 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1814.8 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 206 +/- 29 cal/K/mol
# CpPrTr = 191.6 +/- 10 cal/K/mol
# mole vol. = 291.661 cm3/mol
# mole wt. = 644.1940 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Monoiodide_Al
(Ca2Al(OH)6)2(I)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 *[GHS]
# SOPPrTr = 203.1 +/- 5 cal/K/mol
# CpPrTr = 198.7 +/- 7 cal/K/mol
# 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 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 2 NO3- + 16 H2O
log k      74.2165 # +/- 0.3
delta_h    -114.8 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -3.053942E+3 -4.919574E-1 1.861522E+5 1.112319E+3 -9.056382E+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 +/- 1.7 kcal/mol
# delfH0 = -1853.7 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 168.0 +/- 8 cal/K/mol
# CpPrTr = 216.0 +/- 7 cal/K/mol
# mole vol. = 296.685 cm3/mol
# mole wt. = 614.4332 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Mononitrite_Al
(Ca2Al(OH)6)2(NO2)2(H2O)4 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Al+3 + 2 NO2- + 16 H2O
log k      75.2574 # +/- 0.3
delta_h    -116.0 kcal/mol # +/- 15
analytical_expression -3.097093E+3 -4.984513E-1 1.898904E+5 1.127318E+3 -9.369516E+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 = -1581.3 +/- 14 kcal/mol
# delfH0 = -1803.6 +/- 14 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 156.0 +/- 5 cal/K/mol
# CpPrTr = 221.7 +/- 7 cal/K/mol
# mole vol. = 274.734 cm3/mol
# mole wt. = 582.4344 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

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_Al14"
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/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 *[GHS]
#
# SOPrTr = 198 +/- 20 cal/K/mol
#
# CpPrTr = 244 +/- 10 cal/K/mol
#
# mole vol. = 330.584 cm3/mol
#
# mole wt. = 658.5478 g/mol
#
# date: 23. Jan. 2019
#
Monosulfate_Al109
(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_Al12 = Monosulfate_Al14 - 2 H2O
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/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/K/mol *[GHS]
#
# CpPrTr = 196.4 +/- 7 cal/K/mol
#
# mole vol. = 274.600 cm3/mol
#
# mole wt. = 568.4718 g/mol
#
# date: 23. Jan. 2019
#
Monosulfate_Al105
(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_Al12 = Monosulfate_Al14 - 2 H2O
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/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/K/mol *[GHS]
#
# CpPrTr = 210.7 +/- 7 cal/K/mol
#
# mole vol. = 281.600 cm3/mol
#
# mole wt. = 595.4946 g/mol
#
# date: 23. Jan. 2019
#
Monosulfate_Al112
(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_Al12 = Monosulfate_Al14 - 2 H2O
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 328K
#
# data source: [1979EDE/SAT_a][2015BAQ/MAT]
#
# delfG0 = -1861.73 +/- 1.1 kcal/mol
#
# delfH0 = -2105.8 +/- 6 kcal/mol
#
# SOPrTr = 156 +/- 21 cal/K/mol *[GHS]
#
# CpPrTr = 225.1 +/- 7 cal/K/mol
#
# mole vol. = 308.938 cm3/mol
#
# mole wt. = 622.5174 g/mol
#
# date: 23. Jan. 2019
#
Monosulfate_Al114
(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_Al1"
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/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 *[GHS]
#
# SOPrTr = 198 +/- 20 cal/K/mol
#
# CpPrTr = 244 +/- 10 cal/K/mol
#
# mole vol. = 330.584 cm3/mol
#
# mole wt. = 658.5478 g/mol
#
# date: 23. Jan. 2019
#
Monosulfate_Al116
(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_Al16 = Monosulfate_Al14 + 2 H2O
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/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
#
# SOPrTr = 202 +/- 21 cal/K/mol *[GHS]
#
# CpPrTr = 263.4 +/- 8 cal/K/mol
#
# 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 + 12 H+ = + 4 Ca+2 + 2 Fe+3 + 1 SO4-2 + 18 H2O
log_k 66.4682 # +/- 1.2
delta_h -130 kcal/mol # +/- 20
analytical_expression -3.303640E+3 -5.216109E-1 2.021729E+5 1.195132E+3 -9.754860E+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 +/- 1.9 kcal/mol
# delfH0 = -1860 +/- 16 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 250 +/- 54 cal/K/mol
# CpPr = 233.8 +/- 7 cal/K/mol
# mole vol. = 320.619 cm3/mol
# mole wt. = 680.2484 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Monticellite
CaMgSiO4 + 4 H+ = + 1 Ca+2 + 1 Mg+2 + 1 Si(OH)4
log k 29.8601 # +/- 0.9
delta_h -49.5 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -8.981823E+2 -1.284268E-1 6.060729E+4 3.216332E+2 -2.916185E+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 = -512.8 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -540.8 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 26.4 +/- 4 cal/K/mol
# CpPr = 29.413 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 51.470 cm3/mol
# mole wt. = 156.4661 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

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 4.2586 # +/- 3
delta_h -38.0 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.153356E+3 -3.007480E-1 1.309884E+5 7.648129E+2 -7.514776E+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 *[GHS]
# SOPPr = 66.8 +/- 5 cal/K/mol
# CpPr = 74.553 +/- 999999 cal/K/mol
# 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. = 366.0432 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

Montmor_Ca(avg)
Ca0.2(Mg0.4Fe0.2Al1.45)(Al0.1Si3.9)O10(OH)2 + 6.4 H+ + 3.6 H2O = + 0.2 Ca+2 + 0.15 Fe+3 + 0.05 Fe+2 + 0.4 Mg+2 + 1.55 Al+3 + 3.9 Si(OH)4
log k 5.9670 # +/- 3
delta_h -42.1 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.189527E+3 -3.067879E-1 1.334704E+5 7.777882E+2 -7.581559E+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][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1260.3 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1346.5 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 70.7 +/- 3 cal/K/mol
# CpPr = 75.944 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 135.843 cm3/mol
# mole wt. = 374.2704 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

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 2.2828 # +/- 3
delta_h -34.3 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.128516E+3 -2.955521E-1 1.293116E+5 7.555288E+2 -7.494210E+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][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1275.2 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1361.0 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 76.3 +/- 5 cal/K/mol
# CpPr = 76.324 +/- 999999 cal/K/mol
# 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: 2. Feb. 2021

Montmor_Cs(avg)
Cs0.4(Mg0.4Fe0.2Al1.45)(Al0.1Si3.9)O10(OH)2 + 6.4 H+ + 3.6 H2O = + 0.4 Cs+ + 0.15 Fe+3 + 0.05 Fe+2 + 0.4 Mg+2 + 1.55 Al+3 + 3.9 Si(OH)4
log k 3.5188 # +/- 3
delta_h -37.1 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.162999E+3 -3.011139E-1 1.315255E+5 7.679703E+2 -7.568304E+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][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1265.1 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1350.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 80.6 +/- 3 cal/K/mol
# CpPr = 78.123 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 162.728 cm3/mol
# mole wt. = 419.4170 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

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 3.6053 # +/- 3
delta_h -38.4 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.158418E+3 -3.011592E-1 1.313471E+5 7.662445E+2 -7.533875E+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][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1254.0 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1340.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 69.1 +/- 5 cal/K/mol
# CpPr = 74.827 +/- 999999 cal/K/mol

```

```

# mole vol. = 141.503 cm3/mol
# mole wt. = 368.6451 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

Montmor_Fe(avg)
Fe0.2(Mg0.4Fe0.2Al1.45)(Al0.1Si3.9)O10(OH)2 + 6.4 H+ + 3.6 H2O = + 0.25 Fe+2 + 0.15 Fe+3 + 0.4 Mg+2 + 1.55 Al+3 + 3.9 Si(OH)4
log k 5.1241 # +/- 3
delta_h -42.3 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.196265E+3 -3.073916E-1 1.339024E+5 7.797729E+2 -7.606910E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1239.4 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1324.7 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 73.1 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.309 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 141.503 cm3/mol
# mole wt. = 377.4242 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

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 3.1433 # +/- 3
delta_h -34.2 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.132351E+3 -2.971301E-1 1.292417E+5 7.575891E+2 -7.467321E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1273.3 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1360.6 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 69.6 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.181 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 141.503 cm3/mol (a = 5.21 A, b = 9.02 A, c = 10 A, Beta = 90 deg)
# mole wt. = 372.3328 g/mol
# date: 18. May. 2016

Montmor_K(avg)
K0.4(Mg0.4Fe0.2Al1.45)(Al0.1Si3.9)O10(OH)2 + 6.4 H+ + 3.6 H2O = + 0.4 K+ + 0.15 Fe+3 + 0.05 Fe+2 + 0.4 Mg+2 + 1.55 Al+3 + 3.9 Si(OH)4
log k 4.5597 # +/- 3
delta_h -37.3 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.164883E+3 -3.025442E-1 1.313505E+5 7.693749E+2 -7.527118E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1262.8 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1349.4 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 73.5 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 77.949 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 141.503 cm3/mol
# mole wt. = 381.8941 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Montmor_KunipiaF
K0.005Na0.375Ca0.06(Mg0.31Fe0.1Al1.56)(Al0.09Si3.91)O10(OH)2 + 6.36 H+ + 3.64 H2O = + 0.06 Ca+2 + 0.09 Fe+3 + 0.01 Fe+2 + 0.31 Mg+2 +
0.005 K+ + 0.375 Na+ + 1.65 Al+3 + 3.91 Si(OH)4
log k 4.6039 # +/- 3
delta_h -38.3 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.179798E+3 -3.042992E-1 1.323136E+5 7.744792E+2 -7.560754E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1269.1 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1355.9 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 71.4 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.550 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 138.031 cm3/mol
# mole wt. = 372.6830 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

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 4.1152 # +/- 3
delta_h -39.2 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.162652E+3 -3.014921E-1 1.317653E+5 7.676801E+2 -7.543764E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1267.6 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1354.1 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 68.5 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = 74.356 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 142.918 cm3/mol
# mole wt. = 363.4407 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

Montmor_Mg(avg)
Mg0.2(Mg0.4Fe0.2Al1.45)(Al0.1Si3.9)O10(OH)2 + 6.4 H+ + 3.6 H2O = + 0.6 Mg+2 + 0.15 Fe+3 + 0.05 Fe+2 + 1.55 Al+3 + 3.9 Si(OH)4
log k 5.8043 # +/- 3
delta_h -43.5 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.201748E+3 -3.078496E-1 1.344391E+5 7.816525E+2 -7.620268E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1255.8 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1341.4 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 72.2 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 75.736 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 142.918 cm3/mol
# mole wt. = 371.1158 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Montmor_MX80(avg)
K0.002Na0.21Mg0.018Ca0.036(Mg0.24Fe0.2Al1.55)(Al0.04Si3.96)O10(OH)2 + 6.16 H+ + 3.84 H2O = + 0.036 Ca+2 + 0.19 Fe+3 + 0.01 Fe+2 + 0.258

```

```

Mg+2 + 0.002 K+ + 0.21 Na+ + 1.59 Al+3 + 3.96 Si(OH)4
log k      2.8327 # +/- 3
delta_h    -36.3 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.169882E+3 -3.029146E-1 1.314174E+5 7.707379E+2 -7.546252E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfGO used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfGO = -1249.9 +/- 3 kcal/mol
# delfHO = -1336.6 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 69.5 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 75.746 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 133.783 cm3/mol
# mole wt. = 371.9167 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Montmor_MX80(WY) # from Wyoming. Parent mineral for other montmorillonites
K0.024Na0.409Ca0.009(Mg0.214Fe0.208Al1.598)(Al0.262Si3.738)O10(OH)2 + 7.048 H+ + 2.952 H2O = + 0.009 Ca+2 + 0.173 Fe+3 + 0.035 Fe+2 +
0.214 Mg+2 + 0.024 K+ + 0.409 Na+ + 1.86 Al+3 + 3.738 Si(OH)4
log k      5.1974 # +/- 1.7
delta_h    -43.63 kcal/mol # +/- 2.5
analytical_expression -2.239705E+3 -3.161139E-1 1.359229E+5 7.959503E+2 -7.668443E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [2012GAI/BLA_a]
# delfGO = -1265.09 +/- 1.6 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -1351.90 +/- 1.6 kcal/mol
# SOPrTr = 72.16 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.861 +/- 0.02 cal/K/mol
# mole vol. = 134.920 cm3/mol
# mole wt. = 376.6971 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

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      4.1525 # +/- 3
delta_h    -36.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.153996E+3 -2.995724E-1 1.307746E+5 7.652057E+2 -7.521164E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfGO used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfGO = -1270.3 +/- 3 kcal/mol
# delfHO = -1357.8 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 67.8 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = 75.578 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 135.843 cm3/mol
# mole wt. = 367.0170 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

Montmor_Na(avg)
Na0.4(Mg0.4Fe0.2Al1.45)(Al0.1Si3.9)O10(OH)2 + 6.4 H+ + 3.6 H2O = + 0.4 Na+ + 0.15 Fe+3 + 0.05 Fe+2 + 0.4 Mg+2 + 1.55 Al+3 + 3.9 Si(OH)4
log k      5.7562 # +/- 3
delta_h    -39.7 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.190105E+3 -3.053247E-1 1.331783E+5 7.781905E+2 -7.589069E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfGO used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfGO = -1259.2 +/- 3 kcal/mol
# delfHO = -1345.9 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 71.9 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 77.220 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 135.843 cm3/mol
# mole wt. = 375.4507 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Montmor_NH4
(NH4)0.33(Mg0.33Al1.67)(Si4)O10(OH)2 + 6 H+ + 4 H2O = + 0.33 NH4+ + 0.33 Mg+2 + 1.67 Al+3 + 4 Si(OH)4
log k      -2.3627 # +/- 3
delta_h    -29.0 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.115641E+3 -2.949686E-1 1.270640E+5 7.510510E+2 -7.412058E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfGO used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfGO = -1264.8 +/- 3 kcal/mol
# delfHO = -1356.5 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 77.9 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = 82.164 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 150.418 cm3/mol
# mole wt. = 365.3830 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

Montmor_NH4(avg)
(NH4)0.4(Mg0.4Fe0.2Al1.45)(Al0.1Si3.9)O10(OH)2 + 6.4 H+ + 3.6 H2O = + 0.4 NH4+ + 0.15 Fe+3 + 0.05 Fe+2 + 0.4 Mg+2 + 1.55 Al+3 + 3.9 Si(OH)4
log k      -2.1166 # +/- 3
delta_h    -30.7 kcal/mol # +/- 3
analytical_expression -2.145261E+3 -3.000552E-1 1.287157E+5 7.617218E+2 -7.461933E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfGO used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2012GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfGO = -1252.5 +/- 3 kcal/mol
# delfHO = -1344.6 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 83.1 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 85.200 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 150.418 cm3/mol
# mole wt. = 373.4701 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Mordenite_dia
K1.2Na2.8Ca2(A18Si40O96)(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 delfGO 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
# SOPPr = 1013 +/- 150 cal/K/mol
# CpPrTr = 871.694 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# SOPPr = 915 +/- 140 cal/K/mol
# CpPrTr = 843.325 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# SOPPr = 1044 +/- 140 cal/K/mol
# CpPrTr = 860.725 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 1678.004 cm3/mol
# mole wt. = 3563.5613 g/mol
# date: 30. Aug. 2016

MSH06
(MgO)0.6(SiO2) (H2O)1.08 + 1.2 H+ + 0.32 H2O = + 0.6 Mg+2 + 1 Si(OH)4
log_k 5.3505 # +/- 999999
delta_h -9.217 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -4.908840E+2 -6.431468E-2 3.036320E+4 1.748803E+2 -1.703145E+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 *[GHS]
# SOPPr = 24.753 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 26.447 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 54.949 cm3/mol
# mole wt. = 103.7234 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

MSH07
(MgO)0.7(SiO2) (H2O)1.2 + 1.4 H+ + 0.1 H2O = + 0.7 Mg+2 + 1 Si(OH)4
log_k 6.6943 # +/- 999999
delta_h -11.664 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -5.250764E+2 -6.930211E-2 3.265652E+4 1.871496E+2 -1.794522E+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 *[GHS]
# SOPPr = 27.196 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 28.482 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 57.786 cm3/mol
# mole wt. = 109.9156 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

MSH08
(MgO)0.8(SiO2) (H2O)1.32 + 1.6 H+ = + 0.8 Mg+2 + 1 Si(OH)4 + 0.12 H2O
log_k 8.1144 # +/- 999999
delta_h -14.116 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -5.588924E+2 -7.424822E-2 3.493317E+4 1.993102E+2 -1.884826E+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 *[GHS]
# SOPPr = 29.304 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 30.518 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 60.623 cm3/mol
# mole wt. = 116.1079 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

MSH09
(MgO)0.9(SiO2) (H2O)1.44 + 1.8 H+ = + 0.9 Mg+2 + 1 Si(OH)4 + 0.34 H2O
log_k 9.5887 # +/- 999999
delta_h -16.598 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -5.927333E+2 -7.920228E-2 3.721980E+4 2.114912E+2 -1.975343E+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 *[GHS]
# SOPPr = 31.266 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 32.554 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 63.460 cm3/mol

```

```

# mole wt. = 122.3001 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

MSH10
(MgO)1(SiO2)(H2O)1.56 + 2 H+ = + 1 Mg+2 + 1 Si(OH)4 + 0.56 H2O
log_k 11.1209 # +/- 999999
delta_h -19.125 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -6.270227E+2 -8.421730E-2 3.954482E+4 2.238404E+2 -2.067667E+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 *[GHS]
# SOPPr = 33.115 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 34.589 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 66.297 cm3/mol
# mole wt. = 128.4924 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

MSH11
(MgO)1.1(SiO2)(H2O)1.68 + 2.2 H+ = + 1.1 Mg+2 + 1 Si(OH)4 + 0.78 H2O
log_k 12.7088 # +/- 999999
delta_h -21.699 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -6.606780E+2 -8.915289E-2 4.184319E+4 2.359718E+2 -2.157661E+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 *[GHS]
# SOPPr = 34.864 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 36.626 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 69.134 cm3/mol
# mole wt. = 134.6847 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

MSH12
(MgO)1.2(SiO2)(H2O)1.8 + 2.4 H+ = + 1.2 Mg+2 + 1 Si(OH)4 + 1 H2O
log_k 14.3451 # +/- 999999
delta_h -24.308 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -6.948203E+2 -9.415454E-2 4.418002E+4 2.482843E+2 -2.249597E+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 *[GHS]
# SOPPr = 36.513 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 38.661 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 71.971 cm3/mol
# mole wt. = 140.8769 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

MSH13
(MgO)1.3(SiO2)(H2O)1.92 + 2.6 H+ = + 1.3 Mg+2 + 1 Si(OH)4 + 1.22 H2O
log_k 16.0143 # +/- 999999
delta_h -26.930 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -7.283662E+2 -9.908126E-2 4.648518E+4 2.603930E+2 -2.339367E+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 *[GHS]
# SOPPr = 38.050 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 40.696 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 74.808 cm3/mol
# mole wt. = 147.0692 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

MSH14
(MgO)1.4(SiO2)(H2O)2.04 + 2.8 H+ = + 1.4 Mg+2 + 1 Si(OH)4 + 1.44 H2O
log_k 17.6990 # +/- 999999
delta_h -29.528 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -7.623555E+2 -1.040732E-1 4.881293E+4 2.726721E+2 -2.430821E+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 *[GHS]
# SOPPr = 39.440 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 42.732 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 77.645 cm3/mol
# mole wt. = 153.2615 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

MSH15
(MgO)1.5(SiO2)(H2O)2.16 + 3 H+ = + 1.5 Mg+2 + 1 Si(OH)4 + 1.66 H2O
log_k 19.4035 # +/- 999999
delta_h -32.053 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -7.961691E+2 -1.090496E-1 5.111934E+4 2.849139E+2 -2.521982E+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 *[GHS]
# SOPPr = 40.496 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 44.768 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 80.482 cm3/mol
# mole wt. = 159.4537 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978ROB/HEM]
# delFGO = -1537.114 +/- 0.53 kcal/mol
# delFHO = -1627.730 +/- 0.53 kcal/mol
# S0PrTr = 64.4 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 77.483 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1964PAN][1978HEL/DEL][1991SVE/HEM]
# delFGO = -1335.67 +/- 1.0 kcal/mol
# delFHO = -1427.644 +/- 999999 kcal/mol
# S0PrTr = 70.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.807 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][1995ROB/HEM][1997RIM_a]
# delFGO = -1338.13 +/- 1.2 kcal/mol
# delFHO = -1428.01 +/- 1.2 kcal/mol
# S0PrTr = 73.231 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPrTr = 77.82 +/- 0.4 cal/K/mol
# 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 delFGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995ROB/HEM]
# delFGO = -1340.43 +/- 1.2 kcal/mol
# delFHO = -1431.64 +/- 1.2 kcal/mol
# S0PrTr = 68.762 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPrTr = 77.82 +/- 0.4 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delFGO = -250.50 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -270.26 +/- 0.2 kcal/mol
# S0PrTr = 33.173 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPrTr = 26.595 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 41.728 cm3/mol
# mole wt. = 105.9888 g/mol
# date: 31. Aug. 2017

Na2HPO4(s)
Na2HPO4 = + 2 Na+ + 1 HPO4-2
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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not given
# data source: [1967WAT/STA][1982WAG/EVA]
# delFGO = -384.4 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -417.8 +/- 2 kcal/mol
# S0PrTr = 35.970 +/- 0.10 cal/K/mol
# CpPrTr = 32.340 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 55.029 cm3/mol
# mole wt. = 141.9589 g/mol
# date: 4. Dec. 2017

Na2HPO4(H2O)2(s) # Dorfmonite
Na2HPO4(H2O)2 = + 2 Na+ + 1 HPO4-2 + 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not given
# data source: [1967WAT/STA][1982WAG/EVA]
# delFGO = -499.1 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -560.7 +/- 2 kcal/mol

```

```

# SOPrTr = 52.90 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 50.510 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 86.824 cm3/mol
# mole wt. = 177.9893 g/mol
# date: 4. Dec. 2017

Na2O(s)
Na2O + 2 H+ = + 2 Na+ + 1 H2O
log k      67.4364 # +/- 0.08
delta_h    -84.041 kcal/mol # +/- 0.08
analytical_expression -2.606440E+2   -3.354166E-2   3.289086E+4   9.552959E+1   -7.660188E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1972OHA][1978HEL/DEL]
# delFGO = -89.87 +/- 0.1 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -99.140 +/- 0.07 kcal/mol
# SOPrTr = 17.94 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 16.457 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 25.000 cm3/mol
# mole wt. = 61.9790 g/mol
# date: 30. Nov. 2020

Na2SiO3(s)
Na2SiO3 + 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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO]
# delFGO = -350.72 +/- 1.0 kcal/mol
# delFH0 = -373.19 +/- 1.0 kcal/mol
# SOPrTr = 27.21 +/- 0.3 cal/K/mol
# CpPrTr = 26.6 +/- 1 cal/K/mol
# mole vol. = 46.768 cm3/mol
# mole wt. = 122.0633 g/mol
# date: 30. Aug. 2017

Na2SO4(s) # Thenardite
Na2SO4 = + 2 Na+ + 1 SO4-2
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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1955COU][1978ROB/HEM]
# delFGO = -303.53 +/- 0.1 kcal/mol
# delFH0 = -331.69 +/- 0.1 kcal/mol
# SOPrTr = 35.750 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPrTr = 28.232 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 53.330 cm3/mol
# mole wt. = 142.0432 g/mol
# date: 24. Aug. 2016

Na_in_CSH_gel
NaO0.5 + 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 delFGO used] Modeling phase
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [Unpublished]
# delFGO = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# delFH0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 999999 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 999999 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 30.9895 g/mol
# date: 6. Feb. 2019

Na_in_CASH_gel
NaO0.5 + 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 delFGO used] Modeling phase
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [Unpublished]
# delFGO = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# delFH0 = 999999 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 999999 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 999999 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 30.9895 g/mol
# date: 1. Apr. 2020

NaAlO2(s)
NaAlO2 + 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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1955KIN_a][1960KEL][1977HEM/ROB]
# delFGO = -256.26 +/- 0.3 kcal/mol
# delFH0 = -271.51 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 16.90 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 17.529 +/- 999999 cal/K/mol
# 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      2.9086 # +/- 0.1
delta_h    -0.09 kcal/mol # +/- 0.1
analytical_expression -1.466586E+3 -2.089553E-1  8.532792E+4  5.275335E+2 -5.309215E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delFGO = -83.49 +/- 0.1 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -86.38 +/- 0.1 kcal/mol
# SOPrTr = 20.75 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 12.369 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 32.154 cm3/mol
# mole wt. = 102.8938 g/mol
# date: 3. Apr. 2020

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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delFGO = -130.29 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -137.52 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 12.240 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPrTr = 11.232 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 15.104 cm3/mol
# mole wt. = 41.9882 g/mol
# date: 31. Aug. 2017

Nahcolite
NaHCO3 = + 1 Na+ + 1 HCO3-
log k      -0.4090 # +/- 0.19
delta_h    4.475 kcal/mol # +/- 0.11
analytical_expression -7.102914E+2 -1.102913E-1  3.835349E+4  2.587816E+2 -2.329784E+6
#
# -Range: 0.01 - 127 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 400K
# data source: [1960KEL][1978BER/VAN]
# delFGO = -203.431 +/- 0.26 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -226.805 +/- 0.10 kcal/mol
# SOPrTr = 24.40 +/- 0.8 cal/K/mol
# CpPrTr = 20.941 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 38.185 cm3/mol
# mole wt. = 84.0069 g/mol
# date: 21. May. 2020

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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delFGO = -68.01 +/- 0.3 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -68.80 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 23.5 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 12.486 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 40.843 cm3/mol
# mole wt. = 149.8943 g/mol
# date: 20. May. 2016

NaNO3(s) # Natratine
NaNO3 = + 1 Na+ + 1 NO3-
log k      1.0196 # +/- 0.5
delta_h    4.94 kcal/mol # +/- 0.2
analytical_expression -7.649043E+2 -1.181234E-1  4.199920E+4  2.786974E+2 -2.607931E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1960HEL][1972PAU/PRY][1982WAG/EVA]
# delFGO = -87.71 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -111.82 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 27.85 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 22.24 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 37.581 cm3/mol
# mole wt. = 84.9947 g/mol
# date: 4. Feb. 2021

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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delFGO = -90.78 +/- 0.4 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -101.80 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 15.40 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 14.23 +/- 0.1 cal/K/mol
# 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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]

```

```

# data source: [1983JOH/FLO][2001ARM/GUN]
# delfG0 = -1270.70 +/- 1.2 kcal/mol
# delfH0 = -1366.78 +/- 1.2 kcal/mol
# SOPrTr = 85.90 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 85.86 +/- 0.2 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 88.908 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 90.768 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 29.590 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 4.9992 # +/- 0
delta_h -8.639 kcal/mol # +/- 0.29
analytical_expression 4.133742E+3 4.593590E-1 -2.739775E+5 -1.440992E+3 1.947007E+7
# -Range: 0.01 - 150 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 423K
# data source: [1972ROB/HEM][1973ROB/HEM][1978HEL/DEL]
# delfG0 = -411.987 +/- 0.12 kcal/mol *[GHS]
# delfH0 = -472.576 +/- 0.11 kcal/mol
# SOPrTr = 46.760 +/- 0.14 cal/K/mol
# CpPrTr = 57 +/- 999999 cal/K/mol (lambda transition)
# mole vol. = 74.790 cm3/mol
# mole wt. = 138.3598 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

#NH41(s)
NH41 = 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 *[GHS]
# delfH0 = -48.3 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 27.0 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 19.540 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 57.746 cm3/mol
# mole wt. = 144.9428 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

#NH4NO3(s)
NH4NO3 = + 1 NH4+ + 1 NO3-
log k 1.1508 # +/- 0.5
delta_h 6.07 kcal/mol # +/- 0.2
analytical_expression -3.219140E+2 -6.399973E-2 1.545400E+4 1.218495E+2 -9.955116E+5
# -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 *[GHS]
# delfH0 = -87.37 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 36.11 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 33.600 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 46.537 cm3/mol
# mole wt. = 80.0432 g/mol

```

```

# date: 26. Jan. 2021
HSNO(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 delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1953HIL/GIA1][1982WAG/EVA]
# delfGO = -60.71 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -86.33 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 39.57 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 37.022 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 39.825 cm3/mol
# mole wt. = 35.0456 g/mol
# date: 19. Dec. 2017

H8N2O(l) # (NH4)2O(l)
(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 delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: Not used
# data source: [1953HIL/GIA1][1982WAG/EVA]
# delfGO = -63.79 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -102.94 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 63.94 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 56.355 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982WAG/EVA]
# delfGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 7.14 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 6.16 +/- 0.2 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 300K
# data source: [1969SOR/KOS][2005GAM/BUG]
# delfGO = -109.25 +/- 0.3 kcal/mol
# delfHO = -129.61 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 19.12 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 19.602 +/- 0.07 cal/K/mol
# mole vol. = 23.470 cm3/mol
# mole wt. = 92.7081 g/mol
# date: 6. Apr. 2016

Nontro_Ca
CaO.165(Fe2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.165 Ca+2 + 2 Fe+3 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log k -4.2936 # +/- 2
delta_h -31.2 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -2.278608E+3 -3.217467E-1 1.347708E+5 8.102370E+2 -7.703582E+6
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfGO = -1070.8 +/- 3 kcal/mol
# delfHO = -1154.7 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 77.2 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = 80.633 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 137.122 cm3/mol
# mole wt. = 424.2932 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Nontro_Ca(avg)
CaO.2(Mg0.1Fe1.65Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.2 Ca+2 + 1.65 Fe+3 + 0.1 Mg+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k -0.0109 # +/- 2
delta_h -40.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.319989E+3 -3.301008E-1 1.386019E+5 8.248643E+2 -7.782668E+6
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delfGO used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfGO = -1117.6 +/- 3 kcal/mol
# delfHO = -1201.4 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 78.9 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 79.656 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 136.191 cm3/mol
# mole wt. = 416.5419 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Nontro_CaFe(avg)
CaO.2(Fe1.75Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.2 Ca+2 + 1.65 Fe+3 + 0.1 Fe+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k -0.5709 # +/- 2
delta_h -40.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.316700E+3 -3.297795E-1 1.382472E+5 8.237129E+2 -7.774285E+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][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1109.7 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1193.3 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 79.5 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 79.942 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 136.266 cm3/mol
# mole wt. = 419.6961 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

Nontro_CaFeX2
Ca0.2(Mg0.1Fe1.95)(Fe0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.2 Ca+2 + 2.4 Fe+3 + 0.1 Mg+2 + 3.55 Si(OH)4
log k -3.4687 # +/- 2
delta_h -33.5 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -2.324077E+3 -3.289209E-1 1.373433E+5 8.267051E+2 -7.787581E+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][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1038.0 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1121.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 80.5 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 82.932 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 137.953 cm3/mol
# mole wt. = 438.1910 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

Nontro_Cs
Cs0.33(Fe2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 Cs+ + 2 Fe+3 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log k -6.2694 # +/- 2
delta_h -25.9 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -2.265166E+3 -3.186103E-1 1.333962E+5 8.055569E+2 -7.717959E+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][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1074.7 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1158.9 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 81.4 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = 82.430 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 144.356 cm3/mol
# mole wt. = 461.5391 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Nontro_Cs(avg)
Cs0.4(Mg0.1Fe1.65Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 Cs+ + 1.65 Fe+3 + 0.1 Mg+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k -2.4591 # +/- 2
delta_h -34.5 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.303495E+3 -3.262721E-1 1.369085E+5 8.191190E+2 -7.799367E+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][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1122.4 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1206.5 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 84.0 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 81.834 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 144.988 cm3/mol
# mole wt. = 461.6885 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Nontro_CsFe(avg)
Cs0.4(Fe1.75Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 Cs+ + 1.65 Fe+3 + 0.1 Fe+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k -3.0192 # +/- 2
delta_h -33.7 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.300643E+3 -3.260079E-1 1.365799E+5 8.181232E+2 -7.792639E+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][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1114.5 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1198.4 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 84.6 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 82.120 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 145.063 cm3/mol
# mole wt. = 464.8427 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

Nontro_CsFeX2
Cs0.4(Mg0.1Fe1.95)(Fe0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 Cs+ + 2.4 Fe+3 + 0.1 Mg+2 + 3.55 Si(OH)4
log k -5.8436 # +/- 2
delta_h -27.1 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -2.307729E+3 -3.251102E-1 1.356810E+5 8.210115E+2 -7.804906E+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][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1042.7 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1126.3 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 85.6 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 85.111 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 146.750 cm3/mol
# mole wt. = 483.3376 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

Nontro_Fe
Fe0.165(Fe2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.165 Fe+2 + 2 Fe+3 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log k -5.0202 # +/- 2
delta_h -30.9 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -2.286911E+3 -3.227630E-1 1.351759E+5 8.130038E+2 -7.732589E+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][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1053.6 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1137.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 77.7 +/- 4 cal/K/mol

```

```

# CpPrTr = 80.934 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 136.372 cm3/mol
# mole wt. = 426.8950 g/mol
# date: 15.Feb.2021

Nontro_Fe(avg)
Fe0.2(Mg0.1Fe1.65Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.2 Fe+2 + 1.65 Fe+3 + 0.1 Mg+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k -0.9272 # +/- 2
delta_h -40.6 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.330109E+3 -3.313442E-1 1.390798E+5 8.282468E+2 -7.818074E+6
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1096.8 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1180.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 79.4 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 80.018 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 135.267 cm3/mol
# mole wt. = 419.6957 g/mol
# date: 28.Jan.2021

Nontro_FeX2(avg)
Fe0.2(Fe1.75Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.3 Fe+2 + 1.65 Fe+3 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k -1.4139 # +/- 2
delta_h -39.8 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.327059E+3 -3.310517E-1 1.387621E+5 8.271797E+2 -7.810708E+6
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1088.8 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1172.0 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 80.0 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 80.305 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 135.342 cm3/mol
# mole wt. = 422.8499 g/mol
# date: 28.Jan.2021

Nontro_FeX3
Fe0.2(Mg0.1Fe1.95)(Fe0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.2 Fe+2 + 2.4 Fe+3 + 0.1 Mg+2 + 3.55 Si(OH)4
log k -4.3116 # +/- 2
delta_h -33.2 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -2.334291E+3 -3.301736E-1 1.378541E+5 8.301134E+2 -7.823286E+6
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1017.1 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1100.0 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 81.1 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 83.296 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 137.029 cm3/mol
# mole wt. = 441.3448 g/mol
# date: 28.Jan.2021

Nontro_K
K0.33(Fe2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 K+ + 2 Fe+3 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log k -5.4821 # +/- 2
delta_h -27.1 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -2.258741E+3 -3.183263E-1 1.330271E+5 8.034819E+2 -7.660187E+6
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1072.9 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1157.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 79.3 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = 82.287 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 141.054 cm3/mol
# mole wt. = 430.5827 g/mol
# date: 26.Jan.2021

Nontro_K(avg)
K0.4(Mg0.1Fe1.65Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 K+ + 1.65 Fe+3 + 0.1 Mg+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k -1.4183 # +/- 2
delta_h -36.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.295714E+3 -3.259298E-1 1.364889E+5 8.166039E+2 -7.729218E+6
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1120.1 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1204.4 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 81.5 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 81.659 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 140.943 cm3/mol
# mole wt. = 424.1656 g/mol
# date: 28.Jan.2021

Nontro_KFe(avg)
K0.4(Fe1.75Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 K+ + 1.65 Fe+3 + 0.1 Fe+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k -1.9783 # +/- 2
delta_h -35.3 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.292900E+3 -3.256712E-1 1.361625E+5 8.156217E+2 -7.722619E+6
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1112.2 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1196.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 82.1 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 81.945 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 141.018 cm3/mol
# mole wt. = 427.3198 g/mol
# date: 28.Jan.2021

Nontro_KFeX2
K0.4(Mg0.1Fe1.95)(Fe0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 K+ + 2.4 Fe+3 + 0.1 Mg+2 + 3.55 Si(OH)4

```

```

log k      -4.8760 # +/- 2
delta_h    -28.6 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression  -2.299749E+3   -3.247430E-1   1.352274E+5   8.184257E+2   -7.733971E+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][2013GAI/BLA_a] [Unpublished]
# delFG0 = -1040.5 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1124.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SPrTr = 83.1 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 84.936 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 142.705 cm3/mol
# mole wt. = 445.8147 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

Nonthro_Mg
Mg0.165(Fe2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.165 Mg+2 + 2 Fe+3 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log k      -4.4370 # +/- 2
delta_h    -31.7 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression  -2.292732E+3   -3.233472E-1   1.356818E+5   8.150460E+2   -7.747794E+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][2013GAI/BLA_a] [Unpublished]
# delFG0 = -1067.1 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1151.1 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SPrTr = 76.7 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = 80.461 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 136.248 cm3/mol
# mole wt. = 421.6906 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Nonthro_Mg(avg)
Mg0.2(Mg0.1Fe1.65Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.3 Mg+2 + 1.65 Fe+3 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k      -0.2469 # +/- 2
delta_h    -41.6 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.336793E+3   -3.320006E-1   1.396687E+5   8.305808E+2   -7.835018E+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][2013GAI/BLA_a] [Unpublished]
# delFG0 = -1113.2 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1197.0 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SPrTr = 78.3 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 79.446 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 135.116 cm3/mol
# mole wt. = 413.3873 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

Nonthro_MgFe(avg)
Mg0.2(Fe1.75Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.2 Mg+2 + 1.65 Fe+3 + 0.1 Fe+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k      -0.7336 # +/- 2
delta_h    -40.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.333437E+3   -3.316670E-1   1.393329E+5   8.294042E+2   -7.826533E+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][1981WOO][2013GAI/BLA_a] [Unpublished]
# delFG0 = -1105.2 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1188.8 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SPrTr = 78.9 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 79.732 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 135.192 cm3/mol
# mole wt. = 416.5415 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

Nonthro_MgFeX2
Mg0.2(Mg0.1Fe1.95)(Fe0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.3 Mg+2 + 2.4 Fe+3 + 3.55 Si(OH)4
log k      -3.6314 # +/- 2
delta_h    -34.2 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression  -2.340770E+3   -3.308056E-1   1.384257E+5   8.323819E+2   -7.839562E+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][2013GAI/BLA_a] [Unpublished]
# delFG0 = -1033.5 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1116.8 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SPrTr = 79.9 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 82.723 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 136.879 cm3/mol
# mole wt. = 435.0364 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

Nonthro_Na
Na0.33(Fe2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 Na+ + 2 Fe+3 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log k      -4.3997 # +/- 2
delta_h    -29.4 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression  -2.292732E+3   -3.233472E-1   1.356818E+5   8.150460E+2   -7.747794E+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][2013GAI/BLA_a] [Unpublished]
# delFG0 = -1069.8 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1154.0 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SPrTr = 78.6 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = 81.686 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 138.517 cm3/mol
# mole wt. = 425.2669 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Nonthro_Na(avg)
Na0.4(Mg0.1Fe1.65Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 Na+ + 1.65 Fe+3 + 0.1 Mg+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k      -0.2217 # +/- 2
delta_h    -38.7 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression  -2.319750E+3   -3.284770E-1   1.382969E+5   8.249241E+2   -7.787896E+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][2013GAI/BLA_a] [Unpublished]

```

```

# delFG0 = -1116.5 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1200.6 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 80.6 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 80.931 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 137.867 cm3/mol
# mole wt. = 417.7222 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

Nontro_NaFe (avg)
Na0.4(Fe1.75Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 Na+ + 1.65 Fe+3 + 0.1 Fe+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k -0.7817 # +/- 2
delta_h -37.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.333437E+3 -3.316670E-1 1.393329E+5 8.294042E+2 -7.826533E+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][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1108.6 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1192.5 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 81.2 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 81.217 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 137.942 cm3/mol
# mole wt. = 420.8764 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

Nontro_NaFeX2
Na0.4(Mg0.1Fe1.95)(Fe0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 Na+ + 2.4 Fe+3 + 0.1 Mg+2 + 3.55 Si(OH)4
log k -3.6062 # +/- 2
delta_h -31.3 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -2.323793E+3 -3.272913E-1 1.370576E+5 8.267489E+2 -7.792649E+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][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1036.8 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1120.4 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 82.2 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 84.208 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 139.629 cm3/mol
# mole wt. = 439.3713 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

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 + 8.14 H+ + 1.86 H2O = + 0.02 K+ + 0.247 Ca+2 + 0.066 Mg+2 + 0.81 Al+3
+ 1.688 Fe+3 + 0.007 Ti(OH)4 + 3.458 Si(OH)4
log k 1.3703 # +/- 1.5
delta_h -44.42 kcal/mol # +/- 3.4
analytical_expression -2.344043E+3 -3.350635E-1 1.402828E+5 8.336190E+2 -7.816908E+6
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 1 [reported delFG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [2013GAI/BLA]
# delFG0 = -1119.42 +/- 1.4 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -1203.25 +/- 1.3 kcal/mol
# SOPPrTr = 79.53 +/- 1.7 cal/K/mol
# CpPrTr = 80.102 +/- 0.08 cal/K/mol
# mole vol. = 136.380 cm3/mol
# mole wt. = 419.8734 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

Nontro_NH4
(NH4)0.33(Fe2)(Al0.33Si3.67)O10(OH)2 + 7.32 H+ + 2.68 H2O = + 0.33 NH4+ + 2 Fe+3 + 0.33 Al+3 + 3.67 Si(OH)4
log k -10.9882 # +/- 2
delta_h -21.3 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -2.244602E+3 -3.166476E-1 1.309041E+5 7.980020E+2 -7.612658E+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][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1064.4 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1153.6 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 86.2 +/- 4 cal/K/mol
# CpPrTr = 88.269 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 144.871 cm3/mol
# mole wt. = 423.6329 g/mol
# date: 26. Jan. 2021

Nontro_NH4 (avg)
(NH4)0.4(Mg0.1Fe1.65Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 NH4+ + 1.65 Fe+3 + 0.1 Mg+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k -8.1678 # +/- 2
delta_h -29.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.278529E+3 -3.238915E-1 1.338864E+5 8.099500E+2 -7.671402E+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][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1109.9 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1200.0 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 89.8 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 88.910 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 145.568 cm3/mol
# mole wt. = 415.7416 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

Nontro_NH4Fe (avg)
(NH4)0.4(Fe1.75Al0.3)(Al0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 NH4+ + 1.65 Fe+3 + 0.1 Fe+2 + 0.75 Al+3 + 3.55 Si(OH)4
log k -8.7278 # +/- 2
delta_h -28.3 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.275234E+3 -3.235686E-1 1.335317E+5 8.087962E+2 -7.663060E+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][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1102.0 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1191.9 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPrTr = 90.4 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 89.196 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 145.644 cm3/mol
# mole wt. = 418.8958 g/mol

```

```

# date: 28. Jan. 2021
Nontro_NH4FeX2
(NH4)0.4(Mg0.1Fe1.95)(Fe0.45Si3.55)O10(OH)2 + 7.8 H+ + 2.2 H2O = + 0.4 NH4+ + 2.4 Fe+3 + 0.1 Mg+2 + 3.55 Si(OH)4
log_k -11.5523 # +/- 2
delta_h -21.7 kcal/mol # +/- 5
analytical_expression -2.282544E+3 -3.227005E-1 1.326461E+5 8.117644E+2 -7.676144E+6
#
# -Range: 0.01 - 102 deg C
# gflag: 2 [estimated delFGO used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 375K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFGO = -1030.2 +/- 3 kcal/mol
# delFHO = -1119.8 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 91.4 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 92.187 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 147.331 cm3/mol
# mole wt. = 437.3907 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

Ondinite_7A(avg)
Mg0.85Fe1.12Al0.46(A10.12Si1.88)O5(OH)4 + 6.48 H+ = + 0.32 Fe+2 + 0.85 Mg+2 + 0.8 Fe+3 + 0.58 Al+3 + 1.88 Si(OH)4 + 1.48 H2O
log_k 10.9839 # +/- 1
delta_h -41.174 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -1.615446E+3 -2.315906E-1 9.780950E+4 5.762027E+2 -5.187156E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delFGO used], polyhedral model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][Unpublished]
# delFGO = -827.3 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -902.158 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 58.302 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 66.860 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 107.793 cm3/mol
# mole wt. = 299.6841 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

Okenite
CaSi2O4(OH)2(H2O) + 2 H+ + 1 H2O = + 1 Ca+2 + 2 Si(OH)4
log_k 9.1268 # +/- 999999
delta_h -10.291 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -8.896819E+2 -1.082832E-1 5.459055E+4 3.165195E+2 -3.130123E+6
#
# -Range: Not given
# gflag: 2 [estimated delFGO used], polyhedral model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp not given, Cp = constant
# data source: [2010BLA/BOU][2012ART/SAS]
# delFGO = -688.794 +/- 999999 kcal/mol
# delFHO = -749.480 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 49.323 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 26.740 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 94.770 cm3/mol
# mole wt. = 212.2764 g/mol
# date: 15. Jul. 2015

P4010(s)
P4010 + 6 H2O = + 8 H+ + 4 HPO4-2
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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delFGO = -650.9 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -719.4 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 54.68 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 49.11 +/- 4.7 cal/K/mol
# 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 47.0819 # +/- 10
delta_h -106.4 kcal/mol # +/- 7
analytical_expression -3.992376E+3 -5.376438E-1 2.531260E+5 1.417918E+3 -1.402594E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 2 [estimated delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][2015OGO/VIG]
# delFGO = -2549.0 +/- 6 kcal/mol
# delFHO = -2756.9 +/- 6 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 161.4 +/- 5 cal/K/mol
# CpPrTr = 168.037 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 359.000 cm3/mol
# mole wt. = 753.3204 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1995ROB/HEM]
# delFGO = -1330.91 +/- 0.9 kcal/mol
# delFHO = -1421.92 +/- 0.9 kcal/mol
# SOPrTr = 66.23 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.87 +/- 0.6 cal/K/mol
# 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 -2.523286E+3 -3.664933E-1 1.554681E+5 8.982361E+2 -8.288645E+6

```

```

# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL]
# delFGO = -1326.01 +/- 1.0 kcal/mol
# delFH0 = -1416.963 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 66.400 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 74.991 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][1995ROB/HEM][1997RIM_a]
# delFGO = -1328.34 +/- 0.9 kcal/mol
# delFH0 = -1418.02 +/- 0.9 kcal/mol
# SOPrTr = 70.70 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.87 +/- 0.6 cal/K/mol
# 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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995ROB/HEM]
# delFGO = -1330.91 +/- 0.9 kcal/mol
# delFH0 = -1421.92 +/- 0.9 kcal/mol
# SOPrTr = 66.23 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 76.87 +/- 0.6 cal/K/mol
# 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 103.5069 # +/- 999999
delta_h -226.644 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -5.249621E+3 -7.542989E-1 3.393316E+5 1.871907E+3 -1.706894E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delFGO = -2846.730 +/- 999999 kcal/mol
# delFH0 = -3016.763 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 160.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 161.738 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 273.500 cm3/mol
# mole wt. = 835.8247 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1959KIN][1980KAT][1998CHA]
# delFGO = -303.0 +/- 4 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -329.5 +/- 4 kcal/mol
# SOPrTr = 44.60 +/- 0.5 cal/K/mol
# CpPrTr = 32.780 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO 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][1973BR1/BIE][1978HEL/DEL_a]
# delFGO = -564.98 +/- 0.6 kcal/mol
# delFH0 = -617.99 +/- 0.7 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 84.45 +/- 0.4 cal/K/mol
# CpPrTr = 61.25 +/- 1.0 cal/K/mol
# 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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delFGO = -346.5 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -371.89 +/- 1.4 kcal/mol
# SOPrTr = 31.19 +/- 2.9 cal/K/mol

```

```

# CpPrTr = 25.597 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 308K
# data source: [1932.JOW/PRI][1972NRI_a][1978HEL/DEL_a][1981LOP/TEL][1989ROB/LEF]
# delFG0 = -281.60 +/- 0.2 kcal/mol
# delFH0 = -313.069 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 33.441 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 29.027 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 21.3435 # +/- 0.4
delta_h -35.88 kcal/mol # +/- 0.3
analytical_expression -3.471746E+2 -5.132325E-2 2.612640E+4 1.242788E+2 -1.006965E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFG0 used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
# delFG0 = -136.08 +/- 0.1 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -143.80 +/- 0.1 kcal/mol
# SOPrTr = 6.440 +/- 0.04 cal/K/mol
# CpPrTr = 9.034 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 11.248 cm3/mol
# mole wt. = 40.3044 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

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 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1961KEL/KIN][1968ROB/WAL]
# delFG0 = -376.50 +/- 0.4 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -396.900 +/- 0.41 kcal/mol
# SOPrTr = 22.40 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 23.350 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 33.630 cm3/mol
# mole wt. = 135.9432 g/mol
# date: 3. Dec. 2019

Phillipsite_alk
K1.4Na1.6Ca0.4(A13.8Si12.2032)(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 [1992.JOH/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/K/mol
# CpPrTr = 328.111 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 609.100 cm3/mol
# mole wt. = 1280.8898 g/mol
# date: 24. Aug. 2016

Phillipsite_dia
K0.6Na0.7Ca1.2(A13.7Si12.3032)(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 [1992.JOH/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/K/mol
# CpPrTr = 319.972 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 609.100 cm3/mol
# mole wt. = 1261.0932 g/mol
# date: 24. Aug. 2016

Phillipsite_Ca
Ca3(A16Si10O32)(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 [1992.JOH/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/K/mol
# CpPrTr = 326.440 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 599.766 cm3/mol
# mole wt. = 1291.1426 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

Phillipsite_K
K6(A16Si10O32)(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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -4413.9 +/- 6 kcal/mol
# delfHO = -4756.2 +/- 10 kcal/mol
# SOPrTr = 483.6 +/- 40 cal/K/mol
# CpPrTr = 368.812 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 599.766 cm3/mol
# mole wt. = 1405.4984 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

Phillipsite_Na
Na6(Al6Si10O32)(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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -4367.6 +/- 6 kcal/mol
# delfHO = -4723.4 +/- 10 kcal/mol
# SOPrTr = 419.2 +/- 40 cal/K/mol
# CpPrTr = 339.490 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 599.766 cm3/mol
# mole wt. = 1308.8473 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

Phillipsite_CaII
Ca2.2857(Al4.5714Si11.4286O32)(H2O)11.4286 + 18.2856 H+ + 2.2858 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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -4254.2 +/- 5 kcal/mol
# delfHO = -4595.822 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 380.800 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 320.001 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 605.700 cm3/mol
# mole wt. = 1253.7981 g/mol
# date: 25. Aug. 2016

Phillipsite_KII
K4.5714(Al4.5714Si11.4286O32)(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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -4266.7 +/- 5 kcal/mol
# delfHO = -4618.939 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 393.400 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 342.553 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 605.700 cm3/mol
# mole wt. = 1340.9258 g/mol
# date: 25. Aug. 2016

Phillipsite_NaII
Na4.5714(Al4.5714Si11.4286O32)(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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -4231.5 +/- 5 kcal/mol
# delfHO = -4579.177 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 394.100 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 334.218 +/- 999999 cal/K/mol
# 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      38.0301 # +/- 1.8
delta_h   -82.092 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -2.471957E+3   -3.487431E-1   1.557212E+5   8.822865E+2   -8.132767E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1991SVE/HEM]
# delfGO = -1396.42 +/- 1.0 kcal/mol
# delfHO = -1488.392 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 76.100 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 85.004 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 149.660 cm3/mol
# mole wt. = 417.2599 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

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 -3.052027E+3   -4.496339E-1   2.219928E+5   1.091828E+3   -1.137815E+7
#
# -Range: 0.01 - 280 deg C
#
# gflag: 1 [reported delfGO 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/K/mol
# CpPrTr = 5.69 +/- 0.1 cal/K/mol
# mole vol. = 17.019 cm3/mol
# mole wt. = 30.9738 g/mol
# date: 1. Jul. 2019

Plattnerite # Pb+4 not defined in TDB
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 *[GHS]
# delfH0 = -65.60 +/- 0.7 kcal/mol
# SOPrTr = 17.16 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 14.618 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 25.073 cm3/mol
# mole wt. = 239.1988 g/mol
# date: 23. Oct. 2019

Plumbonacrite
Pb10O2(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][2000KRI/BUR]
# delfG0 = -1212.6 +/- 7 kcal/mol
# delfH0 = -1381.257 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 248.270 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 185.510 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 358.170 cm3/mol
# mole wt. = 2532.0832 g/mol
# date: 23. Oct. 2019

Poitevinite
CuSO4(H2O) = + 1 Cu+2 + 1 SO4-2 + 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 *[GHS]
# SOPrTr = 34.9 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 32.600 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 52.929 cm3/mol
# mole wt. = 177.6248 g/mol
# date: 25. Jun. 2019

Pollucite
CsAlSi206 + 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/BYC]
# delfG0 = -694.4 +/- 1 kcal/mol
# delfH0 = -734.2 +/- 1 kcal/mol
# SOPrTr = 49.8 +/- 2 cal/K/mol
# CpPrTr = 41.4 +/- 1 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 20.97 +/- 0.1 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 7.124 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delFGO = -1390.10 +/- 1.0 kcal/mol
# delFH0 = -1481.649 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 65.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 80.827 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 140.330 cm3/mol
# mole wt. = 412.3843 g/mol
# date: 15. Jul. 2015

Pyrite
FeS2 + 1 H2O = + 1 Fe+2 + 0.5 O2 + 2 HS-
log_k      -59.2377 # +/- 1
delta_h    78.1 kcal/mol # +/- 2000
analytical_expression -1.303318E+3 -2.111523E-1 5.379155E+4 4.744225E+2 -4.205209E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1950COU][1962GR0/WES][1968ROB/WAL][1974MIL][1978HEL/DEL]
# delFGO = -38.3 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -41.0 +/- 2 kcal/mol
# SOPrTr = 12.650 +/- 0.03 cal/K/mol
# CpPrTr = 14.842 +/- 0.15 cal/K/mol
# mole vol. = 23.940 cm3/mol
# mole wt. = 119.9790 g/mol
# date: 16. Jul. 2015

Pyromorphite
Pb10(P04)6C12 + 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 delFGO used], calorimetry & solubility data for Pyromorphite = 10 Pb+2 + 6 P04-3 + 2 Cl-
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1932JOW/PRI][1974NR1][1978HEL/DEL_a][1989DAI/HUG][2011BIS/HUG][2016TOP/MAN]
# delFGO = -1796.60 +/- 1.9 kcal/mol
# delFH0 = -1968.2 +/- 2 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 279.79 +/- 0.5 cal/K/mol
# CpPrTr = 198.36 +/- 0.2 cal/K/mol
# 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      58.2486 # +/- 2.0
delta_h    -136.84 kcal/mol # +/- 2.3
analytical_expression -2.900938E+3 -4.208077E-1 1.892068E+5 1.032834E+3 -9.390067E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978ROB/HEM]
# delFGO = -1417.87 +/- 1.6 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -1502.06 +/- 1.4 kcal/mol
# SOPrTr = 62.30 +/- 2.4 cal/K/mol
# CpPrTr = 77.89 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 113.270 cm3/mol
# mole wt. = 403.1273 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

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 delFGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][1995ROB/HEM][1997R1M_a]
# delFGO = -1258.63 +/- 0.4 kcal/mol
# delFH0 = -1348.00 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 57.22 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 70.24 +/- 0.6 cal/K/mol
# 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 delFGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delFGO = -742.07 +/- 1.0 kcal/mol
# delFH0 = -783.793 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 35.000 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 39.282 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 63.500 cm3/mol
# mole wt. = 218.1230 g/mol
# date: 16. Jul. 2015

Pyrrhotite
FeS + 1 H+ = + 1 Fe+2 + 1 HS-
log_k      -3.7163 # +/- 0.2
delta_h    -1.90 kcal/mol # +/- 1000.0
analytical_expression -8.111795E+2 -1.346588E-1 4.386001E+4 2.947874E+2 -2.571322E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C

```

```

# gflag: 1 [reported delfGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1959GR0/WES_a][1974MIL][1978HEL/DEL]
# delfGO = -24.08 +/- 0.1 kcal/mol
# delfHO = -24.00 +/- 0.1 kcal/mol
# SOPPr = 14.415 +/- 0.01 cal/K/mol
# CpPr = 13.061 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 18.200 cm3/mol
# mole wt. = 87.9130 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 delfGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
# delfGO = -204.646 +/- 0.41 kcal/mol
# delfHO = -217.650 +/- 0.40 kcal/mol
# SOPPr = 9.880 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPr = 10.63 +/- 0.1 cal/K/mol
# mole vol. = 22.688 cm3/mol
# mole wt. = 60.0843 g/mol
# date: 16. Jul. 2015

Rb2O(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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [1978HEL/DEL_a][1982WAG/EVA][1993BAR]
# delfGO = -71.7 +/- 20 kcal/mol
# delfHO = -81.0 +/- 20 kcal/mol
# SOPPr = 30.000 +/- 0.05 cal/K/mol
# CpPr = 22.226 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1997GUR/BER]
# delfGO = -89.37 +/- 0.4 kcal/mol
# delfHO = -100.10 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPPr = 22.47 +/- 0.7 cal/K/mol
# CpPr = 16.49 +/- 0.5 cal/K/mol
# mole vol. = 58.894 cm3/mol
# mole wt. = 102.4752 g/mol
# date: 31. May. 2016

Rhodochrosite
MnCO3 + 1 H+ = 1 Mn+2 + 1 HCO3-
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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL]
# delfGO = -195.0450 +/- 0.330 kcal/mol
# delfHO = -212.521 +/- 0.29 kcal/mol
# SOPPr = 23.90 +/- 0.5 cal/K/mol
# CpPr = 19.49 +/- 0.5 cal/K/mol
# mole vol. = 31.075 cm3/mol
# mole wt. = 114.9472 g/mol
# date: 5. May. 1978

Ripidolite_14A
Mg3Fe2Al(AlSi3)O10(OH)8 + 16 H+ = + 3 Mg+2 + 2 Fe+2 + 2 Al+3 + 3 Si(OH)4 + 6 H2O
log k      59.7969 # +/- 999999
delta_h    -144.429 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -3.497033E+3   -5.095906E-1   2.213059E+5   1.248594E+3   -1.093973E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], treated as ideal solid solution between Daphnite and Clinoclchlore
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [2007WOL/JOV_a]
# delfGO = -1799.624 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -1948.467 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 130.407 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 142.625 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 209.634 cm3/mol
# mole wt. = 618.8809 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

Ripidolite_7A
Mg1.5Fe(AlSi1.5)O5(OH)4 + 8 H+ = + 1.5 Mg+2 + 1 Fe+2 + 1 Al+3 + 1.5 Si(OH)4 + 3 H2O
log k      31.5851 # +/- 999999
delta_h    -73.880 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -1.748852E+3   -2.550142E-1   1.109022E+5   6.247028E+2   -5.447813E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], treated as ideal solid solution between Daphnite and Clinoclchlore
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [2007WOL/JOV_a]
# delfGO = -897.511 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -972.568 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 63.074 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 68.825 +/- 999999 cal/K/mol

```

```

# mole vol. = 107.690 cm3/mol
# mole wt. = 309.4405 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

Romarchite
SnO + 2 H+ = 1 Sn+2 + 1 H2O
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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX][1978HEL/DEL_a][1985JAC/HEL_b]
# delFGO = -61.46 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -68.340 +/- 0.17 kcal/mol
# SOPrTr = 13.660 +/- 0.07 cal/K/mol
# CpPrTr = 11.472 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 20.895 cm3/mol
# mole wt. = 134.7094 g/mol
# date: 05. Jul. 2018

Rozenite
FeSO4 (H2O)4 = 1 Fe+2 + 1 SO4-2 + 4 H2O
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 delFGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 333K
# data source: [2013LEM/BER][1978HEL/DEL_a]
# delFGO = -428.47 +/- 0.2 kcal/mol
# delFHO = -508.72 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 66.0 +/- 1 cal/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = 65.687 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 97.676 cm3/mol
# mole wt. = 223.9714 g/mol
# date: 15. Jan. 2018

Rubidium
Rb + 1 H+ + 0.25 O2 = 1 Rb+ + 0.5 H2O
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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 312K
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delFGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delFHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 18.351 +/- 0.07 cal/K/mol
# CpPrTr = 7.580 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 55.788 cm3/mol
# mole wt. = 85.4678 g/mol
# date: 11. Mar. 2016

Rutile
TiO2 + 2 H2O = + 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 delFGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978ROB/HEM][1983BOW/HEL]
# delFGO = -212.87 +/- 0.8 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -226.10 +/- 0.8 kcal/mol
# SOPrTr = 12.020 +/- 0.04 cal/K/mol
# CpPrTr = 13.165 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 18.820 cm3/mol
# mole wt. = 79.8658 g/mol
# date: 3. Dec. 2019

Salammoniac
NH4Cl = + 1 NH4+ + 1 Cl-
log_k 1.3333 # +/- 0.3
delta_h 3.40 kcal/mol # +/- 0.2
analytical_expression -6.454660E+2 -1.081716E-1 3.433293E+4 2.373458E+2 -2.079867E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delFGO = -48.55 +/- 0.4 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -75.18 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 22.7 +/- 1 cal/K/mol
# CpPrTr = 20.7 +/- 8 cal/K/mol
# mole vol. = 35.062 cm3/mol
# mole wt. = 53.4910 g/mol
# date: 22. Jan. 2021

Sanidine_high
KAlSi3O8 + 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 delFGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1991SVE/HEM]
# delFGO = -893.97 +/- 1.0 kcal/mol
# delFHO = -946.774 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 54.530 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 48.496 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 109.008 cm3/mol
# mole wt. = 278.3315 g/mol
# date: 16. Jul. 2015

Saponite_Ca
CaO.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 26.2655 # +/- 3

```

```

delta_h -61.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.329954E+3 -3.204369E-1 1.453733E+5 8.297632E+2 -7.913602E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1346.4 +/- 3 kcal/mol
#
# delfH0 = -1435.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
#
# S0PrTr = 71.5 +/- 3 cal/K/mol
#
# CpPrTr = 81.067 +/- 999999 cal/K/mol
#
# mole vol. = 139.661 cm3/mol
#
# mole wt. = 385.5142 g/mol
#
# date: 28. Jan. 2021

Saponite_Ca(avg)
Ca0.225(Mg2.8Fe0.1Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 0.225 Ca+2 + 2.8 Mg+2 + 0.1 Fe+3 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 25.6279 # +/- 3
delta_h -65.2 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.382178E+3 -3.315400E-1 1.482487E+5 8.484214E+2 -7.995028E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1344.9 +/- 3 kcal/mol
#
# delfH0 = -1433.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
#
# S0PrTr = 73.6 +/- 3 cal/K/mol
#
# CpPrTr = 81.105 +/- 999999 cal/K/mol
#
# mole vol. = 138.879 cm3/mol
#
# mole wt. = 389.8039 g/mol
#
# date: 29. Jan. 2021

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 18.9941 # +/- 10
delta_h -49.6 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.230728E+3 -3.106941E-1 1.375371E+5 7.950290E+2 -7.662167E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1096.4 +/- 9 kcal/mol
#
# delfH0 = -1178.7 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
#
# S0PrTr = 89.2 +/- 3 cal/K/mol
#
# CpPrTr = 89.654 +/- 999999 cal/K/mol
#
# mole vol. = 141.917 cm3/mol
#
# mole wt. = 480.1402 g/mol
#
# date: 29. Jan. 2021

Saponite_CaFe(avg)
Ca0.225(Fe2.9Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 0.225 Ca+2 + 2.8 Fe+2 + 0.1 Fe+3 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 19.4765 # +/- 10
delta_h -55.4 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.289809E+3 -3.224814E-1 1.411369E+5 8.160915E+2 -7.761165E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1110.7 +/- 9 kcal/mol
#
# delfH0 = -1192.9 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
#
# S0PrTr = 90.1 +/- 3 cal/K/mol
#
# CpPrTr = 89.118 +/- 999999 cal/K/mol
#
# mole vol. = 140.984 cm3/mol
#
# mole wt. = 478.1215 g/mol
#
# date: 29. Jan. 2021

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 24.2897 # +/- 3
delta_h -55.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.316170E+3 -3.172542E-1 1.439830E+5 8.249537E+2 -7.926558E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1350.3 +/- 3 kcal/mol
#
# delfH0 = -1439.3 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
#
# S0PrTr = 75.8 +/- 3 cal/K/mol
#
# CpPrTr = 82.865 +/- 999999 cal/K/mol
#
# mole vol. = 146.919 cm3/mol
#
# mole wt. = 422.7601 g/mol
#
# date: 28. Jan. 2021

Saponite_Cs(avg)
Cs0.45(Mg2.8Fe0.1Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 0.45 Cs+ + 2.8 Mg+2 + 0.1 Fe+3 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 22.9470 # +/- 3
delta_h -58.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.363543E+3 -3.272190E-1 1.463644E+5 8.419241E+2 -8.013523E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1350.2 +/- 3 kcal/mol
#
# delfH0 = -1438.8 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
#
# S0PrTr = 79.4 +/- 3 cal/K/mol
#
# CpPrTr = 83.555 +/- 999999 cal/K/mol
#
# mole vol. = 148.776 cm3/mol
#
# mole wt. = 440.5939 g/mol
#
# date: 29. Jan. 2021

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 17.0182 # +/- 10
delta_h -44.4 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.217117E+3 -3.075357E-1 1.361566E+5 7.902818E+2 -7.675692E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
#
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
#
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
#
# delfG0 = -1100.3 +/- 9 kcal/mol

```

```

# delFH0 = -1182.8 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 93.5 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 91.452 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 149.175 cm3/mol
# mole wt. = 517.3861 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

Saponite_CsFe (avg)
Cs0.45(Fe2.9Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 0.45 Cs+ + 2.8 Fe+2 + 0.1 Fe+3 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log k 16.7956 # +/- 10
delta_h -48.2 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.271410E+3 -3.181911E-1 1.392669E+5 8.096784E+2 -7.780576E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1116.0 +/- 9 kcal/mol
# delFH0 = -1198.6 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 95.9 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 91.570 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 150.881 cm3/mol
# mole wt. = 528.9115 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

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 25.5389 # +/- 3
delta_h -60.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.338363E+3 -3.214677E-1 1.457845E+5 8.325681E+2 -7.942969E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1329.2 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1417.6 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 72.0 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 81.368 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 138.899 cm3/mol
# mole wt. = 388.1160 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

Saponite_Fe (avg)
Fe0.225(Mg2.8Fe0.1Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 0.225 Fe+2 + 2.8 Mg+2 + 0.1 Fe+3 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log k 24.6704 # +/- 3
delta_h -64.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.393666E+3 -3.329483E-1 1.488216E+5 8.522525E+2 -8.035139E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1321.4 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1409.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 74.3 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 81.514 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 137.840 cm3/mol
# mole wt. = 393.3520 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

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 18.3408 # +/- 10
delta_h -49.4 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.239448E+3 -3.117680E-1 1.379879E+5 7.979455E+2 -7.692591E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1079.1 +/- 9 kcal/mol
# delFH0 = -1161.1 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 89.7 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 89.955 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 141.155 cm3/mol
# mole wt. = 482.7420 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

Saponite_FeX2 (avg)
Fe0.225(Fe2.9Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 3.025 Fe+2 + 0.1 Fe+3 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log k 18.5190 # +/- 10
delta_h -55.0 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.301059E+3 -3.238577E-1 1.416958E+5 8.198375E+2 -7.800417E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1087.2 +/- 9 kcal/mol
# delFH0 = -1169.0 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 90.8 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 89.527 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 139.945 cm3/mol
# mole wt. = 481.6696 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

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 25.0769 # +/- 3
delta_h -57.1 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.309655E+3 -3.169590E-1 1.436085E+5 8.228471E+2 -7.868440E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1348.5 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1437.6 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 73.7 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 82.721 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 143.582 cm3/mol
# mole wt. = 391.8037 g/mol
# date: 28. Jan. 2021

```

```

Saponite_K(avg)
K0.45(Mg2.8Fe0.1Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 0.45 K+ + 2.8 Mg+2 + 0.1 Fe+3 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log k      24.0538 # +/- 3
delta_h    -59.8 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.354933E+3 -3.268532E-1 1.458824E+5 8.391452E+2 -7.935113E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1347.7 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1436.5 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 76.6 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 83.359 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 144.225 cm3/mol
# mole wt. = 398.3806 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

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      17.8788 # +/- 10
delta_h    -45.7 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.211007E+3 -3.072905E-1 1.358290E+5 7.883180E+2 -7.619238E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1098.4 +/- 9 kcal/mol
# delfH0 = -1181.1 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 91.4 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 91.308 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 145.838 cm3/mol
# mole wt. = 486.4297 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

Saponite_KFe(avg)
K0.45(Fe2.9Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 0.45 K+ + 2.8 Fe+2 + 0.1 Fe+3 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log k      17.9024 # +/- 10
delta_h    -50.0 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.262732E+3 -3.178149E-1 1.387813E+5 8.068742E+2 -7.701994E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1113.5 +/- 9 kcal/mol
# delfH0 = -1196.2 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 93.1 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 91.374 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 146.331 cm3/mol
# mole wt. = 486.6982 g/mol
# date: 4. Feb. 2021

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      26.1221 # +/- 3
delta_h    -61.7 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.343780E+3 -3.220014E-1 1.462656E+5 8.344669E+2 -7.956576E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1342.7 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1431.5 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 71.0 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 80.896 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 138.775 cm3/mol
# mole wt. = 382.9116 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

Saponite_Mg(avg)
Mg0.225(Mg2.8Fe0.1Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 3.025 Mg+2 + 0.1 Fe+3 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log k      25.3990 # +/- 3
delta_h    -66.0 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.401038E+3 -3.336734E-1 1.494555E+5 8.548390E+2 -8.053728E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1339.9 +/- 3 kcal/mol
# delfH0 = -1428.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 72.9 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 80.870 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 137.670 cm3/mol
# mole wt. = 386.2550 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

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      18.8506 # +/- 10
delta_h    -50.3 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.244802E+3 -3.122900E-1 1.384445E+5 7.998206E+2 -7.706109E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delfG0 = -1092.7 +/- 9 kcal/mol
# delfH0 = -1175.0 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# S0PrTr = 88.7 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 89.482 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 141.031 cm3/mol
# mole wt. = 477.5376 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

Saponite_MgFe(avg)
Mg0.225(Fe2.9Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 0.225 Mg+2 + 2.8 Fe+2 + 0.1 Fe+3 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log k      19.3210 # +/- 10
delta_h    -56.2 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.308647E+3 -3.246058E-1 1.423704E+5 8.224921E+2 -7.819834E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
#
# gflag: 2 [estimated delfG0 used], polymer model [Unpublished]

```

```

# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1105.6 +/- 9 kcal/mol
# delFH0 = -1187.9 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 89.5 +/- 3 cal/K/mol
# CpPr = 88.883 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 139.776 cm3/mol
# mole wt. = 474.5726 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

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 26.0861 # +/- 3
delta_h -59.2 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.329268E+3 -3.190343E-1 1.450904E+5 8.296387E+2 -7.916029E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1345.5 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1434.6 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 72.9 +/- 3 cal/K/mol
# CpPr = 82.121 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 141.044 cm3/mol
# mole wt. = 386.4879 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

Saponite_Na(avg)
Na0.45(Mg2.8Fe0.1Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 0.45 Na+ + 2.8 Mg+2 + 0.1 Fe+3 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log k 25.4366 # +/- 3
delta_h -62.7 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.381740E+3 -3.296934E-1 1.479080E+5 8.484300E+2 -8.000213E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1343.6 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1432.3 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 75.5 +/- 3 cal/K/mol
# CpPr = 82.540 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 140.765 cm3/mol
# mole wt. = 391.1318 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

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 18.8879 # +/- 10
delta_h -47.8 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.244802E+3 -3.122900E-1 1.384445E+5 7.998206E+2 -7.706109E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1095.4 +/- 9 kcal/mol
# delFH0 = -1178.0 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 90.6 +/- 3 cal/K/mol
# CpPr = 90.707 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 143.300 cm3/mol
# mole wt. = 481.1139 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

Saponite_NaFe(avg)
Na0.45(Fe2.9Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 0.45 Na+ + 2.8 Fe+2 + 0.1 Fe+3 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log k 19.3585 # +/- 10
delta_h -53.0 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.289343E+3 -3.206301E-1 1.408166E+5 8.160898E+2 -7.766284E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1109.3 +/- 9 kcal/mol
# delFH0 = -1191.9 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 92.0 +/- 3 cal/K/mol
# CpPr = 90.554 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 142.870 cm3/mol
# mole wt. = 479.4494 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

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 19.5709 # +/- 3
delta_h -51.3 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.295743E+3 -3.153107E-1 1.414942E+5 8.174551E+2 -7.821876E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1340.0 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1434.0 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 80.5 +/- 3 cal/K/mol
# CpPr = 88.703 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 147.398 cm3/mol
# mole wt. = 384.8539 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

Saponite_NH4(avg)
(NH4)0.45(Mg2.8Fe0.1Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 0.45 NH4+ + 2.8 Mg+2 + 0.1 Fe+3 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log k 16.4789 # +/- 3
delta_h -51.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.335738E+3 -3.245786E-1 1.429667E+5 8.317118E+2 -7.870670E+6
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1336.2 +/- 3 kcal/mol
# delFH0 = -1431.6 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 85.9 +/- 3 cal/K/mol
# CpPr = 91.517 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 149.429 cm3/mol

```

```

# mole wt. = 388.9036 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

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 12.3727 # +/- 10
delta_h -40.0 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.196513E+3 -3.055704E-1 1.336788E+5 7.827205E+2 -7.570334E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1089.9 +/- 9 kcal/mol
# delFH0 = -1177.4 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 98.2 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 97.289 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 149.654 cm3/mol
# mole wt. = 479.4799 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

Saponite_NH4Fe(avg)
(NH4)0.45(Fe2.9Al0.05)(Al0.5Si3.5)O10(OH)2 + 8 H+ + 2 H2O = + 0.45 NH4+ + 2.8 Fe+2 + 0.1 Fe+3 + 0.55 Al+3 + 3.5 Si(OH)4
log_k 10.4008 # +/- 10
delta_h -42.2 kcal/mol # +/- 10
analytical_expression -2.243446E+3 -3.155312E-1 1.358809E+5 7.994093E+2 -7.637049E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 2 [estimated delFG0 used], polymer model [Unpublished]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1981WOO][2013GAI/BLA_a][Unpublished]
# delFG0 = -1101.9 +/- 9 kcal/mol
# delFH0 = -1191.2 +/- 9 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 102.4 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 99.531 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 151.535 cm3/mol
# mole wt. = 477.2212 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

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 + 7.724 H+ + 2.276 H2O = + 0.038 Ca+2 + 0.394 Na+ + 0.021 K+ +
0.001 Mn+2 + 2.948 Mg+2 + 0.021 Fe+2 + 0.034 Fe+3 + 0.397 Al+3 + 3.569 Si(OH)4
log_k 30.7206 # +/- 2.0
delta_h -67.19 kcal/mol # +/- 2.2
analytical_expression -2.357788E+3 -3.245637E-1 1.479853E+5 8.399862E+2 -7.961367E+6
#
# -Range: 0.01 - 247 deg C
# gflag: 1 [reported delFG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 520K
# data source: [2013GAI/BLA]
# delFG0 = -1343.74 +/- 1.2 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -1432.56 +/- 1.2 kcal/mol
# SOPrTr = 75.19 +/- 0.4 cal/K/mol
# CpPrTr = 82.93 +/- 0.4 cal/K/mol
# mole vol. = 141.660 cm3/mol
# mole wt. = 391.1371 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

Scollecite
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 [1992.JOH/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/K/mol
# CpPrTr = 731.95 +/- 1.6 cal/K/mol
# mole vol. = 1380.720 cm3/mol
# mole wt. = 3138.6968 g/mol
# date: 25. Aug. 2016

Scollecite_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 [1992.JOH/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/K/mol
# CpPrTr = 759.293 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 1380.720 cm3/mol
# mole wt. = 3138.6998 g/mol
# date: 26. Jul. 2016

Se_mono
Se + 1 H2O + 1 O2 = + 1 SeO3-2 + 2 H+
log_k 24.9283 # +/- 0.5
delta_h -50.573 kcal/mol # +/- 0.44
analytical_expression -1.044998E+3 -1.798923E-1 6.995391E+4 3.769340E+2 -3.890183E+6
#
# -Range: 0.01 - 147 deg C
# gflag: 1 [reported delFG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 420K
# data source: [1972CHE/LNG][1981GAU/SHU]
# delFG0 = 0.308 +/- 0.05 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = 0.520 +/- 0.03 kcal/mol
# SOPrTr = 10.770 +/- 0.10 cal/K/mol
# CpPrTr = 6.00 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 17.952 cm3/mol
# mole wt. = 78.9600 g/mol
# date: 9. Apr. 2020

Selenium # Element
Se + 1 H2O + 1 O2 = + 1 SeO3-2 + 2 H+
log_k 24.7025 # +/- 0.5

```

```

delta_h -50.1 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression -1.650611E+3 -2.550891E-1 1.078187E+5 5.907371E+2 -6.400591E+6
#
# -Range: 0.01 - 221 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 494K
# data source: [1981GAU/SHU]
# delfGO = 0 +/- 0 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 10.060 +/- 0.10 cal/K/mol
# CpPrTr = 5.996 +/- 0.05 cal/K/mol
# mole vol. = 16.417 cm3/mol
# mole wt. = 78.9600 g/mol
# date: 9. Apr. 2020

SeO3(s)
SeO3 + 1 H2O = + 1 SeO4-2 + 2 H+
log_k 20.5479 # +/- 0.5
delta_h 107.15 kcal/mol # +/- 0.5
analytical_expression -2.611735E+3 -3.813376E-1 1.591582E+5 9.372438E+2 -9.507606E+6
#
# -Range: 0.01 - 117 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 390K
# data source: [1965MIJ][58TRZ][1974MIL][1994KON/STR][2005OLI/NOS]
# delfGO = -20.59 +/- 0.5 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -38.98 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 21.92 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 18.46 +/- 0.9 cal/K/mol
# mole vol. = 36.905 cm3/mol
# mole wt. = 126.9582 g/mol
# date: 14. Apr. 2020

Sepiolite
Mg4Si6O15(OH)2(H2O)6 + 8 H+ + 1 H2O = + 4 Mg+2 + 6 Si(OH)4
log_k 31.5126 # +/- 4
delta_h -53.267 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression -3.170022E+3 -4.148505E-1 1.945735E+5 1.129918E+3 -1.095998E+7
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1988STO]
# delfGO = -2211.8 +/- 6 kcal/mol
# delfHO = -2418.748 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 146.600 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 168.003 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 285.600 cm3/mol
# mole wt. = 647.8298 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

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 delfGO used], calorimetry & solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1984ROB/HAS][2013LEM/BER]
# delfGO = -162.426 +/- 0.22 kcal/mol
# delfHO = -179.878 +/- 0.22 kcal/mol
# SOPrTr = 22.82 +/- 0.5 cal/K/mol
# CpPrTr = 19.65 +/- 0.5 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 4.496 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPrTr = 4.739 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1995ROB/HEM]
# delfGO = -582.96 +/- 0.5 kcal/mol
# delfHO = -618.09 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 22.80 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 29.58 +/- 0.2 cal/K/mol
# 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 [delfGO 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/K/mol
# CpPrTr = 8.30 +/- 4.4 cal/K/mol
# mole vol. = 29.000 cm3/mol
# mole wt. = 60.0843 g/mol
# date: 17. Jul. 2015

SiO2(am) inert # HFSC component
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: [1935HI1][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/K/mol
# CpPrTr = 8.30 +/- 4.4 cal/K/mol
# mole vol. = 29.000 cm3/mol
# mole wt. = 60.0843 g/mol
# date: 10. Mar. 2021

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/K/mol
# CpPrTr = 19.14 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 28.275 cm3/mol
# mole wt. = 125.3992 g/mol
# date: 5. May. 1978

SnO2(am)
SnO2 + 4 H+ = + 1 Sn+4 + 2 H2O
log k      -7.3554 # +/- 0.6
delta_h    -6.28 kcal/mol # +/- 15.1
analytical_expression -6.075030E+2   -9.649622E-2   3.238874E+4   2.179708E+2   -1.695056E+6
# -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][1998ODA/AMA]
# delfG0 = -122.82 +/- 0.7 kcal/mol
# delfH0 = -137.15 +/- 1.6 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 13.2 +/- 5 cal/K/mol
# CpPrTr = 16.5 +/- 5 cal/K/mol
# mole vol. = 27.846 cm3/mol
# mole wt. = 150.7088 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

S03_beta
S03 + 1 H2O = + 2 H+ + 1 S04-2
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/K/mol
# CpPrTr = 999999 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 6.715 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 *[GHS]
# delfH0 = -1360.80 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPrTr = 80.14 +/- 0.8 cal/K/mol
# CpPrTr = 80.36 +/- 2.4 cal/K/mol
# mole vol. = 117.900 cm3/mol
# mole wt. = 495.0263 g/mol

```

```

# date: 20. Mar. 2019

Sphalerite
ZnS + 1 H+ = + 1 Zn+2 + 1 HS-
log_k      -11.4276 # +/- 0.4
delta_h    8.49 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression  -8.798776E+2   -1.395069E-1   4.619168E+4   3.182104E+2   -2.868823E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1974MIL][1974STU][1978HEL/DEL]
# delFGO = -47.93 +/- 0.5 kcal/mol
# delFHO = -49.00 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPPr = 14.020 +/- 0.04 cal/K/mol
# CpPr = 10.841 +/- 999999 cal/K/mol
# 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      37.6303 # +/- 1.0
delta_h    -95.1 kcal/mol # +/- 1
analytical_expression  -1.317510E+3   -2.086038E-1   8.853867E+4   4.700178E+2   -3.791538E+6
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1978HEL/DEL]
# delFGO = -517.01 +/- 1.0 kcal/mol
# delFHO = -546.9 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 19.27 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPr = 27.764 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 39.710 cm3/mol
# mole wt. = 142.2656 g/mol
# date: 5. May. 1978

Sr(OH)2(s)
Sr(OH)2 + 2 H+ = + 1 Sr+2 + 2 H2O
log_k      27.5211 # +/- 1.7
delta_h    -36.73 kcal/mol # +/- 2.2
analytical_expression  -2.792985E+2   -4.150384E-2   2.290281E+4   1.016172E+2   -8.060164E+5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delFGO = -210.59 +/- 2.3 kcal/mol *
# delFHO = -231.57 +/- 2.2 kcal/mol
# SOPPr = 23.2 +/- 2 cal/K/mol
# CpPr = 19.7 +/- 2 cal/K/mol
# mole vol. = 39.010 cm3/mol
# mole wt. = 121.6346 g/mol
# date: 16. Nov. 2020

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 delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delFGO = -134.32 +/- 0.8 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -141.50 +/- 0.8 kcal/mol
# SOPPr = 13.72 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPr = 10.810 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 334K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1982WAG/EVA]
# delFGO = -535.35 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -627.10 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPPr = 93.40 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPr = 82.4 +/- 23 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delFGO = -186.42 +/- 0.6 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -198.10 +/- 0.6 kcal/mol
# SOPPr = 27.440 +/- 0.04 cal/K/mol
# CpPr = 18.214 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# SOPPr = 829.1 +/- 98 cal/K/mol
# CpPr = 743.804 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 1330.596 cm3/mol
# mole wt. = 2876.8599 g/mol
# date: 27. Jul. 2016

#Stilbite_11
# 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
# SOPPr = 798.600 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 751.064 +/- 999999 cal/K/mol
# 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
# SOPPr = 813.2 +/- 98 cal/K/mol
# CpPr = 741.628 +/- 999999 cal/K/mol
# 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: [1984TUR][1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][1992BEN/REA][1992ATK/BEN][1994ATK/GLA]
# [1994QU/MAJ][1999GLA/TYR][2000COU][2007MAT/LOT][2015LHO/LOT][2015MYE]
# delfG0 = -1366.06 +/- 1.4 kcal/mol
# delfH0 = -1522.70 +/- 1.8 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 130.14 +/- 3.7 cal/K/mol
# CpPr = 143.67 +/- 6.8 cal/K/mol
# 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 + 10 H+ = + 2 Ca+2 + 2 Fe+3 + 1 Si(OH)4 + 11 H2O
# log k 46.1437 # +/- 10
# delta_h -83.698 kcal/mol # +/- 999999
# analytical_expression -1.832938E+3 -2.763206E-1 1.147540E+5 6.611704E+2 -5.277485E+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 = -1146 +/- 10 kcal/mol
# delfH0 = -1300.230 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 137.300 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 158.991 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 227.000 cm3/mol
# mole wt. = 476.0529 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

#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
# SOPPr = 24.2 +/- 2 cal/K/mol
# CpPr = 19.690 +/- 999999 cal/K/mol
# 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

```

```

# SOPrTr = 13.313 +/- 0.05 cal/K/mol
# CpPrTr = 6.300 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 7.661 +/- 0.01 cal/K/mol
# CpPrTr = 5.440 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1978HEL/DEL]
# delfGO = -97.735 +/- 0.06 kcal/mol
# delfHO = -104.370 +/- 0.06 kcal/mol
# SOPrTr = 19.730 +/- 0.04 cal/K/mol
# CpPrTr = 12.307 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 441K
# data source: [1934CLA/PAR][1934HIL][2004FRE/VOI]
# delfGO = -689.54 +/- 0.4 kcal/mol
# delfHO = -761.1 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 68 +/- 10 cal/K/mol
# CpPrTr = 69.200 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 308K
# data source: [1978HEL/DEL_a][2013LEM/BER]
# delfGO = -258.179 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -297.32 +/- 0.4 kcal/mol
# SOPrTr = 36.666 +/- 999999 cal/K/mol *[GHS]
# CpPrTr = 25.987 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 22.0671 # +/- 2.0
delta_h -46.3 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression -2.219152E+3 -2.970676E-1 1.380146E+5 7.897499E+2 -7.760421E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL][1997RIM_a]
# delfGO = -1320.30 +/- 1.0 kcal/mol
# delfHO = -1411.1 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# SOPrTr = 62.340 +/- 0.15 cal/K/mol
# CpPrTr = 79.880 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 136.250 cm3/mol
# mole wt. = 379.2656 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 delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1971STU/PRO][1978HEL/DEL]
# delfGO = -30.56 +/- 0.5 kcal/mol
# delfHO = -37.20 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 10.18 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 10.11 +/- 0.1 cal/K/mol
# mole vol. = 12.220 cm3/mol
# mole wt. = 79.5454 g/mol
# date: 5. May. 1978

Thaumasite

```

```

Ca3Si(OH)6(SO4)(CO3)(H2O)12 + 3 H+ = + 3 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 1 SO4-2 + 1 HCO3- + 14 H2O
log_k      9.4898 # +/- 0.3
delta_h    0.33 kcal/mol # +/- 2.9
analytical_expression  -2.758931E+3   -4.221376E-1   1.524590E+5   1.003731E+3   -8.954237E+6
#
# -Range: 0.01 - 70 deg C
# gflag: 3 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 343K
# data source: [1978HEL/DEL_a][1979EDE/SAT_a][2004MAC/BAR][2013MIT/BAL][2015MAT/GLA]
# delfGO = -1808.16 +/- 0.9 kcal/mol
# delfHO = -2077.61 +/- 2.8 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 221.0 +/- 9 cal/K/mol
# CpPr = 255.1 +/- 8 cal/K/mol
# mole vol. = 331.729 cm3/mol
# mole wt. = 622.6185 g/mol
# date: 8. Sep. 2020

Thermonatrite
Na2CO3(H2O) + 1 H+ = + 2 Na+ + 1 HCO3- + 1 H2O
log_k      10.7926 # +/- 0.14
delta_h    -6.364 kcal/mol # +/- 0.14
analytical_expression  -8.586262E+2   -1.300789E-1   4.878714E+4   3.133652E+2   -2.740670E+6
#
# -Range: 0.01 - 108 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 380.8K
# data source: [1968WAT/LIN][1978BER/VAN][1983GR0/MEI]
# delfGO = -307.428 +/- 0.18 kcal/mol *[GHS]
# delfHO = -341.715 +/- 0.13 kcal/mol
# SOPPr = 40.19 +/- 0.4 cal/K/mol
# CpPr = 35.543 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 54.990 cm3/mol
# mole wt. = 124.0040 g/mol
# date: 21. May. 2020

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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -11021.8 +/- 12 kcal/mol
# delfHO = -11892.1 +/- 21 kcal/mol
# SOPPr = 734.3 +/- 81 cal/K/mol
# CpPr = 789.258 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978COX][1985JAC/HEL_b][2012GAM/GRU]
# delfGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPPr = 12.230 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPr = 6.391 +/- 0.11 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1964NAB/LUK][1969BAB/MAZ][1978HEL/DEL_a][2016SHK]
# delfGO = -208.15 +/- 1.7 kcal/mol
# delfHO = -221.165 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 12.730 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 10.837 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][2001KNA/DIB][2019PIC/PRO]
# delfGO = -210.10 +/- 1.8 kcal/mol
# delfHO = -223.221 +/- 999999 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 12.375 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 12.002 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 21.976 cm3/mol
# mole wt. = 79.8658 g/mol
# date: 3. Dec. 2019

Titanite
CaTiSiO5 + 2 H+ + 3 H2O = + 1 Ca+2 + 1 Ti(OH)4 + 1 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 delfGO 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 *[GHS]
# SOPrTr = 30.88 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 33.220 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 55.650 cm3/mol
# mole wt. = 196.0275 g/mol
# date: 3. Dec. 2019

Titanium
Ti + 2 H2O + 1 O2 = + 1 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 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1998CHA]
# delfG0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 7.352 +/- 0.05 cal/K/mol
# CpPrTr = 6.03 +/- 0.5 cal/K/mol
# mole vol. = 10.637 cm3/mol
# mole wt. = 47.8670 g/mol
# date: 3. Dec. 2019

Tobelite
NH4Al2(AlSi3O10)(OH)2 + 10 H+ = + 1 NH4+ + 3 Al+3 + 3 Si(OH)4
log_k 13.8086 # +/- 3
delta_h -66.8 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -2.391511E+3 -3.525559E-1 1.458057E+5 8.522909E+2 -7.781838E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfG0 used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][2004HOV/HAR_a][2004HOV/HAR_b]
# delfG0 = -1288.5 +/- 4 kcal/mol *[GHS]
# delfH0 = -1398.5 +/- 4 kcal/mol
# SOPrTr = 75.5 +/- 3 cal/K/mol
# CpPrTr = 85.778 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 146.045 cm3/mol
# mole wt. = 377.2479 g/mol
# date: 25. Jan. 2021

Tobermorite_11A
Ca5Si6O16(OH)2(H2O)4.5 + 10 H+ + 1.5 H2O = + 5 Ca+2 + 6 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 [1992.JOH/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/K/mol
# CpPrTr = 182.818 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 300.804 cm3/mol
# mole wt. = 739.9764 g/mol
# date: 23. Jul. 2015

Tobermorite_14A # Plombierite
Ca5Si6O16(OH)2(H2O)9.5 + 10 H+ = + 3.5 H2O + 5 Ca+2 + 6 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 [1992.JOH/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/K/mol
# CpPrTr = 232.679 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 372.555 cm3/mol
# mole wt. = 830.0524 g/mol
# date: 23. Jul. 2015

Tobermorite_9A # Riversideite
Ca5Si6O16(OH)2(H2O)2 + 10 H+ + 4 H2O = + 5 Ca+2 + 6 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 [1992.JOH/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/K/mol
# CpPrTr = 142.400 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 225.434 cm3/mol
# mole wt. = 694.9384 g/mol
# date: 18. Oct. 2016

#Tobermorite_1(gel) # Superseded by CSH055_CsH165
Ca2Si2.406.8(H2O)3.2 + 4 H+ = + 2 Ca+2 + 2.4 Si(OH)4 + 0.4 H2O
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 [1992.JOH/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/K/mol
# CpPrTr = 75.930 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 140.800 cm3/mol
# mole wt. = 314.0058 g/mol

```

```

# date: 23. Jul. 2015

#Tobermorite_II(gel) # Superseded by CSH055_CsH165
# Ca0.8333Si02.8333(H2O)1.3333 + 1.6666 H+ = + 0.8333 Ca+2 + 1 Si(OH)4 + 0.1666 H2O
# 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 delfGO used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 363K
# data source: [2007MAT/LOT][2008LOT/MAT][2012SAS/ART]
# delfGO = -417.187 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -458.136 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 19.112 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 31.637 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 63.2510 # +/- 3
delta_h -118.9 kcal/mol # +/- 4
analytical_expression -4.593507E+3 -6.258553E-1 2.888759E+5 1.637959E+3 -1.587316E+7
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delfGO used], calorimetry & phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delfGO = -2770.25 +/- 1.0 kcal/mol
# delfHO = -2944.2 +/- 1 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 131.190 +/- 0.30 cal/K/mol
# CpPr = 154.882 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 272.920 cm3/mol
# mole wt. = 812.3664 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 delfGO used], polyhedral model
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [2010BLA/BOU][2012ART/SAS]
# delfGO = -3781.475 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -4028.551 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 221.558 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 247.156 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], solubility
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 373K
# data source: [1982PLU/BUS]
# delfGO = -269.106 +/- 0.21 kcal/mol
# delfHO = -287.833 +/- 0.37 kcal/mol
# SOPPr = 22.05 +/- 2.0 cal/K/mol
# CpPr = 14.19 +/- 8.1 cal/K/mol
# 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 HPO4-2 + 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 [delfGO from log K data] for reaction shown
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1970ROS][1972NRI_b][1978HEL/DEL_a][1989BAR][1994ALB/TOM][2017060/V16]
# delfGO = -1054.15 +/- 1.0 kcal/mol
# delfHO = -1226.2 +/- 3 kcal/mol *[GHS]
# SOPPr = 104 +/- 10 cal/K/mol
# CpPr = 136.141 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL], Tmax for Cp = 403K
# data source: [1996KIS/NAV][2007NEU/WAN]
# delfGO = -11870.663 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -12708.8 +/- 12 kcal/mol
# SOPPr = 766.160 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 769.993 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 761.608 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 1524.224 cm3/mol
# mole wt. = 3475.2496 g/mol
# date: 27. Jul. 2016

#Wairakite_111
# 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/K/mol
# CpPrTr = 761.407 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 54.406 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 20.399 +/- 999999 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 20.38 +/- 2.0 cal/K/mol
# 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/K/mol
# CpPrTr = 20.293 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 32.443 cm3/mol
# mole wt. = 99.4047 g/mol
# date: 24. Mar. 2016

Wurtzite
# ZnS + 1 H+ = + 1 Zn+2 + 1 HS-
# log k -9.1406 # +/- 10
# delta_h 5.34 kcal/mol # +/- 1000.0
# analytical expression -8.798715E+2 -1.394979E-1 4.688680E+4 3.181958E+2 -2.870343E+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/K/mol

```

```

# CpPrTr = 10.996 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 23.846 cm3/mol
# mole wt. = 97.4560 g/mol
# date: 5. May. 1978

Wustite # FeO(s)
FeO + 2 H+ = 1 Fe+2 + 1 H2O
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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1968ROB/WAL][1971STU/PRO][1978HEL/DEL]
# delfGO = -60.10 +/- 0.6 kcal/mol
# delfHO = -65.02 +/- 0.5 kcal/mol
# SOPrTr = 14.52 +/- 0.4 cal/K/mol
# CpPrTr = 11.931 +/- 0.13 cal/K/mol
# mole vol. = 12.000 cm3/mol
# mole wt. = 71.8444 g/mol
# date: 22. Aug. 2016

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 delfGO used], polyhedral model
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp not reported
# data source: [2010BLA/BOU][2012ART/SAS]
# delfGO = -2262.456 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -2395.511 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 137.114 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 150.249 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL_a][1996KIS/NAV]
# delfGO = -4016.540 +/- 999999 kcal/mol
# delfHO = -4326.62 +/- 5.0 kcal/mol
# SOPrTr = 291.492 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 289.418 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [2001ARM/GUN][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -4015.46 +/- 5.4 kcal/mol
# delfHO = -4331.0 +/- 12 kcal/mol
# SOPrTr = 272.3 +/- 43 cal/K/mol
# CpPrTr = 274.392 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 528.038 cm3/mol
# mole wt. = 1181.2114 g/mol
# date: 27. Jul. 2016

ZeoliteP_Ca
CaAl2Si2.66O9.32(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 delfGO used], polymer model [2011ART/SAS_a]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL], Tmax for Cp = 500K
# data source: [1994ATK/GLA][2010VIE][2011ART/SAS_a]
# delfGO = -1329.0 +/- 1 kcal/mol
# delfHO = -1444.0 +/- 3 kcal/mol
# SOPrTr = 100.8 +/- 10 cal/K/mol
# CpPrTr = 101.647 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delfGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delfGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delfHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 9.950 +/- 0.03 cal/K/mol
# CpPrTr = 6.066 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delFGO = -76.596 +/- 0.07 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -83.762 +/- 0.06 kcal/mol
# SOPrTr = 10.43 +/- 0.1 cal/K/mol
# CpPrTr = 9.621 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used], phase relations
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1978HEL/DEL][1982PLU/BUS_a]
# delFGO = -1549.18 +/- 1.0 kcal/mol
# delFH0 = -1643.691 +/- 999999 kcal/mol
# SOPrTr = 70.740 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPrTr = 83.099 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol.= 135.900 cm3/mol
# mole wt.= 454.3571 g/mol
# date: 23. Jul. 2015
#

```

```

# -----
# 2. Gases
# -----

```

```

Br2 (g)
Br2 = + 1 Br2
log_k      -0.4669 # +/- 0.15
delta_h    -7.5880 kcal/mol # +/- 0.202
analytical_expression  1.356348E+2   2.250395E-2   -5.465022E+3   -5.193259E+1   3.574515E+5
#
# -Range: 0.01 - 300 deg C
#
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delFGO = 0.743 +/- 0.027 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = 7.388 +/- 0.026 kcal/mol
# SOPrTr = 58.666 +/- 0.01 cal/K/mol
# CpPrTr = 8.618 +/- 0.02 cal/K/mol
# mole vol.= 0.000 cm3/mol
# mole wt.= 159.8080 g/mol
# date: 29. Jan. 2021
#

```

```

CH4 (g) # Methane
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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1982WAG/EVA]
# delFGO = -12.12 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -17.88 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPrTr = 44.518 +/- 0.02 cal/K/mol
# CpPrTr = 8.543 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delFGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delFH0 = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPrTr = 53.316 +/- 0.01 cal/K/mol
# CpPrTr = 8.133 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1982WAG/EVA]
# delFGO = -94.254 +/- 0.02 kcal/mol *[GHS]
# delFH0 = -94.051 +/- 0.02 kcal/mol
# SOPrTr = 51.09 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 8.879 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delFGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delFHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPPr = 48.469 +/- 0.01 cal/K/mol
# CpPr = 7.494 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 37.9968 g/mol
# date: 29. Oct. 2015

H2(g) # Hydrogen, element
H2 = + 1 H2
log k -3.0786 # +/- 1.5
delta_h -1.0 kcal/mol # +/- 2
analytical_expression 1.057385E+2 1.939211E-2 -6.986761E+3 -3.943488E+1 5.701446E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delFGO = 0 +/- 0 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPPr = 31.233 +/- 0.008 cal/K/mol
# CpPr = 6.888 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 2.0158 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1990JOH]
# delFGO = -54.525 +/- 999999 kcal/mol
# delFHO = -57.935 +/- 999999 kcal/mol
# SOPPr = 44.763 +/- 999999 cal/K/mol
# CpPr = 9.577 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1982WAG/EVA]
# delFGO = -8.02 +/- 0.2 kcal/mol
# delFHO = -4.93 +/- 0.2 kcal/mol
# SOPPr = 49.18 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPr = 8.148 +/- 0.05 cal/K/mol
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 34.0818 g/mol
# date: 3. Feb. 2019

H2Se(g)
H2Se = + 1 H+ + 1 HSe-
log k -4.9845 # +/- 0.4
delta_h -3.60 kcal/mol # +/- 1.0
analytical_expression -6.762087E+2 -1.027641E-1 3.844287E+4 2.420182E+2 -2.304917E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1898PEL][1899BOD][1913PRE/BRO][1966RAW/TOG][1967RAU]
# [1969YUS/DEV][1972FLO][1974MIL][1982WAG/EVA]
# delFGO = 3.70 +/- 0.3 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = 7.00 +/- 0.3 kcal/mol
# SOPPr = 52.35 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPr = 8.28 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 80.9758 g/mol
# date: 7. Apr. 2020

N2(g) # Nitrogen, element
N2 = + 1 N2
log k -3.1864 # +/- 999999
delta_h 0.0 kcal/mol # +/- 999999
analytical_expression 1.913219E+2 3.320496E-2 -1.210066E+4 -7.058309E+1 9.627697E+5
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delFGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delFHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPPr = 45.796 +/- 0.008 cal/K/mol
# CpPr = 6.963 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 28.0134 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delFGO = -3.924 +/- 0.08 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -10.980 +/- 0.08 kcal/mol

```

```

# SOPPrTr = 46.080 +/- 0.05 cal/K/mol
# CpPrTr = 8.483 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delFGO = 0 +/- 0 kcal/mol
# delFHO = 0 +/- 0 kcal/mol
# SOPPrTr = 49.031 +/- 0.008 cal/K/mol
# CpPrTr = 7.008 +/- 999999 cal/K/mol
# 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 delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delFGO = 19.027 +/- 0.07 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = 30.710 +/- 0.07 kcal/mol
# SOPPrTr = 54.506 +/- 0.01 cal/K/mol
# CpPrTr = 7.755 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 64.1320 g/mol
# date: 23. Jul. 2015

Se2(g)
Se2 + 2 H2O = + 2 H+ + 2 HSe- + 1 O2
log k -85.1969 # +/- 1.0
delta_h 106.81 kcal/mol # +/- 2.1
analytical_expression -2.070212E+3 -2.954406E-1 9.536679E+4 7.417521E+2 -7.302630E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used], calorimetry
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1984GR0/DRO][2005OLI/NOS]
# delFGO = 22.10 +/- 0.7 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = 33.72 +/- 0.7 kcal/mol
# SOPPrTr = 59.100 +/- 0.10 cal/K/mol
# CpPrTr = 9.97 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 157.9200 g/mol
# date: 20. Apr. 2020

SO2(g) # Sulfur dioxide
SO2 + 1 H2O = + 1 SO3-2 + 2 H+
log k -8.8780 # +/- 1.5
delta_h -12.644 kcal/mol # +/- 2.00
analytical_expression -1.204944E+3 -1.951097E-1 6.926678E+4 4.319179E+2 -4.163178E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1978COX]
# delFGO = -71.724 +/- 0.05 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -70.939 +/- 0.05 kcal/mol
# SOPPrTr = 59.326 +/- 0.01 cal/K/mol
# CpPrTr = 9.531 +/- 999999 cal/K/mol
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 64.0648 g/mol
# date: 29. Jan. 2021

SO3(g) # Sulfur trioxide
SO3 + 1 H2O = + 1 SO4-2 + 2 H+
log k 23.8684 # +/- 0.2
delta_h -54.493 kcal/mol # +/- 0.20
analytical_expression -1.215831E+3 -1.958569E-1 7.927698E+4 4.363170E+2 -4.216889E+6
# -Range: 0.01 - 300 deg C
# gflag: 1 [reported delFGO used]
# extrapolation algorithm: SUPCRT92 [1992.JOH/OEL]
# data source: [1960KEL][1998CHA]
# delFGO = -88.68 +/- 0.2 kcal/mol *[GHS]
# delFHO = -94.590 +/- 0.17 kcal/mol
# SOPPrTr = 61.37 +/- 0.2 cal/K/mol
# CpPrTr = 12.10 +/- 0.2 cal/K/mol
# mole vol. = 0.000 cm3/mol
# mole wt. = 80.0642 g/mol
# date: 2. Feb. 2021

#--
#END
#--

#-----
# REFERENCES
#-----

# [1887FAB]
# Fabre, M.C. (1887) Recherches thermiques sur les sélénures. Annales de Chimie et de Physique, 10,
# 472-550 [in French].

# [1889SET]
# Setschenow, J. (1889) Über die konstitution der salzlösungen auf grund ihres verhaltens zu kohlenensäure.
# Zeitschrift für Physikalische Chemie, 4(1), 117-125. [in German]

# [1898PEL]

```

Pelabon, M.H. (1898) Ueber die Dissociation des Selenwasserstoffs. Zeitschrift für Physikalische Chemie (München), 26, 659-689 [in German].

[1899BOD]
Bodenstein, M. (1899) Gasreaktionen in der chemischen Kinetik. IV. Bildung und Zersetzung von Selenwasserstoff. Zeitschrift für Physikalische Chemie (München), 29, 429-448 [in German].

[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.

[1913PRE/BRO]
Preuner, G., and Brockmöller, I. (1913) Gasdruckmessungen mit Spiralmanometer aus Quarzglas. Isothermen von Selen, Schwefel, Arsen, Phosphor; Dissociation des Kupfersulfids und des Selenwasserstoffs. Zeitschrift für Physikalische Chemie (Leipzig), 81, 129-170 [in German].

[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]
Heyrovský, 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.

[1928SCH/SWI]
Schott, H.F., Swift, E.H., and Yost, D.M. (1928) The reduction potential of selenium and the free energy of selenous acid. Journal of the American Chemical Society, 50(3), 721-727.

[1928SHE/IZA]
Sherrill, M.S., and Izard, E.F. (1928) Teg reduction potential of selenous acid and the free energy of aqueous selenic acid. Journal of the American Chemical Society, 50, 1665-1675.

[1929HUT/MAG]
Hüttig, 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 Seances de l'Academie, 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 wässrigeren lösung. Zeitschrift für Physikalische Chemie, 153A(1), 321-375 [in German].

[1932JOW/PRI]
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.

[1934BAN]
Banks, W.H. (1934) The dissociation of the selenates of zinc and cadmium in water. Journal of the
Chemical Society, 1010-1012.

[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 Naecken, R., Mosebach, R. (1936) Untersuchungen an den vierstoffsystemen CaO-Al₂O₃-CaCl₂-H₂O und
CaO-SiO₂-CaCl₂-H₂O. Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie, 228, 19-27.

[1937CRA/BRO]
Cranston, J.A., Brown, H.F. (1937) The hydrolysis of salts. II. KCN, CuSO₄, Na₂SO₄, Pb(NO₃)₂. Journal
of the Royal Technical College, Glasgow, 4, 54-60.

[1937MCC]
McCullough, J. (1937) The crystal structure of selenium dioxide. Journal of the American Chemical
Society, 59, 789-794.

[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.

[1939HAG]
Hagiwara, H. (1939) On the ionization constant of selenous acid (glass electrode and its application
Part 4). Bulletin of the Institute of Physical and Chemical Research (RIKEN, Tokyo), 18, 648-656
(in Japanese).

[1939JON]
Jones, F.E. (1939) The quaternary system CaO-Al₂O₃-CaSO₄-H₂O 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.

[1943KEL/MOO]
Kelley, K.K., and Moore, G.E. (1943) The specific heats at low temperatures of anhydrous chlorides of
calcium, iron, magnesium, and manganese. Journal of the American Chemical Society, 65(7), 1264-1267.

[1943MOO]
Moore, G.E. (1943) Heat contents at high temperatures of the anhydrous chlorides of calcium, iron,
magnesium and manganese. Journal of the American Chemical Society, 65(9), 1700-1703.

[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 CaO-Al₂O₃-H₂O 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, Ti2O3, Ti3O5, and TiO2. 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.

[1949NÄS/TAM]
Nasänen, R., and Tamminen, V. (1949) The equilibria of cupric hydroxysalts in mixed aqueous solutions of cupric and alkali salts at 25o. Journal of the American Chemical Society, 71(6), 1994-1998.

[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 ok 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/GEO]
Bell, R.P., George, J.H.B. (1953) Incomplete dissociation of some thalious 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 CaO-Al2O3-H2O bei 20oC und das erhärten der tonerdeemente. 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 298.16oK 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 25oC. 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 50oC to 250oC. 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 Kemistilehte 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 $\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$, $12\text{CaO} \cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$, and $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$. 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, 109-13.

[1957GAR]
 # Garrels, R.M. (1957) Some free energy values from geologic relations. American Mineralogist,
 # 42, 780-791.

[1957GRE/PR1]
 # 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 $\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ at 5oC. Journal of the Chemical
 # Society, 2103-2110.

[1958CAR]
 # Carlson, E.T. (1958) The system Lime-Alumina-water at 1oC. 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 kiesel-sauren. XIV. Die wasserlosliche
 # monokieselsaure. Zeitschrift fur Anorganische und Allgemeine Chemie, 296, 273-279.

[1958SID/BAN]
 # Siddhanta, S.K., Banerjee, S.N. (1958) Some aliphatic monocarboxylate complexes of bivalent metals in
 # aqueous solution. Part VII. Manganese acetato complexes. Journal of the Indian Chemical Society,
 # 35, 419-423.

[1958TRZ]
 # Trzsil, J. (1958) Thermodynamic constants of selenium oxide. Sbornik Vedeckych Praci Vysoke Skoly
 # Banske v Ostrave, 4, 277-281.

[1959GRO/WES_a]
 # Gronvold, F., Westrum, E.F.J., Chou, C. (1959) Heat capacities and thermodynamic properties of the
 # pyrrhotites FeS and FeO.877S from 5 to 350oK. Journal of Chemical Physics, 30, 528-531.

[1959GRO/WES_b]
 # Gronvold, F., Westrum, E.F.J. (1959) Low temperature heat capacities and thermodynamic
 # properties of the iron selenides Fe1.04Se, Fe7Se8 and Fe3Se4 from 5 to 350oK. Acta Chemica
 # Scandinavica, 13, 241-248.

[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 298.15oK 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 21o. 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.

[1960BAR/BET]
Barton, P.B., and Bethke, P.M. (1960) Thermodynamic properties of some synthetic zinc and copper minerals. American Journal of Science, 258A, 21-34.

[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 25oC to 300oC. 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]
Näsänen, R., Meriläinen, P., Leppänen, 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.

[1961SEL/PAK]
Selivanova, N.M., and Pakhorukov, N.I. (1961) On the heats of solution of selenious acid. Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Khimiya i Khimicheskaya Tekhnologiya, 4, 355-358.

[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.

[1962GAT]
Gattow, G. (1962) Die Bildungsenthalpie von SeO2 und die Umwandlungswärmen der Selen-Modifikationen.

Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie, 317, 245-260 [in German].

[1962GR0/WES]
Gronvold, F., and Westrum, E.F.J. (1962) Heat capacities and thermodynamic functions of iron disulfide (pyrite), iron diselenide, and nickel diselenide from 5 to 3500K. The estimation of standard entropies of transition metal chalcogenides. *Inorganic Chemistry*, 1(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 250 to 3000C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 26, 1029-1043

[1962SIE]
Siever, R. (1962) Silica solubility, 00-2000C, 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.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.

[1963QU1/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 8000C 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 298.150K of akermanite, cordierite, gehlenite, and merwinite. United States Bureau of Mines Report of Investigations, 6343, p. 7.

[1963WU/BIR]
Wu, C.-H., Birky, M.M., and Hepler, L.G. (1963) Thermochemistry of some bromine and iodine species in aqueous solution. *Journal of Physical Chemistry*, 67, 1202-1205.

[1964AND/LEC]
Andresen, A.F., and Leciejewicz. (1964) A neutron diffraction study of Fe7Se8. *Journal de Physique*, 25(5), 574-578.

[1964ARC/MON]
Archer, D.W., and Monk, C.B. (1964) 594. Ion-association of some acetates by pH (glass electrode) measurements. *Journal of the Chemical Society*, 3117-3122.

[1964DAU/DAU]
Dauphin, J., Dauphin, S., Chatonier, D., Vialatte, M.-T. (1964) L'hydroxyde ferreux (3e note). Produit de solubilité relatif a l/ion Fe++ et complexes ferro-chlores. *Bulletin de la Societe Chimique de France*, 2588-2592.

[1964HUG]
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.

[1964K0Z]
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.

[1964NA1]
Nair, V.S.K. (1964) Dissociation of the biselenate ion. *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, 26, 1911-1917.

[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.

[1964WE1/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.

[1965COV/DOB]
Covington, A.K., Dobson, J.V. (1965) The dissociation constant of the biselenate ion at 25°C. *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, 27, 1435-1436.

[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 potentiométrique. *Bulletin de la Société Chimique de France*, 971-975.

[1965HUG b]
Hugel, R. (1965) No. 312 - Complexes nitrato de l'ion Pb²⁺. II. - Etude polarographique. *Bulletin de la Société Chimique de France*, 2017-2019.

[1965MIJ]
Mihoff, F.C. (1965) The crystal structure of tetragonal selenium trioxide. *Acta Crystallographica*, 18, 795-798.

[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 Ca₂Al₂O₇-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.

[1966GAD]
Gadzhiev, S.N. (1966) Enthalpy of formation of selenium dioxide. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 40, 241-243.

[1966HAY]
Hays, J.F. (1966) Lime-alumina-silica. *Year Book - Carnegie Institute of Washington*, 65, 234-239.

[1966RAW/TOG]
Rawling, J.R., Toguri, J.M. (1966) The thermodynamic properties of hydrogen selenide. *Canadian Journal of Chemistry*, 44, 451-456.

[1966SAB/CAR]
Sabbah, R., Carpeni, G. (1966) Etude électrométrique des systèmes H₂SeO₃-Na₂SeO₃ (ou K₂SeO₃) en milieu Cl⁻ (Na⁺ ou K⁺) = 3 M à 25°C. *Journal de Chimie Physique*, 63, 1549-1554. [in French].

[1966STR]
Strubel, G. (1966) Die hydrothermale Löslichkeit von Conlestin im System SrSO₄-NaCl-H₂O. *Neues Jahrbuch für Mineralogie*, 1966, 99-107.

[1967BIL/ING]
Bilinski, H., Ingri, N. (1967) A determination of the formation constant of SiO(OH)₃⁻. *Acta Chemica Scandinavica*, 21, 2503-2510.

[1967CHE/UNG]
Cherin, P., and Unger, P. (1967) The crystal structure of trigonal selenium. *Inorganic Chemistry*, 6, 1589-1591.

[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 1070K and pressure-temperature stability fields for coesite and stishovite. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 31, 2289-2307.

[1967KAW/MAN]
Kawassiadis, C.T., Manoussakis, G.E., and Tossidis, J.A. (1967) Study of selenous acid dissociation in mixed aqueous-alcoholic solvents. *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, 29, 401-405.

[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.

[1967RAU]
Rau, H. (1967) Das Bildungsgleichgewicht des Selenwasserstoffs. *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, 71(7), 716-719 [in German].

[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.

[1968GRØ]
 # Grenvold, F. (1968) Heat capacities and thermodynamic properties of the iron selenides Fe_{1.04}Se,
 # Fe₇Se₈, and Fe₃Se₄ from 298 to 1050K. Acta Chemica Scandinavica, 22, 1219-1240.

[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.

[1968MAL/PAS]
 # Mal' tsev, A.K., Pashinkin, A.S., Bakeeva, S.S., and Zhdanov, V.M. (1968) Low-temperature heat capacity
 # and thermodynamic functions of selenium dioxide. Russian Journal of Physical Chemistry, 42, 1381-1382.

[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
 # 298.15K (25.0oC) and one atmosphere (1.013 bars) pressure and at higher temperatures. United States
 # Geological Survey Bulletin, 1259, 1-256.

[1968SEK/IWA]
 # Sekine, T., Iwaki, H., Sakairi, M., and Inarida, M. (1968) Studies on the liquid-liquid partition
 # systems: VI. Solvent extraction study of the dissociation of sulfurou, selenious and tellurous acids in
 # acid perchlorate media. Bulletin of the Chemical Society of Japan, 41, 1-7.

[1968TRU/HOS]
 # Truesdell, A.H., Hopstetler, P.B. (1968) Dissociation constants of KSO₄- from 10o-50oC. Geochimica
 # et Cosmochimica Acta, 32, 1019-1022.

[1968WAT/LIN]
 # Waterfield, C.G., Linford, R.G., Goalby, B.B., Bates, T.R., Elyard, C.A., and Staveley, L.A.K.
 # (1968) Thermodynamic investigation of disorder in the hydrates of sodium carbonate Transactions
 # of the Faraday Society, 64, 868-874.

[1968ZAH/BAU]
 # Zahrobsky, R.F., Baur, W.H. (1968) On the crystal chemistry of salt hydrates. V. The determination
 # of the crystal structure CuSO₄.3H₂O (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 25oC and
 # 200oC. 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 CaSO₄.Na₂SO₄.NaNO₃-H₂O to the critical temperature of
 # water. Association equilibria. Journal of Physical Chemistry, 73, 81-90.

[1969YUS/DEV]
 # Yushin, A.S., and Devyatykh, G.G. (1969) Equilibrium constant for heat of formation of hydrogen selenide
 # from the elements. Russian Journal of Physical Chemistry, 43, 550-552.

[1970AND/VAN]
 # Andresen, A.F., and van Laar, B. (1970) The magnetic structure of Fe₃Se₄. Acta Chemica Scandinavica,
 # 24, 2435-2439.

[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.

[1970GHO/NAI]
Ghosh, R., and Nair, V.S.K. (1970) Studies on metal complexes in aqueous solution: III. The biselenate ion and transition metal selenates. *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry*, 32, 3041-3051.

[1970HEL/MaC]
Helgeson, H.C., MacKenzie, F.T., 1970. Silicate-sea water equilibria in the ocean system. *Deep Sea Research* 17, 877-892.

[1970KÁL/STE]
Kálmán, A., Stephens, J.S., and Cruickshank, D.W.J. (1970) The crystal structure of K₂SeO₄. *Acta Crystallographica B*, 26, 1451-1454.

[1970LIU/LIN] (GWB formatted TDB only)
Liu, C.-T. & Lindsay, W.T.J. (1970) Osmotic coefficients of aqueous sodium chloride solutions from 125 to 130o. *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.

[1971BAR/SIL]
Barcza, L., and Sillén, L.G. (1971) Equilibrium studies of polyanions 19. Polyselenite equilibria in various ionic media. *Acta Chemica Scandinavica*, 25, 1250-1260.

[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., Hefter, 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.

[1971DUB/SIS]
Dubeau, C., Sisi, J.-C., and Ozanne, N. (1971) The solubility of hydrogen selenide in water. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 16(1), 78-79.

[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 NaHC₃O₃, NaC₃O₃⁻, H₂C₃O₃ and HC₃O₃⁻. *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.

[1971PAS/ARO]
Pashinkin, A.S., Aron, B.M., Bakeeva, S.S., Buketov, E.A., Karyakin, N.V., Krylova, G.P., Rustembekov, K.G., and Ugorets, M.Z. (1971) Measurement and calculation of certain thermodynamic and physicochemical constants of selenium dioxide. *Russian Journal of Physical Chemistry*, 45, 909-910.

[1971SIL/MAR]
Sillén, 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 Pb²⁺ and Cl⁻ par spectrophotometrie dans l'ultraviolet. *Bulletin de la Société Chimique de France*, 25-29 [in French].

[1972ARN/BAR]
Arnek, R., and Barcza, L. (1972) Thermochemical studies of hydrolytic reactions: 11. Polyselenite equilibria in various ionic media. *Acta Chemica Scandinavica*, 26, 213-217.

[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.

[1972CHE/UNG]
Cherin, P., and Unger, P. (1972) Refinement of the crystal structure of α -monoclinic Se. *Acta Crystallographica B*, 28, 313-317.

[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.

[1972FLÖ]
Flögel, P. (1972) Zur Kristallzüchtung von Cadmiumsulfid und anderen II-VI-Verbindungen. IV. Zum Gleichgewicht zwischen Selen und Wasserstoff bei 400°C. *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie*, 388, 218-228 [in German].

[1972GRØ]
Grønvold, F. (1972) High-temperature reaction calorimeter. *Acta Chemica Scandinavica*, 26, 2085-2099.

[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 298.15 K of huntite, $\text{CaMg}_3(\text{CO}_3)_4$, and artinite, $\text{Mg}_2(\text{OH})_2(\text{CO}_3)(\text{H}_2\text{O})_3$. *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 $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2\text{-H}_3\text{PO}_4\text{-H}_2\text{O}$. *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.

[1972PAU/PYR]
Paul, G.L., and Pryor, A.W. (1972) The study of sodium nitrate by neutron diffraction. *Acta Crystallographica B*, 28, 2700-272.

[1972ROB/HEM]
Robie, R.A., Hemingway, B.S. (1972) The heat capacities at low-temperature and entropies at 298.15 K of nesquehonite, $\text{MgCO}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, and hydromagnesite. *American Mineralogist*, 57, 1768-1781.

[1972SVE]
Svendsen, S.R. (1972) Decomposition pressures and standard enthalpy of formation for the iron selenides FeSe , Fe_7Se_8 , Fe_3Se_4 and FeSe_2 . *Acta Chemica Scandinavica*, 26, 3757-3774.

[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) Interprétation plus élaborée des équilibres entre les ions Pb^{2+} and Cl^- . Solubilité de PbCl_2 à 25° C dans les solutions $\text{Na}^+(\text{ClO}_4^-, \text{Cl}^-)_4\text{M}$. *Bulletin de la Société Chimique de France* (4), 4096-4099.

[1972WHI/LAN]
Whittemore, D.O., Langmuir, D. (1972) Standard electrode potential of $\text{Fe}^{3+} + e^- = \text{Fe}^{2+}$ from 5-35°C. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 17, 288-290.

[1973BAR/MOR]
Barnes, D.S., Mortimer, C.T. (1973) Enthalpies of combustion of selenium and diphenyl selenide. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 5, 371-377.

[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) $\alpha\text{-Pb}_3(\text{PO}_4)_2$ - A pure ferroelastic. *Materials Research Bulletin*, 8, 497-504.

[1973HAA/ROB]
Haas, J.L., Robie, R.A. (1973) Thermodynamic data for wustite, FeO , 9470, 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, $\text{CaMg}_3(\text{CO}_3)_4$, and artinite, $\text{Mg}_2(\text{OH})_2(\text{CO}_3) \cdot 3\text{H}_2\text{O}$. *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, $\text{MgCO}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, and hydromagnesite, $5\text{MgO} \cdot 4\text{CO}_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$. *United States Geological Survey Journal of Research*, 1, 543-547.

[1974GIB/SCA] (GWB formatted TDB only)
Gibbard, H.F.J., Scatchard, G., Rousseau, R.A. & Creek, J.L. (1974) Liquid-vapor equilibrium of aqueous sodium chloride, from 298 to 373 K 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 $\text{Ba}_3(\text{PO}_4)_2$ in the system $\text{Ca}(\text{OH})_2\text{-H}_3\text{PO}_4\text{-H}_2\text{O}$ 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 50°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 38, 301-318.

[1974MIL]
Mills, K.C. (1974) Thermodynamic data for inorganic sulphides, selenides and tellurides. Butterworths, London, UK.

[1974MOR/SEK]
Moriya, H., and Sekine, T. (1974) A solvent extraction study of zinc(II) complexes with several divalent anions of carboxylic and inorganic acids. *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, 47, 747-748.

[1974NAU/RYZ]
Naumov, G.B., Ryzhenko, B.N. and Khodakovskiy, I.L. (1974) Handbook of thermodynamic data. United States National Technical Information Service (PB-226 722/AS), p. 328. United States Geological Survey, Springfield, VA, U.S.A.

[1974NOR]
North, N.A. (1974) Pressure dependence of SrSO_4 solubility. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 38, 1075-1081.

[1974NR1]
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 50°C. *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 350°C. *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 für 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 200°C. *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 25°C 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 12.5-75°C. *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 300°C. *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 carbonato complexes of Pb(II), Cu(II), Cd(II) and Zn(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 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.

[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., Kolonig, 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 10 to 90°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 10 to 90°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, I.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]
Culberson, C.H., Latham, G., Bates, R.G. (1978) Solubilities and activity coefficients of
calcium and strontium sulphates in synthetic seawater at 0.5°C and 25°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 Fernández-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].

[1979G10/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, KAISi3O8 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)O4.
Acta Crystallographica B, 36, 2539-2545.

[1980LOP/TEL]
Lopez-Echarri, A., Tello, M.J., and Gili, P. (1980) Specific heat behaviour of K2SeO4 in the
48-800K temperature range. A new phase transition. *Solid State Communications*, 36, 1021-1025.

[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. *Croatia Chemica
Acta*, 53, 503-508.

[1980MAR/WAR]
Marshall, W.L., Warakowski, 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 PbCl+ 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.

[1981GAU/SHU]
Gaur, U., Shu, H.-C., Mehta, A., and Wunderlich, B. (1981) Heat capacity and other thermodynamic properties of linear macromolecules. I. Selenium. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 10(1), 89-117.

[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.

[1981WOO]
Wood, B.J. (1981) Crystal field electronic effects on the thermodynamic properties of Fe²⁺ minerals. In R.C. Newton, A. Navrotsky, and B.J. Wood, Eds. *Thermodynamics of Minerals and Melts*, 1, p. 63-84. Springer-Verlag, Berlin, Germany.

[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 (25°C, 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 350°C. *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 90°C, 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 Ca²⁺ and CO₃²⁻ [1988SHO/HEL] together with the solubilities of calcite and aragonite reported in [1982PLU/BUS].

[1982ROH]
Röhl, 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]
Arnórsson, 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.

[1983ATA/NOM]
Atake, T., Nomoto, K., Chaudhuri, B.K., and Chihara, H. (1983) Calorimetric studies of two successive phase transitions. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 15(4), 383-394.

[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.

[1983GRO/MEI]
Gronvold, F., and Meisingset, K.K. (1983) Thermodynamic properties and phase transitions of salt hydrates between 270 and 400 K. II. Na₂CO₃·H₂O and Na₂CO₃·10H₂O. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 15, 881-889.

[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 25°C. 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 91°C, the association constants of SrHCO₃⁺(aq) and SrCO₃⁰(aq) between 5 and
80°C, and an evaluation of the thermodynamic properties of Sr²⁺(aq) and SrCO₃(cr) at 25°C and 1 atm
total pressure. Geochimica et Cosmochimica Acta, 48, 2021-2035.

[1984GR0/DRO]
Grenvold, F., Drowart, J., and Westrum, E.F.J. (1984) The Chemical Thermodynamics of Actinide Elements
and Compounds. Part 4: The actinide chalcogenides, 265p. Report No: STI/PUB/424/04. International Atomic
Energy Agency, Vienna, Austria.

[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's 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 300°C: 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.

[1985DAN/DER]
Daniele, P.G., de Robertis, A., de Stefano, C., Sammartano, S., and Rigano, C. (1985) On the possibility
of determining the thermodynamic parameters for the formation of weak complexes using a simple model for
the dependence on ionic strength of activity coefficients: Na⁺, K⁺, and Ca²⁺ complexes of low molecular
weight ligands in aqueous solution. Journal of the Chemical Society Dalton Transactions, 2353-2361.

[1985GI0]
Giordano, T.H. (1985) Anglesite solubilities in water and sodium sulfate solutions to 85°C. 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 KHSO₅.H₂O(cr), KHSO₅(cr), and
HSO₅⁻(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]
Buserberg, E., Plummer, L.N. (1986) The solubility of BaCO₃(cr) (witherite) in CO₂-H₂O solutions
between 0 and 900C, evaluation of the association constants of BaHCO₃⁺(aq) and BaCO₃⁰(aq) between 5
and 800C, and a preliminary evaluation of the thermodynamic properties of Ba²⁺(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 (α-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. CaCl₂.6H₂O, CaCl₂.4H₂O, CaCl₂.2H₂O, and FeCl₃.6H₂O. *Journal of Chemical Thermodynamics*,
18, 159-173.

[1986MYE]
Myers, R.J. (1986) The new low value for the second dissociation constant for H₂S. *Journal of Chemical*
Education, 63(8), 687-690.

[1986PAR/KIS]
Parise, J.B., and Hyde, B.G. (1986) The structure of atacamite and its relationship to spinel. *Acta*
Crystallographica C, 42, 1277-1280.

[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 KHSO₅(cr) from 5 to 300 K, and the partial molar entropy of
HSO₅⁻(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 H₂O. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 50, 733-739.

[1986YIS/RUI]
Yishin, Z., Ruiyang, A., Chen, Y. (1986) Determination of the solubility of Fe₂O₃ in dilute aqueous
solutions at 3000C and 10 MPa. *Scientia Sinica Series B*, 29, 1221-1232.

[1987AMI/MIN]
Amin, E.B., Minenkov, Y.F., Nabutovskaya, O.A., Naumov, V.N., Pukov, I.E., Kondrat'ev, S.N. (1987)
Thermodynamic properties of selenium dioxide at 7-304K. *Russian Journal of Physical Chemistry*,
61, 1375-1378.

[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 (SrSO₄(s)) solubility in water, seawater and NaCl
solution. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 51(1), 63-72.

[1988BER]
Bertram, 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
kieserite. *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 4000 to 8000C and pressures from 500 to 4000 bars. *Journal of*
Physical Chemistry, 92, 1631-1639.

[1988PAL/DRU]
Palmer, D.A., and Drummond, S.E. (1988) Potentiometric determination of the molal formation constants
of ferrous acetate complexes in aqueous solutions to high temperatures. *Journal of Physical Chemistry*,
92, 6795-6800.

[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 5 kb and 1000 degC. *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 cérusite 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 Lefauchaux, 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. *Thermochimica 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.

[1990DAS/NAR]
Dasgupta, P.K., and Nara, O. (1990) Measurement of acid dissociation constants of weak acids by cation exchange and conductometry. *Analytical Chemistry*, 62, 1117–1122.

[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.

[1990FEL/RAI]
Felmy, A.R., Rai, D., and Amonette, J.E. (1990) The solubility of barite and celestite in sodium sulfate: Evaluation of thermodynamic data. *Journal of Solution Chemistry*, 19(2), 175–185.

[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).

[1990LEV/MYE]
Levy, D.E., and Myers, R.J. (1990) Spectroscopic determination of the second dissociation constant of H₂Se and the activity coefficients and spectral shifts of its ions. *Journal of Physical Chemistry*, 94, 7842–7847.

[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., Macphee, D.E., Kindness, A. & Glasser, F.P. (1991) Solubility properties of ternary and quaternary compounds in the CaO-*Al*2O₃-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 l'hydroxyapatite et de la chlorapatite. *Journal de Chimie Physique*, 88, 1893-1900.

[1991FEI]
Fein, J.B. (1991) Experimental study of aluminum-, calcium-, and magnesium-acetate complexing at 80oC. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 55, 955-964.

[1991GIO]
Giordano, T.H. (1989) Anglesite (PbSO₄) solubility in acetate solutions: The determination of stability constants for lead acetate complexes to 85oC. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 53, 359-366.

[1991GIO/DRU]
Giordano, T.H., Drummond, S.E. (1991) The potentiometric determination of stability constants for zinc acetate complexes in aqueous solutions to 295oC. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 55, 2401-2415.

[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).

[1991OKA]
Okamoto, H. (1991) The Fe-Se (Iron-Selenium) system. *Journal of Phase Equilibria*, 12(3), 383-389.

[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 subseafloor hydrothermal vents. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 56, 3681-3692.

[1992FEI/HEM]
Fein, J.B., Hemley, J.J., d'Angelo, W.M., Komminou, 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, G. (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 Ca₃Al₂Si₃-XO₁₂-4X(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]
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).

[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 300°C. 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.

[1993SHO/KOR]
Shock, E.L., and Koretsky, C.M. (1993) Metal-organic complexes in geochemical processes: Calculation
of standard partial molal thermodynamic properties of aqueous acetate complexes at high pressures and
temperatures. Geochimica et Cosmochimica Acta, 57, 4899-4922.

[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]
Ziemiak, 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 (50-90°C). 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 25°C 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.

[1994KON/STR]
Kondrat'ev, S.N., and Strizhov, B.V. (1994) Heat capacity and thermodynamic functions of selenium
trioxide within a range of 12-307 K. Zhurnal Fizicheskoi Khimii, 68(7), 1190-1192.

[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 50°C, 200°C and
380°C. Advances in Cement Research, 6(22), 47-56.

[1994SAI/KUC]
Saini-Eidukat, B., Kucha, H., and Keppler, H. (1994) Hibbingite gamma-Fe₂(OH)₃Cl, a new mineral from the Duluth
Complex, Minnesota, with implications for the oxidation of Fe-bearing compounds and the transport of metals.
American Mineralogist, 79, 555-561.

[1994WAR/REA]
Warren, C.J. & Reardon, E.J. (1994) The solubility of ettringite at 25°C. 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.

[1995DR1/REF]
Drissi, S.H., Refait, P., M. A., and R. G.J.-M. (1995) Preparation and thermodynamic properties of Fe(II)-Fe(III) hydroxycarbonate (green rust one); Pourbaix diagram of iron in carbonate-containing aqueous media. *Corrosion Science*, 37, 2025-2041.

[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]
Delkers, 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]
Ziemiak, 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 150oC. *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.

[1997BIS/KIS]
Bisengalieva, M.R., Kiseleva, I.A., Melchakova, L.V., Ogorodova, L.P., and Gurevich, A.M. (1997) The molar heat capacity of hydrous copper chloride: atacamite Cu2Cl(OH)3. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 29, 345-352.

[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]
Gurevich, 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 250oC and 5 molal ionic strength (NaCl). *Journal of Solution Chemistry*, 26, 217-232.

[1997PAR/TIC]
Parker, D.R., Tice, K.R., and Thomason, D.N. (1997) Effects of ion pairing with calcium and magnesium on selenate availability to higher plants. *Environmental Toxicology and Chemistry*, 16, 565-571.

[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 oC 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 $Al_2O_3-H_2O-KOH$. *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 $SiO_2(aq)$ 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]
Estimated using correlation methods described in [1997SHO/SAS]

[1997SHO/SAS_b]
Enthalpy, $delfH0$ corrected to conform to Gibbs-Helmholtz (G-H-S) relation.

[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 oC 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, $Ca_2Al(OH)_6(Cl,OH)_6 \cdot 5H_2O$: Its solid solutions and their role in chloride binding. *Cement and Concrete Research*, 28, 1713-1724.

[1998CAP/HEF]
Capewell, S.G., Hefter, G., May, P.M. (1998) Potentiometric investigation of the weak association of sodium and carbonate ions at 25oC. *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 $[Pb(OH)_2 \cdot (PbCO_3)_2(s)]$ and hydrozincite $[Zn(OH)_2 \cdot (ZnCO_3)_2(s)]$ 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 Pd, Pb, Sn, Sb, Nb and Bi in aqueous solution. JNC TN8400 99-011, p. 340. Japan Nuclear Cycle, Tokai, Ibaraki, Japan.

[1990MON]
Monnin, C. (1999) A thermodynamic model for the solubility of barite and celestite in electrolyte solutions and seawater to 200°C and to 1 kbar. *Chemical Geology*, 153, 187-209.

[19990JK/CHR]
Ojkova, I., Christov, C., and Mihov, D. (1999) Thermodynamic study on aqueous solutions of (NH₄)₂SeO₄ and K₂SeO₄ at 298.15 K. *Monatshefte für Chemie*, 130(9), 1061-1065.

[1999PER/PAL]
Perkins, R.B. & Palmer, C.D. (1999) Solubility of ettringite (Ca₆[Al(OH)₆]₂(SO₄)₃·26H₂O) at 5-75°C. *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 200°C and the standard entropy of Fe³⁺ ion in aqueous solution. *Geochemistry International*, 37, 1097-1107.

[2000COU]
Courault, A.-C. (2000) Simulation expérimentale des C-S-H dans les bétons modernes: Etude de la composition et des propriétés à l'équilibre dans des milieux complexes. *Laboratoire de Recherches sur la Réactivité des Solides*, Ph.D., p. 212. Université de Bourgogne, Dijon, France.

[2000GUN/ARN]
Gunnarsson, I., Arnorsson, S. (2000) Amorphous silica solubility and the thermodynamic properties of H₄SiO₄ in the range of 0 to 350°C 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 500-900°C. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 64(17), 2993-3005.

[2000P01]
Pointeau, I. (2000) Etude mécanistique et modélisation de la rétention de radionucléides par les silicates de calcium hydratés (CSH) des ciments. *Chimie*, Ph.D., p. 198. L'Université 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]
Müller, 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.

[2001SÉB/POT]
Séby, F., Potin-Gautier, M., Giffaut, E., Borge, G., and Donard, O.F.X. (2001) A critical review of thermodynamic data for selenium species at 25°C. *Chemical Geology*, 171, 173-194.

[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 oC. *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/VO1]
Freyer, D., Voigt, W. (2004) The measurement of sulfate mineral solubilities in the Na-K-Ca-Cl-SO4-H2O
system at temperatures of 100, 150 and 200oC. *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].

[2004HOV/HAR a]
Hovis, G.L., Harlov, D., and Gottschalk, M. (2004b) Solution calorimetric determination of the enthalpies
of formation of NH4-bearing minerals buddingtonite and tobelite. *American Mineralogist*, 89, 85-93.

[2004HOV/HAR b]
Hovis, G.L., Harlov, D., and Gottschalk, M. (2004b) ERRATUM. *American Mineralogist*, 89, 1838-1839.

[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 Mg0.74Al0.26(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]
Gamsjager, 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) Modelisation des interactions ioniques a la surface des silicates de calcium hydrates,
Ph.D., p. 204. *L'Universite Laval, Quebec, Canada*.

[2005KLE/AHR]
Klemme, S., Ahrens, M. (2005) Low-temperature heat capacity of magnesioferrite (MgFe2O4). *Physics and Chemistry
of Minerals*, 32, 374-378.

[2005OLI/NOL]
Olin, A., Nörläng, B., Osadchii, E.G., Öhman, L.-O., and Rosén, E. (2005) Chemical thermodynamics of
Selenium. 851 p. *OECD Nuclear Energy Agency, Issy-les-Moulineaux, France*.

[2005SPA/SCH]
Spadini, L., Schindler, P.W., and Sjöberg, S. (2005) On the stability of the AlOSi(OH)32+ complex in
aqueous solution. *Aquatic Geochemistry*, 11(1), 21-31.

[2005SWA/FA1]
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., Bénéthet, 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, C., Gianguzza, A., Piazzese, D., Sammartano, S. (2006) Protonation of carbonate
in aqueous tetraalkylammonium salts at 25oC. *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.

[2008RÉM/REF]
Rémazeilles, C., and Refait, P. (2008) Formation, fast oxidation and thermodynamic data of Fe(II) hydroxychlorides. *Corrosion Science*, 50, 856-864.

[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(PO₄)₆Cl₂ and Ca₁₀(PO₄)₆Cl₂ by DSC. *Thermochimica Acta*, 478, 13-16.

[2008XIO]
Xiong, Y. (2008) Thermodynamic properties of brucite determined by solubility studies and their significance to nuclear waste isolation. *Aquatic Geochemistry*, 14, 223-228.

[2009DAC/GEI]
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.

[2009NIS/DON]
Nishimura, T., Dong, J. (2009) Corrosion behavior of carbon steel in overpack in groundwater containing bicarbonate ions. *Journal of Power and Energy Systems*, 3(1), 23-30.

[2009POW/BRO]
Powell, K.J., Brown, P.L., Bryne, R.H., Gajda, T., Heftler, T., Leuz, A.-K., Sjöberg, 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.

[2010LEE/WIL]
Lee, T.R., and Wilkin, R.T. (2010) Iron hydroxy carbonate formation in zerovalent iron permeable reactive barriers: Characterization and evaluation of phase stability. *Journal of Contaminant Hydrology*, 116, 47-57.

[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.

[2011BJS/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]
DiInesa, 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: dfHO value recalculated to be consistent with G-H-S relations.

[2011DIL/LOT]
DiInesa, 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.

[2011NEM/XIO]
Nemer, M.B., Xiong, Y., Ismail, A.E., and Jang, J.-H. (2011) Solubility of Fe2(OH)3Cl (pure-iron end-member of hibbingite) in NaCl and Na2SO4 brines. *Chemical Geology*, 280, 26-32.

[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,SO4) 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 Varieties 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]

[2012AZO/RÉM]
Azoulay, I., Rémezeilles, C., and Refait, P. (2012) Determination of standard Gibbs free energy of chukanovite and Pourbaix diagrams of iron in carbonated media. *Corrosion Science* 58, 229-236.

[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]
DiInesa, 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 SB1d-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.A12O3.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_A12O3-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, G., 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 hydrotalcite-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]
DInesa, 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
Materiaux 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., Wadsó, 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 (alumino) silicate hydrate chemistry under equilibrium conditions. *Cement and Concrete Research*, 68, 83-93.

[2015OGO/VIG]
Ogorodova, L.P., Viggasina, 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) Coprécipitation d'oxydes mixtes de titane et d'étain en solution aqueuse. Ph.D., p. 184.
L'École Nationale Supérieure des Mines de Paris, Paris, France. [in French].

[2015R00]
Roosz, 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 unitherm

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 5-65oC 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 25oC 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.

[2018LEE/XU]
Lee, S.L., and Xu, H. (2018) The crystal structure and Gibbs free energy of formation of chukanovite
as an oxidation product of carbon steel in human liver. Chemical Geology, 488, 180-188.

[2018SII/NEK]
Sidra, 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 25oC 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 Al11 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., Fürst, 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.

[2020LEM/PAL]
Lemire, R.J., Palmer, D.A., Taylor, P., and Schlenz, H. (2020) Chemical thermodynamics of Iron.
Part 2. OECD Nuclear Energy Agency, Boulogne-Billancourt, France.

[Unpublished]
Generated in the development of this thermodynamic database.

RELEASE_NOTES
#

2020v1.2 (2021-03-11)

a. FA_glass_H24_inert, FA_glass_R2_inert and SiO2(am)_inert have been added as unreacted pozzolanic materials
in High content Fly-ash Silica fume Cement (HFSC).

2020v1.1 (2021-02-24)

a. Minor errors corrected, e.g. dates, misspelled author names, etc.

2020v1.0 (2021-02-16)

a. Element selenium, Se has been added to the JAEA TDB with SeO₃-2 as the basis species. All relevant hydrolysis

reactions and association reactions for the formation of Se bearing aqueous species/complexes, element in the reference state, and Se bearing minerals, solid phases and gases have also been added. Polymeric Se species/complexes (e.g. Se3-2, Se4-2) have not been included due to a lack of temperature/pressure dependent data and a lack of reliable extrapolation methods for polymeric species/complexes.

b. Acetate- (CH3CO2-) has been written into the JAEA TDB with Acetate- as a basis species. Metal and non-metal complexes containing acetate have also been added.

c. Gibbs free energy of formation for the basis species Mg+2 has been re-evaluated to be delfG0 = -108.51 +/- 0.6 kcal/mol. This has been included in the derivation of the thermodynamic properties of ALL Mg bearing species/complexes and minerals.

d. delfG0 for the redox species Fe+3 has been re-evaluated to be delfG0 = -4.114 +/- 0.21 kcal/mol. This has significantly reduced uncertainties of Fe(III) bearing species/complexes and minerals that use this value in their derivation.

e. A mistake in the entropy of Br2(l) has been corrected that affected derivation of the thermodynamic properties of Br2(aq), SnBr+, SnBr2(aq), SnBr3-, CaBr2(s), KBr(s), NaBr(s), and Br2(g) that were calculated from the Gibbs-Duhem relation: delfG0 = delfH0 - T*(SOPrTr - SOPrTr elements).

f. Additional revisions/additions for aqueous species/complexes (not described above) include Cu+2, Br3-, BrO-, BrO4-, CH4(aq), ClO-, ClO2-, ClO3-, ClO4-, BaSO4(aq), CO3-2, S-2, SrSO4(aq), and NH4OH(aq) replaced by NH3(aq).

g. The term 2*nFe(II) [1978HEL/DEL] to provide estimates of SOPrTr for Fe(II) silicate minerals has been changed to R*L(N(3)*nFe as described in [1981WOO].

h. A new fly ash (FA) has been used and characterized in R2 (2020) experiments. The glass component is included as FA_glass_R2. The original entry for FA_glass has been renamed FA_glass_H24 corresponding to the year it was used and characterized in H24 (2012) experiments.

i. Additional revisions/additions for minerals, solid phases and gases (not described above) include Al(NO3)3(H2O)6(s), Alabandite, Aegerine, Anorthite, Atacamite, Berndtite, Bornite, Buddingtonite, Cassiterite, Chukanovite, GRICO3, Hibbingite, Na2O(s), Nahcolite, Sr(OH)2, Salammoniac, SO3(g), Thaumassite, Thermonatrite, and Tobelite.

j. Dissolution of minerals and gases are now written in terms of their component species in the correct oxidation states, e.g. Pyrrhotite: FeS + 1 H+ = + 1 Fe+2 + 1 HS-. This may not be apparent or sometimes possible, however, if the mineral contains catenated bonds or double bonds, e.g. Pyrite: FeS2 + 1 H2O = + 1 Fe+2 + 0.5 O2 + 2 HS-.

#* k. Thermodynamic properties delfG0, delfH0 or SOPrTr calculated from Gibbs-Duhem relation are now marked with *[GHS].

2019v1.2 (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.

2019v1.01 (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/K/mol 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/K/mol 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-, FeHP04(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 hemihydroxide.

2019v1.00 (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), FeH2PO4+, 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_Al12) 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.

2018v1.02 (2019-03-26)

a. Corrected errors caused by unbalanced reactions for Aegerine and Montmor_MX80(WY).

2018v1.01 (2019-03-25)

a. JAEA logo added to the top of the file.

b. PO4-3 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.

2018v1.00 (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-K-F EoS) parameters for anionic aqueous species/complexes have been re-estimated using equations given in [2015SHV].

d. Thermodynamic properties and H-K-F EoS parameters for the electron (default values = 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-K-F EoS parameters for metal ion (ML) complexes of M = K+, Na+, Ca2+, and Mg2+ and L = AlO2-, FeO2-, SiO(OH)3-, SiO3-2, HCO3-, CO3-2 and SO4-2 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-ideal solid solution between hydrotalcite_M4Ac (Mg4Al2(OH)12(CO3)(H2O)3) and hydrotalcite_M6Ac (Mg6Al2(OH)16(CO3)(H2O)5).

h. The DSP type model used to describe the solubility behavior of the non-ideal 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-evaluated 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-S-H gel using distribution coefficients, K_d (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-TDB.

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 (Å).

(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, Nontron_Mg, Phillipsite_K, etc.). FeX₂ and FeX₃ are used in reference to multiple site occupancies by Fe (II, III) (e.g. Nontron_FeX₃(avg) has a composition of Fe_{0.2}Mg_{0.1}Fe_{1.95}(Fe_{0.45}Si_{3.55}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' 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/GLA], [1954PEP/WEL], [1958CAR], [1966FAU], [1968ROB], [1979EDE/SAT], [1992ATK/BEN], [1992BEN/REA] and Grossular [1966HAY], [1966NEW], [1968STR], [1970BOE], [1974SHM], [1974HUC], [1977PER/ESS], [1978CHA], [1979KOL/NOG], [1979KRU/ROB], [1979WES/ESS], [1980HAS/WES], [1988BER], [1996BOS/GHA], [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 [1994QUI/MAJ], [1999GLA/TYR], [2000COU], [2000ZHA], [2007MAT/LOT], [2010BAL/LOT], [2012GEI/DAC], [2014DL/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, 0.9, 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], [2015ROO], [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, SO₃beta, Szomolnokite, Wollastonite.

m. Values for delfG0, delfH0 or SOPrTr that are calculated from the delfG0 = delfH0 - 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 GMB 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 hydrotalcite 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. Hydrotalcite 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) delfG0 (cal/mol) is derived from a new (unpublished) clay polymer model, based on all accessible delfG0 data, (iii) interlayer cations extended to include K⁺, Na⁺, Cs⁺, NH₄⁺, Ca²⁺, Mg²⁺, Fe²⁺ 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[aq] in JAEA-TDB (v1.06).

j. A polyhedral model was used to provide estimates of delfG0 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, V0 (cm3/mol) of the layer silicates
# have been calculated from published unit cell dimensions.
# k. Values of delG0 and delH0 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)
# have been revised to be consistent with the revisions to the thermodynamic properties of 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 [1978COD] 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/K/mol), 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/K/mol [1995OEL/HEL][1997SVE/SHO]. Thermodynamic properties
# are used at one additional significant figure to the known uncertainty, e.g. delG0 = -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. delG0 = -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)) [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]:
# log10(gamma) = a#Im + b#Im^2 + c#Im^3 [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]:
# log10(gamma) = b#Im [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:
# log10(gamma) = b.dot#Im [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:
# log10(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 drH0 = 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_Al

# 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 dfG0, dfH0, SO, CpO(Maier-Kelly a,b,c coefficients), and V0
# 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_Al, and Mononitrate_Al. 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 [1992.JOH/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, Hemicarbonate_Fe, Katoite_Al, Katoite_AlSi041 (Katoite_AlSi(0.41)), Katoite_AlSi084
# (Katoite_AlSi(0.84)), Katoite_FeSi095 (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,
# -lnI 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, HC03-, 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

セメントーベントナイト接触試験を対象とした化学反応－物質輸送解析のパラメータ設定

セメントーベントナイト接触試験を対象とした化学反応ー物質輸送解析のパラメータ設定

本文 4.1.1「先進的セメントー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ー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

緩衝材としては、クニゲル V1 を、ケイ砂を混合せずにそのまま使用することを想定した。その初期鉱物組成は、TRU 廃棄物処分技術検討書ー第 2 次 TRU 廃棄物処分研究開発取りまとめ（電気事業連合会/核燃料サイクル開発機構, 2005 : 以下「第 2 次取りまとめ」とする）における設定を基本としつつ、モンモリロナイト含有量の実測値及び不純物も考慮して表 1-1 のように設定した。

表 1-1 Kunigel V1 の初期鉱物組成ⁱ⁾ (1/2)

	A. 第 2 次取りまとめの重量比 [Wt%]	C. モンモリロナイト量更新値 ⁱⁱ⁾ 及び不純物量 ⁱⁱⁱ⁾ を踏まえた重量比 ^{iv)} [Wt%]	D. 圧縮後の体積当たり重量 (=C/100*1.37) [g/cm ³]	E. mol 質量 ^{v)} [g/mol]	F. mol 体積 ^{v)} [cm ³ /mol]
Montmor	48	60 ⁱⁱ⁾	8.220*10 ⁻¹	367.0171	135.843
Calcite	2.4	1.828	2.505*10 ⁻²	100.0872	36.934
Chalcedony	38	28.95	3.966*10 ⁻¹	60.0843	22.688
Quartz	0.6	0.4571	6.262*10 ⁻³	60.0843	22.688
Albite	2.35	1.790	2.453*10 ⁻²	262.2230	100.250
Anorthite	2.35	1.790	2.453*10 ⁻²	278.2073	100.790
Dolomite	2.4	1.828	2.505*10 ⁻²	184.4014	64.365
Analcime	3.3	2.514	3.444*10 ⁻²	220.1539	97.100
Pyrite ^{ix)}	0.6	0.4571	6.262*10 ⁻³	119.9650	23.940
NaCl	-	0.0011 ⁱⁱⁱ⁾	1.507*10 ⁻⁵	58.4428	27.015
KCl	-	0.0044 ⁱⁱⁱ⁾	6.028*10 ⁻⁵	74.5510	37.524
CaSO ₄	-	0.38 ⁱⁱⁱ⁾	5.206*10 ⁻³	136.1356	45.933
Porosity	-	-	-	-	-
Total	100	100	1.37	-	-

表 1-1 Kunigel V1 の初期鉱物組成 (2/2)

	G. 各鉱物 Vol% (=D/E*F*100) ^{vi} [Vol%]	H. 間隙を水で満たした場合の、水 1kg に対する mol 数 ^{vii} [mol]	I. H の条件での 20℃での平衡計算 後の mol 数 ^{viii} [mol]	J. 平衡後の Vol% (=G*I/H*100) ^{ix} [Vol%]
Montmor	30.42	4.587	4.587	30.424
Calcite	0.9243	0.5126	0.5047	0.9102
Chalcedony	14.98	13.52	13.52	14.977
Quartz	0.2365	0.2135	0.2135	0.2365
Albite	0.9377	0.1916	0.1916	0.9377
Anorthite	0.8886	0.1806	0.1806	0.8886
Dolomite	0.8743	0.2782	0.2782	0.8743
Analcime	1.519	0.3204	0.3204	1.519
Pyrite ^{x)}	0.1250	0.1069	0.1069	0.1250
NaCl	6.966e-4	5.281e-4	0	0
KCl	3.034e-3	1.656e-3	0	0
CaSO ₄	0.1757	0.07832	0	0
Porosity	48.91	-	-	49.11
Total	100.00	-	-	100.00

- i) 有効数字が 4 桁未満の数値もあるが、計算途中であるためそれらの数値についても 4 桁までの値を示す。
- ii) 接触試験で用いた Kunigel V1 のメチレンブルー吸着量実測値 84 mmol/100g をモンモリロナイトのメチレンブルー吸着量 140 mmol/100g (Komine et al., 2020) で除して計算。
- iii) Ochs et al. (1999) の値。
- iv) モンモリロナイト、不純物以外の鉱物は Total が 100%になるよう均等に減少させた。
- v) PHREEQC19.dat (v1.2) の値。
- vi) Porosity については [100 - 鉱物合計] で計算した。
- vii) $D/E/((G \text{ の Porosity}/100) * (\text{水密度}))$ で計算した。水密度は 0.9982 g/cm³ (20℃; Johnson and Norton, 1991) を使用した。
- viii) PHREEQC によって計算した。Calcite、Chalcedony、NaCl、KCl、CaSO₄以外の鉱物は反応しないものとして計算した。
- ix) Porosity については [100 - 鉱物合計] で計算した。また、厳密に言えば不純物と Calcite の溶出による間隙増加後の再平衡計算が必要になるが、間隙の増加はわずかであるため、ここでは実施していない。
- x) Pyrite は CABARET では不活性として扱った。

1.2 セメント

セメントの種類として OPC を設定した。それらの初期鉱物組成および初期間隙水化学組成は、以下のように決定した。

まずは未水和 OPC クリンカーの化学組成から、ノルム計算 (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, 2019) によって未水和鉱物組成を算出した。計算に用いた化学組成は、表 1-2 に示した実測値 (平成 30 年度に本事業において取得) とした。

表 1-2 OPC クリンカーの化学組成

	wt.%
SiO ₂	21.22
Al ₂ O ₃	5.34
Fe ₂ O ₃	3.01
CaO	64.74
MgO	1.53
SO ₃	2.14
Na ₂ O	0.25
K ₂ O	0.51
CO ₂	0.36
Others	0.90
Total	100.00

表 1-2 の値から算出された未水和物鉱物組成を表 1-3 に示す。

表 1-3 OPC クリンカーの鉱物組成

	mol/kg
Anhydrite	2.004*10 ⁻¹
C2S_beta	1.092
C3A	3.352*10 ⁻¹
C3S	2.439
C4AF	1.885*10 ⁻¹
Calcite	8.180*10 ⁻²
K ₂ O(s)	5.414*10 ⁻³
K ₂ SO ₄ (s)	4.873*10 ⁻²
Na ₂ O(s)	2.218*10 ⁻²
Na ₂ SO ₄ (s)	1.815*10 ⁻²
Periclase	3.796*10 ⁻¹

*ここに示した 4 桁の値を PHREEQC による水和計算に使用した。実際の有効数字は 4 桁未満である。

上記のクリンカー鉱物組成を用いて、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 (2019) で説明されているセメント水和反応モデルに従って、PHREEQC による水和計算をおこなった。計算の際、水/固体重量比は 0.55 とした。また、水和中の温度は試験に合わせて 20°C とした。求められた OPC の初期水和物組成を表 1-4 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。

表 1-4 OPC の初期水和物組成

	A.水和後モ ル数[mol]	B.モル体積 ⁱ⁾ [cc/mol]	C.体積 (A×B)[cc]	D.体積当 りモル数 ⁱⁱⁱ⁾ (A/ΣC×10 ⁶) [mol/m ³]	E 体積分率 (C/ΣC×100) [%]
間隙			240.3 ⁱⁱⁱ⁾		30.59
鉱物名					
Portlandite	3.723	33.060	123.1	4739	15.67
CSH165	3.233	77.406	250.3	4116	31.86
Katoite_AlSi08	0.1749	142.236	24.88	222.6	3.167
Katoite_FeSi084	0.1885	148.800	28.05	240.0	3.571
Brucite	0.3796	24.630	9.350	483.2	1.190
Monosulfate_Al	0.2670	330.584	88.27	339.9	11.24
Monocarbonate_Al	0.08179	260.774	21.33	104.1	2.715
計			785.5		100.00

i) PHREEQC19.dat (v1.2) の値。

ii) 間隙体積は残存した水の体積とした。

iii) CABARET による化学反応-物質輸送連成解析に使用した 4 桁の値。実際の有効数字は 4 桁未満。

2. 二次鉱物の設定

二次鉱物は、小田らの報告（2005）に基づいて表 2-1 のように設定した。

表 2-1 二次鉱物の設定

鉱物名
CSH(165-085), Katoite-Al, Stratlingite-Al, Ettringite-Al, Hemicarbonat-Al, Friedel_Salt-Al, Gypsum, Hydrotalcite_M6Ac (ケース 5、8 のみ、Clinoptilolite(Na, K, Ca, alk, dia), Heulandite(dia), Laumontite(Ca, dia), Phillipsite(Na, K, alk, dia)を追加)

3. 初期間隙水設定

緩衝材、セメントの初期鉱物組成、間隙水、接触液の化学組成の計算を PHREEQC で行った。計算に使用したモンモリロナイトのイオン交換選択係数は第 2 次取りまとめに従い、表 3-1 のとおりとした。

表 3-1 モンモリロナイトのイオン交換選択係数

	イオン交換反応選択係数 log K
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表 3-2 に示す。

表 3-2 初期間隙水組成として入力した値

	OPC water W/C = 0.55	Kunigel water d = 1.37 g/cm ³	0.2M NaOH & 0.2M KOH	Pure water
pH	13.590	7.320	13.597	7.081
[mol/kg]				
Al	1.488*10 ⁻⁴	3.000*10 ⁻⁸	1.000*10 ⁻²⁰	1.000*10 ⁻²⁰
C	3.962*10 ⁻⁵	7.950*10 ⁻³	1.000*10 ⁻²⁰	1.000*10 ⁻²⁰
Ca	1.024*10 ⁻³	4.166*10 ⁻³	1.000*10 ⁻²⁰	1.000*10 ⁻²⁰
Cl	2.293*10 ⁻¹⁵	2.184*10 ⁻³	1.000*10 ⁻²⁰	1.000*10 ⁻²⁰
Fe	5.825*10 ⁻⁸	1.000*10 ⁻²⁰	1.000*10 ⁻²⁰	1.000*10 ⁻²⁰
K	2.114*10 ⁻¹	5.009*10 ⁻⁴	0.2025	1.000*10 ⁻²⁰
Mg	1.480*10 ⁻⁸	1.435*10 ⁻⁴	1.000*10 ⁻²⁰	1.000*10 ⁻²⁰
Na	1.887*10 ⁻¹	1.657*10 ⁻¹	0.2025	1.000*10 ⁻²⁰
S	1.236*10 ⁻³	7.832*10 ⁻²	1.000*10 ⁻²⁰	1.000*10 ⁻²⁰
Si	1.269*10 ⁻⁴	2.505*10 ⁻⁴	1.000*10 ⁻²⁰	1.000*10 ⁻²⁰

4. 解析設定

4.1 物質輸送特性

実行拡散係数 D_e [m²/s]は、緩衝材では式 (1)、セメント系材料では式 (2) で計算した。

$$D_e = 2.272 \times 10^{-9} \times \theta^n De = Dw \times \theta^n \quad (1)$$

$$n = 2.22 \times fs^{0.13} + 1$$

$$De = Dw \times \varepsilon^a D_e = 2.272 \times 10^{-9} \times \varepsilon^{3.05} \quad (2)$$

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、 fs 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。これまでは主に HTO 用のパラメータを使用してきたが、HFSC では塩化物イオンについてのみ a の値が取得されているため、今後の比較のために OPC でも塩化物イオン用のパラメータを使用することとした。 D_w の値は 20°Cでは 1.8×10^{-9} m²/s、50°Cでは 3.3×10^{-9} m²/s とし (Mills and Lobo, 1989)、 a の値は 4.8 とした (Walker, 2016)。

4.2 鉱物の溶解速度式

鉱物の溶解速度式については、日本原子力研究開発機構 (2014) のデータセットを用いた。

4.2.1 一般鉱物の溶解速度式

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)。

$$r = A \cdot \left[k_n \cdot \exp \left\{ \frac{-e_n}{T} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right\} + k_b \cdot \exp \left\{ \frac{-e_b}{T} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right\} \cdot a_{H^+}^n \right] \cdot \left[1 - \exp \left\{ m \cdot \left(\frac{\Delta G_r}{RT} \right)^p \right\} \right] \quad (3)$$

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 [$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$]、 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^+} はイオン活量 [-]、 m 、 n 、 p はパラメータ [-]を表す。また、ギブス自由エネルギー ΔG_r は (4) 式で表される。

$$\Delta G_r = RT \cdot \ln\left(\frac{\text{IAP}}{K}\right) \quad (4)$$

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。

$$m = 10^{\{4.75 \cdot \log(T) - 0.27 \cdot \text{pH} - 13.39\}} \quad (5)$$

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

$$r = A \cdot \left[k_n \cdot \exp\left\{\frac{-e_n}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right\} + k_b \cdot \exp\left\{\frac{-e_b}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right\} \cdot a_{\text{H}^+}^n \right] \cdot [1 - 10^{\text{SI}}] \quad (6)$$

表 4-1 に各鉱物の、(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 (式中の 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。

表 4-1 (3) 式を用いる場合の溶解速度式中の定数

	k_n [$\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$]	k_b [$\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$]	e_n [kJ mol^{-1}]	e_b [kJ mol^{-1}]	n	m	p
Albite	$3.98 \cdot 10^{-13}$	$5.25 \cdot 10^{-17}$	56.6	34.8	-0.5	(5) 式	3
Anorthite	$3.98 \cdot 10^{-13}$	$5.25 \cdot 10^{-17}$	56.6	34.8	-0.5	(5) 式	3
K-Feldspar	$3.89 \cdot 10^{-12}$	$6.31 \cdot 10^{-22}$	38	94.1	-0.823	(5) 式	3
Analcime		$3.91 \cdot 10^{-12}$		77.1	0	1	1
Chalcedony		$3.09 \cdot 10^{-15}$		108.4	-0.52	1	1
Brucite		$5.75 \cdot 10^{-9}$		42.0	0	1	1
Hydrotalcite_ M6Ac		$5.75 \cdot 10^{-9}$		42.0	0	1	1

4.2.2 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。

$$r = A \cdot \left[k_b \cdot a_{H^+}^n \cdot \exp\left(\frac{-e_b}{RT}\right) \right] \cdot \left[1 - \exp\left\{ m \cdot \left(\frac{\Delta G_r}{RT}\right)^p \right\} \right] \quad (7)$$

表 4-2 にモンモリロナイトの溶解速度式中の定数を示す。

表 4-2 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	$10^{0.212 \cdot pH - 6.40}$	38.7	(5) 式	3

4.2.3 炭酸を含む鉱物の溶解速度式

炭酸を含む鉱物は CO₂ 分圧 P_{CO₂} を用いて (8) 式で表される。

$$r = A \cdot \left[k_a \cdot \exp\left\{ \frac{-e_a}{T} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right\} \cdot a_{H^+}^l + k_n \cdot \exp\left\{ \frac{-e_n}{T} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right\} + k_b \cdot \exp\left\{ \frac{-e_b}{T} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right\} \cdot P_{CO_2}^n \right] \cdot \left[1 - \exp\left\{ m \cdot \left(\frac{\Delta G_r}{RT}\right)^p \right\} \right] \quad (8)$$

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]、 l はパラメータ [-] を表す。表 4-3 に各鉱物に対応するこれらの定数・パラメータの値を示す。

表 4-3 炭酸を含む鉱物の溶解速度式中の定数

	k_a	k_n	k_b	e_a	e_n	e_b	l	n	m	p
	[mol m ⁻² s ⁻¹]			[kJ mol ⁻¹]						
Calcite	$5.01 \cdot 10^{-1}$	$1.55 \cdot 10^{-6}$	$3.31 \cdot 10^{-4}$	14.4	23.5	35.4	1	1	1	1
Dolomite	$6.46 \cdot 10^{-4}$	$2.95 \cdot 10^{-8}$	$3.09 \cdot 10^{-6}$	36.1	52.2	34.8	0.5	0.5	1	1

4.2.4 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。

$$r = A \cdot \left[k_a \cdot \exp\left\{ \frac{-e_a}{T} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right\} \cdot a_{H^+}^l + (1 - S) \cdot k_b \cdot \exp\left\{ \frac{-e_b}{T} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) \right\} \right] \cdot a_{H^+}^n \cdot \left[1 - \exp\left\{ m \cdot \left(\frac{\Delta G_r}{RT}\right)^p \right\} \right] \quad (9)$$

ここで、 S は Al(OH)₄⁻ の物質量 [Al(OH)₄⁻] [mol/kg] を用いて (10) 式で表される

$$S = \frac{(-3000 \cdot pH + 39700) \cdot (-0.196 \cdot pH + 2.94) \cdot [Al(OH)_4^-]}{1 + (-3000 \cdot pH + 39700) \cdot [Al(OH)_4^-]} \quad (10)$$

石英に関するパラメータは表 4-4 のようにまとめられる。

表 4-4 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

4.2.5 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、(10) 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。

$$r = A \cdot k \cdot [1 - 10^{SI}] \quad (11)$$

原子力機構の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 (表 4-5)。また表 4-6 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。新たに加えた Katoite-FeSi084 については暫定的に Katoite-Al と同じ式・値とした。

表 4-5 C/S 比に依存した C-S-H ゲルの速度定数

	Log k
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

表 4-6 (11) 式を用いる場合の溶解速度式中の定数

	Log k	根拠
Portlandite	-6	C-S-H ゲルより溶解が早い
Ettringite-Al	-10.94	CSH(1.0)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	CSH(1.0)と同じ
C4AH19	-10.94	CSH(1.0)と同じ
Katoite-Al	-10.94	CSH(1.0)と同じ
Katoite-AlSi080	-10.94	CSH(1.0)と同じ
Stratlingite	-10.94	CSH(1.0)と同じ
Friedel_Salt	-10.94	Ettringite と同じ

4.3 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 (12) 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 は初期の比表面積 (表 4-7)、 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 $A=A_0$ とする。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 (Oda et al., 2014)。

$$A = A_0 \left(\frac{M}{M_0} \right)^{-0.59} \quad (13)$$

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。

表 4-7 鉱物の初期比表面積

C-S-H ゲル以外は日本原子力研究開発機構（2018）の値を使用した。

鉱物名	比表面積 [m ² /g]	鉱物名	比表面積 [m ² /g]
Albite	10	Dolomite	10
Analcime	10	Ettringite_Al	9.8
Anorthite	10	Friedel_Salt_Al	9.8
Brucite	10	Gypsum	10
Calcite	10	Hemicarbonate_Al	9.8
Chalcedony	0.23	Heulandite_dia	10
Clinoptilolite (全型)	10	Hydrotalcite_M6Ac	11.94
CSH085	322	Kotoite (全型)	10
CSH090	314	Laumontite (全型)	10
CSH095	307	Monocarbonate_Al	9.8
CSH100	299	Monosulfate_Al	9.8
CSH105	291	Montmorillonite (全型)	2.45
CSH115	276	Phillipsite (全型)	10
CSH125	261	Portlandite	10.44
CSH135	246	Quartz	0.1
CSH145	230	Stratlingite_Al	10
CSH155	215		
CSH165	200		

参考文献

- 日本原子力研究開発機構, 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, 2014
- 日本原子力研究開発機構, 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 処分システム評価確証技術開発報告書, 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 Appendix II HFSC の地球化学モデル開発の現状, 2019.
- Johnson, J.W., and Norton, D., Critical phenomena in hydrothermal systems: State, thermodynamic, electrostatic and transport properties of H₂O in the critical region, *American Journal of Science*, vol.291, pp.541-648, 1991.
- Komine, H., Scale-model test for disposal pit of high-level radioactive waste and theoretical evaluation of self-sealing of bentonite-based buffers, *Canadian Geotechnical Journal*, vol.57, pp.608-615, 2020.
- Mills, R., and Lobo, V. M. M., Self-diffusion in electrolyte solutions, vol.36 of physical sciences data, 364p, 1989.
- Walker, S., Sutou, S., Oda, C., Mihara, M., and Honda, A., 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*, vol.79, pp.1-30, 2016.
- Ochs, M., Lothenbach, B., Shibata, M., and Yui, M., Bentonite porewater chemistry, JNC TN8400 99-075, 142p, 1999.
- 小田治恵, 佐々木良一, Savage, D., Arthur, R.C., 本田明, 緩衝材の鉱物学的長期変遷シナリオ、JNC TN8400 2005-020, 2005.
- Trapote-Barreira, A., Cama, J. and Soler, M., Dissolution kinetics of C-S-H gel: Flow-through experiments. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, vol.70, pp.17-31, 2014.
- 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- JNC TY1400 2005-013, FEPC TRU-TR2-2005-02, 2005.

Appendix V

セメントーベントナイト接触試験を対象とした化学反応－物質輸送解析の結果

セメントーベントナイト接触試験を対象とした化学反応ー物質輸送解析の結果

1. 解析結果

本文 4.1.1「先進的セメントー緩衝材相互作用評価モデルの高度化」に示したそれぞれのケースについて、解析結果を示していく。本文には追加も含めてケース 7 まで記載したが、さらに追加として「最小グリッド幅 20 μ m、拡散係数 \times 1、ゼオライト沈殿あり」のケース 8 の結果も示す。それぞれのケースについて、鉱物組成、固相元素組成、液相組成の時間変遷を示す。

なお、鉱物組成の図の凡例は図 1-1 に示すとおりである。



図 1-1 鉱物組成図における凡例

1.2 初期状態

解析初期における鉱物組成の分布を図 1-2 に示す。初期状態は各ケースで共通である。

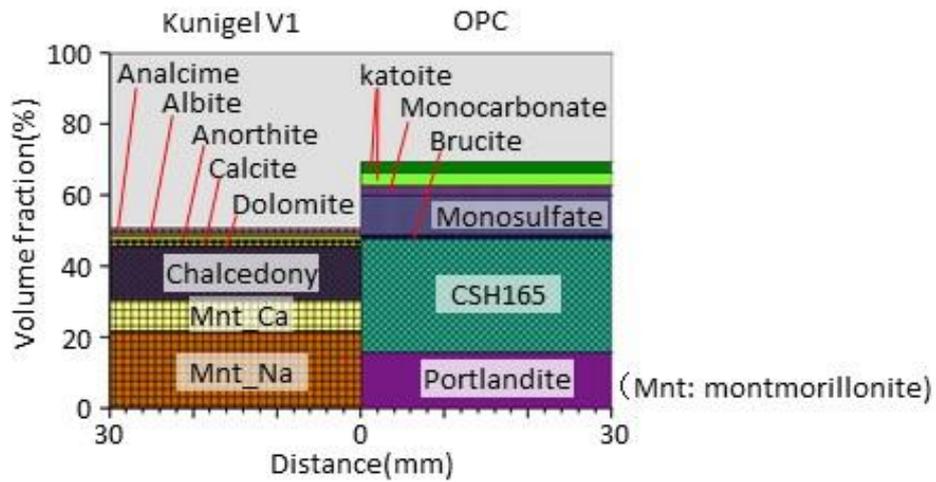


図 1-2 解析初期における鉱物組成分布

1.3 各ケース結果

ケース 1 から 7 における昇温 1.2 年後の鉱物組成と固相元素組成、pH と液相組成の時間変遷を表 1-1 から表 1-8 に示す。

表 1-1 ケース 1 の解析結果

ケース 1 (最小グリッド幅 1mm、拡散係数×1、ゼオライト沈殿なし)	
鉍物組成分布 (昇温 1.2 年後)	界面付近固相 Ca、Si 量、間隙率分布 (昇温 1.2 年後)
<p>Volume fraction(%) vs Distance(mm) showing CSH090, Mnt-K, CSH125, and Ettringite distribution.</p>	<p>固相中Ca, Si量 (× 1000 mol/m³) and 間隙率 (率範囲) vs Distance(mm) for Kunigel V1 and OPC.</p>
クニゲル V1 側リーザーバーセル液相経時変化	主な結果
<p>pH and 各元素濃度 (mol/L) vs 時間 (日) showing changes over time for Na, Si, K, Al, Ca, Mg.</p>	<p>【固相】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・クニゲル側 接触界面から 6mm 程度の領域までカルセドニが溶解。同 1mm までの領域で C-S-H090 が沈殿。モンモリロナイト Ca 型が全体的に K 型化。 ・OPC 側 接触界面から 1mm の領域で C-S-H125 が沈殿。1-2mm の領域でエトリンガイトが沈殿。2mm の領域でポリトランダイトが溶解。リーザー側界面からモノサルフェートの溶解が進行。 <p>【クニゲル V1 側リーザーバーセル液相】 pH、Na 濃度、K 濃度はおおむね実測値と整合。Si 濃度は初期に過大予測。Al、Mg、Ca 濃度は全体的に過大予測。</p>

表 1-2 ケース 2 の解析結果

ケース 2 (最小グリッド幅 100 μ m、拡散係数 \times 1、ゼオライト沈殿なし)	
鉍物組成分布 (昇温 1.2 年後)	界面付近固相 Ca、Si 量、間隙率分布 (昇温 1.2 年後)
<p style="text-align: center;">界面付近4mmを拡大</p>	
クニゲル V1 側リーザーバーセル液相経時変化	主な結果
	<p>【固相】 クニゲル側でのカルセドニの溶解、C-S-H090 の沈殿、Ca 型モンモリロナイトの K 型化、OPC 側での C-S-H125 とエトリンガイトの沈殿、ポリトランダイトの溶解、モノサルフェートの溶解がケース 1 と同様に進行。</p> <p>【クニゲル V1 側リーザーバーセル液相】 ケース 1 と同様の傾向。</p>

表 1-3 ケース 3 の解析結果

ケース 3 (最小グリッド幅 10 μ m、拡散係数 \times 1、ゼオライト沈殿なし)	
鉍物組成分布 (昇温 1.2 年後)	界面付近固相 Ca、Si 量、間隙率分布 (昇温 1.2 年後)
<p style="text-align: center;">界面付近4mmを拡大</p>	
クニゲル V1 側リーザーバーセル液相経時変化	主な結果
	<p>【固相クニゲル V1/OPC 界面】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・クニゲル側 ほとんど変化なし。 ・OPC 側 界面から 10μm の領域で C-S-H135 及び 145 が沈殿し、間隙率が 1%まで低下。それより内部では変化は起こらず。モノサルフェートの溶解はケース 1 と同様に進行。 <p>【クニゲル V1 側リーザーバーセル液相】</p> <p>pH はほとんど変化せず、時間が進むほど過少予測。K 濃度、Si 濃度も過少予測。Ca、Mg は過大予測。Al も過大予測だがケース 1 よりは低い予測値。</p>

表 1-4 ケース 4 の解析結果

ケース 4 (最小グリッド幅 1mm、拡散係数×0.1、ゼオライト沈殿なし)	
鉍物組成分布 (昇温 1.2 年後)	界面付近固相 Ca、Si 量、間隙率分布 (昇温 1.2 年後)
クニゲル V1 側リーザーバーセル液相経時変化	
	<p>【固相】</p> <p>クニゲル側でのカルセドニの溶解、C-S-H090 の沈殿、Ca 型モンモリロナイトの K 型化、OPC 側での C-S-H125 とエトリンガイトの沈殿、ポリトランダイトとモノサルフェートの溶解がケース 1 と同様に起こっているが、その度合いが小さい。</p> <p>【クニゲル V1 側リーザーバーセル液相】</p> <p>pH、Si 濃度、K 濃度がケース 1 より過少予測。Ca、Mg は過大予測。Al も過大予測だがケース 1 よりは低い予測値。</p>

表 1-5 ケース 5 の解析結果

ケース 5 (最小グリッド幅 1mm、拡散係数×1、ゼオライト沈殿あり)	
鉍物組成分布 (昇温 1.2 年後)	界面付近固相 Ca、Si 量、間隙率分布 (昇温 1.2 年後)
クニゲル V1 側リーザーバーセル液相経時変化	主な結果
	<p>【固相】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・クニゲル側 カルセドニの溶解、C-S-H090 の沈殿はケース 1 と同様。Ca 型モンモリロナイトは K 型化ではなく Na 型化。全体的にアナルサイムが消失しフィリップサイト Na と K が沈殿。 ・OPC 側 C-S-H とエトリンガイトの沈殿、ポリトランダイトとモノサルフェートの溶解はケース 1 とおおむね同規模。界面から 1mm の領域にフィリップサイトが沈殿。 <p>【クニゲル V1 側リーザーバーセル液相】 pH、Si 濃度はケース 1 と類似。K 濃度はケース 1 より過少予測。Ca、Mg は過大予測。Al の予測値が大幅に低下。</p>

表 1-6 ケース 6 の解析結果

<p>ケース 6 (最小グリッド幅 20μm、拡散係数\times1、ゼオライト沈殿なし)</p>	
<p>鉍物組成分布 (昇温 1.2 年後)</p>	<p>界面付近固相 Ca、Si 量、間隙率分布 (昇温 1.2 年後)</p>
<p>Volume fraction(%)</p> <p>Distance(mm)</p> <p>CSH135&145 & 165</p> <p>界面付近4mmを拡大</p> <p>Volume fraction(%)</p> <p>Distance(mm)</p> <p>CSH135&145 & 165</p>	<p>固相中Ca, Si量 (x 1000 mol/m³)</p> <p>Distance(mm)</p> <p>Ca量</p> <p>間隙率</p> <p>Si量</p> <p>間隙率(每黄錐)率範囲</p>
<p>クニゲル V1 側リーザーバーセル液相経時変化</p>	<p>主な結果</p>
<p>pH</p> <p>昇温</p> <p>各元素濃度(mol/L)</p> <p>時間(日)</p> <p>Na</p> <p>Si</p> <p>K</p> <p>Ca</p> <p>Mg</p> <p>Al</p>	<p>【固相】</p> <p>クニゲル V1 側で C-S-H090 の沈殿がみられるのはケース 1 と共通。カルセドニの溶解と Ca 型モンモリロナイトの K 型化の度合いは小さい。OPC 側では 50μm 付近まで C-S-H が沈殿。50μm から 200μm の領域でポルトランダイト溶解に伴い、間隙増加。エトリンガイトはほとんど沈殿しない。</p> <p>【クニゲル V1 側リーザーバーセル液相】</p> <p>ケース 3 と類似。</p>

表 1-7 ケース 7 の解析結果

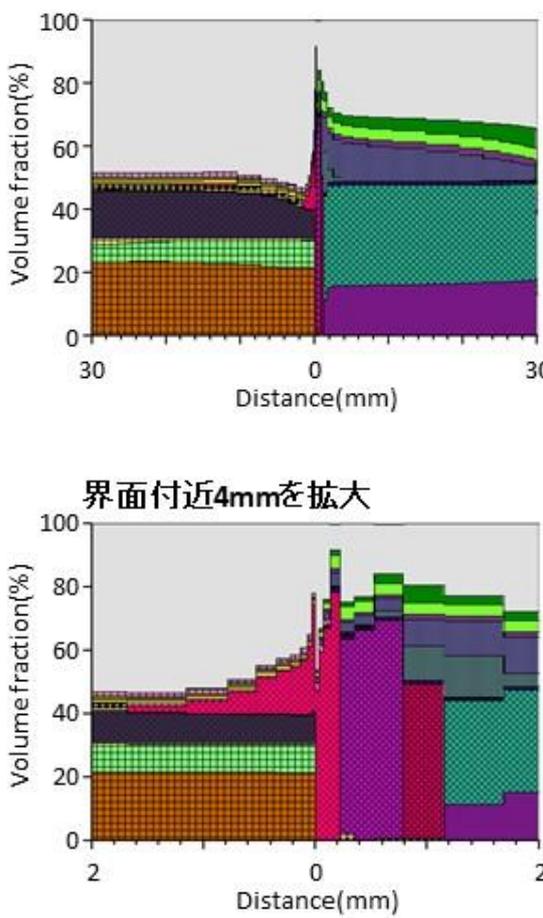
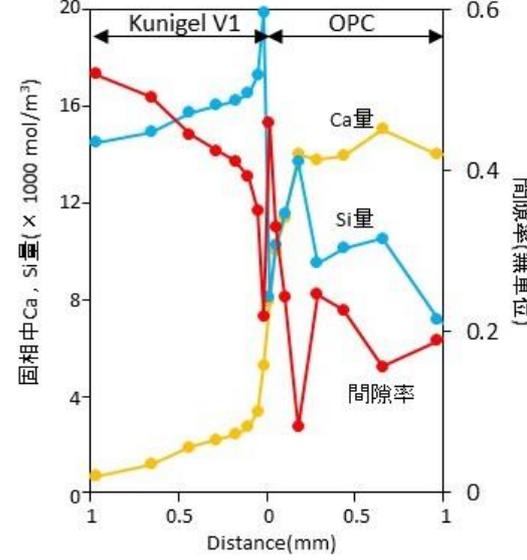
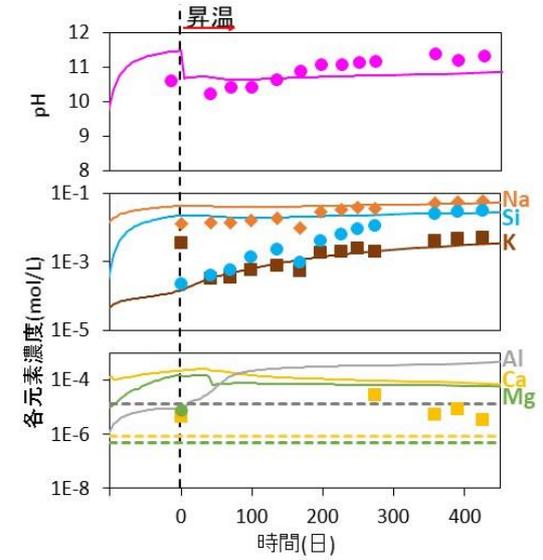
<p>ケース 7 (最小グリッド幅 30μm、拡散係数\times1、ゼオライト沈殿なし)</p>	
<p>鉍物組成分布 (昇温 1.2 年後)</p>	<p>界面付近固相 Ca、Si 量、間隙率分布 (昇温 1.2 年後)</p>
	
<p>クニゲル V1 側レーザーバーセル液相経時変化</p>	<p>主な結果</p>
	<p>【固相】 C-S-H の C/S 比及び OPC 側界面の間隙率が若干異なる以外はケース 1 の結果と類似。</p> <p>【クニゲル V1 側レーザーバーセル液相】 ケース 1 の結果と類似</p>

表 1-8 ケース 8 の解析結果

ケース 8 (最小グリッド幅 20 μm 、拡散係数 $\times 1$ 、ゼオライト沈殿あり)	
鉍物組成分布 (昇温 1.2 年後)	界面付近固相 Ca、Si 量、間隙率分布 (昇温 1.2 年後)
<p>Volume fraction(%)</p> <p>Laumontite_dia</p> <p>Distance(mm)</p> <p>Volume fraction(%)</p> <p>Phillipsite_K</p> <p>CSH135&165</p> <p>Distance(mm)</p>	<p>固相中Ca, Si量 ($\times 1000 \text{ mol/m}^3$)</p> <p>間隙率(%)</p> <p>Ca量</p> <p>Si量</p> <p>Distance(mm)</p>
クニゲル V1 側リーザーバーセル液相経時変化	主な結果
<p>pH</p> <p>昇温</p> <p>各元素濃度(mol/L)</p> <p>時間(日)</p> <p>Na</p> <p>Si</p> <p>K</p> <p>Ca</p> <p>Mg</p> <p>Al</p>	<p>【固相】</p> <p>ゼオライト沈殿なしのケース 6 と比較すると、アナルサイムが溶解してローモンタイトとフィリップサイト K が沈殿した以外は類似。</p> <p>【クニゲル V1 側リーザーバーセル液相】</p> <p>ケース 6 と比較すると Al については濃度が下がって再現性が良くなったが、K については再現性が低下。</p>

Appendix VI

ナチュラルアナログに係る補足資料

ナチュラルアナログに係る補足資料

pH11 を超える高アルカリ湧水がスメクタイトを含む粘土層（碎屑性堆積物）に浸出しているフィリピン国パラワン島 Narra 地区においてナチュラルアナログ調査を実施している。本付録では、これまでに取得した調査サイトの地質環境に係るデータと今年度実施したバルクの鉱物・化学分析の手法と分析結果の詳細と報告書本編で掲載できなかった微細構造の観察結果を示す。

1. パラワン島 Narra 地区の調査サイト及びその周辺の地質環境

1.1 地質概要

Narra 地区は、パラワン島州都・プエルトプリンセサから南東約 35km に位置する Narra 州・Caguisan 地域・Panacan 地区にある。調査サイトは、パラワン島東部にあるスルー海（フィリピン諸島とボルネオ島北部の間の内海）の海岸線から約 6km 西方に位置し、その標高は海拔約 60m で、東へ緩傾斜する平坦地（河川扇状地様地形）である。この調査サイト規模は東西約 80m、南北約 150m の範囲である。

Narra サイトに分布する原岩は典型的なマントル起源のオフィオライト火成岩類で、主にハルツバージャイトと、少量のレーブルライトで代表されるいわゆる超苦鉄質複合岩体（Beaufort Ultramafic Complex）で、その後貫入したスタバーリイ斑れい岩（Staverly Gabbro）の岩脈・岩床で構成されている（Forbes et al., 2011）。斑れい岩の岩脈は小高い丘を形成するような地形的な高まりで特徴づけられる。また、Babatou 滝のクリーク上流部に、ハルツバージャイトに貫入した斑れい岩の岩脈が観察できる。

このサイトの地質構造学的発展は、①パラワンオフィオライト（ハルツバージャイト質超塩基性岩体）の定置・隆起（図 1-1）、②パラワンオフィオライトの風化（図 1-2）、③パラワンオフィオライトの浸食－破碎－運搬－堆積による碎屑性堆積物の形成（図 1-3）、④碎屑性堆積物中に浸透する高アルカリ地下水との相互作用（図 1-4）と解釈することができる。

また、図 1-1～図 1-4 にはこのような地質環境においてスメクタイトの形成にかかわった源岩の鉱物組成と化学成分を合わせて示す。Narra サイトで同定・観察されたスメクタイトは、パラワンオフィオライト（超苦鉄質複合岩体）が定置後(33~23 Ma (Aurelio・Pena, 2010 ; Aurelio et al., 2013))、地表に露出し、風化作用（浸食・破碎・削離・運搬・沈積・堆積/再堆積プロセス）により供給された碎屑性堆積物（堆積性の超苦鉄質岩礫あるいは、超苦鉄質岩起源鉱物粒子）の堆積過程で形成された風化起源のものと、その後、この風化作用で形成されたスメクタイトが、母層であるこの碎屑性堆積物の固結過程（岩石化）で、蛇紋岩化作用により生成・進化したアルカリ地下水との接触によりアルカリ変質反応の地球化学的場（系）に晒されたものとに区別できる。

その堆積環境からは、その形成過程が、いわゆる「風化－侵食・削離－運搬－堆積－岩石化（続成作用）プロセス」を示す現地性の碎屑性堆積物で、この堆積物に層間内礫として挟在する礫の大きさや扁平された亜礫の形状から判断して、その運搬距離は遠いものではないといえる。また、堆積物には斑れい岩起源の礫や降下火山灰層を確認しており、貫入した斑れい岩質の碎屑物や近隣の火山島からの火山灰が堆積したイベントが過去に生じていたと考えられる。更に、碎屑性堆積物に現生化石であるカワニナ（沿岸域で棲息し、淡水・海水を棲み分ける）が観察・同定されていることから、一時期、浅海性（沿岸域）環境下での堆積/再堆積があったことが考えられる。

Major Constituent Minerals				
	Main Minerals	Mineral Composition	Modal Volume	Main Components
Harzburgite	Mafic Minerals	Opx***	◎	Mg, (Fe), Si, (Al)
		Ol***	◎	Mg, (Fe), Si
		(Cpx)**	△	Mg-Ca, (Fe), Si, (Al)
		(Amph)*	△	Mg, Ca, (Fe), Si, Al, Na, K
Opaque Minerals	Chr	△	Cr, Mg, Fe	
	Cr	△	Cr, Mg, Fe, Al	
	Mt	△	(Mg), Fe	
Gabbro	Mafic Minerals	Cpx*	○	Mg-Ca, (Fe), Si, (Al)
		Opx*	○	Mg, (Fe), Si, (Al)
		(Ol)**	△	Mg, (Fe), Si
		(Amph)*	△	Mg, Ca, (Fe), Si, Al, Na, K
	Feldspars	Plag	◎	Ca, Si, Al, Na, K
		K-Feld	○	
Silica Minerals	Qz	◎	Si	
Opaque Minerals	Mt	△	Fe	

Initial Alteration of Palawan Ophiolite		
① Serpentinization* (Low Temp. Type SP) Chrysotile Lizardite	Mg, Si Mg, Si	
② Chloritization* (Low Temp. Type Chl) Mg-Chlorite	Mg, (Fe), Si, Al	

*Forbes et al.(2011); Aurelio and Pena (2010)

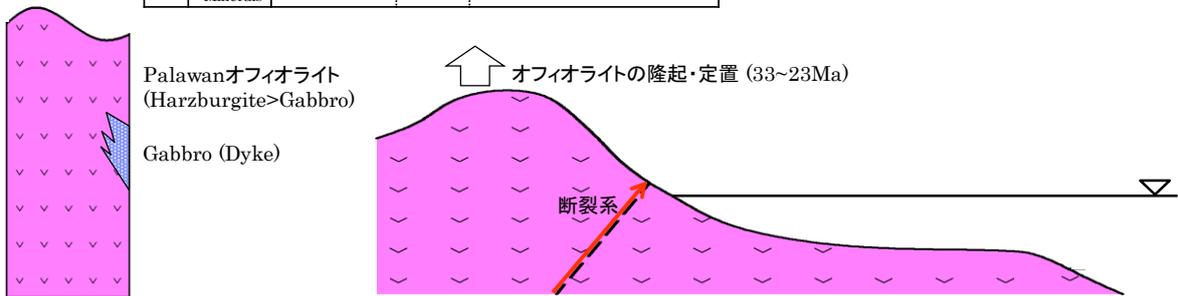


図 1-1 パラワンオフィオライトの定置

Weathering Processes		
Starting Materials		Formation of Smectite
Serpentinized Harzburgite Clasts (Rock Fragments)	Mg, (Fe), Si	(Mg-rich / Al-poor Smectite) Mg-Saponite [Trioctahedral Type] [ExMg ₃ (Al _{0.33} Si _{3.67})O ₁₀ (OH) ₂ ·nH ₂ O]
Aggregates of Altered Mafic Minerals	Mg, (Ca), (Fe), Si, (Al)	(Fe-rich / Al-poor Smectite) Nontronite [Diocahedral Type] [ExFe ³⁺ ₂ (Al _{0.33} Si _{3.67})O ₁₀ (OH) ₂ ·nH ₂ O]
Altered Gabbro Clasts	Mg, Ca, (Fe), Si, Al, Na, K	(Al-rich / Mg-poor Smectite) Beidellite [Diocahedral Type] [ExAl ₂ (Al _{0.33} Si _{3.67})O ₁₀ (OH) ₂ ·nH ₂ O]

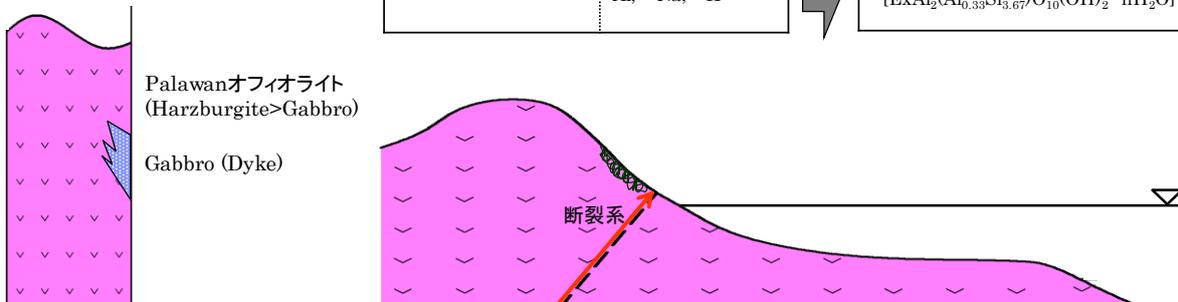


図 1-2 パラワンオフィオライトの風化

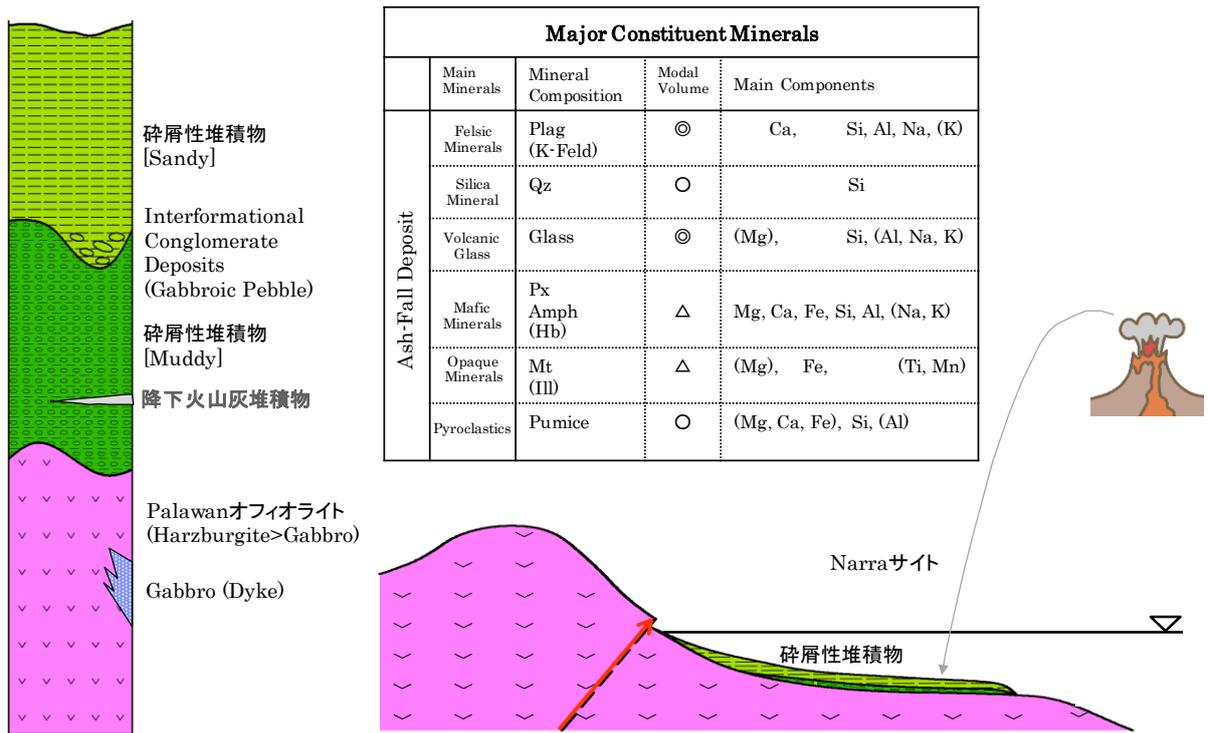


図 1-3 パラワンオフィオライトの浸食-破碎-運搬-堆積による碎屑性堆積物の形成

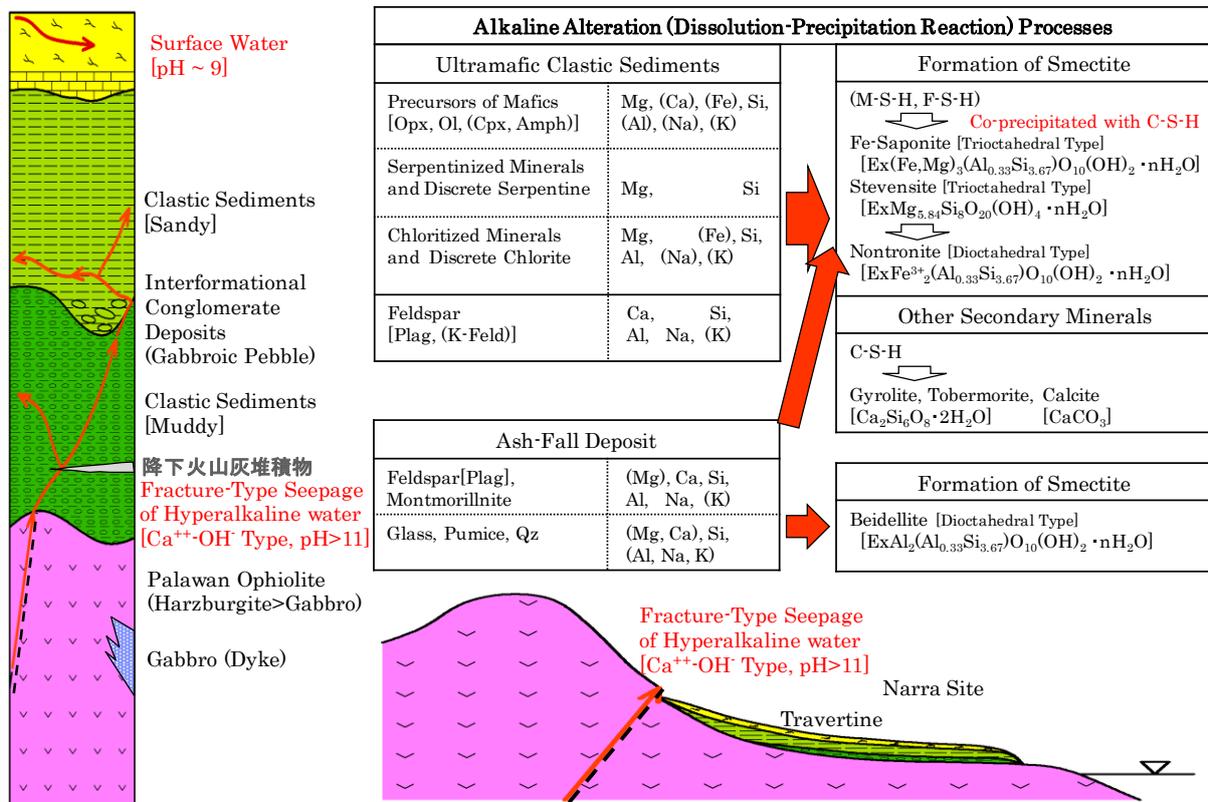


図 1-4 碎屑性堆積物中に浸透する高アルカリ地下水との相互作用

1.2 地下水の地球化学特性

Narra 地区におけるアルカリ湧水の流動系は、パラワンオフィオライト基盤岩の断裂系より湧

水する裂隙水が、当サイトのアルカリ源泉地点(Narra3-1)を基点として、東方に開いた河川系扇状地様の緩慢な傾斜に沿って表層部を流下（ここでは表層水と呼称する）している。

表層地質は、前述しているように、表層部はトラバーチン（石灰華）起源のルーズな炭酸塩沈殿物である。局所的ではあるが深部へ向かって固結化（岩石化）が進み、炭酸塩堆積層または、塊状の炭酸塩岩が観察される。

トレンチ調査でのトレンチ 1~7 及び試錐調査での 4 孔において、アルカリ湧水位置（湧水源）は、碎屑性堆積物層まで届いていないトレンチ 1 を除き、炭酸塩堆積物（一部、炭酸塩岩）と下位の砂質で粗粒な碎屑性堆積物の境界及び、砂質な碎屑性堆積物と泥質な碎屑性堆積物の境界付近からである。これらのアルカリ湧水をここでは、浅層アルカリ地下水(pH > 11)と呼称する。

また、表層水を試錐掘削時に使用したにも拘わらず、すべての試錐孔内水は、アルカリ地下水(pH > 11)である。これらの事実から、浅層アルカリ地下水は、独立した水理場での流動系を保持しているものと考えられる。

一方、細いクリークを流下している表層水は弱アルカリ性（pH:上流は 9.2、中流は 9.6、下流は 9.6）を示す。この pH の差異は、浅層地下水のアルカリ湧水とは異なる水理場と流動系を持ち、降雨水との混和による希釈と、溶存している炭酸イオンによる緩衝により低減されたものと考えられる。

このアルカリ地下水の水理場やその流動系から、上位の砂質で粗粒な碎屑性堆積物、下部層・下位の泥質な碎屑性堆積物ともアルカリ地下水との確実な接触（貯留）する地球化学的な場（環境）であることが示唆される。

平成 26 年度～平成 29 年度のフィールド調査（原子力環境整備促進・資金管理センター, 2015 ; 2018）で取得したパラワン島の Narra 地区及びその他の湧水・地下水の水質データの内、代表的な湧水（地下水）の地球化学的特性を表 1-1 及び図 1-5 に示す。

図 1-5 のヘキサダイアグラムから、トレンチ内からの湧水組成は、一部アルカリ金属イオンと炭酸・炭酸水素イオン濃度に若干の差はあるが、全体としての水質パターンは類似し、Narra サイトのアルカリ源泉のものと酷似している。アルカリ成分や塩素イオン濃度は、おそらく海水の影響を受けた証拠として考えられる。更に、殆ど検出限界濃度の Mg イオンは、世界的にオフィオライト起源の蛇紋岩化作用に伴うアルカリ湧水（地下水）組成に確認される普遍的な特性である。Zambales オフィオライトのアルカリ地下水(Poonbato)との比較では、Ca イオンより Na イオンが高い点は異なるが、Narra3-1 は海水影響があることも考慮すると、オフィオライト基盤岩中で生成されたアルカリ地下水の組成は比較的近いものと推測される。

このように高 pH に加え、温度が高く、酸化還元電位が低いことは TRU 廃棄物の地層処分における HFSC 浸出水との類似性を示しており、このような高アルカリ地下水との長期の相互作用をもたらす環境は、そこでの反応プロセスのアナログとして、高アルカリ環境下でのスメクタイト形成・進展についての考察が有効であることが示唆される。

表 1-1 ナチュラルアナログ調査地点（パラワン島及びルソン島）の水質分析結果

Site	Palawan Riotuba-Waterfall	Palawan Brooke's Point - 7 Falls	Palawan Narra -1 Hot Spring	Palawan Narra -3.2 Trench5	Palawan Narra -3.2 Trench6	Palawan Narra -3.2 Trench7	Palawan Narra -3.1 Hot Spring	Luzon Poonbato	Luzon Manleluag Hot Spring - M1	Luzon Bigbiga - Well-1	Low alkali cement leachates (PNC 1997)*
採取年 Sample No.	2015 Riotuba Mine O	2015 7 Falls 1 O	2015 Narra1 G	2017 Narra3-2 Trench5 O	2017 Narra3-2 Trench5 O	2017 Narra3-2 Trench5 O	2017 Narra3-1 O	2013 P-2 G	2013 M1 G	2014 Well1 G	1997
pH	10.01	9.31	10.50	11.27	10.96	11.16	11.28	11.41	10.80	9.52	11.09
ORP(Eh) [mV]	119	-387	-435	-100	-107	-141	-221	-111	-420	8	-
Temp [°C]	29.3	37.9	47.2	29.0	27.2	27.7	32.3	28.0	32.9	29.2	60
CH ₄ [ppm]	0	0	>700	-	-	-	-	> 5000	2090	0 (0-560)	-
H ₂ [ppm]	0	0	0	-	-	-	-	50-1320	0 (0-62)	0 (0-130)	-
Na ⁺ [ppm]	2.00	164	96.4	45.4	50.1	49.1	42.9	24.3	26.3	100.6	43
K ⁺ [ppm]	0.44	3.38	1.46	2.16	2.18	2.02	2.26	1.45	0.375	1.05	13
Ca ²⁺ [ppm]	5.00	3.80	3.78	25.5	24.6	26.8	41.3	92.5	29.9	1.63	16.8
Mg ²⁺ [ppm]	16.4	1.31	0.17	0.01	0.01	0	0	0.24	0.03	0.02	-
Si ²⁺ [ppm]	< 0.5	31	86.4	3.46	5.77	4.27	0.40	11	17	72.3	-
Al ³⁺ [ppm]	< 0.01	< 0.01	0.19	0.14	0.19	0.18	0.30	1.41	1.05	0.97	0.3
Fe(2 ⁺ +3 ⁺) [ppm]	0.08	0.02	0.06	0	0.02	0.02	0	0.18	< 0.001	0.0058	-
Cl ⁻ [ppm]	28.6	162	56.5	27.8	28.5	28.6	27.2	12.9	17.8	4.50	-
SO ₄ ²⁻ [ppm]	0.03	15.7	6.34	0.08	1.92	0.63	0.02	0.05	0.364	48.0	-
HCO ₃ ^{-*} [ppm]	21.2	121.0	-	3.0	9.2	8.9	1.6	1.6	30.0	135.6	-

* wt % - Portlandite Cement: Silica Fume: Fly Ash=40: 20: 40
 **HCO₃⁻ - アルカリ度滴定結果から算出したHCO₃⁻ + CO₃²⁻の値

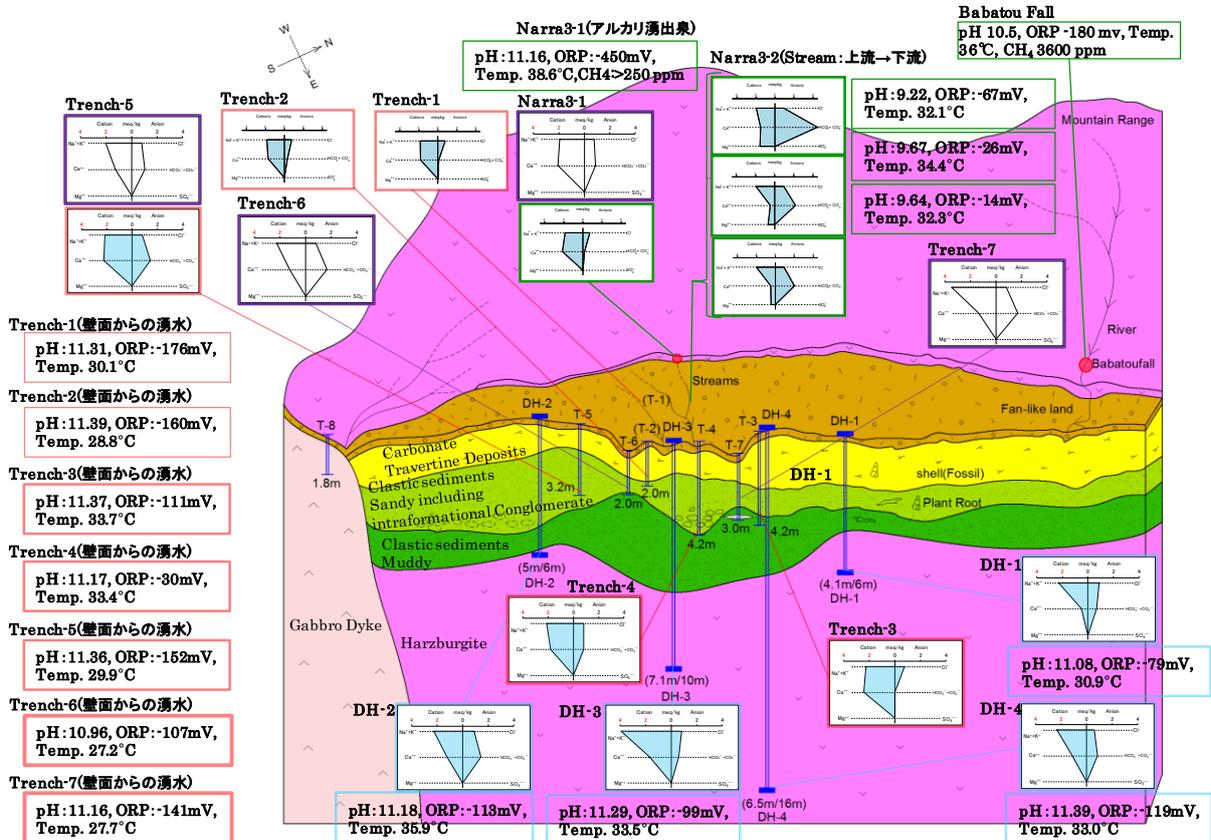


図 1-5 Narra 地区の調査サイトの模式層序学的断面図と地下水（湧水）の水質

2. 分析試料

本年度は、アルカリ変質プロセスに関する上記の特性に関する分析データ取得を目的として、トレンチ 7 の底部から 2 試料、それに比べて反応時間が短い浅部の試料を 1 試料 (PWT07-17-Rh-009)、底部の 2 試料に挟まれた降下火山灰堆積物層から 1 試料を選定して、鉱物分析 (X 線回折 (以下、XRD) 分析)、化学分析 (蛍光 X 線 (以下、XRF) 分析)、SEM および EPMA による観察・化学組成分析を行った。さらに、FIB-SEM によって加工した薄膜試料を TEM および STEM で観察した。表 2-1 に今年度の分析に供した試料一覧を示す。

表 2-1 分析試料一覧

試料名	分析項目	
	XRD	XRF
PWT07-17-Rh-009	○	○
PWT07-17-Rh-C03	○	○
PWT07-17-Rh-C04	○	○
PWT07-17-Rh-C05	○	○

3. XRD 分析

3.1 分析条件

分析試料の調整を以下に示す順で行った。各湿潤試料を分析に必要な量をシャーレ等に分取し、数日間風乾を行った。乾燥後メノウ乳鉢にて、力を加えずに試料をほぐし、マトリックス以外の礫、砂、植物根等を除去した後、粉碎した。粉碎後、篩にて、105 μm 以下を分画し分析試料とした。分取前、乾燥前、乾燥・粗破碎、105 μm 篩で篩分けたときの残分と通過分の状態を図 3-1 に示す。さらに自動乳鉢にて 10 分間粉碎後、バルク (不定方位) 分析に供した。表 3-1 に分析条件を示す。

底角部のピークがスメクタイトによるものかどうかを判定する目的で、定方位試料 (2 μm 以下を分級し、粘土分画を使用した試料) を作製し、エチレングリコール処理を行った。表 3-2 に定方位試料及びエチレングリコール処理試料の XRD 分析条件を示す。

試料名	分析前試料	乾燥前 (分取)	乾燥後	105 μ m 篩上	105 μ m 篩下
PWT07 -17- Rh- 009					
PWT07 -17- Rh- C03					
PWT07 -17- Rh- C04					
PWT07 -17- Rh- C05					

図 3-1 分析試料一覽

表 3-1 分析条件（不定方位）

項目	詳細	
装置名	リガク、SmartLab	
測定条件	ソーラスリット	2.5° (0.04rad) (入射側、受光側共通)
	入射スリット	1/6°
	受光スリット 1	20mm
	受光スリット 2	Open
	ターゲット	Cu
	管電圧, 管電圧	40kV, 50mA
	走査速度	1°/min
	走査ピッチ	0.01°
	走査範囲	4~70°
	エネルギーモード	蛍光 X 線低減モード
	試料充填方法	不定方位 (粉末試料の表面をガラス板で平滑にした)

表 3-2 XRD 分析条件（定方位）

項目	詳細	
装置名	リガク、SmartLab	
測定条件	ソーラスリット	2.5° (0.04rad) (入射側、受光側共通)
	入射スリット	1/6°
	受光スリット 1	20mm
	受光スリット 2	Open
	ターゲット	Cu
	管電圧, 管電圧	40kV, 100mA
	走査速度	0.2°/min
	走査ピッチ	0.01°
	走査範囲	3°~40°
	エネルギーモード	—
	試料	定方位

3.2 分析結果

X 線回折分析による鉱物同定結果を表 3-3 および図 3-2~図 3-5 に示す。全ての試料で、粘土鉱物としてのスメクタイトが同定された。また、スメクタイトに比べ微量と考えられるが緑泥石も同定された。

PWT07-17-Rh-C03 および C04 で石英が検出され、PWT07-17-Rh-C03,C04 および C05 で長石類として曹長石が同定された。その他の鉱物としては、沸石、角閃石、輝石（斜方輝石）、蛇紋石が同定され、PWT07-17-Rh-009 では炭酸塩（カルサイト）が同定された。

また、スメクタイトの有無を確認するために行った定方位試料の EG 処理結果を表 3-4 および図 3-6～図 3-7 に示す。ともに 0.16～0.18nm と低角側へのピークシフトが見られたことから、スメクタイトの存在が明確となった。

2 八面体シートの場合、060 面の d 値は 1.49～1.52Å であり、CuK α 線の場合、その回折によるピーク位置 (2 θ) は 61°～62° 程度である。さらにモンモリロナイト・バイデライトは 060 面の d 値が 1.49～1.50Å であり、ノントロナイトは 060 面の d 値が 1.51～1.52Å で区別される。3 八面体シートの場合は 060 面の d 値は 1.52～1.54Å であり、CuK α 線の場合、その回折によるピーク位置 (2 θ) は 60° 程度である。

不定方位 XRD パターン（図 3-2～図 3-5）から、PWT07-17-Rh-C03 は 060 面のピークが不明瞭だが、それ以外の超苦鉄質岩を原岩とする Fe, Mg に富む碎屑性堆積物では、その 060 面のピークはいずれも 61° 付近にみられ、2 八面体であるノントロナイト組成のスメクタイトであることが示唆される。ただし、060 面相当のピークは、スメクタイト以外のピークも多数あり、明瞭にスメクタイトピークとは判断できないので、さらに詳細にスメクタイトのタイプを他の分析方法でも調べる必要がある。

表 3-3 不定方位 XRD 分析結果一覧

試料名	粘土鉱物		沸石	角閃石	輝石	蛇紋石	炭酸塩	石英	長石
	スメクタイト	緑泥石	濁沸石	—	斜方輝石	リザードイト	カルサイト	石英	曹長石
	Smectite	Chlorite	Laumontite	Amphibole	Orthopyroxene	Lizardite	Calcite	Quartz	Albite
PWT07-17-Rh-009	○	△	△	○	△	○	△	—	—
PWT07-17-Rh-C03	○	△	—	○	—	△	—	○	○
PWT07-17-Rh-C04	○	△	△	○	○	○	—	△	○
PWT07-17-Rh-C05	○	△	△	○	○	○	—	—	△

表 3-4 定方位 XRD 分析におけるエチレングリコール (EG) 処理前後の
スメクタイト d(001)ピーク移動量

試料名	d(001) 面ピーク値 (Å)		
	処理前	処理後	ピーク移動量
PWT07-17-Rh-009	15.28	17.05	1.77
PWT07-17-Rh-C03	15.36	17.00	1.65
PWT07-17-Rh-C04	15.15	16.88	1.73
PWT07-17-Rh-C05	15.23	16.90	1.68

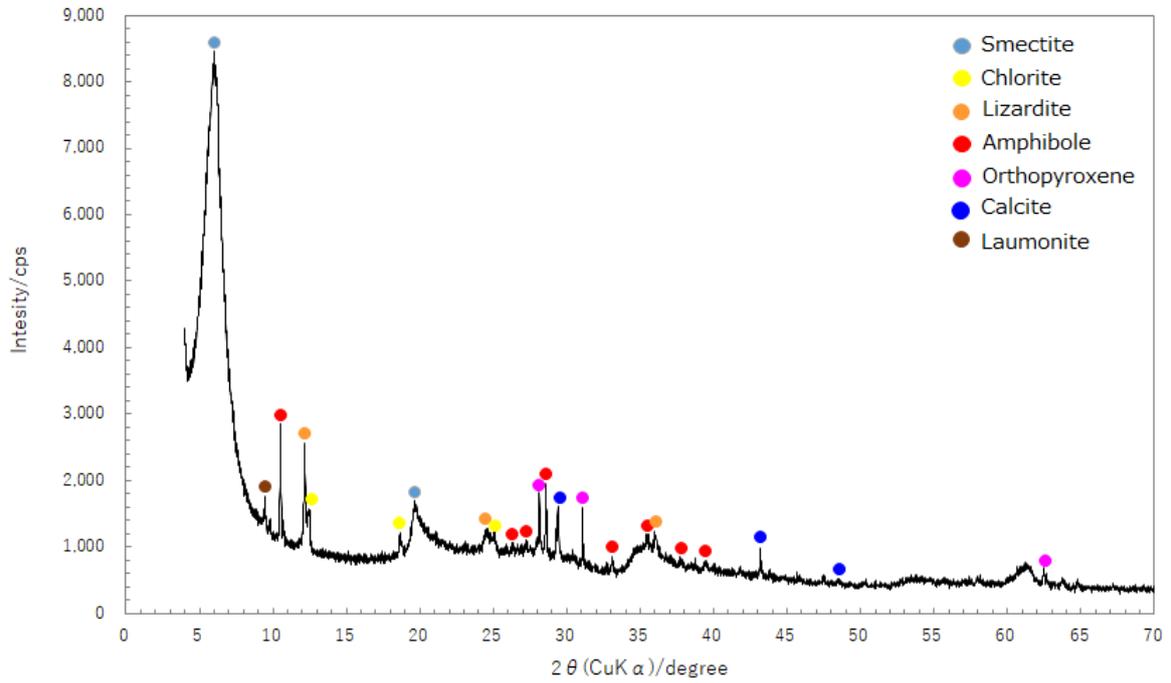


図 3-2 PWT07-17-Rh-009 の不定方位 XRD 分析結果

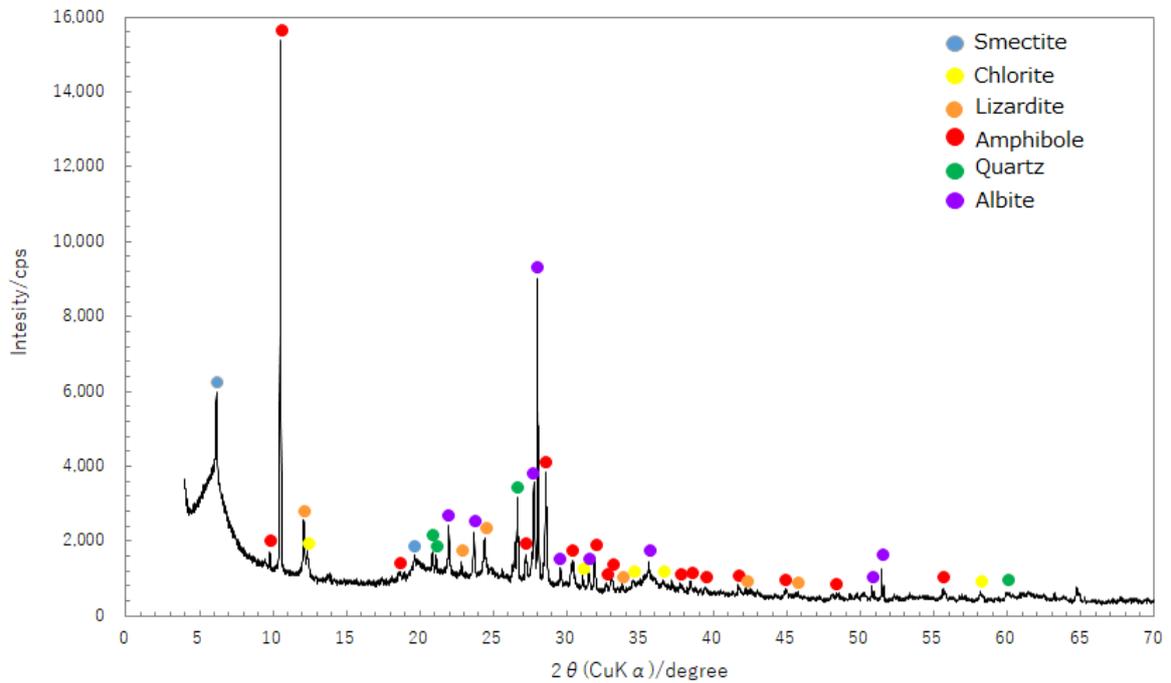


図 3-3 PWT07-17-Rh-C03 の不定方位 XRD 分析結果

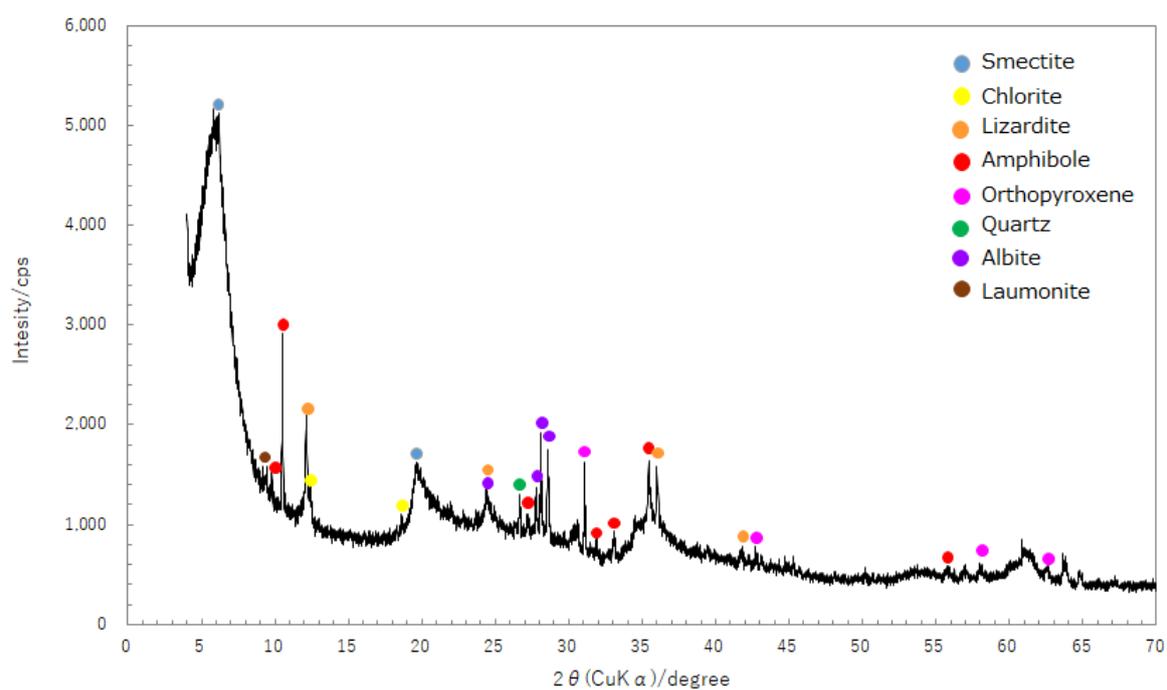


図 3-4 PWT07-17-Rh-C04 の不定方位 XRD 分析結果

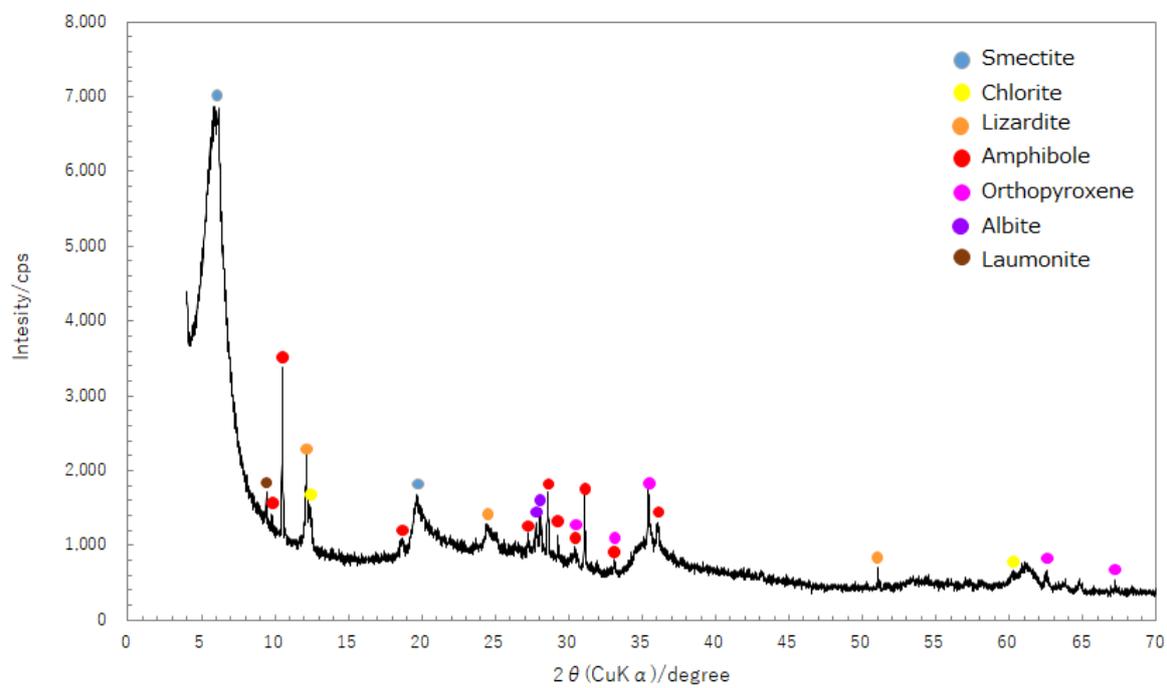


図 3-5 PWT07-17-Rh-C05 の不定方位 XRD 分析結果

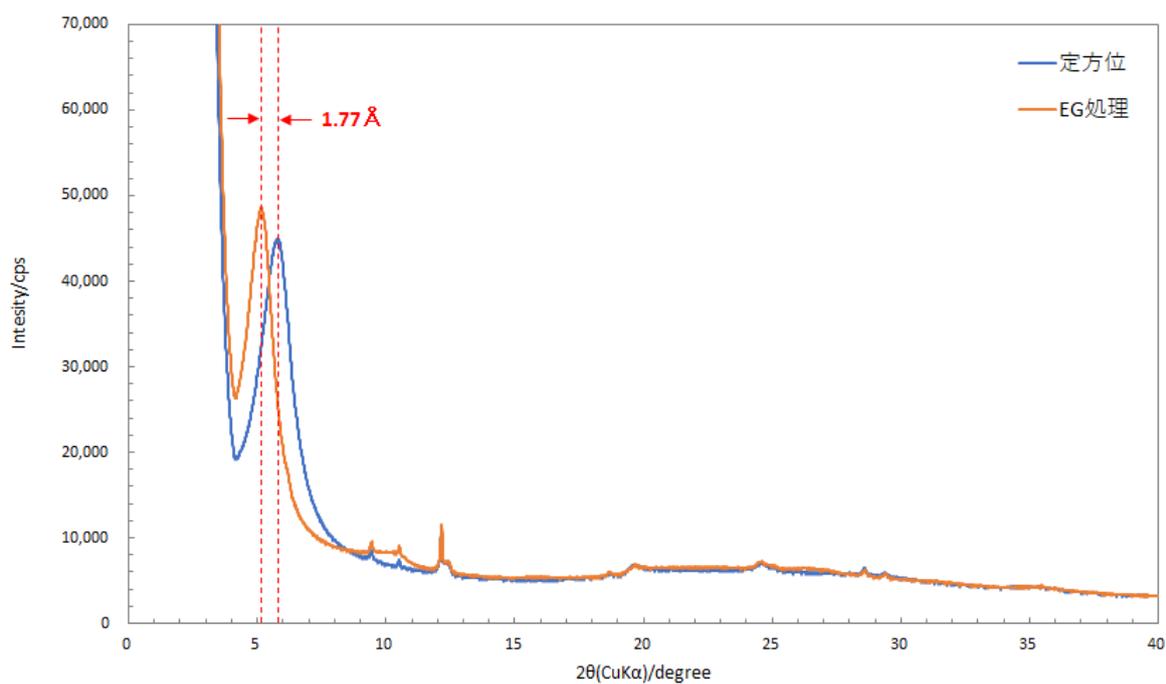


図 3-6 PWT07-17-Rh-009 の定方位 XRD 分析結果 (赤 : EG 処理後)

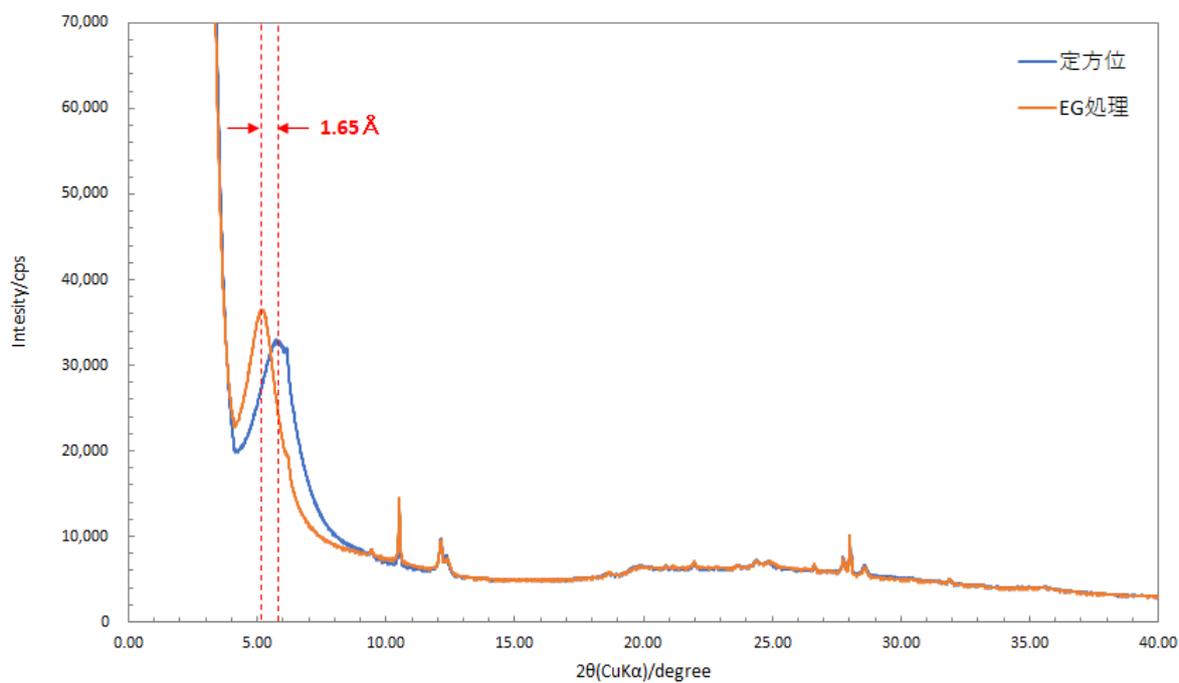


図 3-7 PWT07-17-Rh-C03 の定方位 XRD 分析結果 (赤 : EG 処理後)

4. XRF 分析

4.1 分析条件

3.1 の手順で調整した岩石試料の粉末を分析に供した。島津製作所の波長分散型蛍光 X 線分析装置 XRF-1800 を用いて、表 4-1 に示す条件により、XRF による定量分析を実施した。

表 4-1 XRF 分析条件

項目	仕様等
X 線ターゲット	Rh
電圧	40kV
電流	95mA

4.2 分析結果

XRF 分析による元素定量結果を表 4-2～表 4-3 および図 4-1～図 4-2 に示す。なお、表の空欄は、当該元素が検出されないことを示し、結果は酸化物表示で CO₂ を含む結果と CO₂ の含有率を控除して百分率を求めたものをそれぞれ記載している。

PWT07-17-Rh-009 の Mg がやや少なく、CaO がやや多いものの、PWT07-17-Rh-C04 および C05 とほぼ同じ傾向となった。

一方、PWT07-17-Rh-C03 は、他の 3 試料に比べ Al₂O₃ の割合が高い。これは、長石類の影響と考えられる。

なお、Mg は蛇紋岩の量比の違いも考えられるが、MSH の可能性も考えられる。

表 4-2 XRF 分析による定量結果 (酸化物表記、CO₂ 含む)

試料名	PWT07-17-Rh	PWT07-17-Rh	PWT07-17-Rh	PWT07-17-Rh
%	-009	-C03	-C04	-C05
CO ₂	13.50	13.57	15.45	14.74
CaO	6.02	3.22	1.91	2.07
SiO ₂	52.82	57.22	52.64	52.39
Fe ₂ O ₃	15.60	7.49	15.06	15.94
MgO	8.09	5.85	10.81	10.58
Al ₂ O ₃	2.19	9.46	2.44	2.25
Cr ₂ O ₃	0.66	0.20	0.60	0.73
NiO	0.57	0.23	0.54	0.53
SO ₃	0.03	0.05	0.02	0.02
MnO	0.13	0.15	0.16	0.26
Na ₂ O	0.13	1.14	0.16	0.19
TiO ₂	0.05	0.33	—	0.07
Co ₂ O ₃	0.06	0.02	0.05	0.06
K ₂ O	0.12	0.93	0.09	0.11
ZnO	0.01	0.01	0.01	0.01
SrO	0.01	0.03	0.01	0.01
V ₂ O ₅	0.01	—	0.01	0.01
CuO	0.00	0.00	0.00	0.00
Cl	—	0.03	0.01	0.01
Ga ₂ O ₃	—	0.00	—	—
BaO	—	0.02	—	—
P ₂ O ₅	—	0.02	—	—
I	—	0.01	—	—
Rb ₂ O	—	0.00	—	—
In ₂ O ₃	—	—	0.01	0.01
ZrO ₂	—	0.01	—	—
SiO ₂ /Al ₂ O ₃	24.17	6.05	21.54	23.24

表 4-3 XRF 分析による定量結果（酸化物表記、CO₂ 含まず）

試料名	PWT07-17-Rh	PWT07-17-Rh	PWT07-17-Rh	PWT07-17-Rh
%	-009	-C03	-C04	-C05
CaO	7.11	3.89	2.33	2.49
SiO ₂	60.18	65.88	61.51	60.68
Fe ₂ O ₃	19.05	9.28	18.96	19.81
MgO	9.02	6.51	12.27	11.94
Al ₂ O ₃	2.47	10.68	2.83	2.59
Cr ₂ O ₃	0.79	0.25	0.74	0.89
NiO	0.72	0.29	0.71	0.68
SO ₃	0.04	0.06	0.03	0.02
MnO	0.16	0.19	0.20	0.32
Na ₂ O	0.15	1.26	0.18	0.22
TiO ₂	0.06	0.40	—	0.08
Co ₂ O ₃	0.07	0.03	0.07	0.08
K ₂ O	0.14	1.12	0.11	0.13
ZnO	0.01	0.01	0.01	0.01
SrO	0.01	0.04	0.01	0.01
V ₂ O ₅	0.01	—	0.01	0.01
CuO	0.00	0.00	0.00	0.00
Cl	—	0.03	0.01	0.01
Ga ₂ O ₃	—	0.00	—	—
BaO	—	0.03	—	—
P ₂ O ₅	—	0.02	—	—
I	—	0.02	—	—
Rb ₂ O	—	0.00	—	—
In ₂ O ₃	—	—	0.02	0.02
ZrO ₂	—	0.02	—	—
SiO ₂ /Al ₂ O ₃	24.35	6.17	21.74	23.43

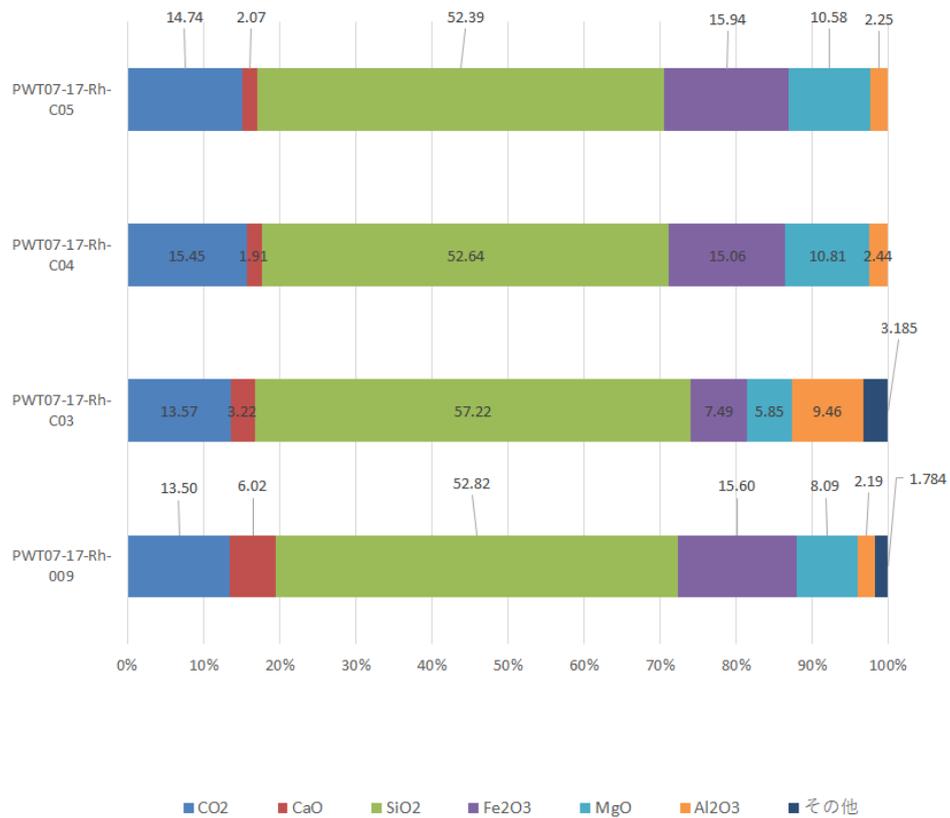


図 4-1 各試料の XRF 分析結果（酸化物表記、CO₂ を含む）



図 4-2 各試料の XRF 分析結果（酸化物表記、CO₂ を含まず）

5. ナチュラルアナログ試料の微細構造の観察

5.1 分析条件

対象とする試料はバルク分析と同じに表 2-1 示す 4 試料である。研磨片および鏡面研磨薄片の一覧をそれぞれ図 5-1 と図 5-2 に示す。

PWT07-17-Rh-009



PWT07-17-Rh-C04



PWT07-17-Rh-C03



PWT07-17-Rh-C05



図 5-1 研磨片の一覧

PWT07-17-Rh-009



PWT07-17-Rh-C04



PWT07-17-Rh-C03



PWT07-17-Rh-C05



図 5-2 鏡面研磨薄片の一覧

5.2 分析結果

5.2.1 試料名：PWT07-17-Rh-009

主な構成鉱物は直方（斜方）輝石（Opx）、単斜輝石（Cpx）、蛇紋石（Spt）、スピネル（Spn）、緑泥石（Chl）であり、加えて褐色の微細粒子で占められた基質部分をもつ。C03 や C04, C05 と比較して、変質が進み切っていない（褐色ではなく緑色を呈する）蛇紋石の部分も多くみられる。褐色の基質部分がかなり色濃く、不透明な箇所が多い。

濃い褐色部分は SEM-EDS の分析による $(Al+Mg+Fe)/Si$ 比の値から判断して、2:1 型層状ケイ酸塩鉱物だと考えられるが、Ca 濃度が高くスメクタイトというよりもバーミキュライトに相当する。ただし、XRD の膨潤挙動からするとスメクタイトだと推測されていることから、過剰な Ca は二次鉱物への Ca の吸着や微細な含 Ca 鉱物（CSH など）の混合が考えられる。これらの可能性については TEM による微細組織観察から確認を行うこととした。

濃褐色を示す二次鉱物の化学組成を SEM-EDS で分析した結果、ノントロナイトだと思われる部分の構造式は平均 ($n=5$) で $Ca_{0.34}(Mg_{0.60}Fe_{1.19}Al_{0.22})_{2.01}[Al_{0.12}Si_{3.88}]_4O_{10}(OH)_2$ となった。一方、蛇紋石を取り囲んでいるサポナイトだと思われる部分の構造式は $Ca_{0.39}(Mg_{1.44}Fe_{0.93})_{2.37}[Fe_{0.33}Al_{0.13}Si_{3.54}]_4O_{10}(OH)_2$ でありノントロナイトだと思われる部分と同程度の Ca を含みつつ、やや Fe よりも Mg に富んでいる。中心の蛇紋石が Mg に富んでおり ($Mg/(Fe+Mg) \sim 0.81$)、これがサポナイトへの Mg と Fe の供給源になっていることを反映していると考えられる。

FIB によるマイクロサンプリングを直方輝石岩片の周囲に分布しているノントロナイトらしき二次鉱物に対して行った（図 5-3）。薄膜の断面(f)には層状の粘土鉱物が束になり、ランダムな向きになっていることが確認出来る。

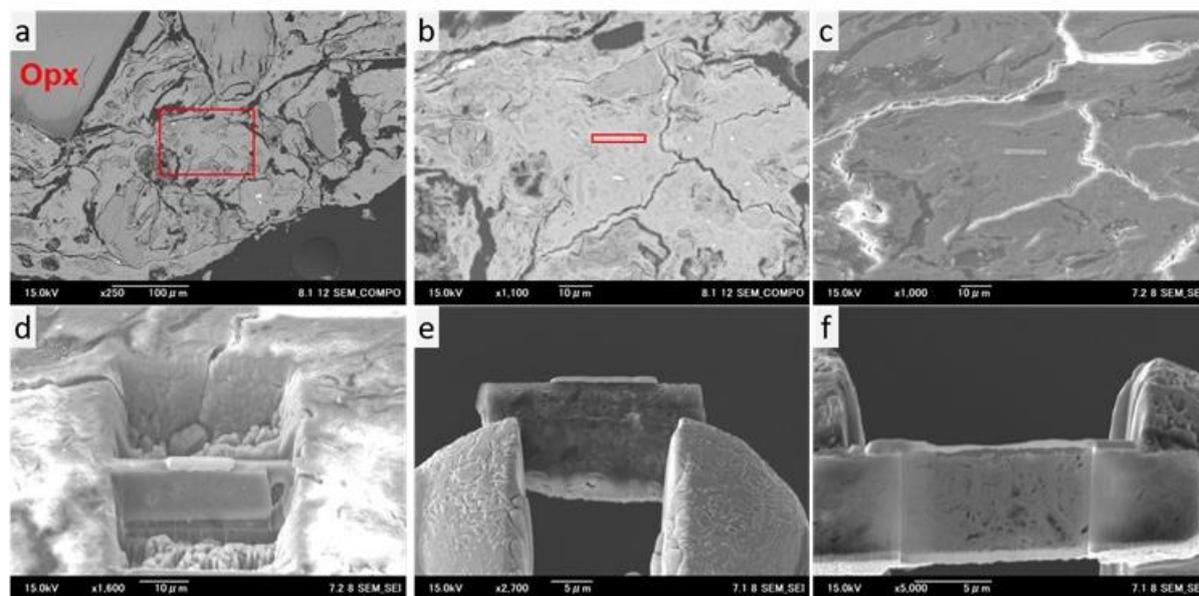


図 5-3 PWT07-17-Rh-009 の FIB 加工過程

FIB で切り出した薄膜を TEM によって観察を行うと、薄膜全体に層状鉱物が網目状に分布している。さらに拡大して観察すると、層状鉱物が束になった部分とその間に存在するコントラストがやや明るい部分の 2 つの領域が観察される。制限視野電子回折からは、前者が 1.09 nm の底面間隔をもつ層状粘土鉱物で、後者が非晶質物質だと判断されるが、一方 EDS 分析では両者に大きな組成差は見られなかった。また、薄膜中に C-S-H の粒子が混合している様子はなく、

非晶質および層状粘土鉱物の両方において SEM-EDS や EPMA での分析と同じくノントロナイトに類似するが Ca 過多の組成が得られた。

STEM による分析では層状部分と非晶質部分の化学組成の差がより明確に分かる。高角環状暗視野 (HAADF) 像では非晶質部分のコントラストがより暗い。元素マップとそれぞれの場所の特性 X 線スペクトルの比較から、非晶質部分は層状部分と比較して相対的に Fe と Si が少なく、Mg と Ca、C に富んだ組成をしている。したがって、C については包埋用の樹脂由来である可能性があるものの、主要陽イオン組成については層状部分と非晶質部分で若干異なっている。また、層状部分の化学組成をスメクタイトの構造式に当てはめて計算すると $\text{Ca}_{0.44}(\text{Mg}_{0.38}\text{Fe}_{1.39}\text{Al}_{0.10})_{1.86}[\text{Al}_{0.15}\text{Si}_{3.85}]_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$ となり、SEM や TEM での分析と同じく Ca 過多の組成となる。

5.2.2 PWT07-17-Rh-C03

目立つ特徴として、白色砂質の分と褐色味の強い蛇紋岩碎屑物のブロックに大きくに分けられる。火山灰由来と考えられる白色砂質部分は主に石英、斜長石 (組成上は Na と Ca 成分がほぼ同じか、若干 Na が多い程度、 $\sim\text{Ab}_{50-56}$)、火山ガラス(Gl)、普通角閃石 (Hrb) の粒子が含まれる (図 5-4)。基質としては PWT07-17-Rh-009 などでも見られている濃褐色のものや、淡褐色～灰色の基質の 2 種類が確認される。

蛇紋岩由来の岩片に含まれている角閃石が緑泥石を伴う傾向を示すのに対し、白色砂質部分に含まれる角閃石は単体の粒子が多く見られる。粒子間の組成の幅が大きいものの、Leake et al. (2004) の分類に従い、magnesian-hornblende の組成範囲に入る。蛇紋岩由来の岩片に含まれる角閃石と比較して、Fe に富み、四面体サイトの Al の量が増えている (つまり、フェロツェルマック閃石寄りの組成を示す)。

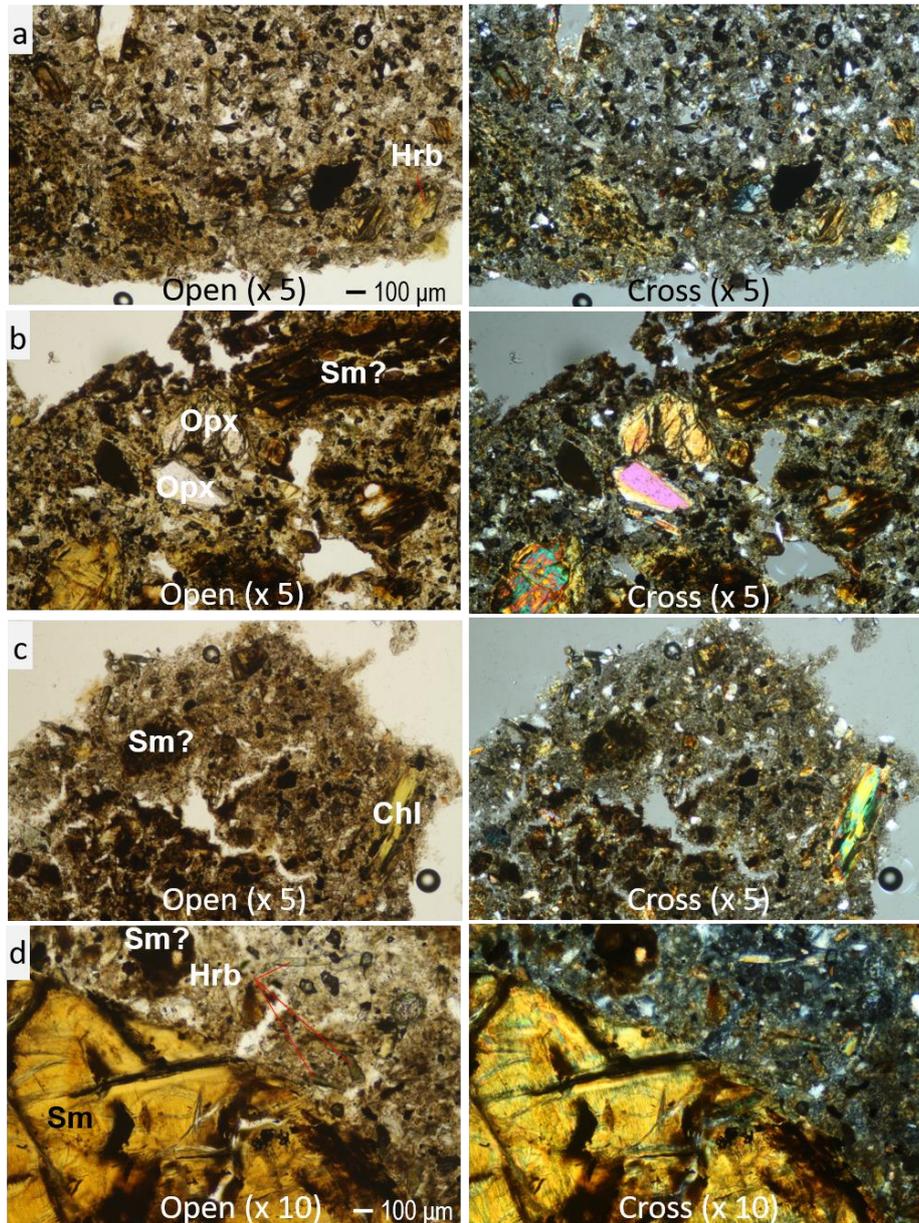


図 5-4 PWT07-17-Rh-C03 の偏光顕微鏡像（火山灰由来の堆積物）

含まれている火山ガラスは繊維状あるいはスポンジ状の形状で、非常に微細なため光学顕微鏡では識別が難しい場合が、SEM 観察ではその特徴的な形状から簡単に識別が可能である。火山ガラスの化学組成はアルカリの少ない長石質で、粒子間での比較的均質だった（表 5-1）。また、火山ガラス周囲にはモンモリロナイト(Mt)組成の二次鉱物が分布している。このモンモリロナイト組成の二次鉱物は白色砂質のブロックでよく観察される一方で、蛇紋岩由来の岩片周囲ではあまり見られないことから、火山灰堆積物からの Si や Al の供給がその形成に関与していると考えられる。

火山ガラス周辺について EPMA による元素マッピング結果から、マッピング範囲内に含まれる複数の火山ガラスの粒子間・粒子内で組成はほとんど均一だと思われる。ただし、Na については若干粒子内で濃度のバラつきが見られる。火山ガラスから火山ガラス周囲の粘土鉱物に向かって特定の元素が移行している様子は見られない。また、C の分布からはガラス周囲の粘土鉱物の

部分には樹脂が浸透していると考えられ、SEM-EDS で C のピークが他の粒子と比べて高く出ていることから支持される。

表 5-1 火山ガラスの化学組成

火山ガラスの化学組成								
	201031				201106			Ave.
wt%	011	012	013	014	012	008	002	
Na ₂ O	2.59	2.7	2.8	2.69	2.43	2.53	2.57	2.62
MgO	0.18	0	0.13	0.21	0.35	0.27	0.19	0.19
Al ₂ O ₃	13.79	13.91	13.79	13.91	13.88	13.64	14.13	13.86
SiO ₂	77.9	78.75	78.74	78.73	77.34	77.89	78.7	78.29
K ₂ O	3.07	3.4	3.34	3.16	2.7	3.03	3.25	3.14
CaO	1.31	1.24	1.2	1.3	1.79	1.28	1.16	1.33
Fe ₂ O ₃	1.17	0	0	0	1.5	1.37	0	0.58

火山ガラスの形態を観察するために、PWT07-17-Rh-C03 のバルク試料の一部をエタノールで分散した後、TEM 用マイクログリッド (直径 3mm, Cu メッシュ+カーボン支持膜) の上に分散し、加速電圧 5 kV において SEM の二次電子像を撮影した。火山ガラスの表面は平滑ではなく、数百 nm の細かな孔が無数に存在している様子が見られる。

火山ガラスと周囲の二次鉱物との界面の微細構造を観察するために、火山ガラスを跨るように FIB-SEM による TEM 試料作製を行った (図 5-5)。SEM 観察と同様に火山ガラス粒子の周囲は平滑ではなく蜂の巣状に小さな孔が分布しているのが分かる。ガラス内部には孔が存在しないことから、元々火山ガラスが持っていた孔ではなく、その後の変質過程で形成されたものだと考えられる。火山ガラス周辺を観察すると、層状の粘土鉱物も散見されるが、ガラスと直接接する部分には直径 20 nm 程度の粒子が多数分布している様子が見られる。このナノ粒子は中心のコントラストが弱く中空になっていると思われる。化学組成からは Al と Si が主体で、Fe や Mg、Ca なども含まれるが、周囲の層状鉱物とナノ粒子の化学組成を別々に評価するのが難しいため、次項の STEM による分析結果を基に判断することとした。

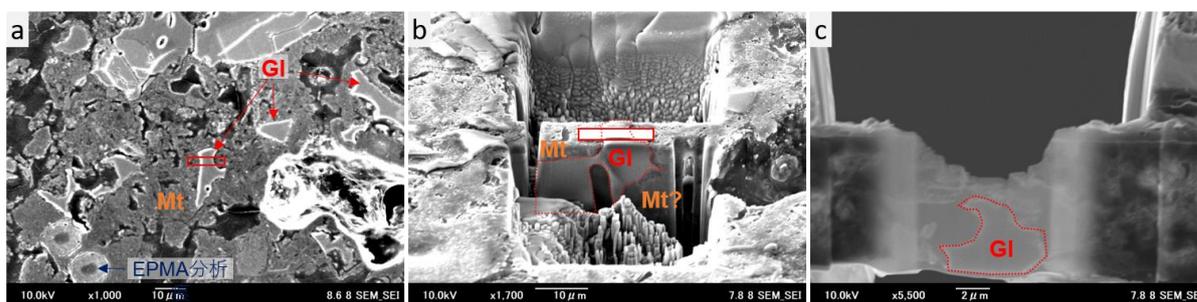


図 5-5 火山ガラス周辺の FIB 加工過程

TEM 観察した試料を STEM で観察・分析した結果から、火山ガラスの界面が蜂の巣状を呈することが明瞭に分かる。ガラス中心から周囲に向かって主要元素のプロファイルを確認すると、中心の A 端における各陽イオンの質量濃度%は SEM-EDS での点分析の定量値と概ね一致する

が、周囲に向かって K と Ca、Al の減少と Si の増加が確認される。堆積した際の火山ガラスの組成が均一であったと仮定すると、長期間にわたって周囲溶液と反応した結果、アルカリと Al の溶出が起これ、相対的に Si が界面付近で増加したと考えられる。周囲の二次鉱物の方に注目すると、層状鉱物の部分は Si と Al に加えて Fe あるいは Mg に富んだ組成をもち、ノントロナイトやサポナイトであると考えられる。HAADF 像中の 2 か所 (Area #1 および #2) の化学組成からスメクタイト構造式に当てはめて計算すると、それぞれ $\text{Ca}_{0.10}(\text{Mg}_{0.49}\text{Fe}_{0.90}\text{Al}_{0.77})_{2.15}[\text{Al}_{0.16}\text{Si}_{3.84}]_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$ と $\text{Ca}_{0.11}(\text{Mg}_{1.53}\text{Fe}_{0.14}\text{Al}_{0.86})_{2.73}[\text{Al}_{0.86}\text{Si}_{3.14}]_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$ となる。回折コントラストの情報を含む TEM の明視野像と比較して、HAADF 像上では非晶質部分の輪郭が明瞭ではないが、元素マップの結果から判断すると Al と Si が主体の物質であろうと考えられる。TEM による観察結果と併せて、Al と Si 主体で中心が中空のナノ粒子という点からアロフェンの可能性が考えられる。ただし、一般的に報告されているアロフェンのサイズ (数 nm 程度) と比較すると、直径が 20 nm 程度と非常に大きい。

蛇紋岩由来の岩片には角閃石、蛇紋石、直方輝石、単斜輝石、かんらん石由来であろう粒子が見られるが、変質をあまり受けていない粒子は直方輝石のみで、一部が緑泥石化している普通角閃石 (図 5-6f) や一部がスメクタイト化している蛇紋石 (図 5-6g) が観察される。

粒子内部の二次鉱物に加え、これらの粒子の周囲には褐色の基質が分布しており、009 や C04 でも観察されている細かな鉱物片を含むノントロナイト組成のスメクタイトだと考えられる。直径 100 μm 程度の塊としてよく観察される (図 5-6h)。

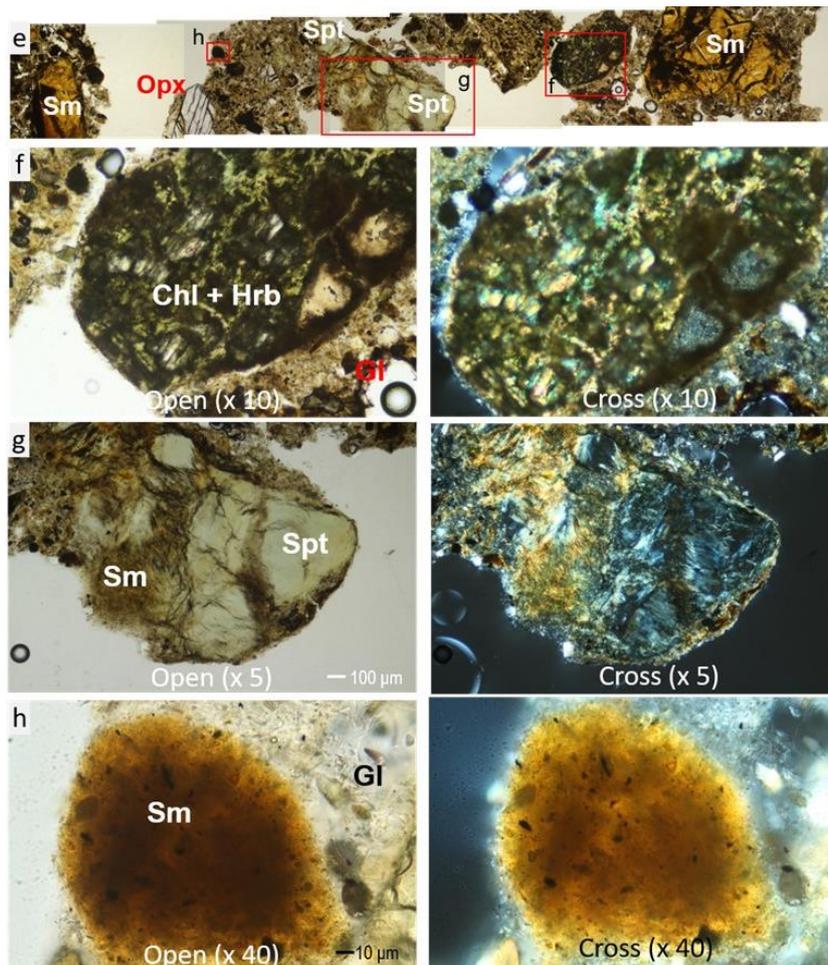


図 5-6 PWT07-17-Rh-C03 の偏光顕微鏡像 (蛇紋岩由来の岩片など)

蛇紋岩岩片周囲の二次鉱物を SEM で観察・分析した結果から、中心の岩片にはかんらん石または輝石が蛇紋石化反応の際に形成したと考えられる鉄鉱物が網目状に分布しており、元々は蛇紋石だったと思われるが、既にスメクタイト化が進行しており Mg に富んだスメクタイト組成を示す。この岩片のリムの一部には細かな直方輝石などの鉱物片を多く含む、やや Fe に富むスメクタイトが分布している。岩片内部の網目状組織の中心には蛇紋石化を免れた 1 次鉱物がスメクタイト化したと考えられる部分が存在している。こちらはノントロナイト寄り、サポナイト寄りの組成を示す 2 つの領域が隣り合っている。

岩片の周囲に存在する二次鉱物の部分を FIB で切り出し (図 5-7)、TEM による微細構造の観察を行った。薄膜全体に層状の粘土鉱物が束なった様子が見られ、束の部分から得られた制限視野電子回折は約 1 nm の底面間隔を持つ粒子が層に沿って配向していることが分かる。組成と併せて、ノントロナイトが集合したものに相当していると考えられる。似た産状の PWT07-17-Rhr-009 の二次鉱物と比べると、非晶質部分が少なく、層状の粘土鉱物が大部分を占めている。また、過剰な Ca も確認されない。一方で数百 nm 程度のサイズの蛇紋石も観察される。

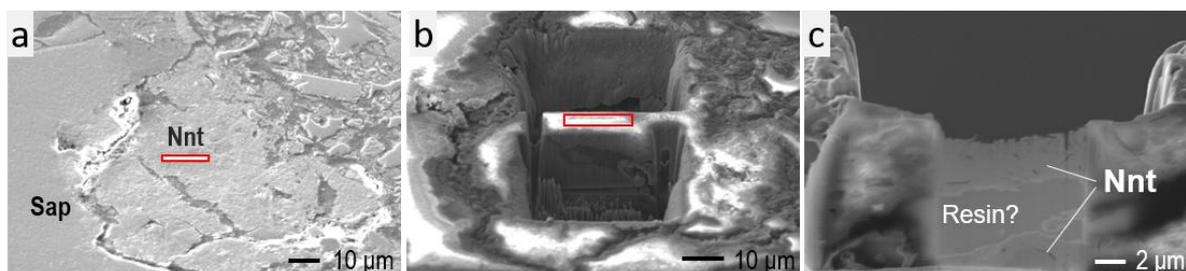


図 5-7 PWT07-17-Rh-C03 蛇紋岩岩片周囲の二次鉱物の FIB 加工過程

STEM による分析でも 009 の基質と比べて層状部分がより密で非晶質部分が少なく、Ca が過剰な部分が認められない。化学組成をスメクタイトの構造式に当てはめると、それぞれ $\text{Ca}_{0.14}(\text{Mg}_{0.82}\text{Fe}_{1.03}\text{Al}_{0.29})_{2.13}\text{Si}_{4.03}\text{O}_{10}(\text{OH})_2$ と $\text{Ca}_{0.12}(\text{Mg}_{0.74}\text{Fe}_{1.24}\text{Al}_{0.21})_{2.19}[\text{Al}_{0.07}\text{Si}_{3.93}]_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2$ となる。また、HAADF コントラストが明るい数十 nm 程度の大きさの領域が点在しており Fe に富んだ直方輝石と思われる組成を持つ。

5.2.3 試料名 : PWT07-Rh-C04

PWT07-17-Rh-009 と比べると、岩片の種類は 009 と変わらないが明るい褐色を帯びた粒子が増えている。基質部分の色も褐色味の濃い 009 に比べてやや明るい褐色もしくは灰色味を帯びている。直方輝石の岩片はあまり変質していない無色透明の粒子が残存している。蛇紋石由来のメッシュ組織がよく観察されるが、こちらも明るい褐色および干渉色を示すことから 3 価の鉄を含むスメクタイトに変質していることが考えられる。同様に、角閃石、単斜輝石、かんらん石由来と考えられる岩片も元々の粒子形状を残しつつも粒子全体が褐色に変化している。SEM-EDS の分析と併せて考えると、スメクタイトに変質していると判断される (図 5-8) また、これらの粒子内の亀裂あるいは劈開に沿ってマグネタイト (Mgt) が分布している様子も見られ (図 5-8b, d)、蛇紋石化反応の変質過程を経験していることが想定される (野坂, 2012)。

メッシュ組織を呈する岩片周囲の二次鉱物を SEM-EDS によって分析を行うと、岩片の周囲に分布する基質は角閃石や石英などの細かな鉱物片を伴うノントロナイト組成の物質だと分かった。

産状は PWT07-17-Rh-009 の岩片周囲に分布する基質と同じだが、こちらでは過剰な Ca は検出されない。同様の基質は岩片間を充填する基質として C04 の試料中で広く観察される。

メッシュ組織を呈する岩片内を分析すると、 $(Mg+Fe)/Si$ の比が 0.8-0.9 程度であり、Al や Ca も含むことから蛇紋石がスメクタイト化していると考えられる。岩片外の基質と異なり、Fe よりも Mg を主体とするサポナイト寄りの組成を示す。また、SEM-EDS で検出可能な微量の Ni や Cr も含まれていることも特徴である。スメクタイト化する前の蛇紋石あるいは 1 次鉱物の組成の影響を引き継いでいると解釈される。ただし、 $O_{10}(OH)_2$ ベースの構造式に合わせて計算した場合、Al+Si が 4 に満たず四面体サイトに Fe^{3+} を配置させることになる。これは恐らく蛇紋石の構造が一部残存していることを反映した結果だと考えられる。同様の傾向は C04 中のメッシュ組織に広く観察される。

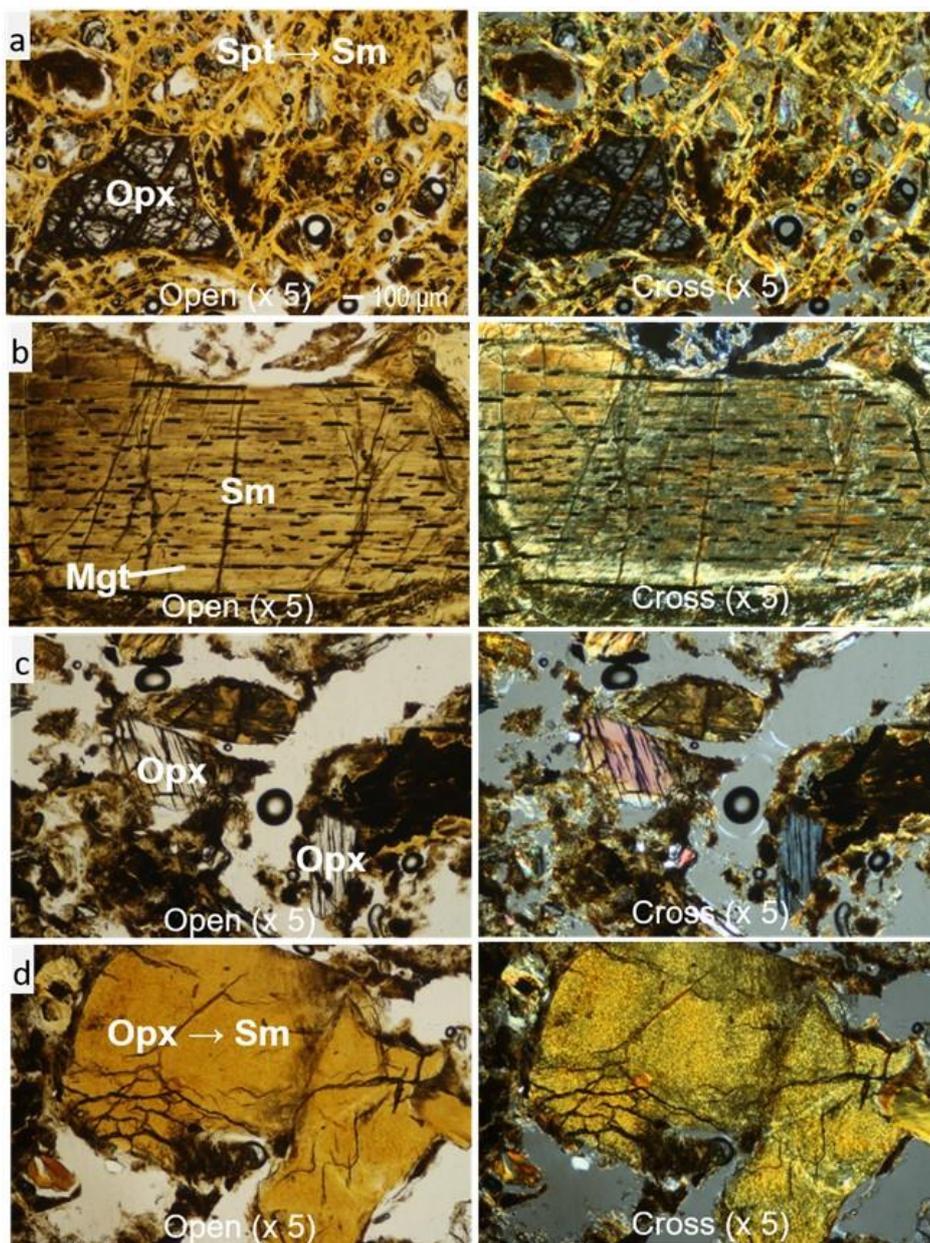


図 5-8 PWT07-17-Rh-C04 構成鉱物の偏光顕微鏡像

5.2.4 試料名 : PWT07-17-Rh-C05

岩片および基質について、C03 を挟んで上位にある C04 とほぼ同様の鉱物組成を示す。ただし、C04 や 009 に含まれている岩片と比べてややサイズが小さい傾向で、代わりに基質が占める面積が増える傾向が見られる。基質については009で多く見られた濃褐色の基質の割合が減って、より明るい褐色～灰色の割合が増えていると思われる。

SEM-EDS で岩片および基質部分を調べた結果から、C03, C04 と同様の傾向が見られ、岩片周囲に分布するノントロナイト組成の基質と岩片内を置き換えているサポナイト組成のもの2種類が観察される。

残存している直方輝石周囲の元素マッピングを行うと (図 5-10)、Mg が支配的な直方輝石に対してサポナイト部分は Fe に富んでいる様子が分かる。サポナイト部分で Al が少ないのはもとの直方輝石に含まれている量が少ないからだと考えられる。

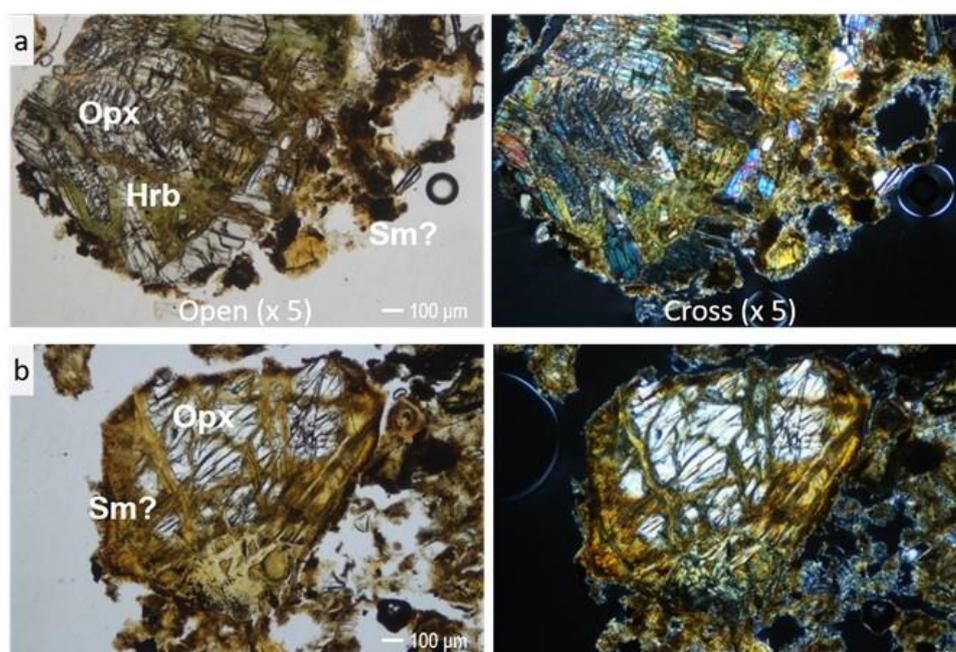


図 5-9 PWT07-17-Rh-C05 構成鉱物の偏光顕微鏡像

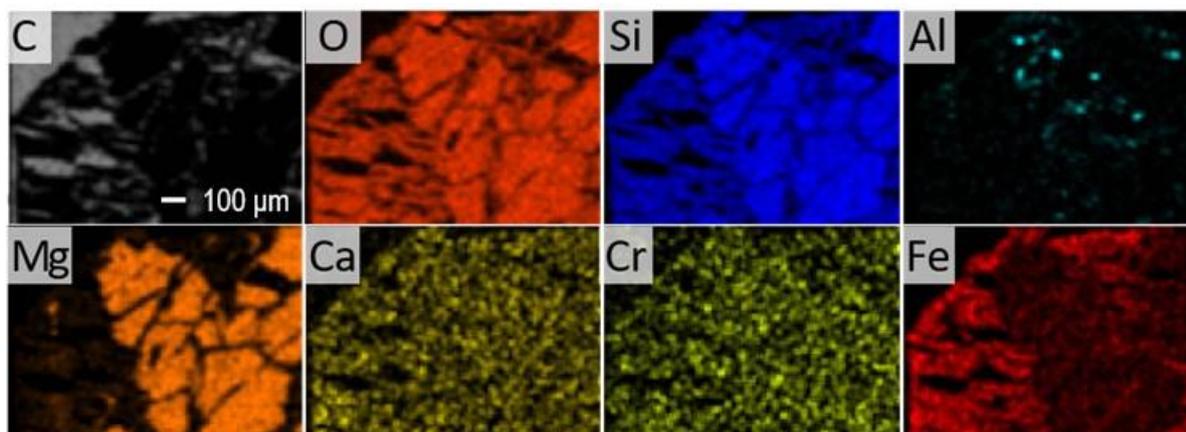


図 5-10 PWT07-17-Rh-C05 構成鉱物の SEM-EDS 元素マッピング

参考文献

- Aurelio, M.A. and Pena, R.E., (Eds.), *Geology of the Philippines Tectonics and Stratigraphy*, second ed., vol.1, Mines and Geosciences Bureau, Department of Environment and Natural Resources, Quezon City, Philippines, 2010.
- Aurelio, M.A., Franke, D., Savva, D. and Steur, S., Middle to Late Cenozoic tectonic events in South and central Palawan (Philippines) and their implications to the evolution of the south-eastern margin of South China Sea: Evidence. *Marine and Petroleum Geology*, p1-16, 2013.
- (公財) 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・処分高度化開発報告書 (第 3 分冊) - ナチュラルアナログ調査 -, 2015.
- (公財) 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・処分高度化開発報告書 (第 3 分冊) - ナチュラルアナログ調査 -, 2016.
- (公財) 原子力環境整備促進・資金管理センター, 平成 28 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・処分高度化開発報告書 (第 3 分冊) - ナチュラルアナログ調査 -, 2017.
- (公財) 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・処分高度化開発報告書 (第 3 分冊) - ナチュラルアナログ調査 -, 2018.
- Forbes, M.T., Mapaye, C.B. and Baculd, J.A., Structural characterization of off-shore Southwest Palawan, Philippines using the most recent 2D / 3D seismic data, In *Proceedings of Southeast Asia Petroleum Exploration (SEAPEX) Meeting*, Manila, Philippines, pp.1-25, April, 2011.

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. 廃棄体由来の発生ガスに関する現象妥当性検討に係る補足資料

1.1 ガス移行場の状態を考慮した解析条件の設定

ガス発生量に対する周辺人工バリアの飽和状態と廃棄体パッケージの開口時期の影響検討の必要性が提示されており、ガス発生量と発生時期・緩衝材の飽和状態が解析結果に対して大きな影響を与え得ることが示唆されているが、これらの因子を処分場のガス移行挙動に与える「場の状態」に反映することを検討した。

流体物性、水理物性、物質移行パラメータ、及び廃棄体領域からのガス発生に関する条件設定を示す。

1.1.1 流体物性

本検討で取扱う流体（水、水素）の物性を示す。本検討では再冠水とガス発生・移行が同時に起こる過程を対象とするが、簡略化して水と水素の 2 相 2 成分流体系として取扱うものとした。本検討では等温状態を仮定するため、流体物性（密度、粘性係数）を圧力によってのみ変化させる。第 2 次 TRU レポートを参考に、地表面温度を 15 °C、地温勾配を 0.03 °C/m とすると、処分坑道がある地表面から深度 1000 m では 45 °C となるため、ここでは 45 °C の等温状態を前提とする。

理科年表より 45 °C における標準大気圧 101,325 Pa での水の密度 ρ_{w0} を 990.21 (kg/m³)、粘性係数 μ_{w0} を 0.59965×10^{-3} (Pa s) (40 °C と 50 °C の値を用いて線形補間して算出) とし、以下の式により水圧の関数として取り扱う。

$$\rho_w = \rho_{w0}(1 + C_f(P_w - P_0)) \quad (1-1)$$

$$\mu_w = \mu_{w0}(1 + C_\mu(P_w - P_0)) \quad (1-2)$$

ρ_w :水の密度(kg/m³)

μ_w :粘性係数(Pa s)

C_f :圧縮率 0.45×10^{-9} (1/Pa)

C_μ :粘性係数の増加率 1.0×10^{-10} (1/Pa)

P_w :水圧(Pa)

P_0 :参照圧力 101,325 (Pa)

理科年表より t°C における標準大気圧 101,325 Pa での空気の密度 ρ_{a0} は以下に示す式で計算され、45 °C における空気の密度は 1.110 kg/m³ となる。水素の空気に対する比重 0.0695 から、標準大気圧での水素の密度 ρ_{h0} を 7.713×10^{-2} kg/m³ とした。また、粘性係数 μ は理科年表に記載された以下の式より、45 °C における水素の粘性係数を 9.312×10^{-6} Pa s とした。密度はガス圧に比例するものとし（理想気体を仮定）、粘性係数は変化しないものとした。

$$\rho_{a0} = \frac{1.293}{1 + 0.00367t} \quad (1-3)$$

$$\mu = \mu_{20} \left(\frac{T_{20} + C}{T + C} \right) \left(\frac{T}{T_{20}} \right)^{3/2} \quad (1-4)$$

ここに、 T 、 C はそれぞれ温度(K)、サザランド定数であり、添え字 20 は標準大気圧 101,325 Pa、

20 °Cにおける値を示す。標準大気圧 101,325 Pa、20 °Cにおける水素の粘性係数は 8.8×10^{-6} (Pa s)、 $T_{20}=293.15$ K、水素のサザランド定数には 72 を設定した。

1.1.2 水理物性

材料ごとの水理物性の一覧を表 1-1 にまとめた。相対浸透率及び毛細管圧力を表現する構成モデルをそれぞれ表 1-2、表 1-3 に、各材料の相対浸透率曲線及び毛細管圧力曲線を図 1-1 から図 1-3 に示す。

表 1-1 水理物性一覧

部材	絶対浸透率 $K_p(m^2)$		相対浸透率 $k_r(-)$				毛細管圧力 $P_c(Pa)$					間隙率 $\phi(-)$	固相 圧縮率 $C_r(1/Pa)$	初期 水相 飽和度 (%)
			モデル	残留水相 飽和度 $S_{wr}(-)$	残留ガス 相飽和度 $S_{gr}(-)$	係数 $m(-)$	モデル	残留水相 飽和度 $S_{wr}(-)$	残留ガス 相飽和度 $S_{gr}(-)$	係数 $P_0(Pa)$	係数 $n(-)$			
廃棄体 (内部充填材+ パッケージ、パッ ッケージ間充填材)	水相	4.1×10^{-18}	Corey/Power	0.15	0.075	25/2.8	vG	0.15	0	1.4×10^6	1.5	0.19	6.0×10^{-12}	85.4
	ガス相	4.1×10^{-18}												
緩衝材	水相	6.4×10^{-20}	vG/Grant	0	0	0.4	vG	0	0	1.0×10^6	2	0.407	1.0×10^{-9}	65
	ガス相	6.4×10^{-20}												
埋め戻し	水相	1.0×10^{-18}	Corey/Grant	0.3	0.01	4	vG	0.580	0.01	4.0×10^4	2.5	0.32	1.87×10^{-7}	85
	ガス相	1.0×10^{-18}												
コンクリート	水相	4.1×10^{-18}	Corey/Power	0.15	0.075	25/2.8	vG	0.15	0	1.4×10^6	1.5	0.13	5.92×10^{-11}	85.4
	ガス相	4.1×10^{-18}												

表 1-2 相対浸透率曲線を表現する構成モデル

<i>Corey/Power</i>	
k_{rw}	$= S_{we}^{m1}$
k_{rg}	$= S_{ge}^{m2}$
S_{we}	$= (S_w - S_{wr}) / (1 - S_{wr} - S_{gr})$
S_{ge}	$= (S_g - S_{gr}) / (1 - S_{wr} - S_{gr})$
<i>van Genuchten (vG)/Grant</i>	
k_{rw}	$= \sqrt{S_{we}} (1 - (1 - S_{we}^{1/m})^m)^2$
k_{rg}	$= 1 - k_{rw}$
S_{we}	$= (S_w - S_{wr}) / (1 - S_{wr} - S_{gr})$
<i>Corey/Grant</i>	
k_{rw}	$= S_{we}^m$
k_{rg}	$= 1 - k_{rw}$
S_{we}	$= (S_w - S_{wr}) / (1 - S_{wr} - S_{gr})$

表 1-3 毛細管圧力曲線を表現する構成モデル

<i>van Genuchten (vG)</i>	
P_c	$= P_0 (S_{we}^{-1/m} - 1)^{1-m}$
S_{we}	$= (S_w - S_{wr}) / (1 - S_{wr} - S_{gr})$
n	$= 1 - 1/m$

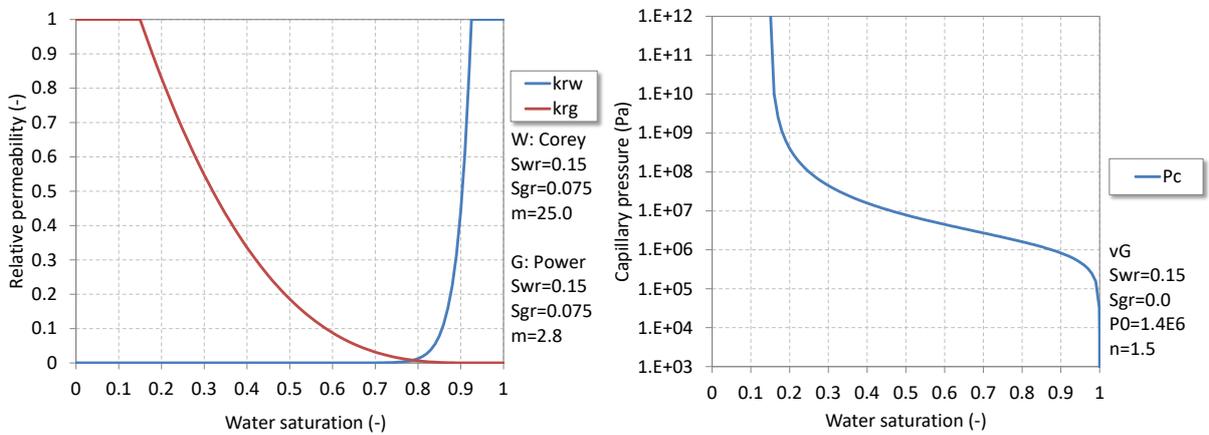


図 1-1 相対浸透率と毛細管圧力曲線 (廃棄体・コンクリート)

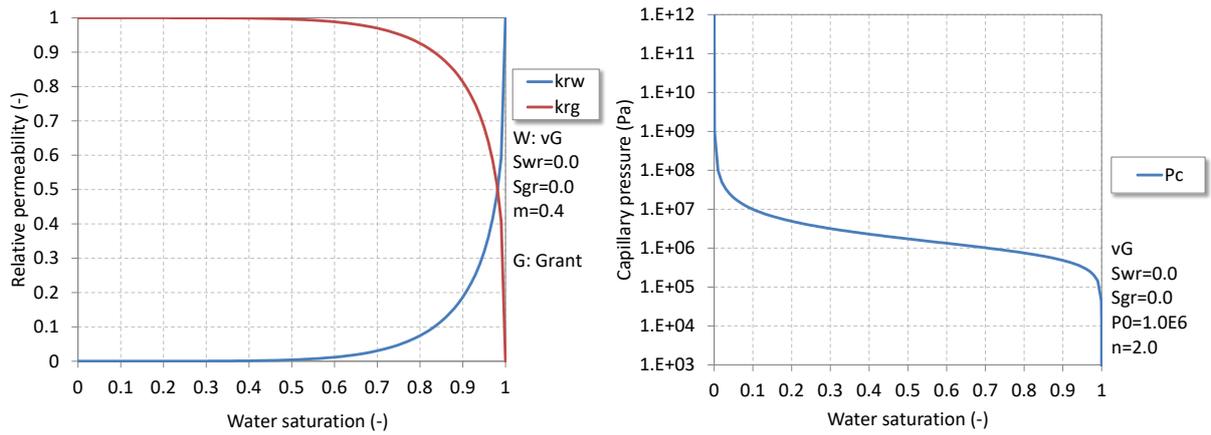


図 1-2 相対浸透率と毛細管圧力曲線（緩衝材）

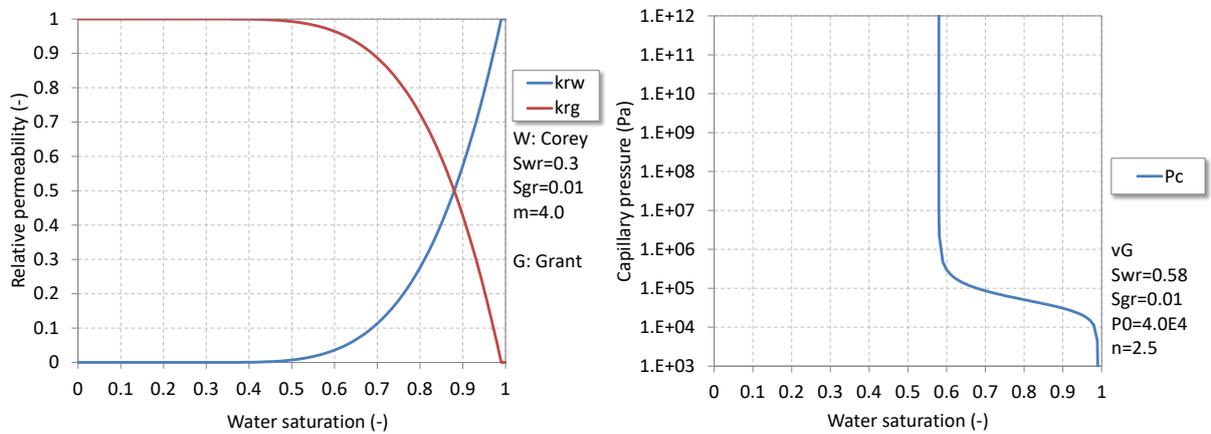


図 1-3 相対浸透率と毛細管圧力曲線（埋め戻し）

1.1.3 物質移行パラメータ

ガス溶解を考慮する場合における溶存物質の移行パラメータについて示す。

水素ガスの45°Cにおける飽和溶解度は理科年表より、0.016 (cm³/cm³)とした。なお、この値は水1 cm³中に溶解するときの体積を0 °C、1 atmのときの体積に換算した値である。なお、水素ガスの溶解については瞬時平衡状態を前提としている。

分子拡散係数は、既往の文献に示された値の平均値をとり、7.05 × 10⁻⁹ m²/sを設定した。

分散長については、移行経路長を1.0 mとし、縦分散長を 1/10 倍、横分散長を 1/100 倍とした。

1.1.4 廃棄体領域からのガス発生に関する条件設定

設定したガス発生速度（RWMC(2020a)）を図 1-4 に示す。

期間	mol/year/m
0~25y	0.000E+00
25~50y	3.370E+00
50~60y	2.874E+00
60~150y	7.395E-01
150~325y	1.136E-01
325~1,000y	2.427E+01
1000~2,000y	1.189E+01
2000~5,000y	7.010E+00
5,000~10,000y	5.221E+00

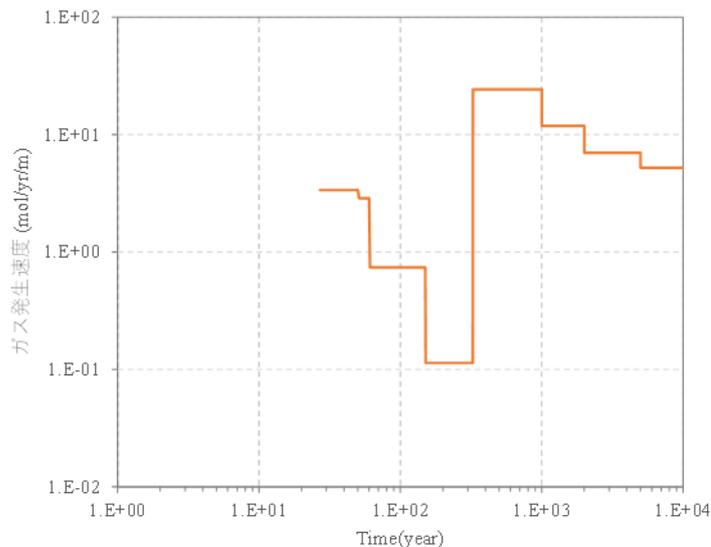


図 1-4 ガス発生速度の時間変化

1.2 感度解析の実施結果

1.2.1 解析ケース 1、2（ガス溶解の有無）

初期状態として水で完全に飽和した設定を与えた時のケース 1（ガス溶解を考慮）及びケース 2（ガス溶解を考慮しない）の解析結果は以下の通りである。

図 1-5 から図 1-8 に、評価地点におけるガス相圧力、水相圧力、水相飽和度の時間変化グラフを、また、図 1-9 から図 1-12 に、複数の時間断面におけるガス相圧力、水相飽和度分布を示す。

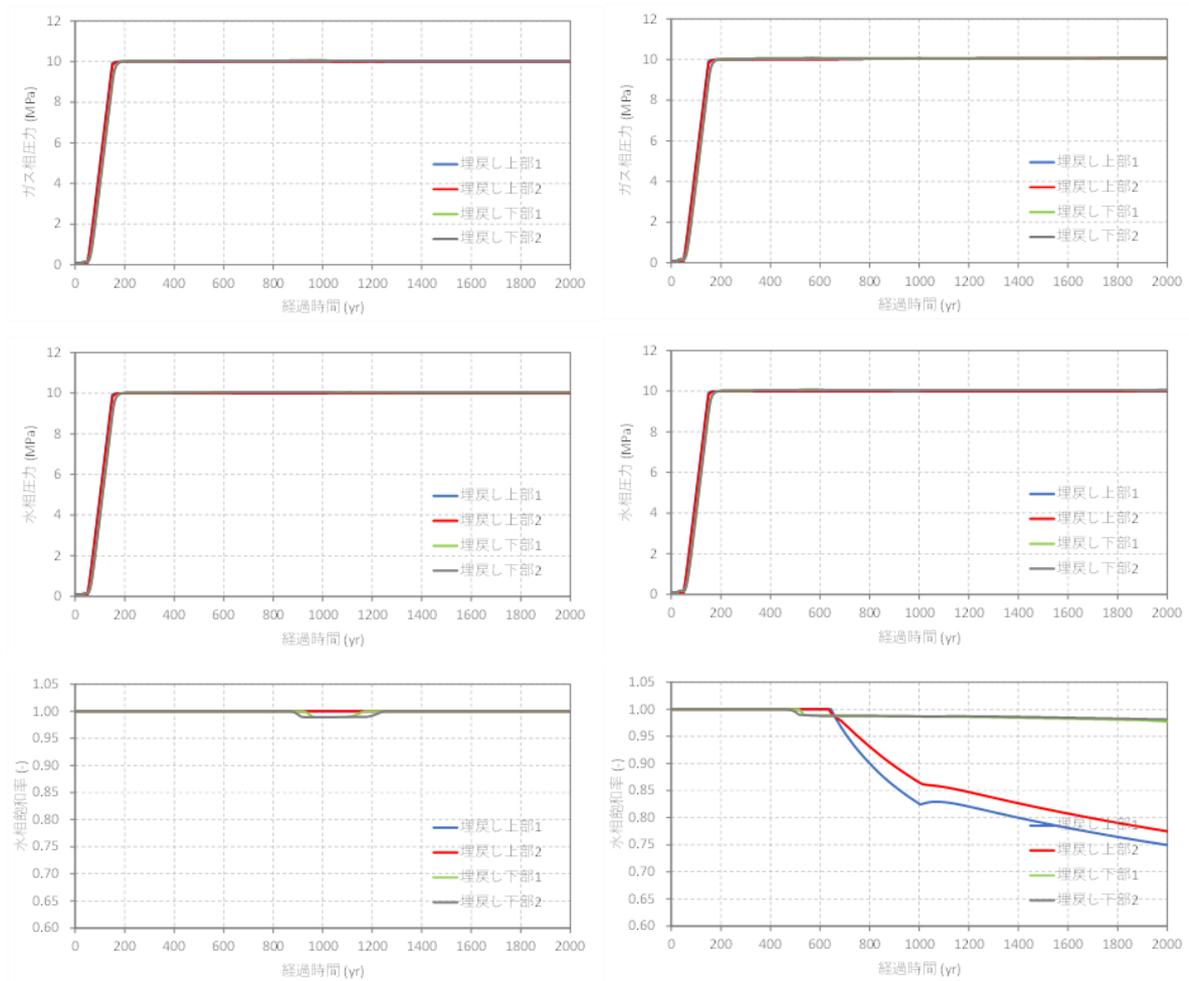


図 1-5 ケース 1、2 の埋め戻しにおけるガス相圧力、水相圧力、水相飽和度の時間変化 (左：ガス溶解を考慮、右：ガス溶解を考慮しない)

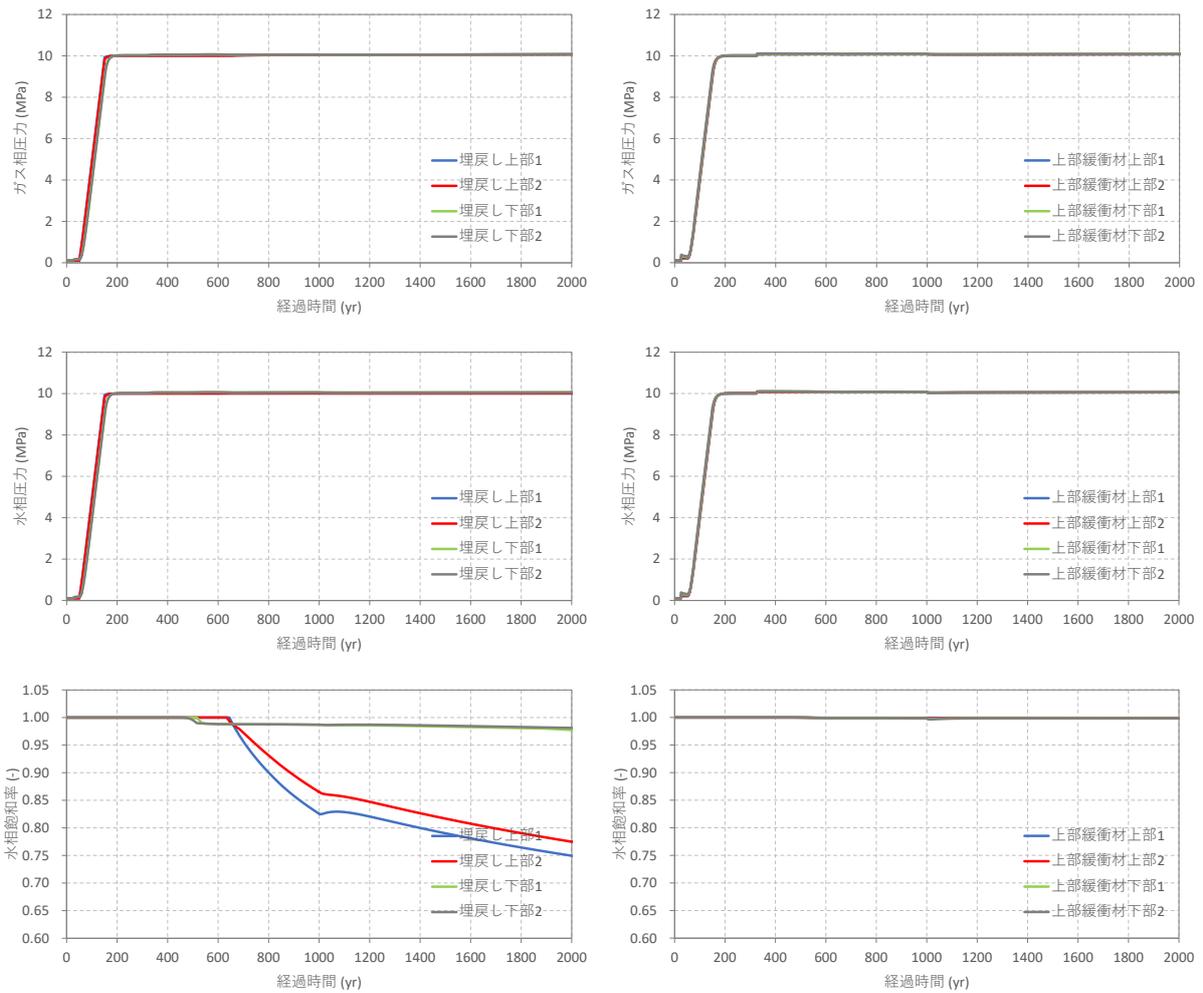


図 1-6 ケース 1、2 の上部緩衝材におけるガス相圧力、水相圧力、水相飽和度の時間変化
(左：ガス溶解を考慮、右：ガス溶解を考慮しない)

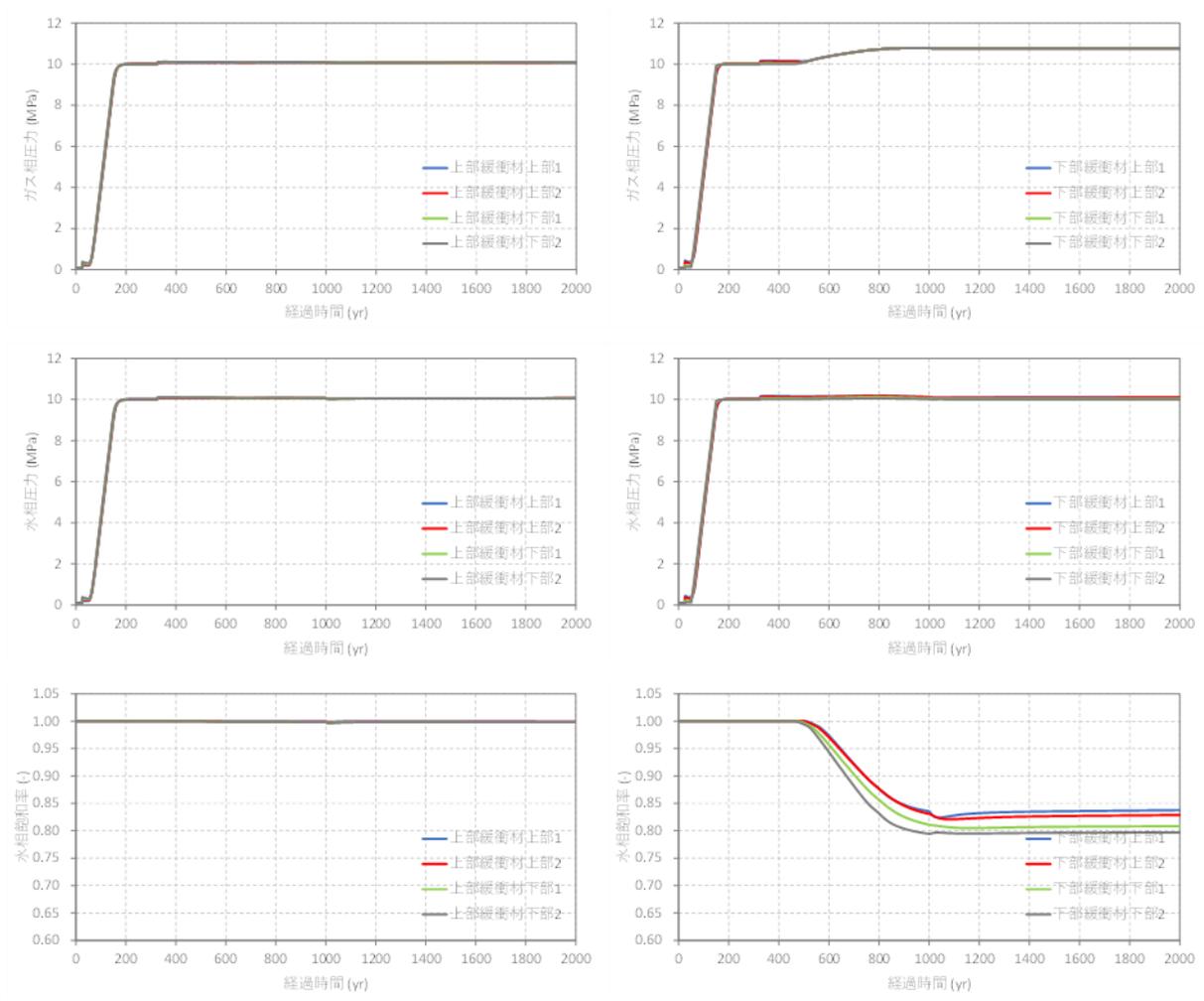


図 1-7 ケース 1、2 の下部緩衝材におけるガス相圧力、水相圧力、水相飽和度の時間変化 (左：ガス溶解を考慮、右：ガス溶解を考慮しない)

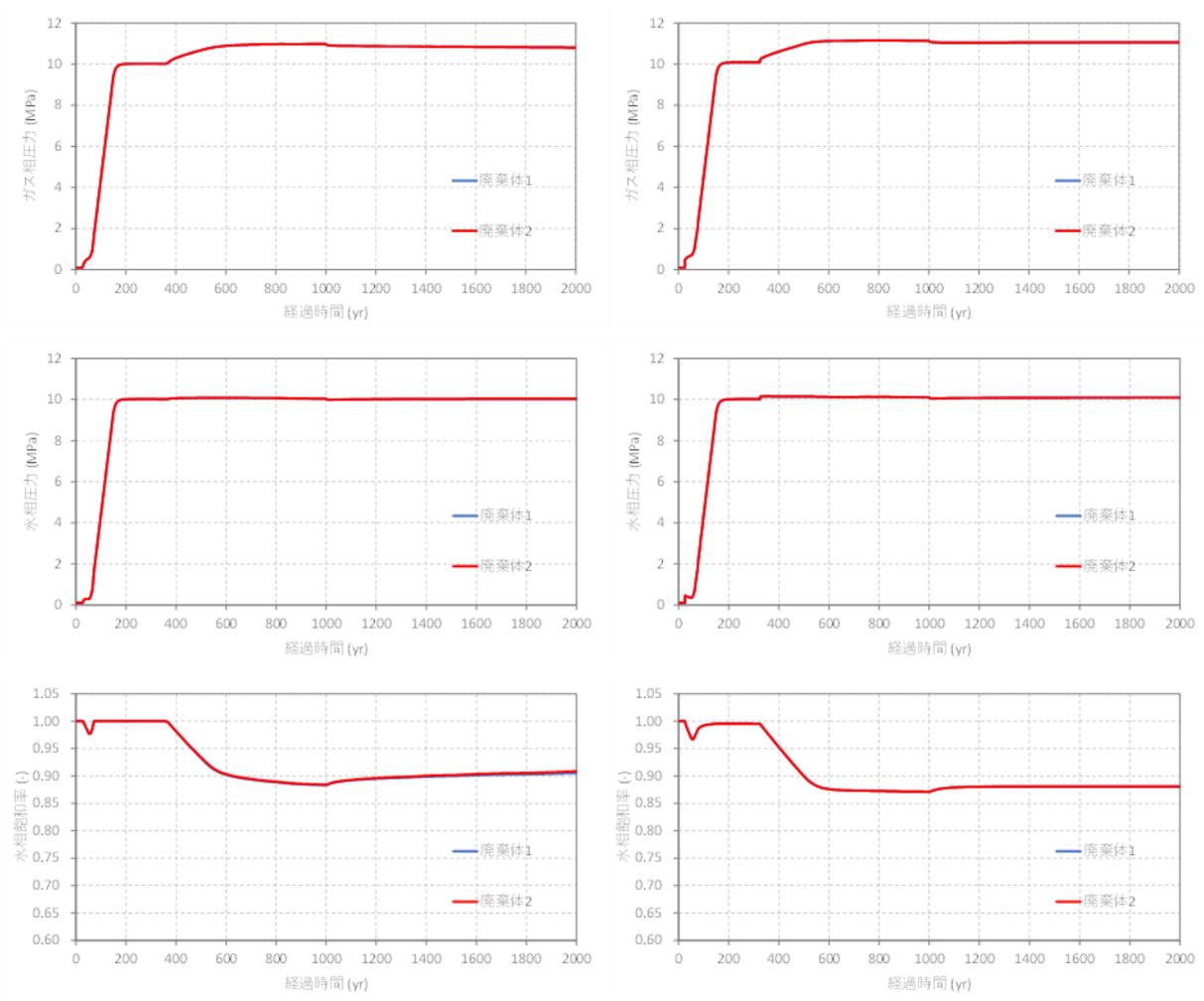


図 1-8 ケース 1、2 の廃棄体におけるガス相圧力、水相圧力、水相飽和度の時間変化
(左：ガス溶解を考慮、右：ガス溶解を考慮しない)

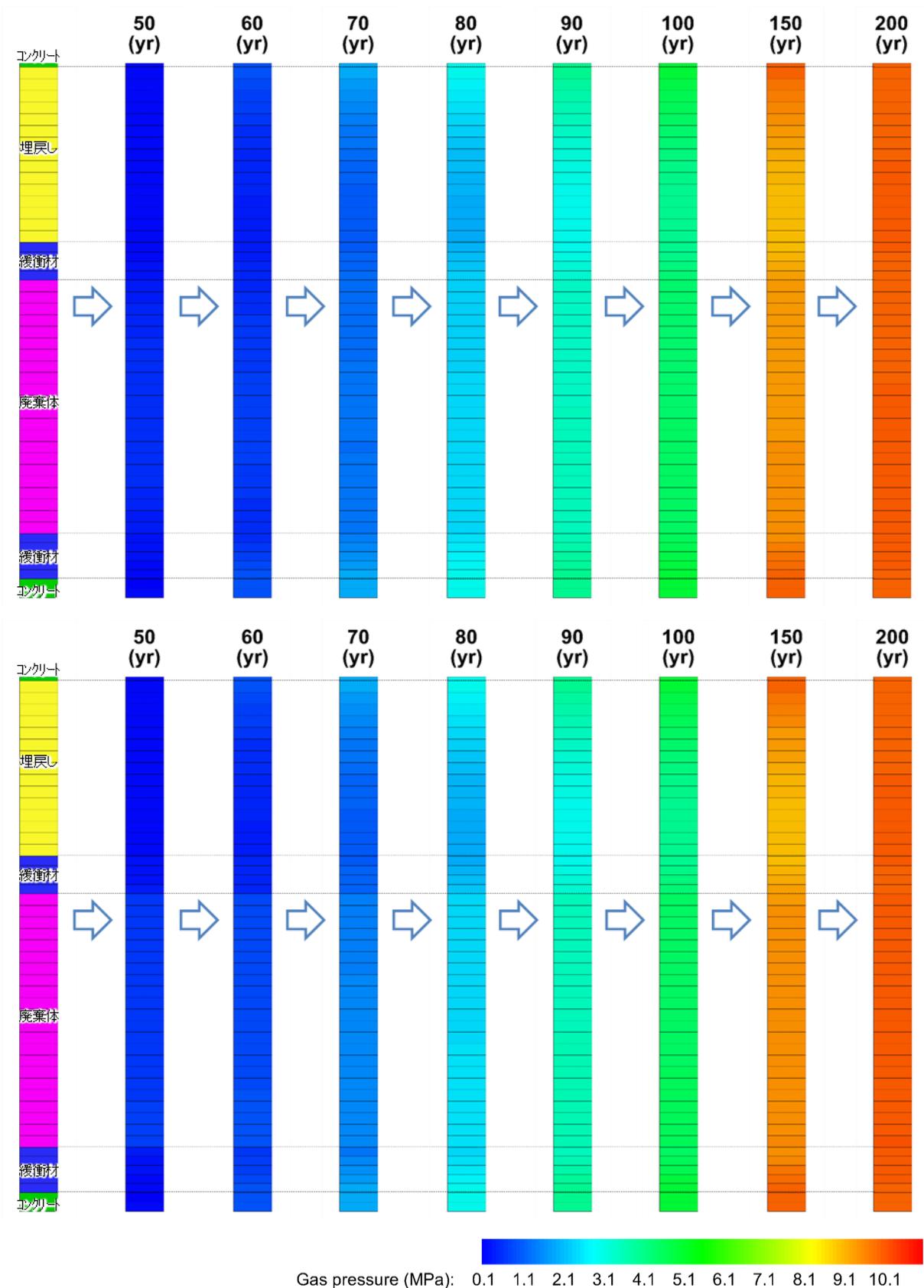


図 1-9 ケース 1、2 のガス相圧力分布の時間変化 (50 年~200 年)
 (上 : ガス溶解を考慮、下 : ガス溶解を考慮しない)

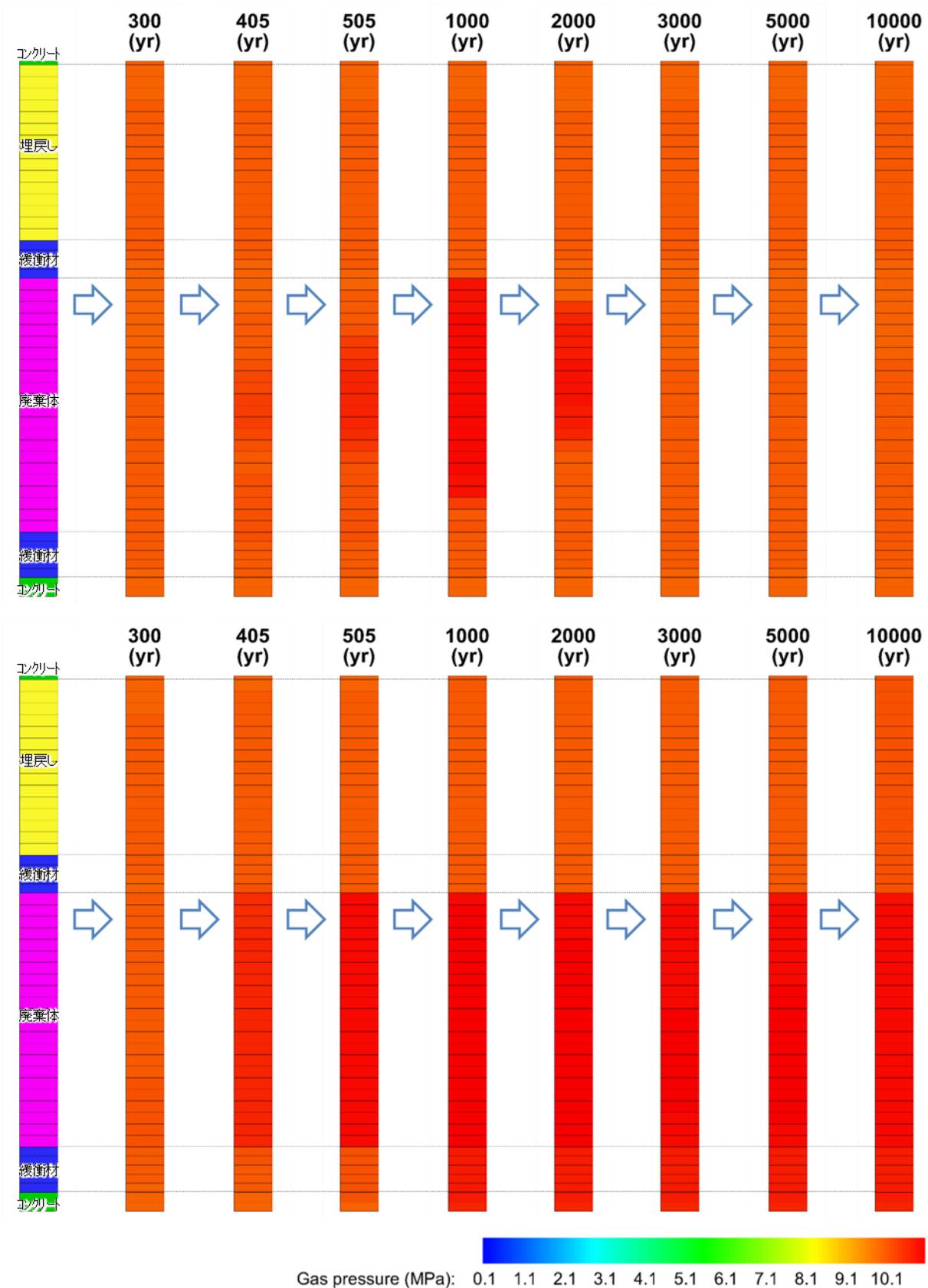


図 1-10 ケース 1、2 のガス相圧力分布の時間変化 (300 年~10000 年)
 (上 : ガス溶解を考慮、下 : ガス溶解を考慮しない)

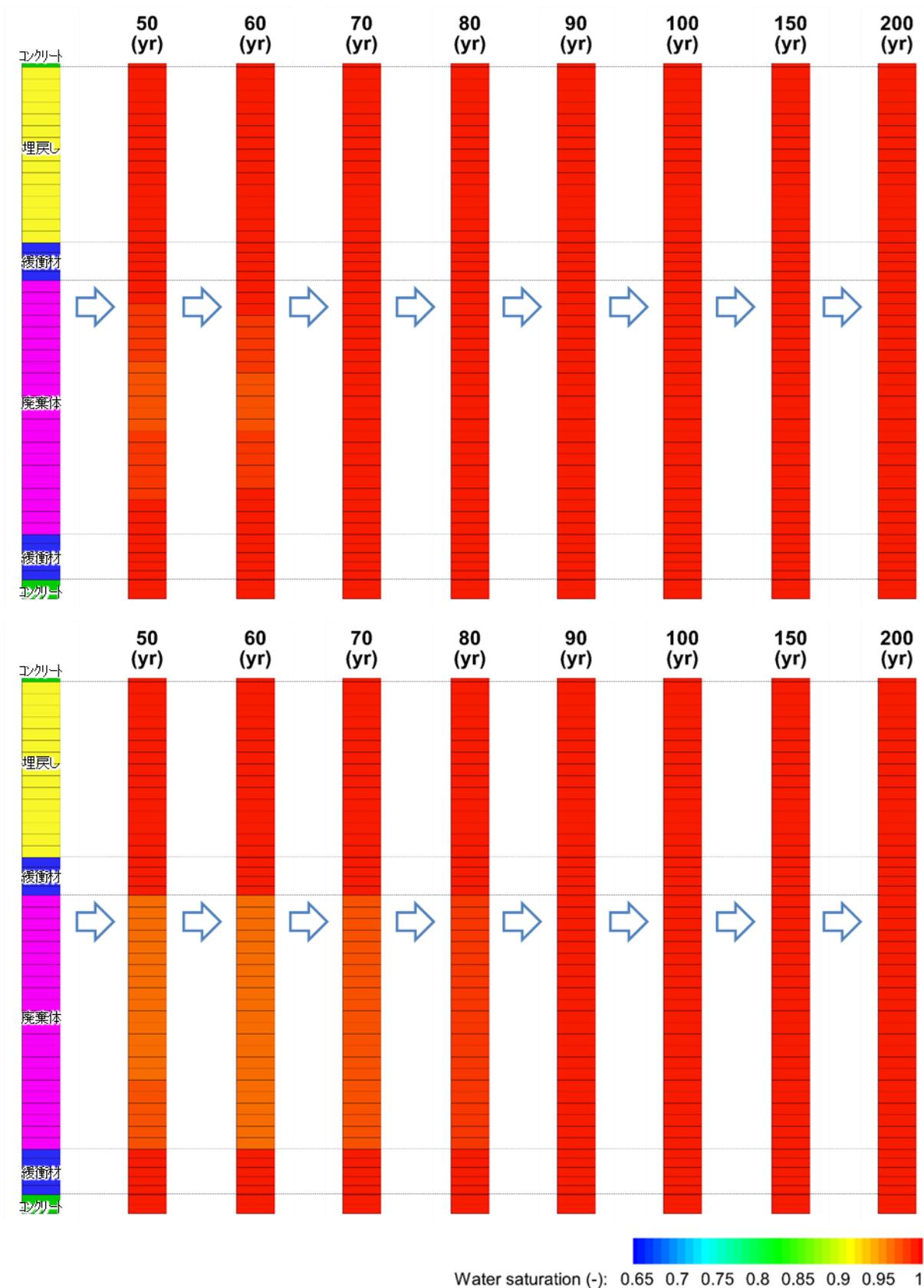


図 1-11 ケース 1、2 の水相飽和度分布の時間変化（50 年～200 年）
 （上：ガス溶解を考慮、下：ガス溶解を考慮しない）

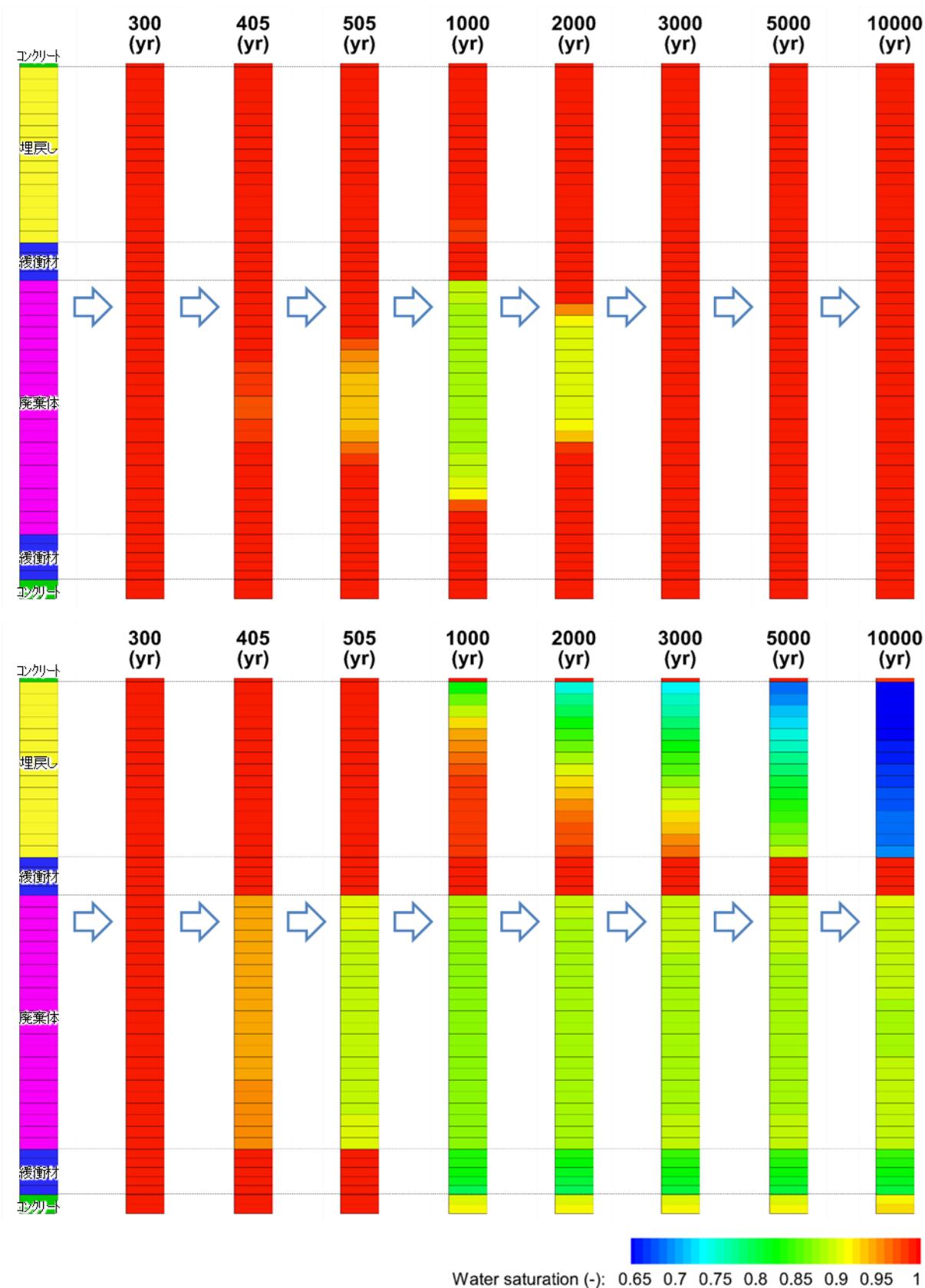


図 1-12 ケース 1、2 の水相飽和度分布の時間変化 (300 年~10000 年)
 (上 : ガス溶解を考慮、下 : ガス溶解を考慮しない)

1.2.2 解析ケース 3

初期不飽和状態としたケース 3 の結果を以下に示す。評価地点におけるガス相圧力、水相圧力、水相飽和度の結果の詳細図を図 1-13、図 1-14 に、複数の時間断面におけるガス相圧力、水相飽和度分布を図 1-15、図 1-16 にそれぞれ示す。

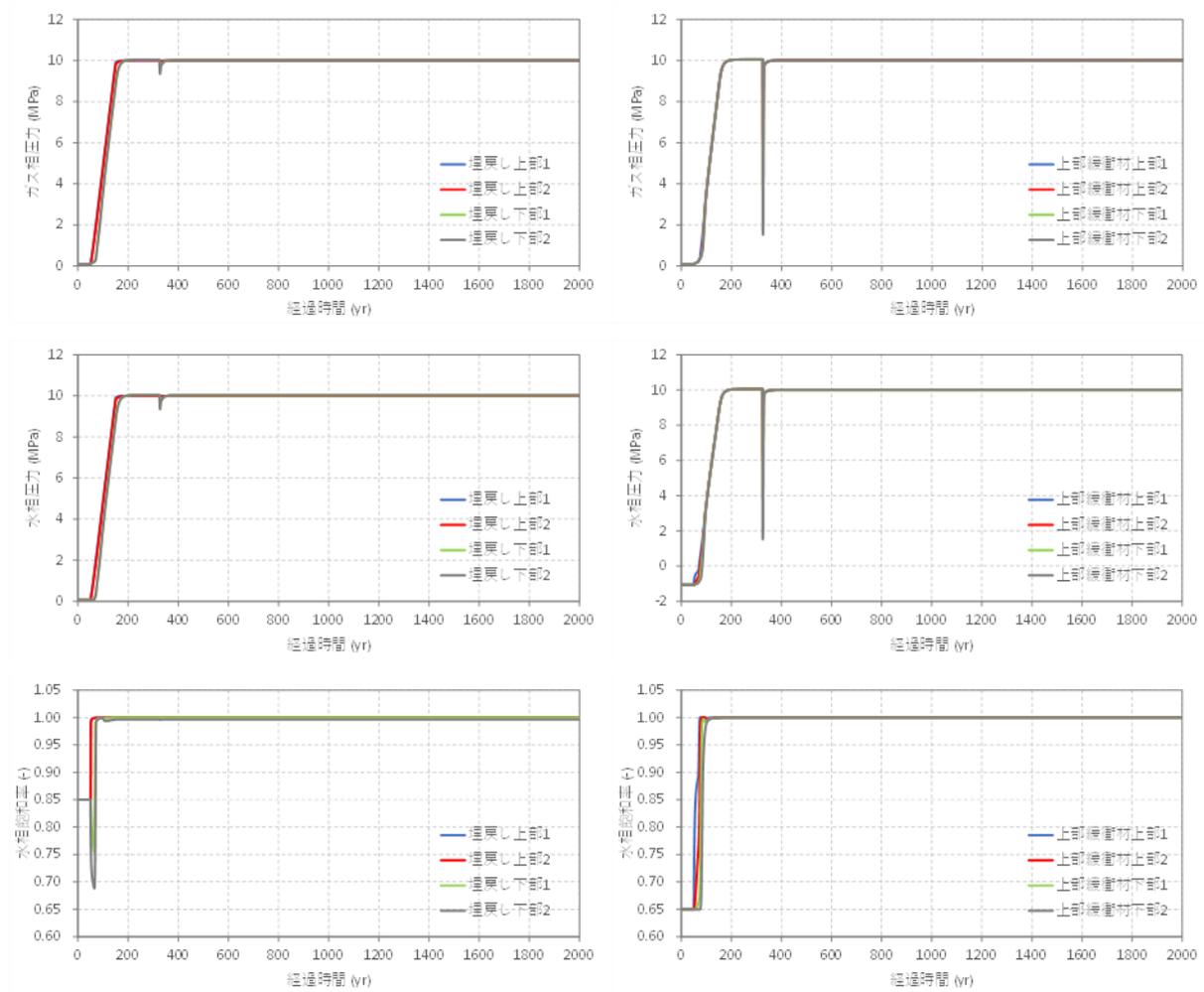


図 1-13 ケース 3 の埋め戻し、上部緩衝材におけるガス相圧力、水相圧力、水相飽和度の時間変化

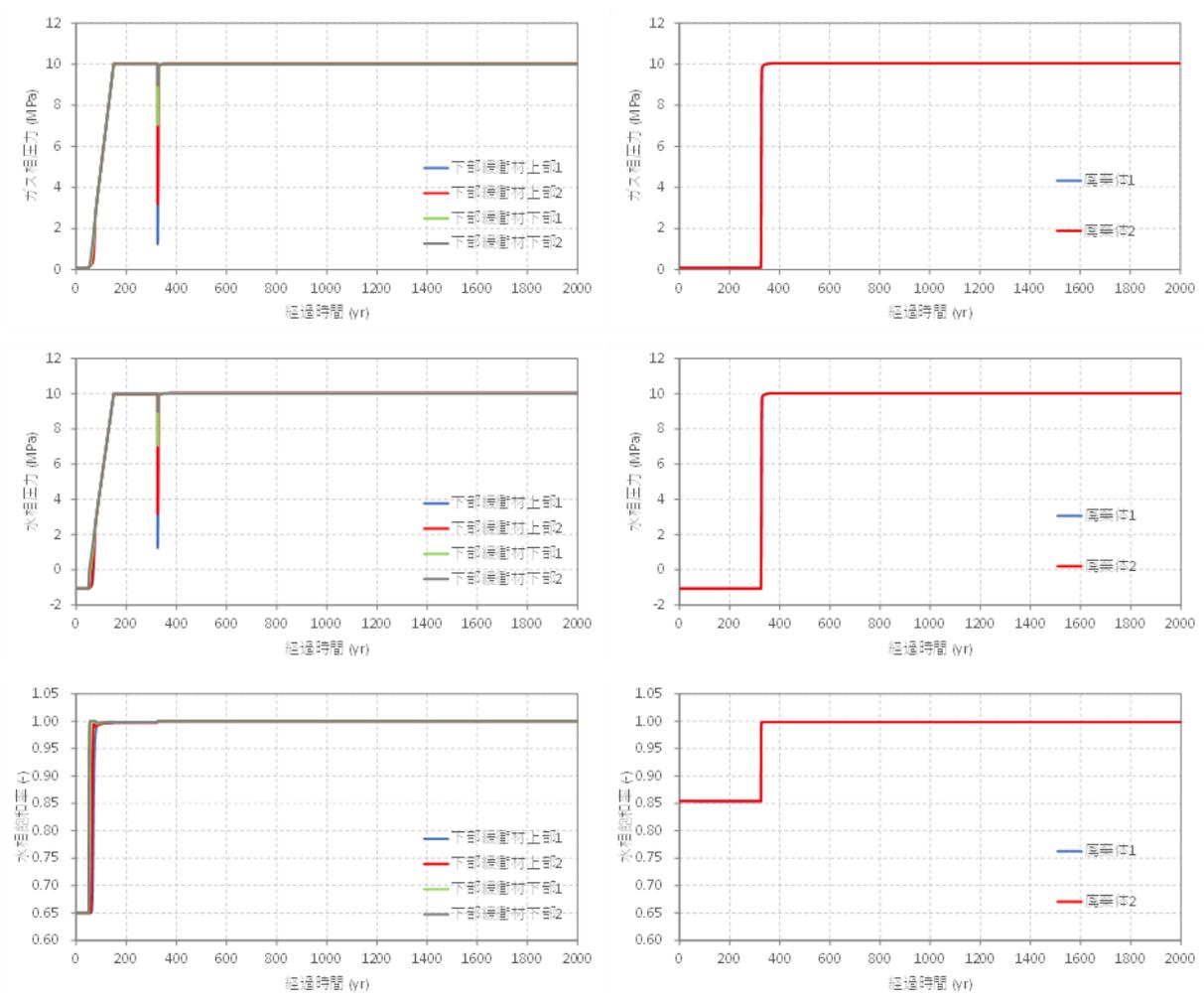


図 1-14 ケース 3 の下部緩衝材、廃棄体におけるガス相圧力、水相圧力、水相飽和度の時間変化

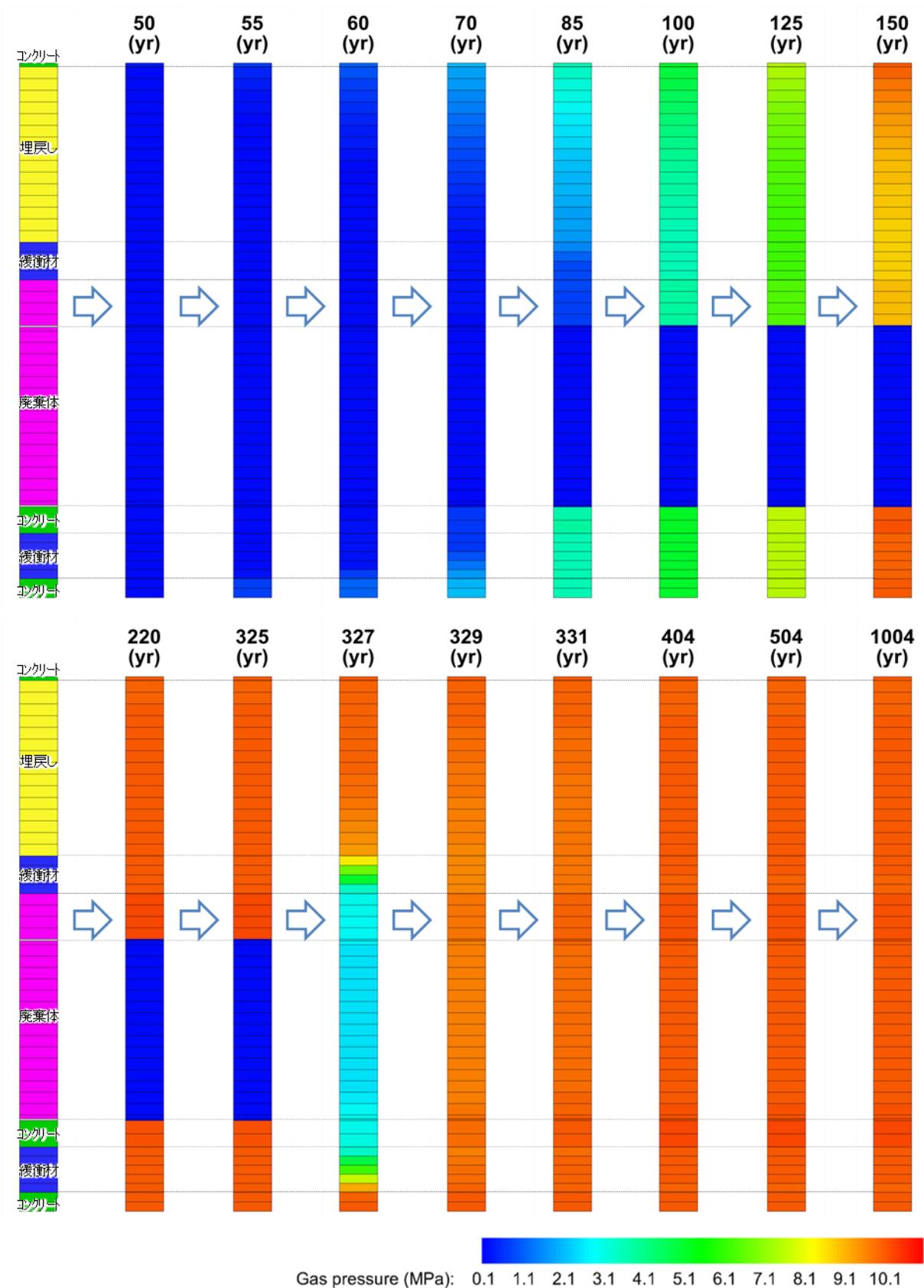


図 1-15 ケース 3 のガス相圧力分布の時間変化 (50 年～1000 年)

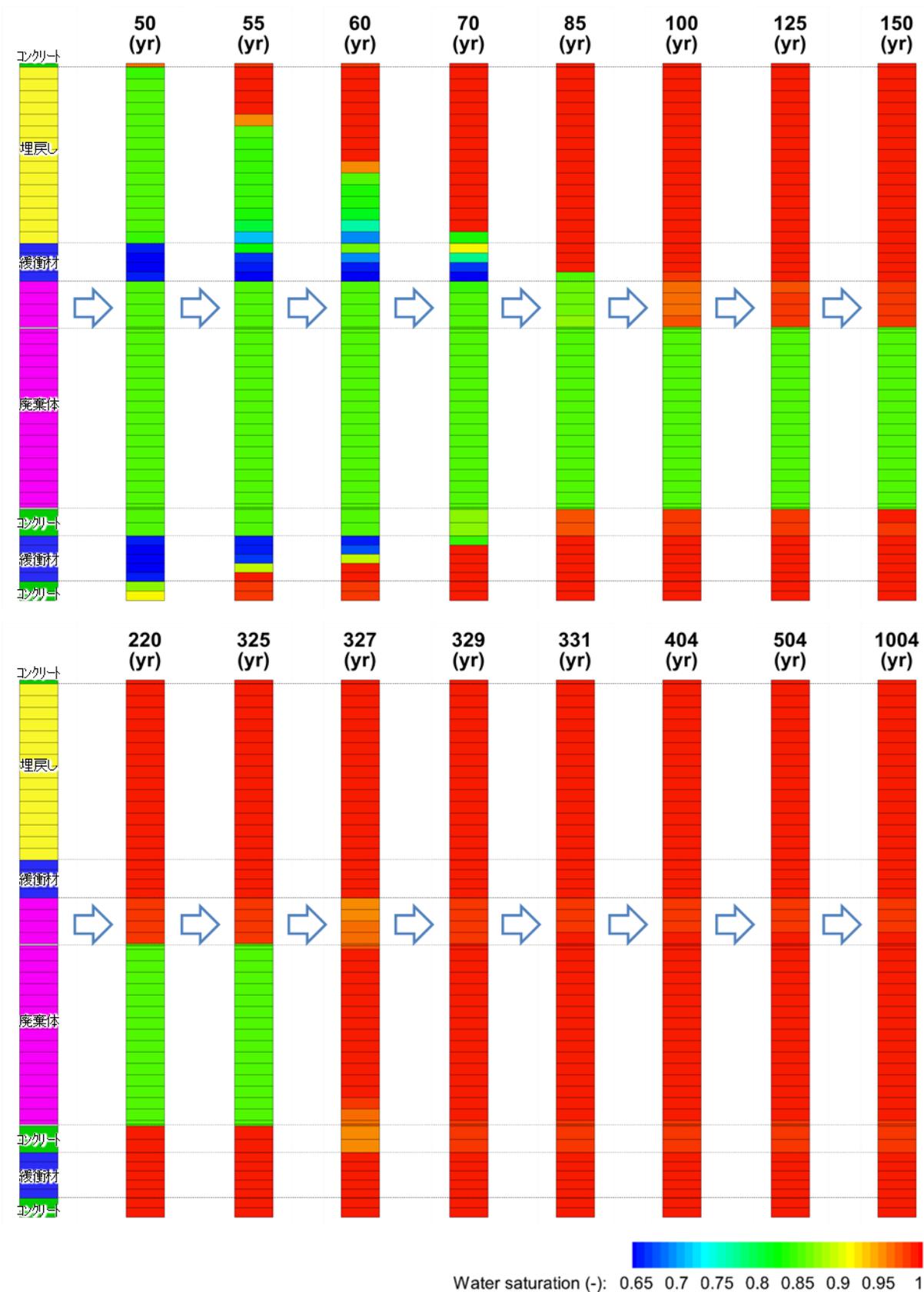


図 1-16 ケース 3 の水相飽和度分布の時間変化 (50 年~1000 年)

2. 状態設定に係る緩衝材の力学挙動試験に係る補足資料

2.1 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

今年度は、平成 30 年度の結果を踏まえて設定した試験手順・条件でモンモリロナイト含有率 80 % のケースについて三軸CU試験を実施した。

試験結果の詳細を示す。

2.1.1 圧密過程

モンモリロナイト含有率 80 % のケースにおいても前述のモンモリロナイト含有率 20 % と同様に、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 倍にするのは、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 1.3 Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 80 % のケースでは、通水圧を 30 kPa として十分な通水量を確認した (図 2-1)。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、637 kPa の軸応力が発生している。図 2-2 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 1500 kPa とした。

図 2-3 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段階的に変動させて、圧密変形がゼロとなるように制御した。その結果、圧密開始直前よりも 0.009 cm^3 程度圧密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 2-4 に B 値の測定結果を示す。図に示すように、側圧を 1630 kPa 程度から 1640 kPa まで増加させた際の背圧の変化を計測し B 値を算出した。その結果、0.95 以上の B 値が得られたため、十分に飽和していると判断した。

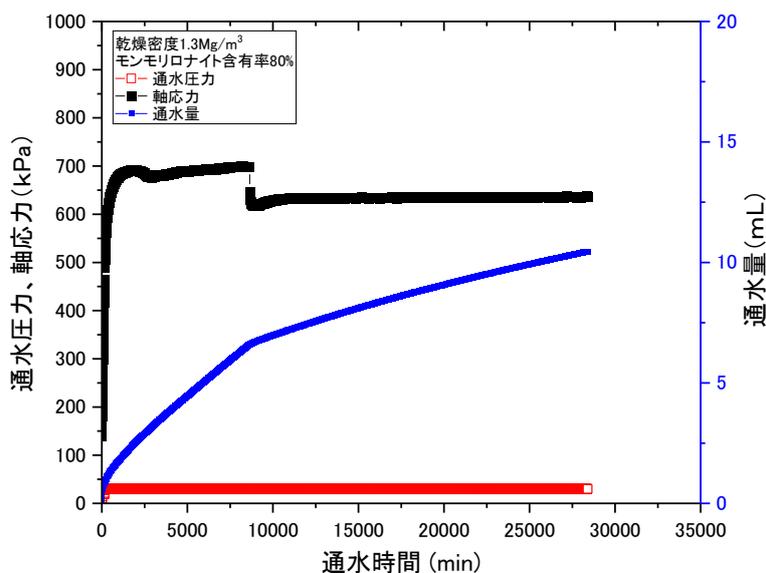


図 2-1 通水圧と通水量、軸応力の経時変化 (乾燥密度 1.3 Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 80%)

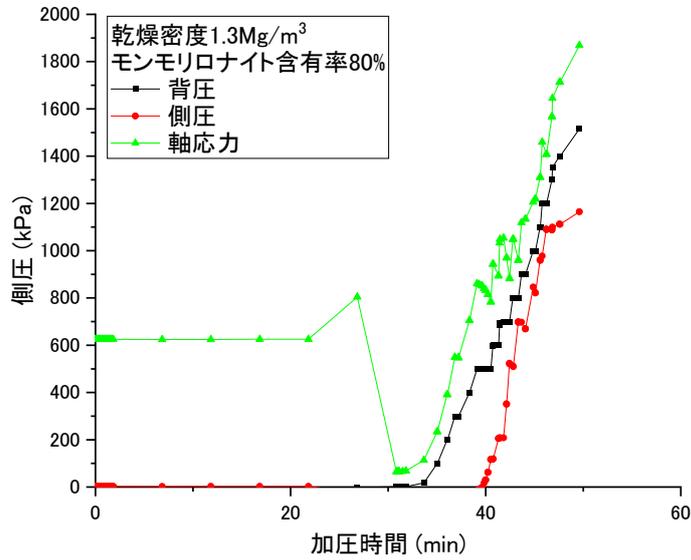


図 2-2 背圧付与時の側圧と軸応力の経時変化 (乾燥密度 1.3Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 80%)

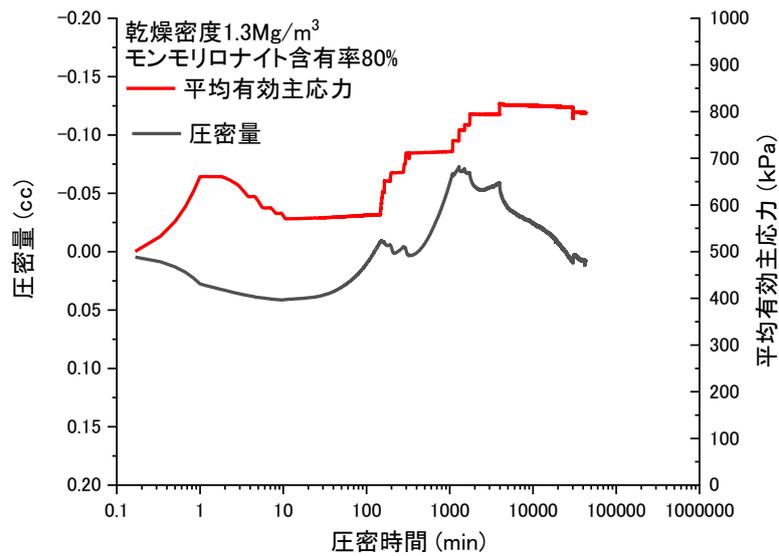


図 2-3 圧密曲線 (乾燥密度 1.3Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 80%)

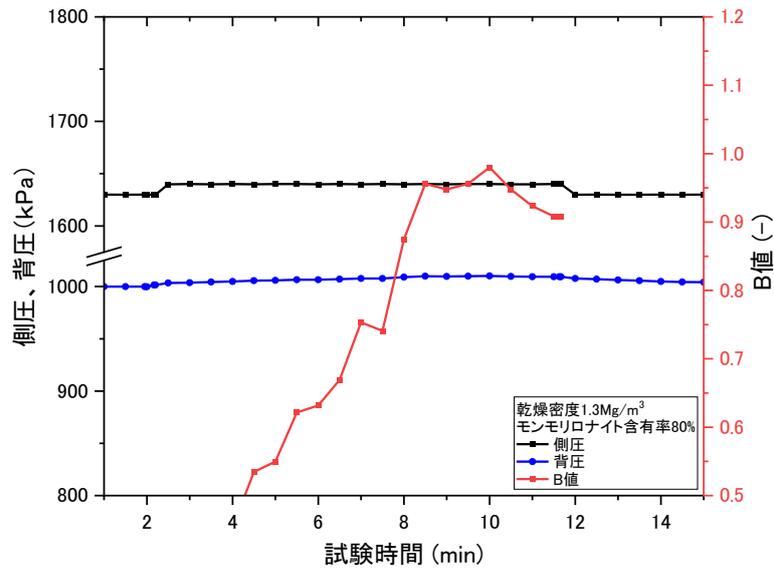


図 2-4 B 値の測定結果 (乾燥密度 1.3Mg/m³、モンモリロナイト含有率 80%)

乾燥密度 1.6 Mg/m³ のケースでは、通水圧は 40 kPa として、十分な通水量を確認した (図 2-5)。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、1500 kPa 程度の軸応力が発生している。図 2-6 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 1600 kPa 程度とした。図 2-7 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段階的に変動させ、圧密変形がゼロとなるように制御した。その結果、圧密開始直前よりも 0.079 cm³ 程度圧密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 2-8 に B 値の測定結果を示す。図に示すように、側圧を 1680 kPa 程度から 1690 kPa 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 1.0 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。

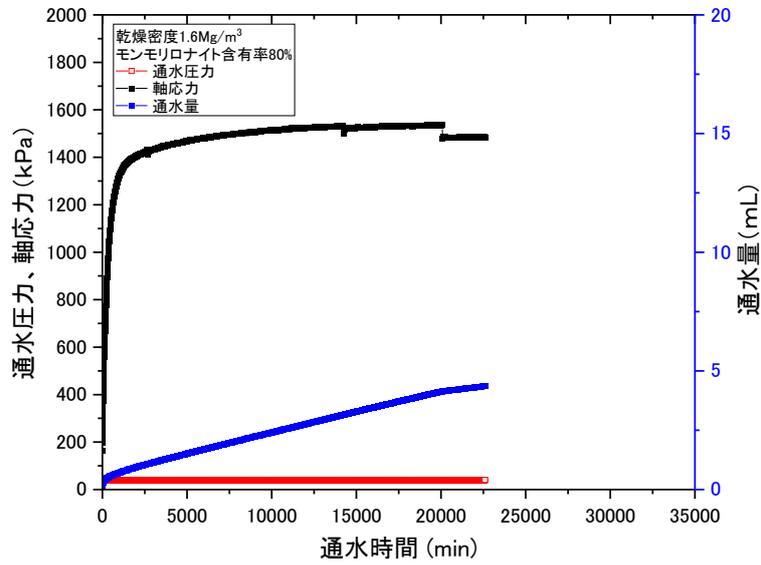


図 2-5 通水圧と通水量、軸応力の経時変化 (乾燥密度 $1.6\text{Mg}/\text{m}^3$ 、モンモロロナイト含有率 80%)

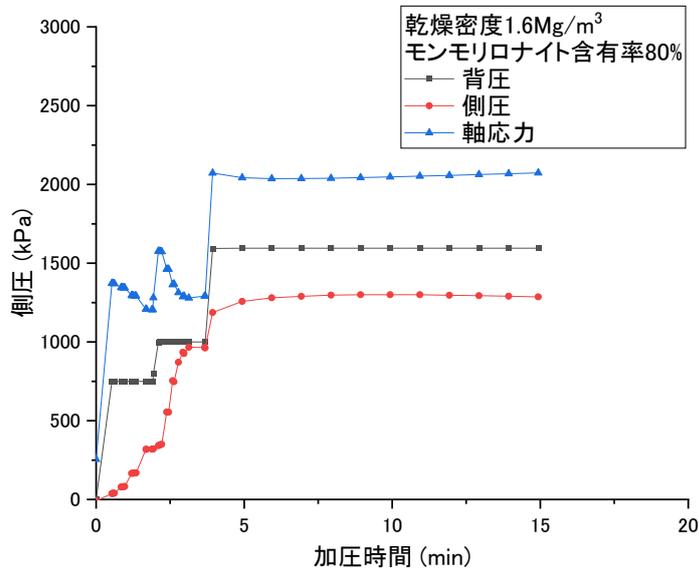


図 2-6 背圧付与時の側圧と軸応力の経時変化 (乾燥密度 $1.6\text{Mg}/\text{m}^3$ 、モンモロロナイト含有率 80%)

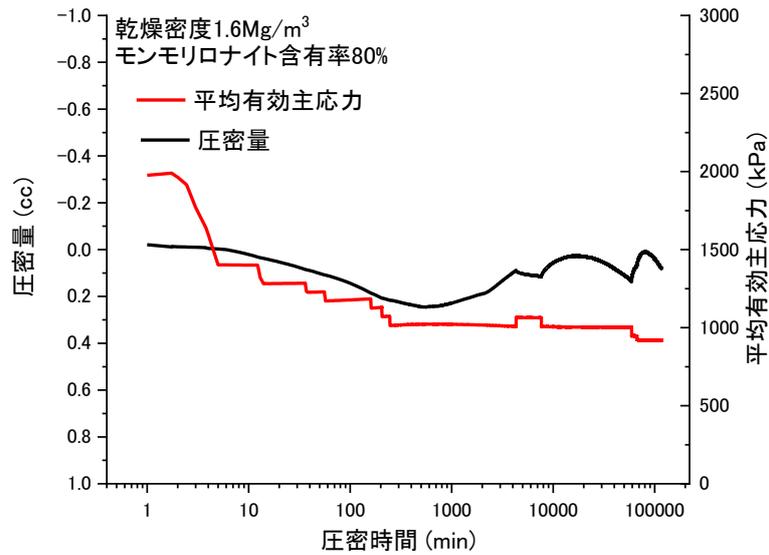


図 2-7 圧密曲線 (乾燥密度 1.6Mg/m³、モンモリロナイト含有率 80%)

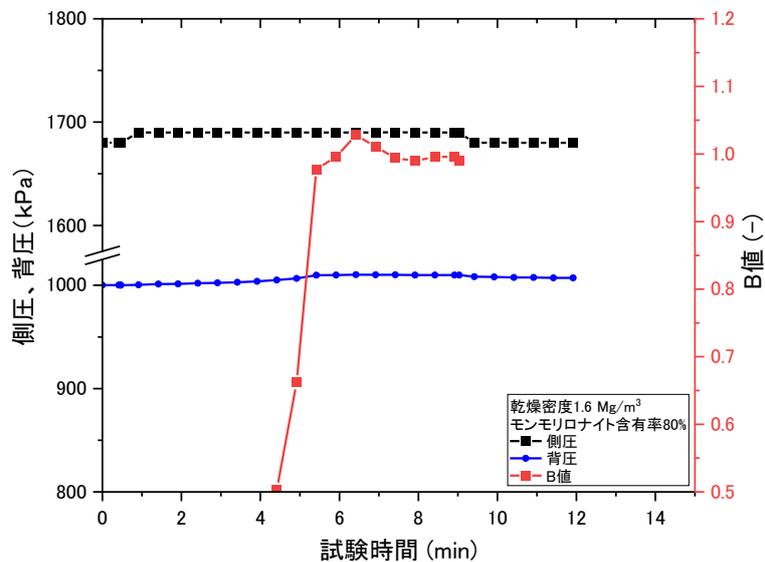


図 2-8 B 値の測定結果 (乾燥密度 1.6Mg/m³、モンモリロナイト含有率 80%)

乾燥密度 1.8 Mg/m³ のケースでは、通水圧は 50 kPa として、十分な通水量を確認した (図 2-9)。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、最大で約 5900 kPa 程度の軸応力が発生している。図 2-10 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 2700 kPa とした。図 2-11 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段階的に変動させて、圧密変形がゼロとなるように制御した。その結果、圧密開始直前よりも 0.162 cm³ 程度圧密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 2-12 に B 値の測定結果を示す。図に示すように、側圧を 2050 kPa 程度から 2060 kPa 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 1.0 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。

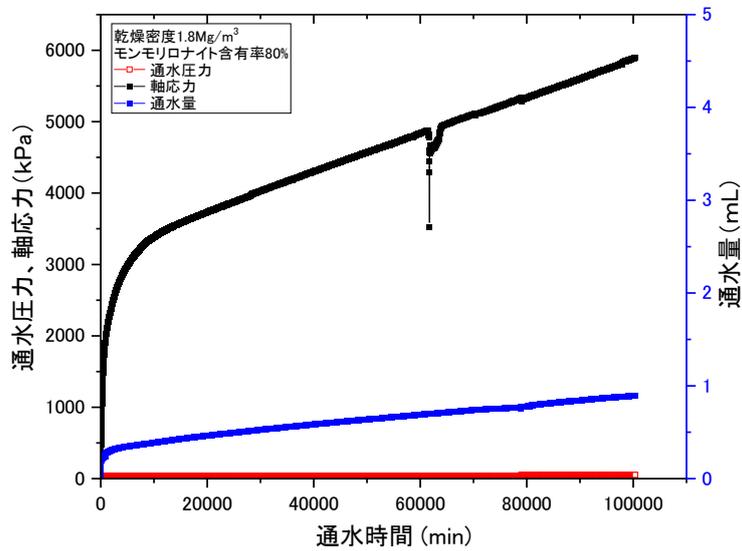


図 2-9 通水圧と通水量、軸応力の経時変化 (乾燥密度 1.8Mg/m³、モンモロロナイト含有率 80%)

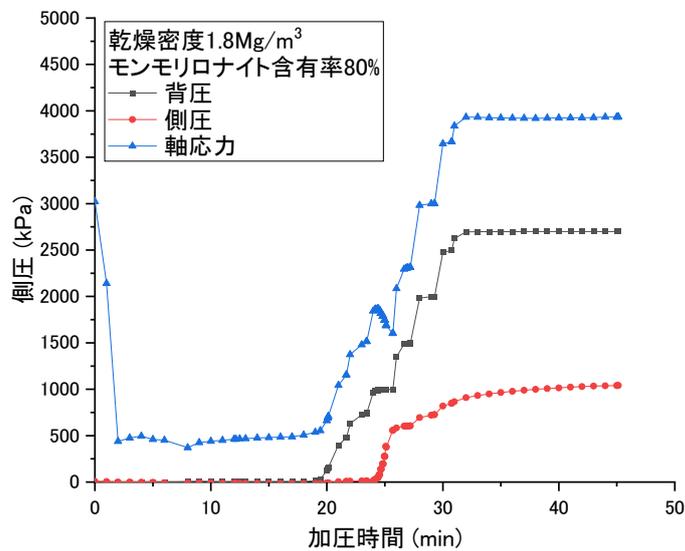


図 2-10 背圧付与時の側圧と軸応力の経時変化 (乾燥密度 1.8Mg/m³、モンモロロナイト含有率 80%)

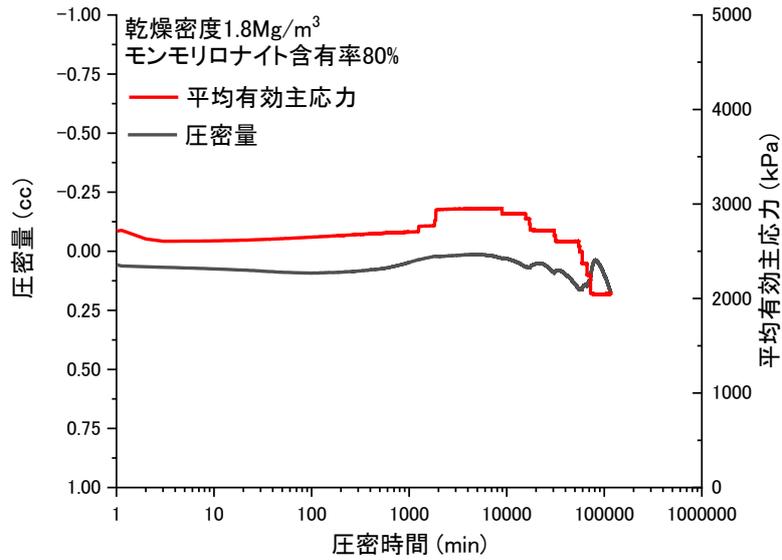


図 2-11 圧密曲線 (乾燥密度 1.8Mg/m³、モンモリロナイト含有率 80%)

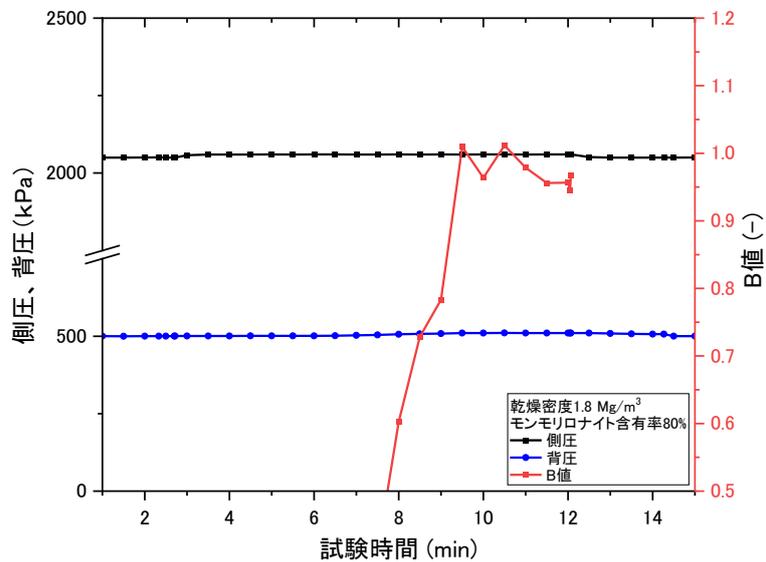


図 2-12 B 値の測定結果 (乾燥密度 1.8Mg/m³、モンモリロナイト含有率 80%)

2.1.2 せん断過程

前述の圧密過程後にひずみ速度 0.005 %/min で軸ひずみが 20 %になるまでせん断を実施した。せん断時間は 4000 min である。せん断方法は非排水条件であり、側圧一定で軸応力を増加させ

る方式として、せん断中の全応力の側圧と軸応力、さらに間隙水圧計による過剰間隙水圧を計測することで、有効応力での軸応力と側圧を取得した。

図 2-13 に乾燥密度 1.3 Mg/m^3 の場合のせん断応力、平均有効主応力、過剰間隙水圧の経時変化を示す。せん断応力がピーク強度を示した後に減少傾向を示し、せん断強度が減少している間に過剰間隙水圧が減少し、負圧に至っていることが分かる。この傾向は、重い過圧密土の典型的なせん断挙動と言える。

図 2-14 には、乾燥密度 1.6 Mg/m^3 の場合のせん断応力、平均有効主応力、過剰間隙水圧の経時変化を示す。せん断挙動は概ね乾燥密度 1.3 Mg/m^3 のケースと同様である。これも過圧密土の典型的なせん断挙動と言える。図 2-15 には、乾燥密度 1.8 Mg/m^3 の場合のせん断応力、平均有効主応力、過剰間隙水圧の経時変化を示す。他のケースと同様に、せん断応力がピーク強度を示した後に減少傾向を示し、過剰間隙水圧も減少している。さらに、間隙水圧も負圧に至っており、重い過圧密土のせん断挙動と言える。

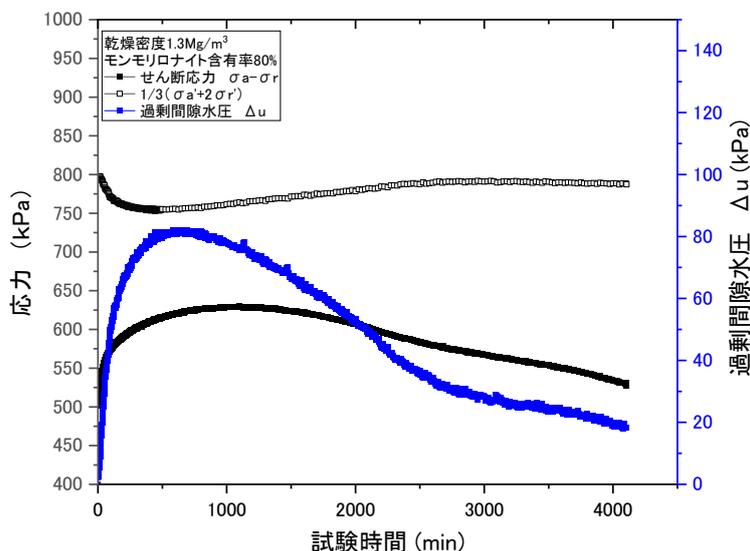


図 2-13 せん断応力、平均有効主応力、過剰間隙水圧の経時変化 (乾燥密度 1.3 Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 80%)

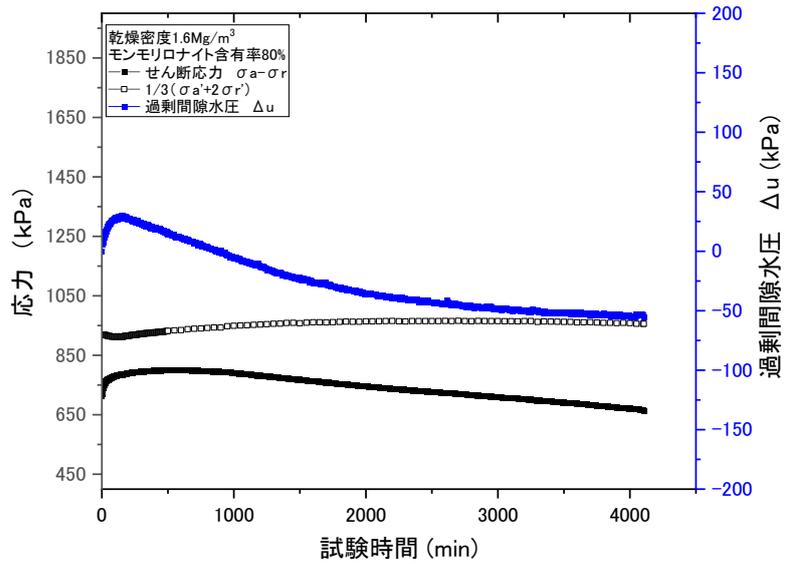


図 2-14 せん断応力、平均有効主応力、過剰間隙水圧の経時変化 (乾燥密度 1.6 Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 80%)

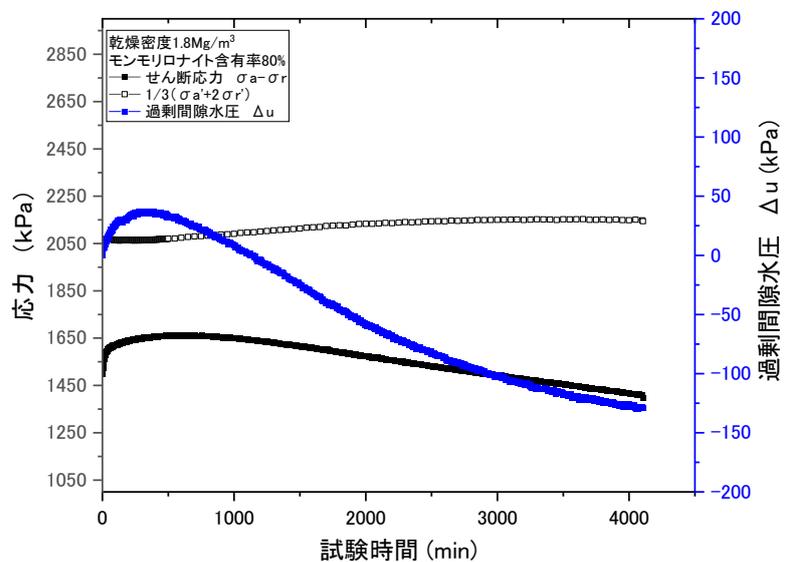


図 2-15 せん断応力、平均有効主応力、過剰間隙水圧の経時変化 (乾燥密度 1.8 Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 80%)

図 2-16 には、乾燥密度 1.3 Mg/m^3 の場合の軸ひずみとせん断応力の関係を示す。応力ひずみ関係において、軸ひずみが 5%程度でピーク強度を示し、その後、強度が漸減していることが分かる。モンモリロナイト含有率 20%のケースと比較すると、ピーク強度を発現するひずみが大いだが、これは、モンモリロナイトの含有率が高いために剛性が低く可塑性に富んでいるためであると考えられる。図 2-17 には、乾燥密度 1.6 Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 80% の場合の軸

ひずみとせん断応力の関係を示す。応力ひずみ関係は、3%でピーク強度となっている。図 2-18 には、乾燥密度 1.8Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 80% の場合の軸ひずみとせん断応力の関係を示す。軸ひずみが 3% 辺りでピーク強度を示して、せん断応力が減少傾向を示している。これは、他のケースと同様の傾向であった。

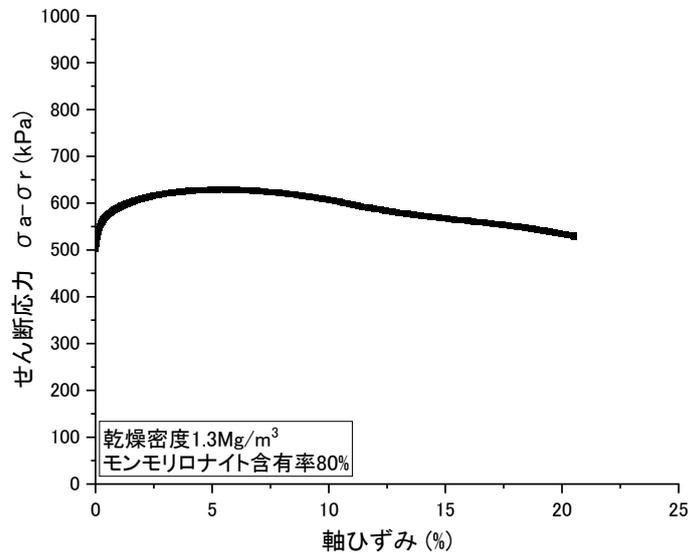


図 2-16 軸ひずみとせん断応力の関係 (乾燥密度 1.3Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 80%)

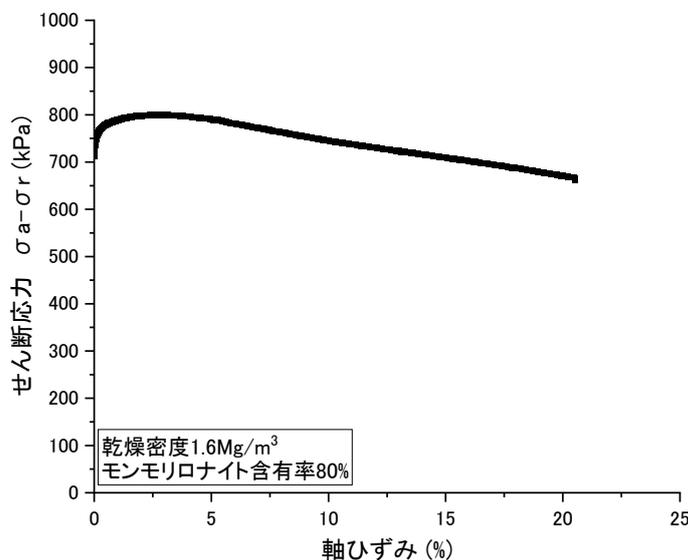


図 2-17 軸ひずみとせん断応力の関係 (乾燥密度 1.6Mg/m^3 、モンモリロナイト含有率 80%)

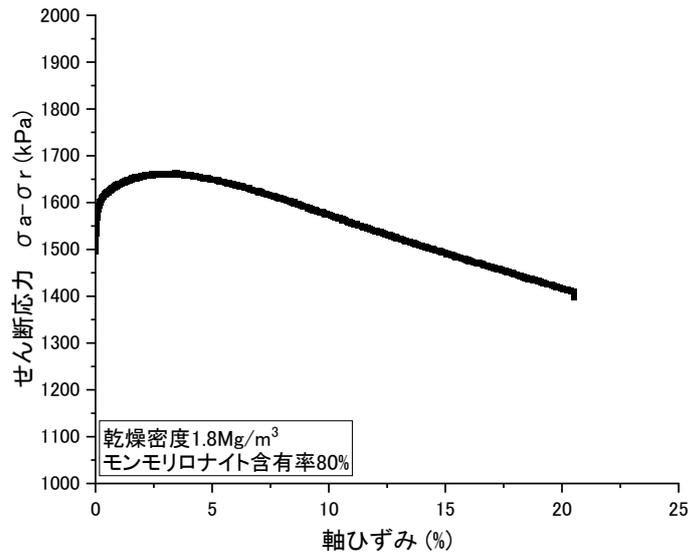


図 2-18 軸ひずみとせん断応力の関係 (乾燥密度 1.8Mg/m³、モンモリロナイト含有率 80%)

図 2-19 には、乾燥密度 1.3 Mg/m³ の有効応力経路を示す。圧密過程の有効応力の変化も示す。図中には、 K_0 を 0.6 としてせん断過程の残留強度が限界状態線とした場合の関口・太田モデルの先行時と残留時の降伏曲面も示す。図から、降伏曲面はモンモリロナイト含有率が 20 % のケースと比べ偏平である。また、供試体作製時に非常に高いせん断応力が発生している可能性があることが分かる。そのせん断応力を維持した応力比で三軸膨潤圧試験と圧密を行ったため、 K_0 線よりも高い、過圧密領域からせん断を開始した状態となっている。応力点が初期降伏曲面（先行時降伏曲面）に至った後に、降伏曲面が縮小しながら軟化挙動を示し残留時の降伏曲面に至っていることが分かる。

図 2-20 には、乾燥密度 1.6 Mg/m³、モンモリロナイト含有率 80 % の場合の有効応力経路を示す。なお、図 2-19 に示した乾燥密度 1.3 Mg/m³、モンモリロナイト含有率 80 % の場合の有効応力経路も併せて示す。この図から、高いせん断応力を保持したままで、過圧密領域からせん断が開始され、緩やかに降伏曲面を拡大させながら限界状態に至っていることが分かる。

図 2-21 には、乾燥密度 1.8 Mg/m³、モンモリロナイト含有率 80 % の場合の軸ひずみとせん断応力の関係を示す。なお、図 2-19、図 2-20 に示した乾燥密度 1.3 Mg/m³ と 1.6 Mg/m³、モンモリロナイト含有率 80 % の場合の有効応力経路も併せて示す。この場合も、他のケースと同様に、高いせん断応力を保持したままで、過圧密領域からせん断が開始され、緩やかに降伏曲面を拡大させながら限界状態に至っていることが分かる。

このモンモリロナイト含有率 20 % の 3 ケースでは、限界状態応力比が、1.07 から 1.28 程度であったが、モンモリロナイト含有率 80 % の場合では 0.65 から 0.70 程度であった。これは、モンモリロナイト含有率 20 % の場合は細粒分が 20 % 程度のシルト質粘土と同程度の限界状態応力比であり、モンモリロナイト含有率 80 % は粘性土と同程度の限界状態応力比と言える。このため、モンモリロナイト含有率が一定の割合を下回ると、膨潤性鉱物の力学挙動よりも、非膨潤性鉱物の力学挙動が支配的となる可能性があることを示唆している。

なお、図 2-19 から図 2-21 に示した降伏曲面は、関口・太田モデルを仮定したもので、式 (2-1) で表され、各パラメータは表 2-1 に示すとおりである。

$$q = \pm \frac{q_0}{p'_0} p' \mp Mp' \ln \left(\frac{p'}{p'_0} \right) \quad (2-1)$$

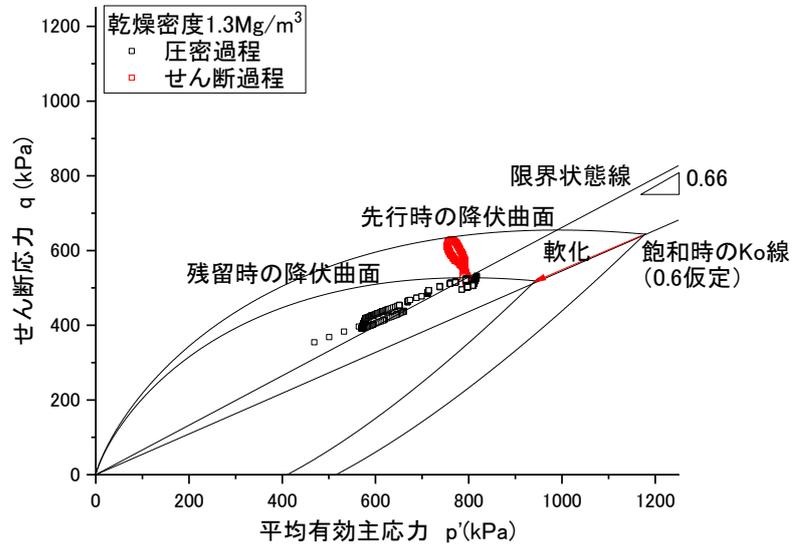


図 2-19 有効応力経路 (乾燥密度 1.3Mg/m³、モンモリロナイト含有率 80%)

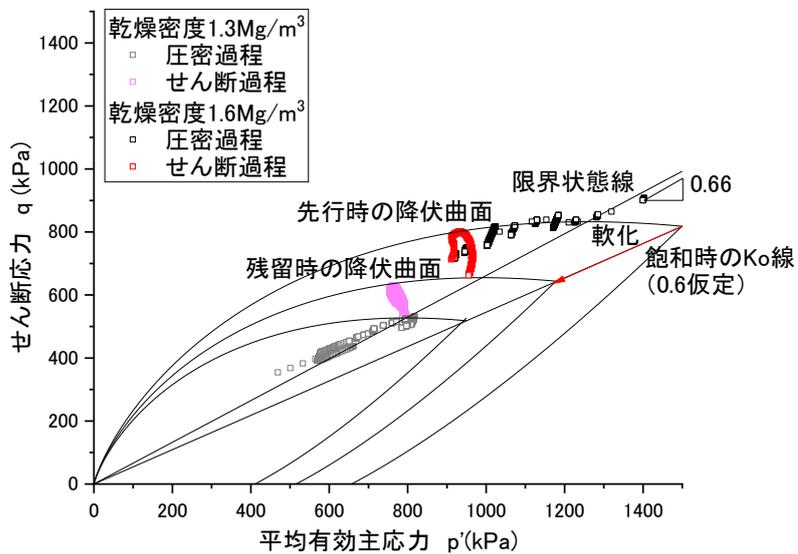


図 2-20 有効応力経路 (乾燥密度 1.6Mg/m³、モンモリロナイト含有率 80%)

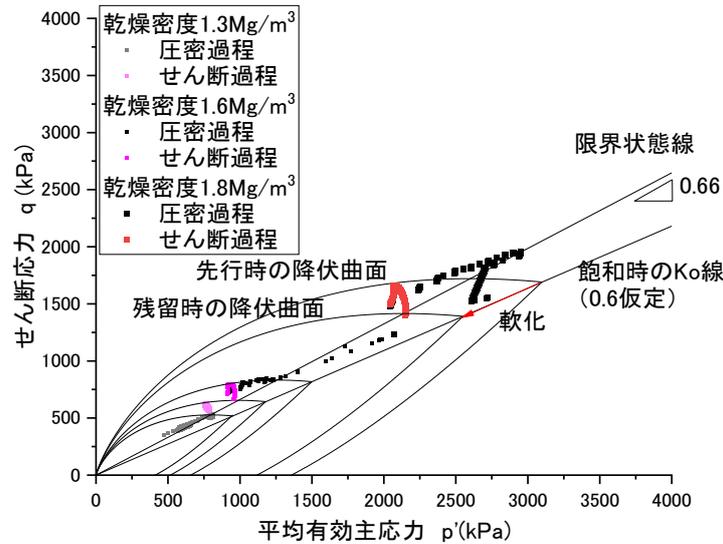


図 2-21 有効応力経路 (乾燥密度 1.8Mg/m³、モンモリロナイト含有率 80%)

表 2-1 関口・太田モデルの降伏曲面のパラメータ

モンモリロナイト含有率	20		
乾燥密度 (Mg/m ³)	1.3	1.6	2.0
$\frac{q_0}{p'_0} = \frac{3(1-K_0)}{1+2K_0}$	0.5454		
p'_0 (kPa)	69	345	690
M	1.28	1.07	1.15

図 2-19 から図 2-21 に示した有効応力経路は、既往の研究に比べてせん断のスタート位置の応力比 q/p' が高い位置に存在している。これは、モンモリロナイト含有率 20 % のケースと同様であった。このことから、一般的に拘束圧をアプライ前に設定する三軸試験方法を適用すると、ベントナイト系人工バリア材料はこの高い初期応力によって変形する可能性がある。

本検討における供試体は、ブロック作製以降の応力履歴は全て計測しているため、この初期応力が高い状態はブロック作製時に起因するものと考えられる。本試験で採用した不飽和締固め土である供試体を、変形を拘束して飽和させた場合、ブロック作製時の応力状態が保持されて、高い初期せん断応力を示すため、重い過圧密で初期せん断応力が高くなるものと考えられる。

さらに、 K_0 を 0.6 としてせん断過程の残留強度が限界状態線とした場合の関口・太田モデルの先行時と残留時の降伏曲面を描くと、乾燥密度 1.6 Mg/m³ と 1.8 Mg/m³ の圧密過程のストレスパスが先行時の降伏曲面の外側に存在する。理論上、先行時の降伏曲面の外側に応力点が存在することは許容されないため、実際は、図 2-20 及び図 2-21 に示した先行時の降伏曲面の外側に存在しているが、圧密過程に発生するせん断によって軟化（降伏曲面の縮小）して、せん断初期には図 2-20 及び図 2-21 に示した先行時の降伏曲面となったものとするのが妥当である。このことは、圧密過程の仕様として、ブロック作製時の形状を維持するように側圧を変動させるというやり方が、結果として繰り返しせん断の応力履歴を与えていることを意味している。ベントナイト系人工バリア材料のせん断試験手順として、最も合理的なやり方をどのようにしたら良いかは、

今後の課題と言える。案としては、三軸飽和セルでの応力を参考にして等方圧密圧力を決定し、確実に限界状態線よりも下側からせん断を開始して、かつ正規状態、若しくは過圧密状態を制御できるように圧力制御で圧密を行い、圧密が終了したらせん断を行うという方法が考えられる。

図 2-22 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、全てのケースで袈裟切り状の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：80%			
	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 2-22 せん断後の供試体の状況

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に係る補足資料

3.1 ガス発生量のケーススタディ

3.1.1 解析ケースの抽出・検討

本年度実施するガス発生量評価のケーススタディを行う上での前提条件について整理する。

ケーススタディにおける解析ケースを設定するにあたり、解析ケースの一次案を表 3-1 に示す。表中の主な設定変更に対して、水の放射線分解あるいは金属の嫌気性腐食によるガス発生量が、昨年度実施した評価に比較してどのように変化するか、その影響予測も記した。

表 3-1 解析ケースの一次案

代替ケース		主な設定変更		ガス発生への影響予測	
実施計画書	No.	タイトル	説明	放射線分解	金属腐食
廃棄体パッケージ内充填物の不確実性	1	パッケージ仕様の変更	モルタル充填なし	減少	－
地層処分シナリオに関する不確実性	2-1	キャニスタ/パッケージ寿命設定	より現実的な寿命設定（長期化）	減少	減少
	2-2	再冠水時間/飽和度の代替設定	例：再冠水時間長、飽和度低	減少	減少
	2-3	中間貯蔵期間の長期化	水接触までの待ち時間が長期化	減少	減少
金属腐食に関する不確実性	3	より現実的な腐食速度	金属腐食速度が経時的に減少	－	減少
水の放射線分解に関する不確実性	4	より現実的なG値	セメント中のG値を適用	減少	－

上記の解析ケースの一次案を基に検討を重ねた結果、本年度のガス発生量評価においては、表 3-2 に基づいた評価を行うことに決定した。なお、同表では、解析ケースの全体像を示したものとなっており、ケース設定における枝番の発生の有無、個別の具体的・定量的な条件設定は、後述するものとする。

表 3-2 解析ケースの全体像

解析ケース		内容		1次案からの統廃合
No.	ケース名	説明	主な条件変更	
0	標準ケース	標準となる条件設定。	(2019年度の設定)	－
1	廃棄体パッケージ仕様の変更	現在、RWMC殿で検討中の代替仕様の廃棄体パッケージの条件で評価を行う。	・充填モルタルの水分含有比	旧ケース1 旧ケース4
2	より現実的な金属腐食速度	現在、RWMC殿で検討中の金属腐食モデルの高度化の成果を用いる。	・金属材料の腐食モデル/速度 ・容器/廃棄体パッケージの寿命	旧ケース2-1 旧ケース3
3	より現実的な過渡変遷	閉鎖後初期の過渡変遷における再冠水/飽和度のより現実的な検討結果を、ガス発生評価に反映する	・水分量（経時変化） ・濡れている金属の割合	旧ケース2-2

●ケース0：標準ケース

2019年度のガス発生量評価において用いた条件設定であり、解析ケース間の比較を行う際に標準となるケースである。昨年度実施したため本年度は割愛する。

●ケース1：廃棄体パッケージ仕様の変更

原理的には、旧ケース1（パッケージ仕様の変更）と旧ケース4（より現実的なG値）を統合した解析ケースである。具体的には、廃棄体パッケージの充填モルタル中の含有水分量を変化させた場合のガス発生量評価を行う。

解析ケース最終案を決定する過程では、廃棄体パッケージの形状・寸法を昨年度の設定（NUMO／キャニスタ用廃棄体パッケージ）から変更する案も検討されたが、最終的には棄却された。

また、水の放射線分解によるガス発生評価で用いるG値を、昨年度の設定（自由水中のG値）からセメントモルタル中のG値に変更する案も検討されたが、セメントモルタルの物性と1対1に対応したG値の設定が困難であり、また、現状、廃棄体パッケージの充填モルタルに用いられるセメントの種類・モルタルの構成等を特定することも困難であるため、G値の設定変更は行わず、昨年度の設定（自由水中のG値）を引き続き用いることとした。

●ケース2：より現実的な金属腐食モデル

原理的には、旧ケース3（より現実的な金属腐食速度）に対応した解析ケースである。

具体的には、金属材料（ジルカロイ、ステンレス鋼、炭素鋼）の腐食モデルあるいは腐食速度を、昨年度の設定（保守的かつ長期的に一定）から現在検討が進められている本事業の別項目の成果に基づいたものに変更する。

●ケース3：容器寿命の代替設定

原理的には、旧ケース2-1（キャニスタ／パッケージ寿命設定）に対応した解析ケースである。

一般に、金属材料の寿命は想定される複数の腐食機構（均一腐食、孔食、すきま腐食、応力腐食割れ、粒界腐食、異種金属接触腐食、不動態の形成など）や、置かれる環境における熱的／力学的／化学的影響も考慮して包括的に設定されるものであるが、標準ケースにおけるキャニスタ及び廃棄体パッケージの寿命は、保守的な観点から非常に短寿命に設定されている。キャニスタ内あるいは廃棄体パッケージ内に水が外部から侵入するタイミングは、特に放射線分解において重要な影響因子となることがわかっているため、本ケースでは、より現実に近いと考える寿命設定を試みる。

当初は、解析ケース2（より現実的な金属腐食モデル）と統合した解析ケースとすることも考えられたが、金属腐食モデル／腐食速度が均一腐食を前提とすることが多いのに対して、金属容器寿命は必ずしも技術的な側面だけから決定されているわけではないため、同一の解析ケースの中で評価するには乖離が大きいと判断し、それぞれ独立の解析ケースとして評価することとした。

●ケース4：より現実的な過渡変遷

原理的には、旧ケース2-2（再冠水時間／飽和度の代替設定）に対応した解析ケースである。昨年度の検討では、再冠水時間／飽和度について、以下の仮定をおいている。

- ・処分場閉鎖時点（T=50年）で、すでに緩衝材の再冠水は終息しており、廃棄パッケージ周囲には十分な地下水が存在している。廃棄体パッケージ開口時点（T=325年）で、廃棄体パッ

ケージ内部に地下水が浸入する。

現在、評価対象としている処分坑道における再冠水挙動が検討されており、昨年度の仮定のように、処分場閉鎖時点で再冠水が終息しているわけではなく、廃棄体パッケージ近傍における利用可能な地下水は、タイミングの観点ではより遅く、量の観点ではより少なくなっていることが予想される。

3.1.2 ケーススタディの実施

前項にて設定されたケーススタディの各解析ケースにおける水素ガス発生量について、個別に記述する。ここではケース2以降の条件設定と実施結果について示す。

(1) ケース0：標準ケース

ケース2以降との比較のため、昨年度実施の標準ケースであるケース0の水素ガス発生量の評価結果を参考として示す。

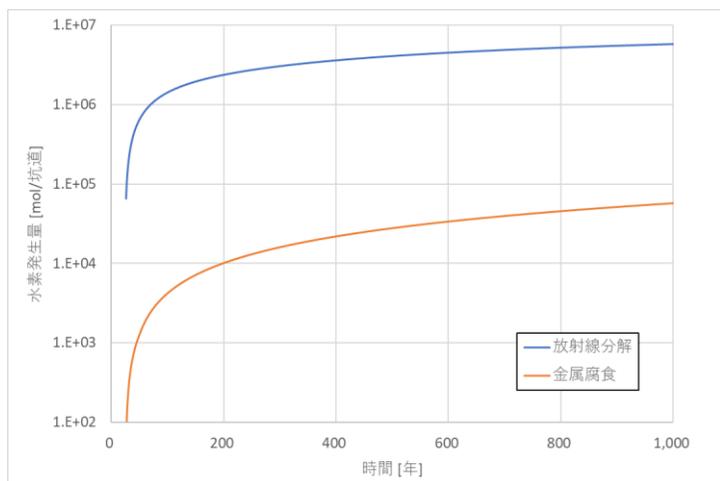


図 3-1 ケース 0A における最終評価結果 (1,000 年まで)

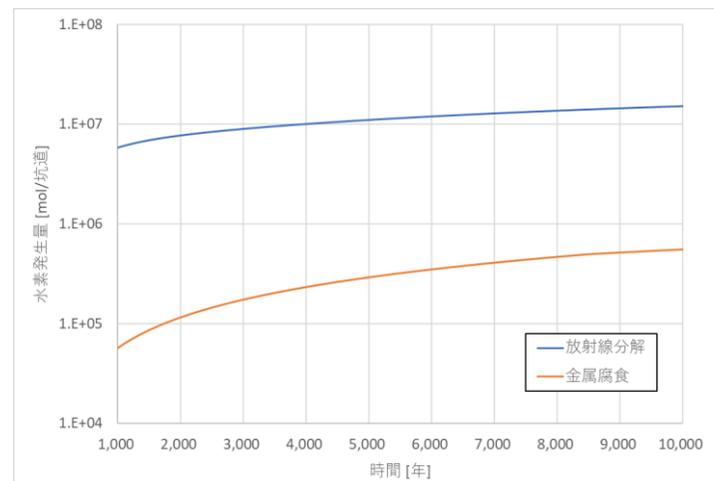


図 3-2 ケース 0A における最終評価結果 (1,000~10,000 年まで)

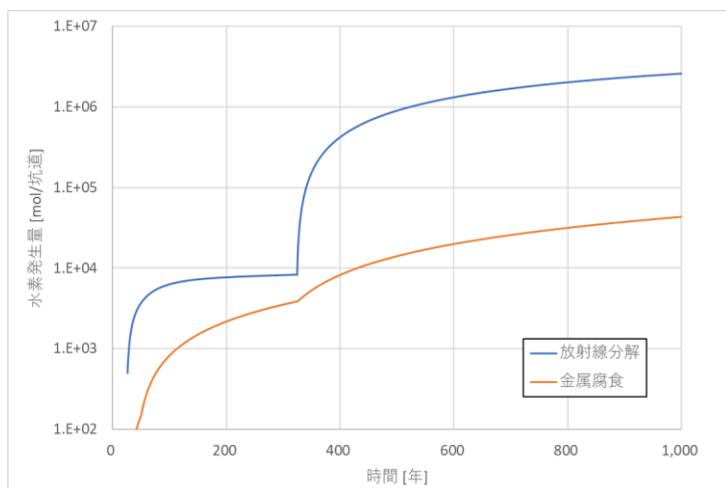


図 3-3 ケース 0B における最終評価結果 (1,000 年まで)

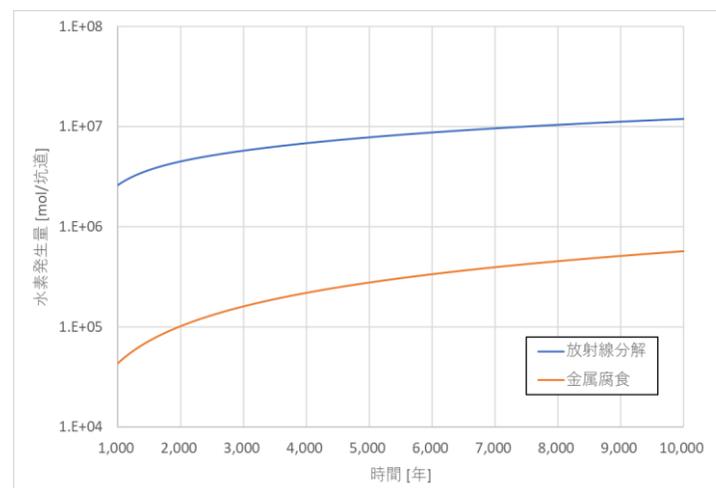


図 3-4 ケース 0B における最終評価結果 (1,000~10,000 年まで)

(2) ケース 2 : より現実的な金属の腐食速度

1) 条件設定

評価対象であるグループ 2 の処分システムにおいては、複数種の金属材料の適用が想定されており、ジルカロイはハルに、ステンレス鋼はエンドピース及びキャニスタに、炭素鋼は廃棄体パッケージ、構造躯体、ロックボルトにそれぞれ用いられる。

ここでは、ジルカロイ/ステンレス鋼/炭素鋼の腐食モデル/腐食速度に関する代替設定を試みる。

本事業の別項目において各金属の腐食挙動に関する試験研究が進められている。同研究における腐食試験結果などを参考に設定した本ケースの評価条件を表 3-3 に示す。

表 3-3 解析ケース 2 : より現実的な金属の腐食速度における条件設定

解析ケース		解析ケース 0	解析ケース 2	
継続期間 [年]		評価期間中	0-1,000	1,000-10,000
金属腐食 速度 [m/y]	ジルカロイ	5.E-09	2.E-09	1.E-09
	ステンレス鋼	2.E-08	1.E-08	3.E-09
	炭素鋼	1.E-07	2.E-08	
備考		—	高温相当 (80°C)	地温相当 (50°C)

ジルカロイ及びステンレス鋼については、温度条件によって金属の腐食速度が異なることが示唆されているため、腐食試験の温度設定に合わせて 80 °C を高温相当、50 °C を地温相当として、廃棄体グループ 2 の処分環境の状態変化に追従した金属の腐食速度を設定する。炭素鋼については明瞭な温度影響が確認できなかったため、長期的な腐食速度として 0.02 μ m/y を適用するものとする。

包括的技術報告書 (NUMO, 2021) では、深成岩の母岩条件での本研究の評価対象であるグループ 2 を含む発熱性廃棄体の緩衝材における温度の経時変化が図示されている。同図を基に、本研究における金属の腐食速度を処分坑道における温度変化と関連付けて設定した模式図を図 3-5 に示す。

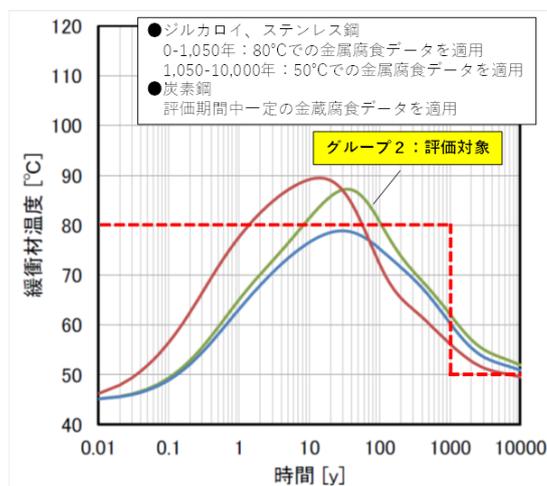


図 3-5 廃棄体グループ 2 の処分坑道の温度の経時変化予測と金属の腐食速度の設定 (NUMO (2021) を基に編集)

2) 金属の嫌気性腐食による累積水素ガス発生量

本ケースにおけるジルカロイ／ステンレス鋼／炭素鋼の金属腐食速度の設定と標準ケースでの設定との相違を、腐食深さを指標として比較したものを図 3-6 から図 3-8 に示す。

本ケースでは、水の放射線分解による水素ガス発生については、標準ケースとは異なる条件設定とはなっておらず、また金属腐食による水消費が相対的に抑制される本ケースにおいては廃棄体パッケージ内のモルタル自由水が枯渇しないので、水の枯渇を理由に金属の腐食が停止することはない。また、金属材料そのものが消失することもないため、本ケースでは、金属腐食による水素ガスの発生が評価期間（10,000 年）中に終息することはない。

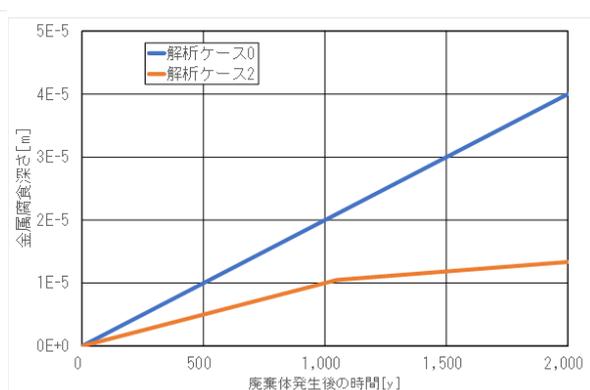
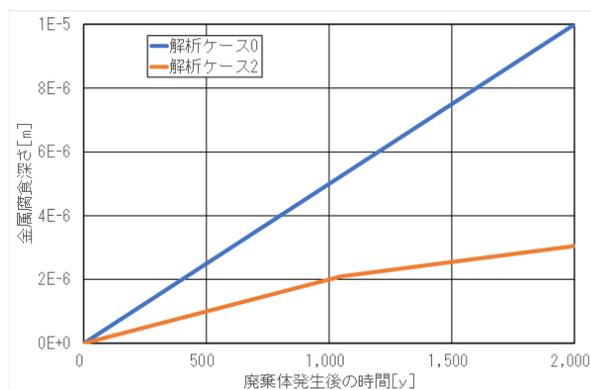


図 3-6 金属腐食速度設定の違い（ジルカロイ） 図 3-7 金属腐食速度設定の違い（ステンレス鋼）

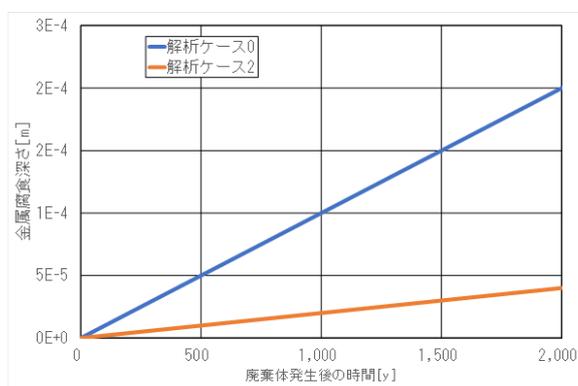


図 3-8 金属腐食速度設定の違い（炭素鋼）

3) 最終的な評価結果と考察

処分坑道 1 本あたりの累積水素ガス発生量の経時変化を図 3-9 から図 3-12 に示す。

金属の腐食速度を、処分環境の温度変化に応じて、より現実的に設定した本解析ケース 2 については、以下のことが言える。

●ケース 2A/2B の水素ガス発生量の経時変化のプロファイルは、ケース 0A/0B のそれと相似しているが、金属腐食によるガス発生量が 1 オーダー程度低下している。

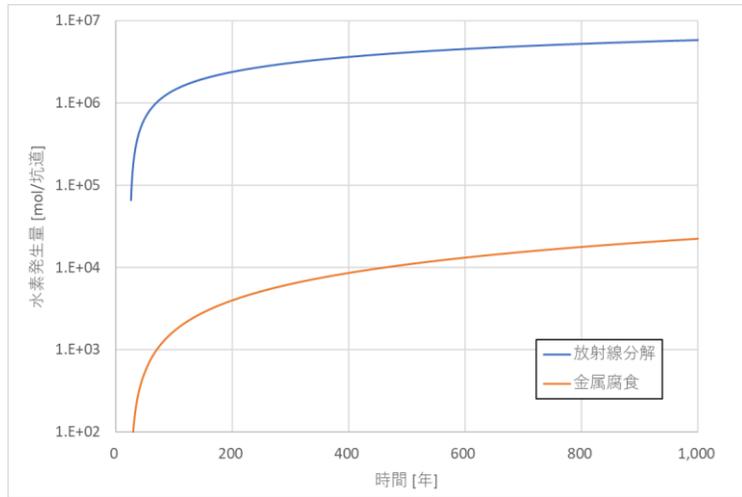


図 3-9 ケース 2A における最終評価結果（1,000 年まで）

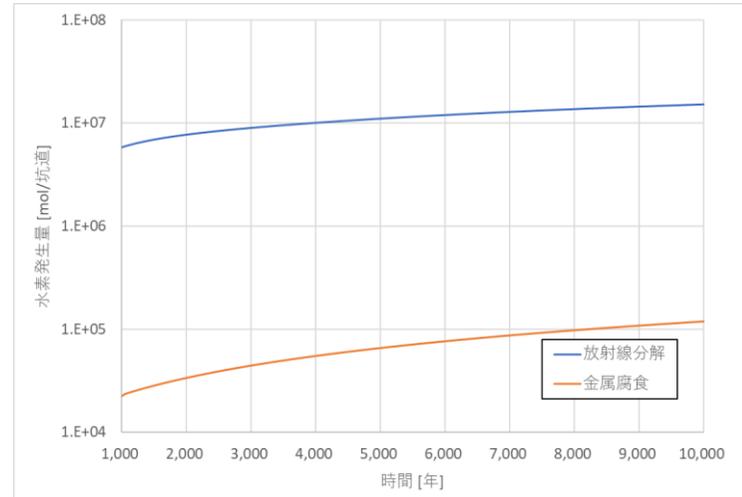


図 3-10 ケース 2A における最終評価結果（1,000～10,000 年まで）

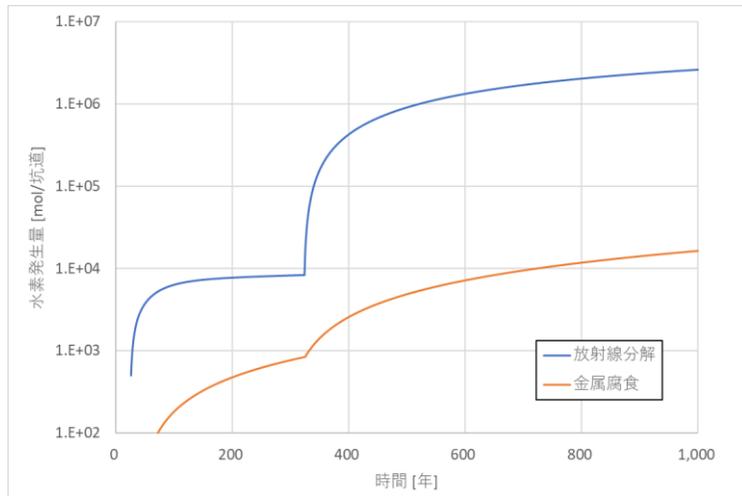


図 3-11 ケース 2B における最終評価結果（1,000 年まで）

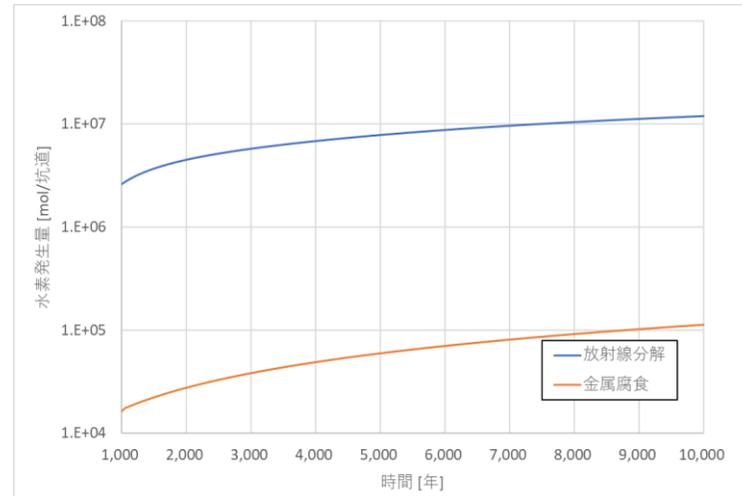


図 3-12 ケース 2B における最終評価結果（1,000～10,000 年まで）

(3) ケース3：容器寿命の代替設定

1) 条件設定

本ケースでは、容器寿命に関する代替設定を行った場合の水素ガス発生量を評価する。

容器であるキャニスタ及び廃棄体パッケージの寿命については、標準ケースでは、キャニスタは0年、廃棄体パッケージでは300年とされている。ただし、キャニスタについては、キャニスタにハル・エンドピースの廃棄物が封入されて(T=0年)、廃棄体パッケージ化される(T=25年)までの間は破損しない前提であるので、実質的には25年以上の寿命を想定しているのに等しい。

一方、各容器の金属材料とその(均一)腐食速度からは、腐食モデルとして平板モデルを仮定した場合に、金属材料が消失するまでの時間を寿命として評価することもできる。これら2つの寿命の考え方(設定上の寿命と評価上の寿命)における寿命の相違を表3-4に示す。

表 3-4 考え方による容器寿命の相違

容器	金属材料	腐食速度 [m/y]	肉厚 [mm]	寿命 [年]	
				標準設定	評価上
キャニスタ	ステンレス鋼	2.E-08	5mm	0 (25)	125,000
廃棄体パッケージ	炭素鋼	1.E-07	50mm	300	250,000

※：キャニスタには寿命に関する公的なクレジットはない(0年)が、

廃棄体パッケージ製作までは破損しない(25年)と仮定。

※：評価上の寿命とは、平板モデルで両面から均一腐食速度で腐食した場合

このように、容器寿命については、考え方によって大きく異なる。容器の寿命は、水素ガス発生評価上は容器内部に水が浸入するタイミングとして反映されるが、特に水の放射線分解による水素ガス発生においては非常に大きな影響因子となることが予想される。

そこで本ケースでは、ケーススタディとして容器寿命の代替設定を行うこととする。解析ケース設定を表3-5に示す。

解析ケース3-1では、キャニスタの寿命は100年(T=125年)、廃棄体パッケージの寿命は1,000年とした。これらの数値設定については、現状、技術的な裏付けがあるわけではなく、HLWガラス固化体のオーバーパック寿命(1,000年)などの関連情報を斟酌したエンジニアリングジャッジである。

また、解析ケース3-2では、標準設定における金属腐食速度と容器の肉厚を用いて算出される評価上の寿命を用いるものとする。このケースでは、キャニスタも廃棄体パッケージも評価期間(10,000年)中は開口しないので、廃棄体パッケージ内部への外部からの地下水の浸入(供給)はなく、廃棄体パッケージ内部では、モルタル中の自由水のみを消費する形で放射線分解及び金属腐食が進行することとなる。

表 3-5 解析ケース3：容器寿命の代替設定

容器	金属材料	解析ケース0		解析ケース3-1		解析ケース3-2	
		寿命 [年]	開口時期 [年]	寿命 [年]	開口時期 [年]	寿命 [年]	開口時期 [年]
キャニスタ	ステンレス鋼	0 (25)	T=25	100 (125)	T=125	125,000	評価期間(10,000年) 中は開口しない。
廃棄体パッケージ	炭素鋼	300	T=325	1,000	T=1,025	250,000	
備考		標準設定		エンジニアリング ジャッジ		金属腐食速度から推定される 評価上の消失期間。	

2) 水の放射線分解による累積水素ガス発生量

「容器寿命の代替設定」とうたわれている当該ケースでは、標準ケースに比較して容器寿命が長く設定されるために、外部から地下水が供給されるタイミングが後ろ倒しになる。

特にケース 3-2 では、評価期間（10,000 年）中、廃棄体パッケージが開口せず、外部からの水の供給がないため、廃棄体パッケージ内においては、水の放射線分解で必要とされる水は、初期の廃棄体パッケージモルタルの自由水に限定されることとなる。またキャニスタも開口しないため、標準ケースではキャニスタ内での水の放射線分解も一切生じないこととなる。

3) 金属の嫌気性腐食による累積水素ガス発生量

「容器寿命の代替設定」とうたわれている当該ケースでは、標準ケースに比較して容器寿命が長く設定されるために、水の放射線分解と同様、外部から地下水が供給されるタイミングが後ろ倒しになる。

特にケース 3-2 では、評価期間（10,000 年）中、廃棄体パッケージが開口せず、外部からの水の供給がないため、廃棄体パッケージ内においては、生起する金属腐食で必要とされる水は、初期の廃棄体パッケージモルタルの自由水に限定されることとなる。またキャニスタも開口しないため、標準ケースではキャニスタ内で生起するはずの金属腐食も一切生じないこととなる。

4) 廃棄体パッケージ内での水の枯渇の可能性

「容器寿命の代替設定」とうたわれている当該ケースでは、水の放射線分解及び金属腐食の基本メカニズムは標準ケースと変わらないものの、特に廃棄体パッケージ寿命が延びているために、その間にモルタル自由水が枯渇する可能性は高まっているので、確認が必要である。

解析ケース 3-1A/3-1B の条件下で、放射線分解と金属腐食によるモルタル自由水の競合的消費の経時変化を評価したものを図 3-13 及び図 3-14 に示す。いずれの場合も、モルタル自由水が枯渇する可能性がないことがわかった。また、解析ケース 3-2 では、キャニスタも廃棄体パッケージも評価期間中は開口しないため、モルタル自由水の消費は廃棄体パッケージ内（キャニスタ内を除く）でのみ起きるために、解析ケース 3-1B に近い状況となることが想定されるため、モルタル自由水が枯渇しないことは明らかである。

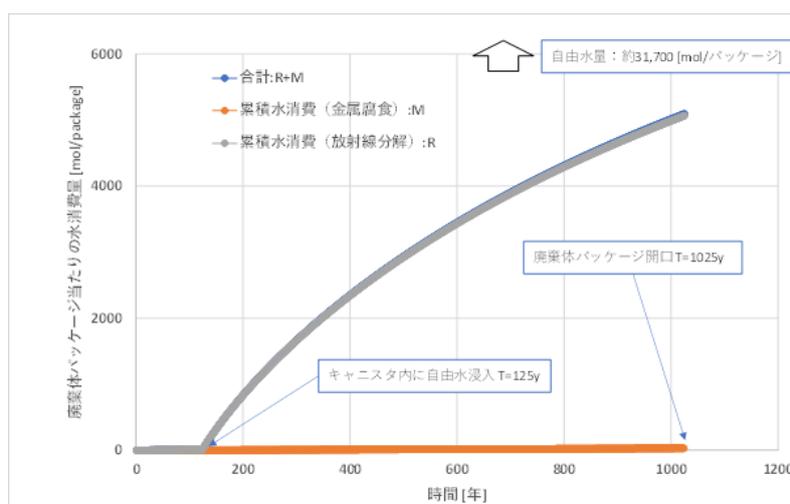


図 3-13 廃棄体パッケージ内でのモルタル自由水の消費（ケース 3-1A）

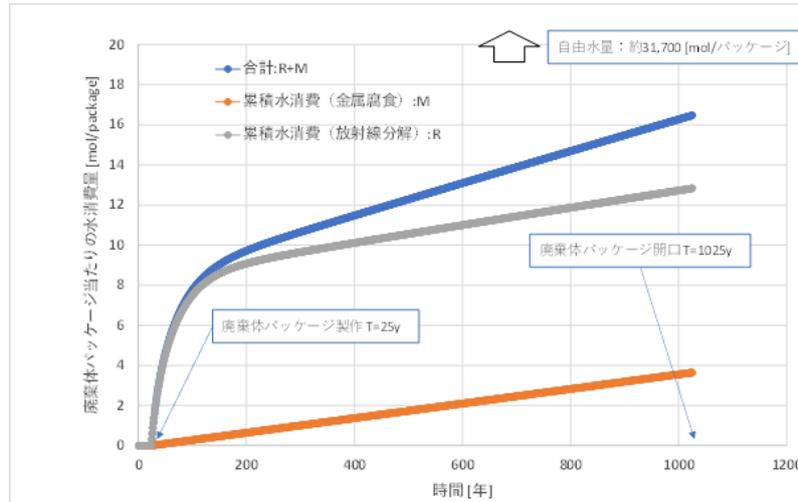


図 3-14 廃棄体パッケージ内でのモルタル自由水の消費（ケース 3-1B）

5) 最終的な評価結果と考察

処分坑道 1 本あたりの累積水素ガス発生量の経時変化を図 3-15～図 3-20 に示す。

キャニスタ及び廃棄体パッケージの寿命について、非常に保守的な標準ケースに比較して、相対的により現実的に設定した本解析ケースについては、以下のことが言える。

●キャニスタの寿命を 100 年、廃棄外パッケージの寿命を 1,000 年と設定したケース 3-1A/B では、特に、キャニスタ内部に流入する水のタイミングが後ろ倒しとなるために、同領域での水の放射線分解が抑制されていることがわかる。

●標準ケースで設定した金属腐食速度（ステンレス鋼で $2.0E-8$ m/y、炭素鋼で $1.0E-7$ m/y）と容器の肉厚から容器寿命を設定したケース 3-2 では、キャニスタ／廃棄体パッケージともに評価期間 10,000 年では開口しない設定となったが、本ケースでは、廃棄体パッケージないでの水の放射線分解／金属腐食ともに非常に限定的で、両メカニズムとも EBS 領域でわずかに進行する評価結果となった。

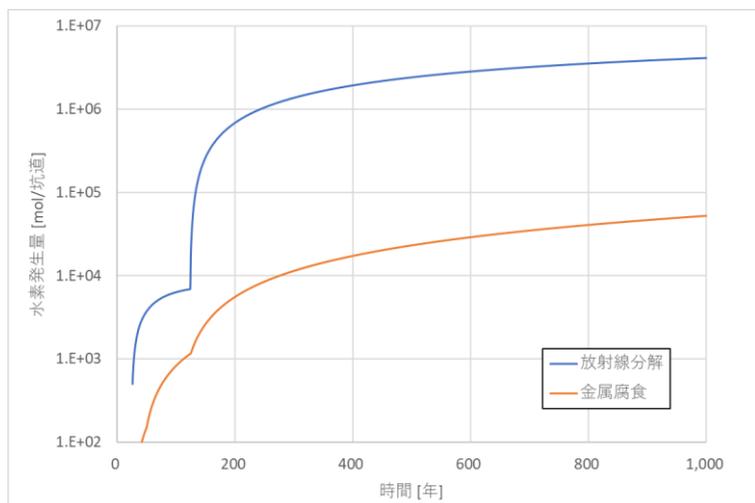


図 3-15 ケース 3-1A における最終評価結果 (1,000 年まで)

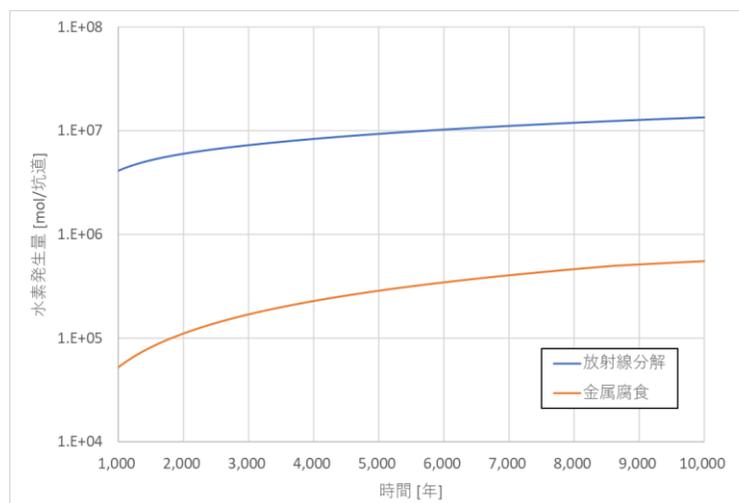


図 3-16 ケース 3-1A における最終評価結果 (1,000~10,000 年まで)

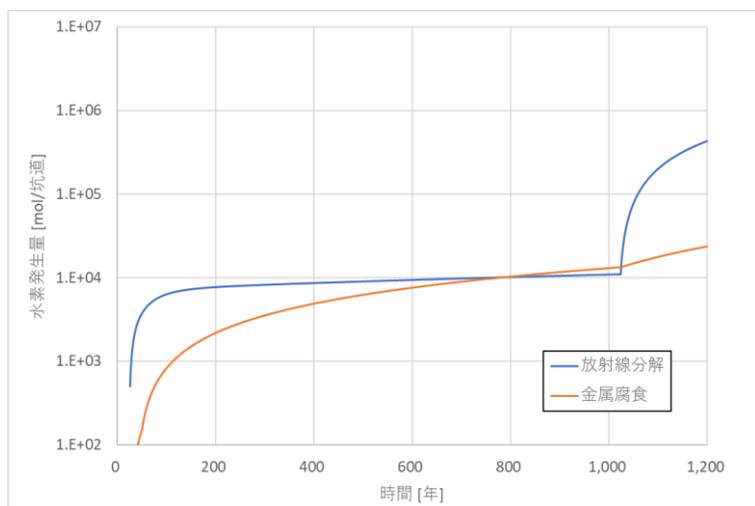


図 3-17 ケース 3-1B における最終評価結果 (1,200 年まで)

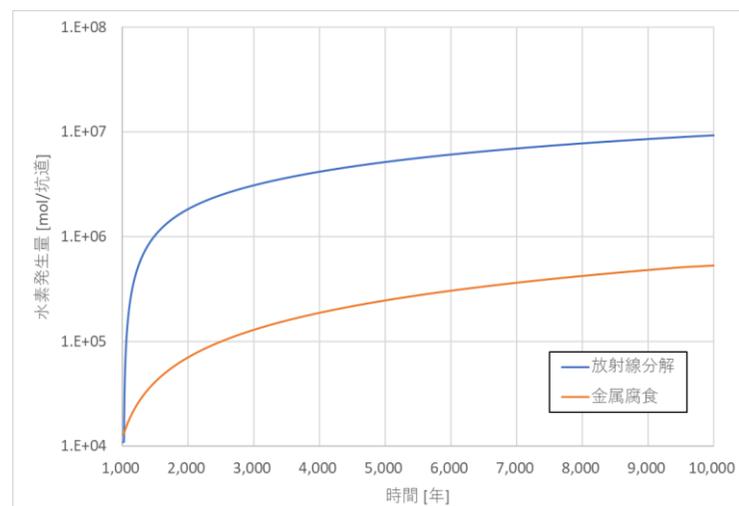


図 3-18 ケース 3-1B における最終評価結果 (1,000~10,000 年まで)

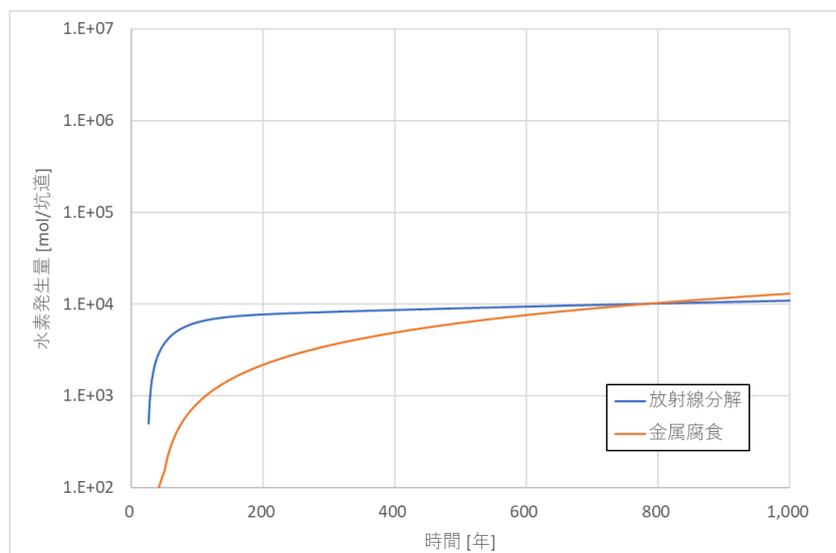


図 3-19 ケース 3-2 における最終評価結果（1,000 年まで）

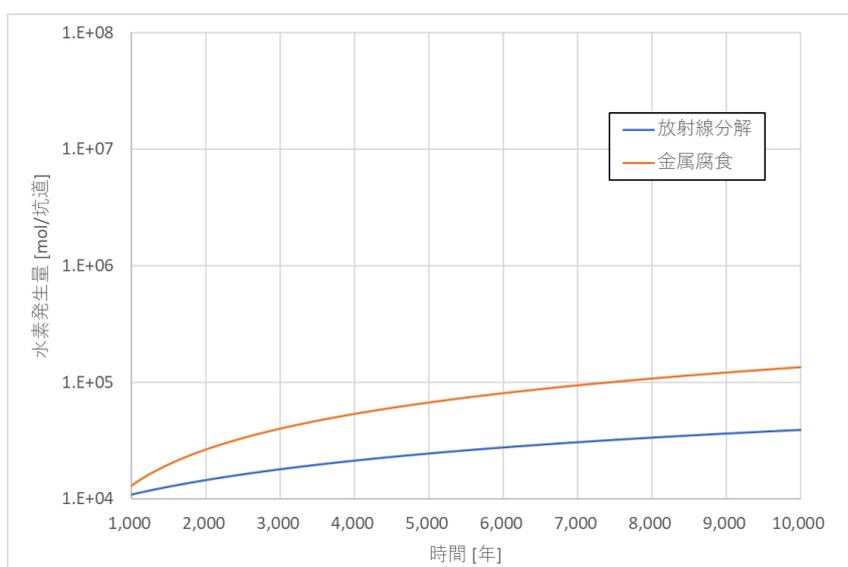


図 3-20 ケース 3-2 における最終評価結果（1,000～10,000 年まで）

(4) ケース 4：より現実的な過渡変遷

1) 条件設定

本ケースは、本事業の「ガス移行評価モデルの検討」において検討した廃棄体グループ 2 の処分坑道への再冠水挙動に関する評価結果をガス発生量評価に取り込んだものである。

再冠水評価の解析モデル図を図 3-21 に示す。同研究では、廃棄体領域（キャニスタを含む廃棄体パッケージとパッケージ間充填材）を均質な領域としてモデル化したケースと、廃棄体パッケージを一部具体化したケースを実施した。ガス発生量評価における入力としては、後者の結果を用いるものとする。廃棄体パッケージが開口するまでは、同領域内部への水の流入が生じない不透水性媒体（閉境界）とし、開口後は、内部への水の流入を許容する透水性媒体として扱った。

同評価結果を参考にガス発生量評価の条件設定に反映する。

●緩衝材における再冠水は T=100 年で終息する。緩衝材の内側にある、構造躯体（配筋）及び廃棄体パッケージ外面での金属腐食は、T=100 年より開始する。

●T=325 年の廃棄体パッケージ開口後は、廃棄体パッケージ内の再冠水は、直ちに終息する。

以上より、解析ケース 4 の条件設定を表 3-6 のように設定する。

表 3-6 解析ケース 4：より現実的な過渡変遷における条件設定

事象展開	解析ケース 0	解析ケース 4
T=0	キャニスタ製作	
T=25	廃棄体パッケージ製作	
T=50	処分場閉鎖 緩衝材再冠水	処分場閉鎖
	ロックボルト腐食開始 構造躯体（配筋）腐食開始 パッケージ外面腐食開始	ロックボルト腐食開始
T=100	—	緩衝材再冠水
		構造躯体（配筋）腐食開始 パッケージ外面腐食開始
T=325	廃棄体パッケージ開口 廃棄体パッケージ内再冠水	
備考	標準設定	再冠水挙動を反映

廃棄体領域を均
質化したモデル

廃棄体パッケージを
具体化したモデル

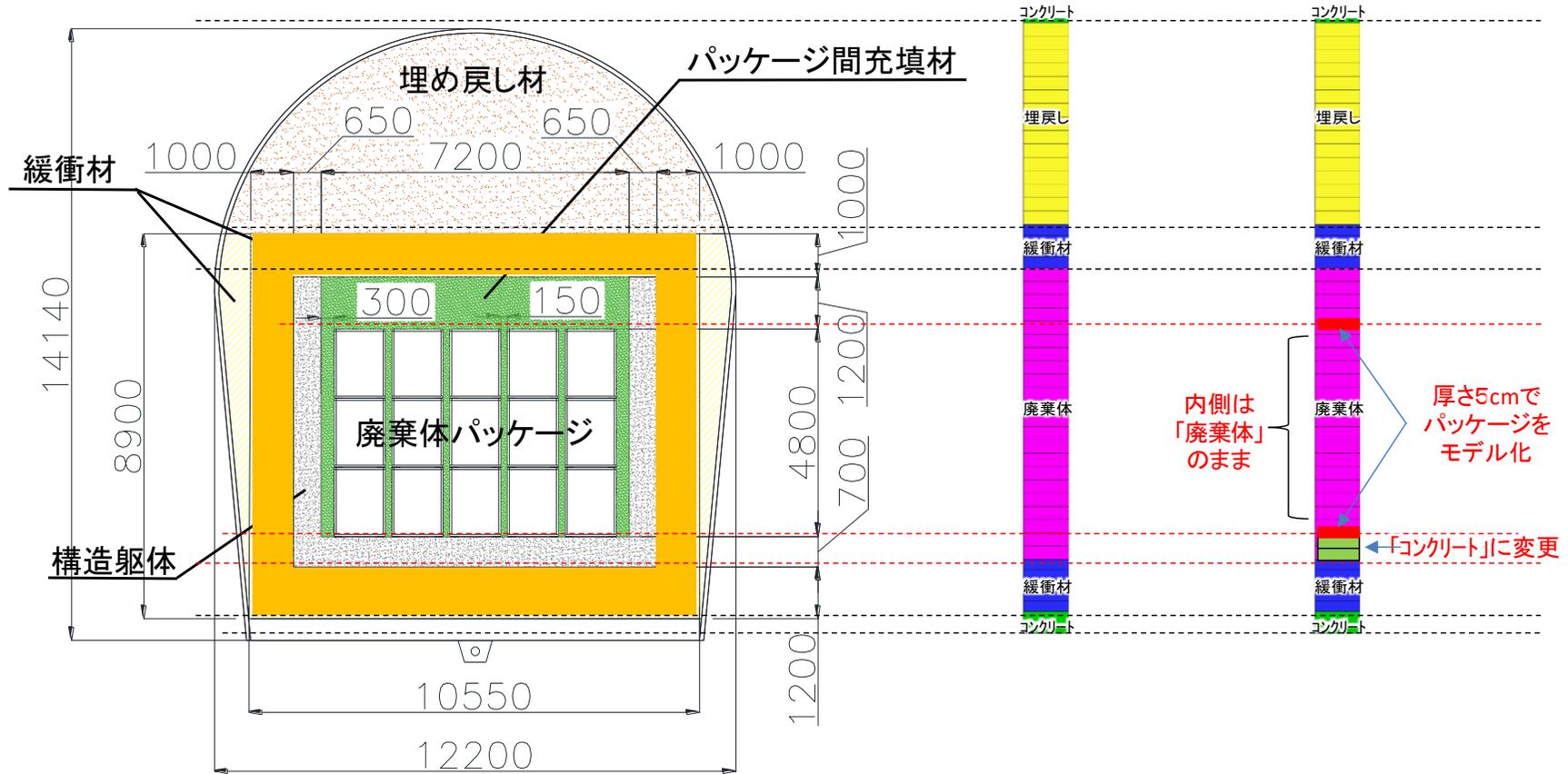


図 3-21 再冠水評価の解析モデル

2) 水の放射線分解による累積水素ガス発生量

「より現実的な過渡変遷」とうたわれている当該ケースでは、廃棄体パッケージ内での水の放射線分解には影響しないが、EBS 領域が水と接触するタイミングが標準ケースとは異なっており、部材に応じて後ろ倒しとなっている。水の放射線分解の評価上は、構造躯体、緩衝材、周辺岩盤等を集約して「EBS」と扱っているが、厳密に言えば、周辺岩盤では、人工バリア製作直後（T=50 年）から、構造躯体及び緩衝材は再冠水時近傍（T=100 年）からと、水の放射線分解が始まるタイミングにはズレがある。

しかしながら、「EBS」領域においてはγ線のエネルギー付与率は非常に小さく、水素ガス発生量に与える影響も小さいので、本ケースでは EBS 領域内の部材毎の詳細な区別は行わず、「EBS 領域での水の放射線分解は、一括して T=100 年（再冠水終了時）より開始する」として、評価を行うこととする。

3) 金属の嫌気性腐食による累積水素ガス発生量

「より現実的な過渡変遷」とうたわれている当該ケースでは、廃棄体パッケージ内での金属腐食にはほとんど影響しないが、EBS 領域が水と接触するタイミングが標準ケースとは異なる可能性があり、部材に応じて後ろ倒しとなることがある。具体的には、周辺岩盤内にあるロックボルトの金属腐食は人工バリア製作直後（T=50 年）から、構造躯体及び緩衝材の金属腐食は再冠水時近傍（T=100 年）から、と金属腐食が始まるタイミングにはズレがある。

4) 廃棄体パッケージ内での水の枯渇の可能性

基本的には EBS 領域での水の放射線分解／金属腐食が開始するタイミングが後ろ倒しになるので、両メカニズムが標準ケース以上に進行することはない。したがって、解析ケース 3A/3B は標準ケース 0A/0B に準ずるので、水の枯渇は生じない。

5) 最終的な評価結果と考察

処分坑道 1 本あたりの累積水素ガス発生量の経時変化を図 3-22～図 3-25 に示す。

閉鎖後初期の水理に関する過渡変遷について、「ガス移行評価モデルの検討」による検討結果を受けて、より現実的な再冠水挙動を反映した本解析ケースについては、以下のことが言える。

●標準ケースと本ケースにおける再冠水のタイミングは、前者が T=50 年、後者が T=100 年とそれほど大きな差とはならなかった。

●再冠水挙動の差が現れるのは、主として EBS 領域（緩衝材、構造躯体、周辺母岩（ロックボルト））であり、水の放射線分解の観点でも影響が小さく、また金属腐食の観点でもやはり影響が小さいので、標準ケースとあまり大きな差は生じなかった。

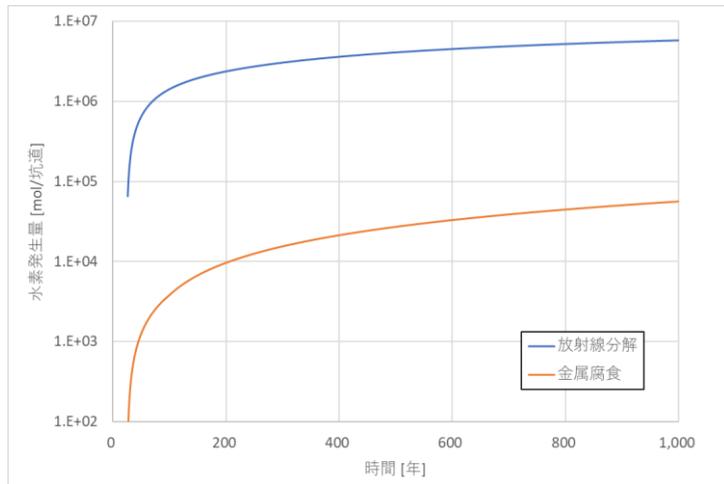


図 3-22 ケース 4A における最終評価結果 (1,000 年まで)

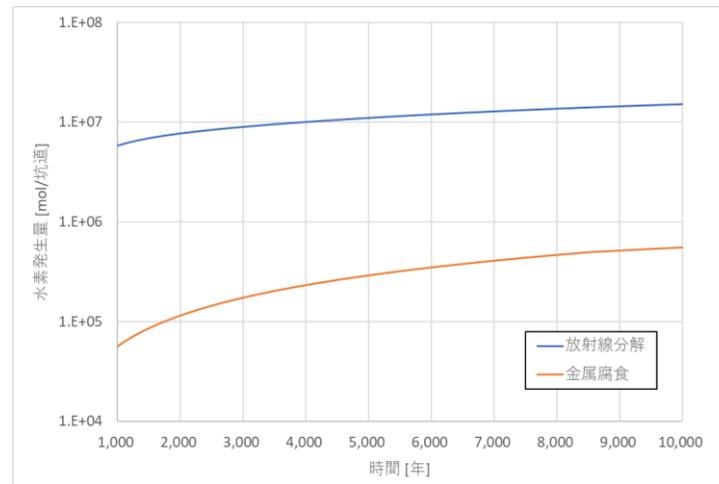


図 3-23 ケース 4A における最終評価結果 (1,000~10,000 年まで)

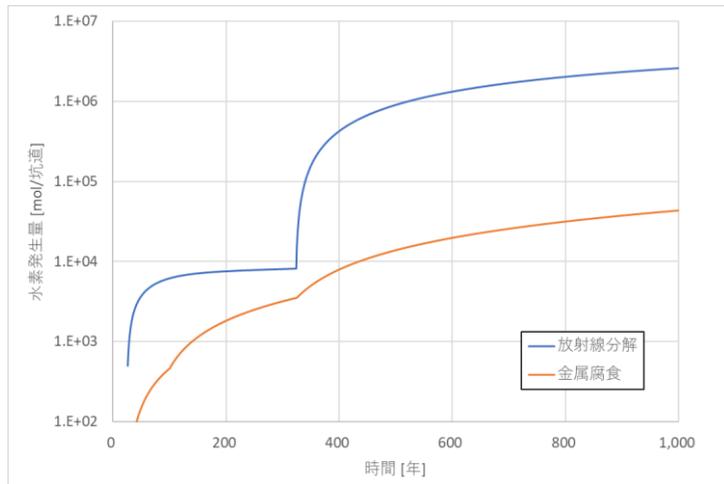


図 3-24 ケース 4B における最終評価結果 (1,000 年まで)

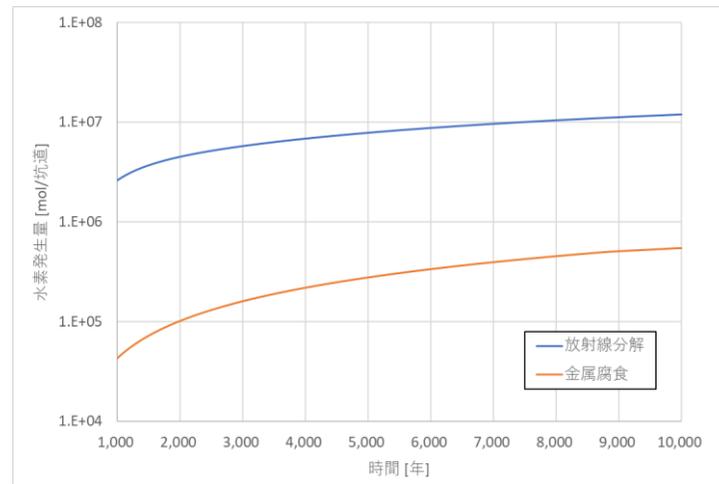


図 3-25 ケース 4B における最終評価結果 (1,000~10,000 年まで)

参考文献

- 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—適切なサイト選定に向けたセーフティケースの構築—, 第4章, NUMO-TR-20-03, 2021.
- 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2分冊) —炭素14長期放出挙動評価— 平成30年3月, 2018a.
- 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.
- 原子力環境整備促進・資金管理センター, 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 報告書 令和2年3月, 2020a.
- 原子力環境整備促進・資金管理センター, 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 Appendix1、令和2年3月, 2020b.
- 金子昌章, 三浦律彦, 藤原 愛, 山本正史, 還元性環境での金属腐食に起因する ガス発生量評価、原環センター技術報告書 RWMC-TRJ-03001, 平成16年3月, 2004.

委員会議事録など

委員会議事録など

1. 令和2年度 第1回 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発検討委員会

1.1 日時

2020年8月5日(水) 13:30～17:00

1.2 場所

原環センター 会議室【オンライン開催併用】

1.3 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

1.4 配布資料

- | | |
|--------|-----------------------------|
| 資料1-1 | 委員名簿 |
| 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、望月委員

【委員（オンライン）】 桐島委員、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（オンライン）】 藤崎殿、石田殿、鈴木覚殿、小川殿

【オブザーバー】 安楽殿（METI）

【オブザーバー（オンライン）】 山田殿・木嶋殿（原子力規制庁）、澤口殿・阿部殿（JAEA 安全研究センター）、小澤殿（JNFL 埋設）、守屋殿・平殿・石塚殿（JNFL 再処理）、中林殿（電中研）、林殿（電事連）

【事務局：JAEA（オンライン）】 亀井、三原、笹本、三ツ井、小田、北村、岩田、紀室、佐藤、ウォーカー、芝本、朝倉、花町

【事務局：RWMC】 田中俊、大和田、藤井、植田、林、櫻木、八木、伊藤、深谷、長谷川、玉井

1.6 議事録

(1) 開会

本事業の実施にあたり、事務局大和田から全体概要の説明、RWMC 田中・JAEA 亀井殿・METI 安楽殿から挨拶の後、当委員会の主査として出光先生が承認され、挨拶いただいた。

(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

- ・ 内部充填材の施工について、ひび割れと G 値低下は相反すると考えるため、バランスの取れた乾燥条件を検討した方が良い。
→ (拝承)
- ・ 内部充填材の水素ガス発生について、熱環境及び放射線環境によって発生量が異なると考えられるため、廃棄体による熱影響及び線量率に関して検討した方が良い。
→ 今後3年間での課題としてどのように取り組めるか検討したい。
- ・ 内部充填材の G 値について、自由水量との相関を示しているが、自由水量を 100%に外挿した時に、水の G 値と概略整合が取れているかを確認した方がよい。
→ (拝承)
- ・ 容器内部の水素ガス発生による腐食への影響(水素脆化)についても考慮し、溶接技術(SR)と腐食に関するロジックをしっかりと組み立てることを考えた方がよい。
→ (拝承)
- ・ 容器内部の隙間(空気層)について、SR 時の温度上昇と水素ガスのバッファは相反すると考えるため、バランスの取れた内部充填を検討した方がよい。
→ 初年度にすきまによる課題としては認識しており、今後検討したい。

② 陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発

- ・ 陰イオン吸着材については、陰イオンというのはヨウ素のことか。吸着性は化学種によって異なるので、最初から化学種を対象として考えた方がよい。
→ ヨウ素以外の安全評価上の影響の大きい陰イオン核種も調査対象としている。まずは幅広く調査して、NUMO 殿とも相談して対象を絞り込みたい。
- ・ ヨウ素脱離への影響物質について、HIP では HS 濃度が高いと脱離しやすいのに対して、BPI ガラスでは脱離が抑制されるとの傾向だが、どう理解すべきか？
→ HIP のヨウ素は AgI の形態で固定されており、露出すると HS と反応して Ag₂S になる。Ag₂S の生成による体積収縮で空隙がさらに中へ進んでいく。BPI ガラスでは AgI から一旦脱離したヨウ素は、ガラスマトリクスの中におそらく network-modifier の形に入っている。炭酸でセルサイトやハイドロセルサイトの変質層ができるが、HS があるとガレナ (PbS) が析出して抑制層になるのではないかと考えている。
- ・ BPI でリン酸についても析出物ができるという理解でよいか。
→ そのとおり。表面に鉛と塩素の系統のアパタイトができて抑制するのではないかと考えている。

- BPI で炭酸についてはどうか。
 - 分析できていないので仮説だが、まずホウ素が出て行って、鉛とヨウ素が多い層がうっすらできているところに炭酸が来ると、15 ページのようにハイドロセルサイトの層が出来て、これが鉛を食ってしまうので、一緒にいるヨウ素を放出して、結果、ヨウ素とホウ素の **congruent** な溶出になる。
- 溶出試験等でそのような傾向は見えているのか？それなら、あとはその説明を計算でどこまで突っ込めるかということかかと理解。
 - ホウ素だけ最初に出て来るような現象がずっと続くのか、その上で、鉛の変質層が出来るというのは熱力学的に計算可能と考えられるので、その二つを合わせて、ずっと続く現象としてはこういった現象で、変質層が徐々に厚くなると拡散層となって溶出がゆっくりになるということが示せるのではないかと考えている。
- 陰イオン吸着材については、ある程度絞って調査をした方がよい。地下水には Cl⁻イオンがたくさん含まれるので、それらの吸着で飽和して、肝心の核種を止めるためには埋まっただけに役に立たないということになる。Cl⁻あたりに対して止めたいものに関する選択性の高いものを探していくのがよい。
 - 検索結果を精査する中で Cl⁻の影響はどうかとか、ある程度見えて来ると思うので、実際の地下水という観点で使えそうか否かを判断していきたい。
- イオン交換体としての長期的な安定性も重要なファクターである。

(3) 閉鎖前安全性の評価技術整備

- 発熱速度モデルのなかで、反応における酸素の関わりというのは、どういうふうを考え、この式が出できたのか。また、酸素が反応機構のどこに効いてくるのかを押さえておく必要がある。
 - 現状の発熱速度モデルは、低酸素条件の実験値に基づいて作成されたモデルであるので、酸素の影響は考慮されていない。空気が多量に存在する状態での測定値は、非常にノイズが大きいため、このデータをどのようにモデルに反映していくかを考える必要がある。また、アスファルト固化体は、パッケージに封入されることが検討されていることから、操業期間中に多量の空気とアスファルト固化体がさらされる可能性があるのかを考慮しながら、酸素のモデルにおける取り扱いを考えたい。

(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

- 8 枚目のスライドで、Co-60 濃度の分析結果は、エンドピース（下部タイプレート）の最下部の方 (⑤) が中心位置 (③) の濃度より高くなっている理由はなにか。分析誤差の範囲であれば問題ないと思うが。
 - 親元素 (Co) が不均質に分布していた可能性もあるが、詳細を確認・検討する必要があると考えている。
- エンドピースの C-14 の親元素である窒素の分布を把握し、解析評価に反映するのは良い方法であるが、CAST プロジェクト (スライド 11) における C-14 濃度が解析値よりも実測値が大きいという差異の要因について、例えば、窒素の偏在、中性子分布、核データの影響など、何か考察は出ているか。
 - CAST の中では詳しく議論されていない。不純物濃度が不確定であること。また、解析も MCNP を用いているが、炉全体での中性子フラックス分布を用いているなど、ピンポイント

ントの情報が反映できていない可能性が考えられる。

- ・ 3次元での放射化計算を実施しているが、実際にこのエンドピースがどのくらいの燃焼条件で燃焼されたかのデータは詳細に分かっているのか？様々な不確実性があるので、その整理も含めて実施してもらいたい。
- 炉内のどの位置にどれくらいの期間置かれていたかといった情報はある。入手可能な燃焼条件をフルに使って、今年度はなるべく正確に解析していく。不足する条件は簡易的に与えて試してみるなどし、解析の精度の説明性も示せるように検討していく予定である。

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

- ・ 先進的セメント-緩衝材相互作用の実験とモデル構築（熱力学データ整備を含む）を別個に続けて、最後に比較するのは危険。実験結果とモデルを年ごとに比較して次期に反映させるほうが良い。
 - （拝承）
- ・ 先進的セメント-緩衝材相互作用の実験で、精密にモデルと比較するため、間隙水の組成について何らかの分析方法を開発できるとよい。接触試験体のセルの溶液組成だけでもモデルの検証には有効である。
 - （拝承） ベントナイト側のセルの溶液の分析結果とモデルの計算結果の対比を今後実施する。間隙水については分析がきていないので、分析方法についてアドバイスを頂けると有難く思う。
- ・ フライアッシュの反応量の分析をしていなければ、検討する必要がある。
 - ポゾラン反応率（フライアッシュ及びシリカフェームの反応量）は酸溶解処理による方法で求めている。その方法の妥当性も確認しながら分析を進めていく。
- ・ 将来石炭火力発電が縮小された場合のフライアッシュの安定供給について意識した検討が望ましい。
 - （拝承）
- ・ スメクタイトが生成しない条件を探すことも重要。
 - パラワン島 Narra の NA サイトでは難しいので、MSH から蛇紋岩系の二次鉱物が生成しているサイトとの差などの考察等検討したい。

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

- ・ Pd-ISA の溶解度試験に関して、データのばらつきの原因がわからないので、pH8.5 と 10 で再実験ということだが、水酸化物の固相の違いは予想されているか。
 - pH8.5 と 10 で支配的な溶存化学種が変わるといってもないので、今年度は再現性を確認することを優先して実施する。
- ・ Pd-ISA の溶解度試験のばらつきを無くしていくのは根気のいる作業なので、一つ一つつぶしていくしかないかと思う。
- ・ $TcO_2 \cdot xH_2O(am)$ 固相の熟成について、少し還元剤の濃度が低いようである。

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
- (特になし。)

2. 令和2年度 第2回 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発検討委員会 中間評価

2.1 (2-1) 廃棄体パッケージの閉じ込め性能に係る試験と評価

2.1.1 日時

2020年12月15日(火) 10:00~12:00

2.1.2 場所

オンライン会議 (原環センター第2会議室、原子力機構地層処分基盤研究施設 4階大会議室)

2.1.3 議事

- (0) はじめに
- (1) 廃棄体パッケージ開発に係る全体概要
- (2) 廃棄体パッケージ容器の製作方法の検討
- (3) 廃棄体パッケージ内充填材の仕様の検討
- (4) 廃棄体パッケージの健全性評価

2.1.4 配布資料

- 資料2-1-1 廃棄体パッケージ開発に係る全体概要
- 資料2-1-2 廃棄体パッケージ容器の製作方法の検討
- 資料2-1-3 廃棄体パッケージ内充填材の仕様の検討
- 資料2-1-4 廃棄体パッケージの健全性評価

2.1.5 出席者

【委員】 出光主査、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】 鈴木^寛殿、小川殿

【オブザーバー】 青柳殿 (METI)、山田殿・青木殿 (原子力規制庁)、澤口殿・阿部殿 (JAEA 安全研究センター)、小澤殿 (JNFL 埋設)、守屋殿 (JNFL 再処理)、中林殿 (電中研)、林殿 (電事連)

【事務局：JAEA】 亀井、三原、笹本、澤田、三ツ井、朝倉、芝本、花町、佐藤^信、木内

【事務局：RWMC】 田中^俊、大和田、藤井、植田、林、八木、長谷川、玉井、佐藤^成

2.1.6 議事録

(0) はじめに

事務局から第2回委員会として実施する中間評価の進め方について説明、RWMC 田中・JAEA 亀井殿・METI 青柳殿から挨拶の後、当委員会の主査である出光先生から挨拶いただいた。

(1) 廃棄体パッケージ開発に係る全体概要

- ・ 示されている実施計画は当初のものか見直した現状のものか。
→現状の計画で、これまでの検討を踏まえて特に製作技術の内容を変更した。また、操業中の異常事象に対する堅牢性は実施計画の見直しの際に予定していた落下試験に先立ち製作技術の実証を優先すべきと判断しトーンダウンさせた。

(2) 廃棄体パッケージ容器の製作方法の検討

- これまでの研究の流れが良く分かったが、年度ごとに判明した課題を否定的な表現とする必要は無く、最終目標に対する検討という表現にすれば良い。
- 各板厚に対して選定している溶接方法は妥当と考えられる。
- 熱処理の温度や時間はどのようにして決めたのか。
→ JIS を基に温度や保持時間を決めている。
→→ JIS の基準は、応力除去のみではなく溶接後の組織の改質等も目的としている。そのような経緯から溶接後熱処理は、SR ではなく PWHT という用語になった歴史的経緯がある。JIS で定められた条件は、応力除去を最大の主目的とした SR の条件になっているか確認が必要。
- 応力除去を特に重点を置いた熱処理条件ということであれば、来年度以降の現実の構造体に対する熱処理について、例えばパラメトリックサーベイ的な数値計算を少し多めにやる等が望ましいと考える。
- TRU 容器のための SR の条件について、JIS を参照したということから始まって、改めて過去のデータを整理して、今回はこのようなデータを取得するという検討が重要である。
- 残留応力低減を目指して実施している溶接後熱処理について、定量的な目標設定を検討願う。
→ (拝承)
- 溶接部の品質検査手法として EMAT を第一候補としているが、比較対象として従前の UT のデータも取得すること。
→ (拝承)
- TRU 容器の長期に亘った密封性について、溶接部の健全性で担保するのか。
→ 今回事業では、溶接方法や溶接部の品質検査方法等、制作技術の開発に主眼を置いているが、容器全体に求められる要求機能及びそれに対する検査方法については、今後、事業者 (NUMO 殿) と連携して検討する。
- 熱解析で廃棄体の発熱特性は入れているのか。
→ グループ 3 のアスファルト固化体について、JAEA の研究成果を反映して目標温度を設定しているが、発熱速度モデルの組み込みには至っておらず、今後の検討となる。
- 全体概要で内部充填材のセメント部に安全機能を見込んでいるという説明もあり、内部充填材の制限温度に対して、SR 時の発熱の影響、廃棄体自身の発熱も踏まえて、熱解析して制限温度を超えないということを確認した方が良い。
→ TRU の廃棄物の発熱量については、熱的制限は熱暴走を引き起こすグループ 3 のアスファルト固化体が一番厳しく、熱暴走を引き起こす温度は 195°C であるという JAEA の研究成果がある。この温度を十分満足するように廃棄体を製作可能であれば、他の廃棄体についても問題無いと考えられる。よって、まずはグループ 3 を検討の対象にした。
一方、処分場内の温度の制限については、第 1 次 TRU レポートではセメント系材料の熱変質の問題から 80°C 設定をしていたが、これは考慮しないということに変わっている。
以上より、現状、アスファルト固化体の 195°C を超えないよう、検討を進めている。
- セメントの 80°C 制限というのは、考慮しなくて良いということになったのか。
→ 【NUMO 補足】 廃棄体パッケージの内部の充填材の安全機能は、主には操業期間中を対象とした安全機能となっている。以前は収着性を期待していたが、現在は期待していない。一方で、廃棄体パッケージの外側のパッケージ間充填材については、収着等の安全機能を期待している物があり、これについては 80°C を温度制限としている。一部の発熱の高い廃棄物については、パッケージ間充填材に安全機能を期待できないケースがあり、それに対してはパッケージ間充填材の外側に緩衝材を設置し、充填材に期待できない分の安全機能を緩衝材で

補っている。よって、内部充填材に温度制限は設けないこととしている。

- ・ 温度制限に達したから直ぐに劣化するというわけではないと思うが、将来的に事故時等を考慮した場合に、熱的制限を超えた場合、どれくらいまで許容できるかといった検討も今後必要と考える。
- ・ 内部充填材について、自由空隙は無い方が良く、収着機能を求めないということだが、廃棄体に悪影響を与えないということは最低限必要である。

(3) 廃棄体パッケージ内充填材の仕様の検討

- ・ 乾燥コンクリートとはどの程度乾燥したものと定義するのか。自由水 0 の状態なのか、ある程度乾燥させたものなのか。
→可能であれば、水素ガス発生量抑制の観点から、自由水 0 まで乾燥させたものが目標である。しかし、実機で可能な装置能力等で制限される可能性もあるため、現在の検討結果をふまえて適切な条件を設定したい。
→自由水 0(少ない)の時のデータ充実が必要である。
- ・ 繊維補強した際の繊維の耐放(射線)性(分解してガス発生)等は問題ないのか。
→問題ないと考えている。
- ・ 水素以外のガス発生という話があったが、どのようなガスを想定しているのか。混和材の有機物から発生するガスなどか。
→それらの他、酸素なども考えている。
- ・ 製作性に着目して具体化に向け検討をしていることは理解できるが、設計要件から考えて乾燥処理したコンクリートを最適と選定して検討を進めているが、内部充填材として必要としている性能、前提の機能(条件)の確認、整理がおろそかにされている印象がある。(例えば、すき間がない(廃棄体が移動しない)ことが求められていると認識しているが、製作性施工性を考えてプレキャストということであると、プレキャストではすき間が発生してしまうなど。)きれいなコンクリートを作るという意味では問題ないが、充填材という特殊な要件のもとで作るとした場合に、充填材として必要なものが作られるように整理されているのか。
→水素ガス発生の低減が主な目標。後打設方式だと放射線環境下での乾燥が必要になるなど、制約も多くなるため、プレキャスト方式を選定した。
→→水素ガス発生低減や製作性の観点からプレキャストを選定するというのは理解できる。一方で、すき間ができてしまうなど、内部充填材として必要な性能や機能が満たされない部分がでてこないかという印象をうけるので、今一度その辺りの整理を検討してほしい。
→(拝承)
→【NUMO 補足】充填材にどのような安全機能をもたせるかは、包括的技術報告書から発展する形で変わってきている。今回は過去求めていたものと現在求めているものが混ざって説明されていたので、NUMO と RWMC で相談、整理して報告書等で示すようにしたい。
- ・ 水素ガス発生量について自由水量との関係でうまく説明できるとあったが、現在のデータの見せ方(まとめ方)だとそれを説明するには不十分だと思うので、もう少しまとめ方の整理、工夫をお願いしたい。
→(拝承)
- ・ 乾燥後に大気中の水分を吸湿してしまい、また自由水が増えることも考えられるので、そのあたりの検討もお願いしたい
→(拝承)

(4) 廃棄体パッケージの健全性評価

- ・ 内圧を下げるために空間をあけることも対策として考えられるが、一方で隙間をできるだけ減らすという目的とバッティングするのでそこをどう考えるのか。また耐圧させた場合、最終的に破損した際にバリアに影響を与える可能性もあるので、内圧をどの程度に抑えるのか。→現状では内圧をどのように設定するかまでは検討していないので、ご指摘の点も踏まえて適切な内圧の設定についてまとめるようにしたい。
- ・ 閉鎖後の内圧等の健全性評価について、評価手法そのものは問題ない（解析による許容内圧の評価のみな）ので候補となる形状に対して引き続き検討いただきたい。落下等の異常事象についても、今回の検討結果を参照して今後進めていただきたい。

2.2 (2-2) 放射性廃棄物の特性、放射性核種の移行・反応に係る検討

2.2.1 日時

2020年12月25日(火) 9:30~12:30

2.2.2 場所

オンライン会議（原環センター会議室、原子力機構地層処分基盤研究施設4階大会議室）

2.2.3 議事

- (1) 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の整備
- (3) 廃棄体からの核種溶出モデルの高度化
- (4) 有機物の影響評価モデルの高度化

2.2.4 配布資料

- 資料2-2-1 陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発
- 資料2-2-2 閉鎖前安全性の評価技術の整備
- 資料2-2-3 廃棄体からの核種溶出モデルの高度化
- 資料2-2-4 有機物の影響評価モデルの高度化

2.2.5 出席者

【委員】 出光主査、桐島委員、佐々木委員、福士委員、若杉委員

【技術アドバイザー：NUMO】 藤崎殿、鈴木覚殿、小川殿

【オブザーバー】 安楽殿 (METI)、山田殿・青木殿 (原子力規制庁)、向井殿・澤口殿・阿部殿 (JAEA 安全研究センター)、小澤殿 (JNFL 埋設)、守屋殿 (JNFL 再処理)、中林殿 (電中研)、林殿 (電事連)

【事務局：JAEA】 亀井、三原、笹本、澤田、三ツ井、朝倉、芝本、花町、佐藤信、木内

【事務局：RWMC】 田中俊、大和田、藤井、植田、櫻木、八木

2.2.6 議事録

- (1) 陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発
 - ・ HIP 固化の HS⁻イオンの影響、確かに Ag₂S になるだろう。Ag を電子材料で使っている人た

ちはむしろ Ag_2S の被覆できて電気抵抗上がって使えなくなると気にしている。うまく被膜できて I の溶出が進まなくなるというメカニズムがあるのかと思う。スライド 23 において I の溶け出しはだんだん寝て来る傾向だが、こんな効果は考えているのか。

→スライド 20 (写真を絵にしたもの) のように、ヨウ素は AgI の形で粒間に偏在しており、 Ag_2S になると体積収縮があるのでその周囲は空隙になってしまう。粒間にある AgI はほぼ空隙になって連通率が上がるので HS^- の効果が大きい。還元性雰囲気では球状の AgI を浸漬すると表面に Ag の膜が出来て溶出遅くなるという現象はあるので、 AgI が例えば顆粒であれば表面に Ag の被膜が生成して途中で溶出が止まるということもあるかと思う。一方で、廃銀吸着材は薄い膜の形で AgI が付いているものなので、廃銀吸着材をそのまま埋めてしまうと薄い膜では長時間保たない。また、HIP 固化体は空隙の連通率が上がってしまうという問題があり、連通率が高まらないような方策を考える必要があると考えている。

- ・ 陰イオン吸着材、国内でも取り扱っているメーカーはいくつかあるが、メーカーへの聴き取りはじっししているのか。

→聴き取りはこれから。まずは研究している先生方何人か、NUMO さんにも紹介いただいて、企業の製品情報、カタログやデータも含む現状の検索結果を示しながら、地層処分環境、還元性でちょっとアルカリ側なんですけどいかがでしょうか。

- ・ 陰イオン吸着材は使い方が大事。水処理の現場だと吸着させた後に回収。入れっ放しですっくと放っておいて常に吸着し続けるものが望まれているのか。それとも、最初だけ吸着させたいと望んでいるのか、最初にまず大きく溶出したものを抑えてと望むのか。どういった使い方か。

→経産省からの仕様書では処分概念も含めて考えることとなっている。NUMO にも相談しているが、充填材として使えたらという話もある。まずは分配係数として見たときに数値が入るものと考えている。置きっ放しで、吸着能には限界があるので、移行遅延効果のみあればよい。あるいは、例えばアパタイトのように一旦固定してしまうと環境が相当変わらないと放出しないというものもあるので、そこである程度の量を下げってしまうということもあるのかと思うが、何分、環境が課題であると考えている。

→例えば MgO は、亜セレン酸などに対して無機材料では一番 K_d 高くなる。 $\text{Mg}(\text{OH})_2$ に変質する過程で構造内に亜セレン酸を取り込むため、ワンウェイで一回そうなるとそのあとは効果が認められない。吸着材は個々の特性があるので、そこら辺を厳密化すると選び安くなるのかと思う。ゲーサイトはたぶんダメ。アルカリ環境で塩濃度高いので。

(2) 閉鎖前安全性の評価技術の整備

- ・ 7 枚目のスライドで塩濃度が模擬アスファルト体 3 サンプルで少しずつ違うが、発熱量の積分値自体はどのくらい差あったのか。

→数値データを確認致します。

- ・ 混合ガス窒素 98% と酸素 2% とか酸素を多くしたり少なくしたりする条件での試験により接触可能な酸素量も計算できるからいいのでは？ また、実験結果見た限りでは 1 個ピンホールを開けているものはうまくいっているのか、その状態で酸素濃度をふってみるのも手ではないか。

→ (拝承)

- ・ 放射線照射での線量率の影響については放射線場で硝酸や亜硝酸とか線量率によって反応が変わったりする可能性はないか？ また照射中に分解して揮発する成分も中にはあるかと思うが、そのような確認試験では必要であり、計画の中で検討されているか？

→現状、ガスを測定することは考えていないが、副次的にガスの測定も可能で検討したい。

(3) 廃棄体からの核種溶出モデルの高度化

- ・ 3点質問がある：

- ① C-14 インベントリの不確実性の要因は、N（窒素）の分布、中性子束、核データの3つくらいあるが、N 存在は均一か？例えば、溶接線がありそこに N が偏在していれば C-14 の放出率が高くなると考えられる。関連して、N の深さ方向の分布はあまり見ないと説明があったが、溶出モデルの確認のためにも、深さ方向の N 分布は採っておいた方がよい。
- ② スライド 29 の複数の解析コードを使って比較した結果において、このような違いが出ている理由は何か？
- ③ 2年間を経て残される課題（スライド 55）としては、C-14 のインベントリ設定に結局何が効くのか、前フェーズのハルの結果とも総括して C-14 の現実的な評価の考え方、この下部タイプレートのローカルな検討をいかに全体のインベントリの設定に拡張していくのか、そのあたりを是非課題として挙げておいていただきたい。

→N の分布については、下部タイプレートは溶接のない鋳造一体もの。しかし、Co の結果（スライド 14）を見てわかるように、組成の分布がありそうだが、N についての知識はまだ持ち合わせていない。金属組成や鋳造に関する情報も必要。また、N の深さ方向の分布についてはご指摘のとおりであり、ホットサンプルで GD-OES による深さ方向のデータが得られれば参考にしたい。

→スライド 29 の縦軸はログで 1 ケタ以上の差異となっており、結果の整理が十分ではなく、検討させていただきたい。計算方法を変更した影響の可能性、また、計算で入力した N 濃度は実測値ではないという点もある。

→スライド 55 について拝承。前フェーズと総括して、今後どうするか提言できるようなまとめ方にしたい。

- ・ 試料表面の黒い変色、検討しなくてよいのか？腐食の被覆にならないかという観点もある。
→表面の被膜は瞬時放出の観点からも重要と認識しているが、ホットセル内での詳しい検討は作業量的に難しいと考えている。表面を軽く削ってガンマ線を測ったことはある。

(4) 有機物の影響評価モデルの高度化

- ・ Pd と ISA の錯生成定数に関しては、溶解度法以外の手法を用いて求めることはどうか。
→（拝承）溶解度法以外の手法に関しても検討する。
- ・ セメント系材料に対する ISA が共存する Pd の収着試験については、Pd の水酸化物があつて、ISA の錯体があるといった複雑な系なので時間依存を丁寧にみて、平衡状態を確認していく必要がある。
→（拝承）

2.3 (2-3) 人工バリア等処分場の機能への影響に係る検討

2.3.1 日時

2020年12月15日(火) 13:20~16:25

2.3.2 場所

オンライン会議（原環センター第2会議室、原子力機構地層処分基盤研究施設 4 階大会議室）

2.3.3 議事

- (0) はじめに
- (1) 先進的セメント系材料の地下水との反応挙動評価、先進的セメントー緩衝材相互作用モデルの高度化
- (2) ナチュラルアナログによる緩衝材の長期安定性の検証
- (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) 硝酸塩の現象解析モデルの妥当性検討

2.3.4 配布資料

- 資料 2-3-1 先進的セメント系材料の地下水との反応挙動評価、先進的セメントー緩衝材相互作用モデルの高度化
- 資料 2-3-2 ナチュラルアナログによる緩衝材の長期安定性の検証
- 資料 2-3-3 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
- 資料 2-3-4 硝酸塩の現象解析モデルの妥当性検討

2.3.5 出席者

【委員】 出光主査、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】 鈴木^寛殿、小川殿

【オブザーバー】 青柳殿（METI）、山田殿・青木殿（原子力規制庁）、澤口殿・阿部殿（JAEA 安全研究センター）、小澤殿（JNFL 埋設）、守屋殿（JNFL 再処理）、中林殿（電中研）、林殿（電事連）

【事務局：JAEA】 亀井、三原、笹本、澤田、三ツ井、朝倉、芝本、花町、佐藤^信、木内

【事務局：RWMC】 田中^俊、大和田、藤井、植田、林、八木、長谷川、玉井、佐藤^成

2.3.6 議事録

(0) はじめに

事務局から第2回委員会として実施する中間評価の進め方について説明した。

(1) 先進的セメント系材料の地下水との反応挙動評価、先進的セメントー緩衝材相互作用モデルの高度化

1) 先進的セメント系材料の地下水との反応挙動評価

- ・ C-A-S-H が重要なのは理解できるが、1 つの相のみで 5 成分が支配される現象は自然界では稀ではないか。Si 濃度はアモルファスシリカによって支配される、など、対象とする系で生じる鉱物組み合わせを最初に整理したほうがいい。
→（拝承）合成した C-A-S-H の溶解試験については、固相組成を NMR で分析中である。アモルファスシリカなどの存在はそうした分析で確認する。
- ・ C-A-S-H モデルの内容の説明が不足している。モデルの特徴、長所、短所等を示すべき。
→（拝承）C-S-H のモデルは水酸化カルシウムとトバモライトの固溶体として表現したもの。C-A-S-H はそれにアルミが加わったもの。
- ・ 長期的な評価をする際、フライアッシュの反応率をどう設定するかを視野に入れるべき。

→ (拝承)

2) 先進的セメント-緩衝材相互作用評価モデルの高度化

- 再指摘だが、評価モデルが実験と整合しない原因を理解するためには液相組成の比較が有効である。それができないのであればできるようなバッチ試験のような単純な実験を先に行ったほうが良いのではないか。

→ 間隙水の分析は分析難しいが、接触液の分析は行っており、解析結果とも比較している。第3回委員会で報告する。

- 先行研究データとの関係も踏まえて新しい結果を示すべき。HFSCのデータは少なくとも、OPCやフライアッシュセメントについては多くの実験データがある。

→ (拝承)

(2) ナチュラルアナログによる緩衝材の長期安定性の検証

- Feの3価ノントロナイトや2価のサポナイトも見られており、この系での酸化還元はどう考えたらいいのか。また、処分環境との対応で酸化還元はどう整理されるのか。

→ フィールドではアルカリ流体は還元環境で流動しているがトレンチで調査可能なところでは表層に近く酸化の影響は受けていると思われる。反応後に酸化環境になったのか、酸化環境で反応したのかも詰め切れなく、その評価はなかなか難しいと感じている。スメクタイトはサポナイトともノントロナイトともとれる組成のものが多く、試料分析で鉄2価、3価について調べることができないか検討しているところである。処分環境では、スメクタイト化は2000年程度でも成長過程であることを踏まえると、閉鎖後長期のプロセスとして還元環境での反応を考えればよいのかと思う。

→ XAFSで鉄2価、3価を微小領域で測れたりすることもあるので、データとしてそろえたほうがよいと思う。

→ XAFSについては、具体的な計画はまだしていないので、今後検討したい。

- パラワン島で時間に応じて(スメクタイト化の)反応が進んでいるわけではないという説明について、そうすると時間経過というより何らかの条件がそろったときにそれぞれの場所で反応が起きているとみてよいということか。

→ そう考えている。大きな岩片が多いものはスメクタイト化が進まずそのまま残るものが多い。そのため、スメクタイト化をスメクタイト含有率でみると時間との相関を関係づけることができなかった。

- もともとスメクタイトがなかったところにスメクタイトができたということで、時系列的に反応物と生成物が固定されているとみて構わないか。

→ はい。スメクタイトは初生鉱物でなく、風化かアルカリ(変質)で生成したが、量比の比較からアルカリでできたものが圧倒的に多い。

- 途中で酸化還元環境が変わっているということはないのか。

→ 可能性はある。陸上ではなく浅い海域で反応したと考えており、何らかの酸化の影響があったと考えているが、酸化還元環境がどう変化したかは明確にはわからない。

→ サポナイトが酸化されてノントロナイトに変わることはあるのか。

→ その可能性は少ないと思うが、明確に否定はできない。比較的酸化的な環境でできたものがノントロナイトではないかと今のところ推測している。

(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

- ガスの発生、ガス移行から破過現象に関しては閾値まで追求した現実的なシナリオの整理を

していただきたい。

→処分坑道や止水プラグも見据えた処分施設全体を考慮した現実的なガスシナリオを整理するようNUMO殿からも助言いただいている。高ガス圧の想定も含む、より現実的なシナリオの整理を進めていく。

- ・ 再破過試験実施にあたっては何をもって自己修復としたのか事前に決めておき、初期の透気経路とも比較し本当に自己修復されたのか、再破過試験の時点ではどうなったのか、透水性を比較することで自己修復を定量的に評価できるように進めていただきたい。
→解体調査による破過経路の追跡により自己修復の確認を実施する。解体調査後の供試体の一部を用いて透水試験を行い、全体の透水性と比較することで人工バリアの透水性の変化を確認できないか検討している。
- ・ 核種移行を考慮する際に重要と考えられるが、破過した時の間隙水量は測定しているか。
→各面の間隙水量、ガス圧は測定している。液相を汚染水と汚染されていない水とに分けられる解析手法についても追求している。
- ・ 再破過試験では一回目の破過試験と同じところからガスが抜けるとは限らない。同じところから抜ければガスが抜けやすくなる要因を推定できたり、別の方向から抜ければ修復の完了の確認になったり等の考察につながるので注視いただきたい。
→（拝承）発表の中で説明したメカニズムにより破過現象、自己修復は説明できると考えている。
- ・ 自己修復の確認としてX線CT等の非破壊試験による解体後供試体の調査ができないか。破過箇所を小分けにした状態での測定が有効ではないかと考える。
→方法調査する。有効であれば工程上来年度以降となると思うが、実施を検討する。
- ・ 形状に起因する不均質な変形、ガスによる選択的な破過現象を表現できるモデルの構築が本検討の期待事項であると考え。
→来年度以降の解体調査及びTRU処分施設を対象とした解析で検討したい。
- ・ 分割モデルでは各境界を不透気と設定しているが、これでは全ての影響要因を不飽和の透水透気パラメータに押し込めているように見えるので、設定の根拠が必要である。
→境界の影響について今後検討する。
- ・ 核種移行について検討する際には核種の種類についても考慮いただきたい。
→（拝承）

（4）硝酸塩の現象解析モデルの妥当性検討

- ・ モデルの精度も非常に上がっていると思うが、このモデルを実際の処分環境に適用出来るという事に、どのように繋げていくかが問題となる。地層深くの事例が必要になるので、ナチュラルアナログのようなものは難しいかもしれないが、アンテナを広げて解析対象を模索できないか？
→（拝承）。モデルの確証のため、実験を通して出来ることがあれば検討していきたい。過去には広島県生口島にて、計算結果と実測値が非常に合致する定量性で成功したナチュラルアナログがあり、他にもトライした事はある。今後も、適した解析対象を模索していく。

3. 令和2年度 第3回 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発検討委員会

3.1 日時

2021年2月8日(月) 9:30～13:00

3.2 場所

オンライン会議（原環センター会議室、原子力機構地層処分基盤研究施設4階大会議室）

3.3 議事

(0) 開会

(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

3.4 配布資料

資料3-1① 令和2年度第2回 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発検討委員会 中間評価
議事録－(2-1) 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3-1② 令和2年度第2回 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発検討委員会 中間評価
議事録－(2-2) 放射性廃棄物の特性、放射性核種の移行・反応に係る検討－

資料3-1③ 令和2年度第2回 TRU 廃棄物処理・処分技術高度化開発検討委員会 中間評価
議事録－(2-3) 人工バリア等処分場の機能への影響に係る検討－

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

3.5 出席者

【委員（オンライン）】出光主査、望月委員、桐島委員、佐々木委員、半井委員、福士委員

【技術アドバイザー：NUMO（オンライン）】石田殿、鈴木覚殿、小川殿

【オブザーバー】安楽殿（METI）

【オブザーバー（オンライン）】山田殿（原子力規制庁）、向井殿・澤口殿・阿部殿（JAEA 安全研究センター）、守屋殿（JNFL 再処理）、中林殿（電中研）、林殿（電事連）

【事務局：JAEA（オンライン）】亀井、牧野、三原、澤田、笹本、三ツ井、北村、岩田、紀室、佐藤信、ウォーカー、芝本、朝倉、花町、鐵、館、木内、佐藤成

【事務局：RWMC】田中俊、大和田、藤井、八木、植田、櫻木、林、長谷川、玉井、深谷、伊藤、丸山

3.6 議事録

（1）はじめに

事務局から第 3 回委員会の開会宣言の後、RWMC 田中・JAEA 亀井殿・METI 安楽殿から挨拶の後、当委員会の主査である出光先生から挨拶いただいた。

（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

- ・ 前回の中間報告を受けての今回の報告の感想としては、製作方法に関してはまだ残っている部分もあるが、その上で目標の設定、その後の試験の実施などうまく進んでいるという印象であった。
- ・ 内部充填材の施工性及び製作性に関してよく理解できた。プレキャスト方式に関しては引き続き検討して頂きたい。
- ・ 構造健全性として、内圧が厳しいとなると全体設計の見直しになってしまうことを危惧するが、概ね順調に進んでいると思われる。

② 陰イオン核種に対する閉じ込め技術の開発

- ・ 吸着材については、事前にジオポリマーとか調べていただいたが、ヨウ化物イオンに対してはいいのがあまりなさそうである。オキソ酸については、ある程度吸着するようなものがあるが、残念ながらヨウ素酸については、還元環境でいいというのは、なかなかなさそうで、苦慮しているところ。皆さんの方でも何か情報あれば、是非お知らせいただきたい。

（3）閉鎖前安全性の評価技術整備

- ・ スライド（ページ 7）の空気雰囲気では、発熱量が塩濃度に明確な依存性はなく、窒素雰囲気では、塩濃度高い方が発熱量は多くなっている結果より、アスファルトが空気雰囲気では酸素で燃やされている状態だが、窒素雰囲気ではアスファルト中に含まれる硝酸塩が酸化剤になってアスファルトを燃焼・分解していることが示されると思う。空気が十分にある環境で火災が起こるときは、アスファルト中に存在する塩濃度はそこまで気にしなくて良く、ただ酸欠状態で蒸し焼きのような状態のときには、塩濃度が十分なファクターになる。また、消火剤として二酸化炭素、酸素を吸収するような消火剤を使っても、効き目が期待通りでない可能性を示差しているようにみえますがいかがか。
→反応については、先月得られたばかりの結果であり、まだ考察ができていないのが現状であり、ご指摘の点も踏まえて今後検討していきたい。
- ・ スライド（ページ 8）のアスファルト成分の分解で、低温でやっているときにはアスファルテン分が増加し、芳香族分、レジン分が分解して縮合してアスファルテン分になっているという理解でよろしいか。
→アスファルト組成割合の分析結果であり、今回は絶対量で評価していないので、その辺も

今後見たいと思う。

- 塩の含有量と記載しているが、塩で良いのか、硝酸量にした方が良いのか。
→ 模擬アスファルト固化体①には硝酸ナトリウム、亜硝酸ナトリウムおよびリン酸等が含まれており、塩についてはこれらを含めて 45wt% と記載しています。
- スライド（ページ 9）の放射線影響での照射前後で変化を追いかけるということで非常に興味深いと思います。有機物、無機塩、あとサンプルに水分が含まれているかわかりませんが、有機物だけでなく他成分の化学分析も丁寧に実施して頂ければいいと思う。
→（拝承）

（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

- C-14 の化学状態分析は重要。AMS でどうやって化学状態を知るのか。
→ 事前にクロマトで分離／分画する。溶存種はある程度同定できるが、ガス状の方が非常に難しい。海外の報告ではガス状の C-14 を重要視しているが、ガス発生挙動と併せて今後の課題。
- スライド 11、ホットサンプルでの窒素の分布は均一と考えてよいか。GD-OES で極めて長時間当てているが、最初の 1 分ぐらい、表面の 10 ミクロンぐらいのところの分析が重要なのではないかと。横軸長くてつぶれてしまっているところだが、そのあたりの情報を少し丁寧に採ることはできそうか。
→ 基本的には窒素の分布は均一と考えているが、前回にもコメントあり、検討が必要。左図のようになるとすれば、表面の部分は避けて、ある程度掘ったところ、安定しそうな領域の値を以って定量値としようかと考えている。
- バルク量としては、その部分の一定の値を採択するということかと理解。実際に分析してみて、また装置の校正をするという対応と考える。
→ 表面の影響については、しっかり除くようにしたいと思っている。
- 最表面の部分の溶出反応とバルクの部分とは異なる可能性がある。表面の酸化層からの C-14 の溶出、別のメカニズムが働くとも考えられるので、この分析の数値、depth profile および溶出の挙動を、整合性を持って説明できるようにした方がよい。
→ 最表面の扱い、このフェーズの中でうまく説明するところまでは難しいかもしれないが、重要な課題と認識し、溶出モデルを考えていきたい。

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

- C-A-S-H についてはその準安定性が重要であり、今後取得される熱力学的なパラメータを使ってその予測をすることが望まれる。
→（拝承）
- HFSC/緩衝材接触試における HFSC の間隙増加の原因として、フライアッシュの溶解を挙げている理由は何か。
→ 変質部と健全部の比較により、変質部ではフライアッシュ周辺に空隙ができていたことによる。変質部ではフライアッシュ以外の部分にも空隙は存在しているようである。報告書には観察結果も示したい。
- 鉄サポナイト中の Fe^{2+} が不安定で大気に触れただけで酸化してしまう（ Fe^{3+} だが 3 八面体の構造をもつフェリアンサポナイト）ことが多く、なかなか普通に Fe の 2 価、3 価を調べるのはなかなか難しいという印象を持っている。

→ 参考にさせていただきたい。EELS の分析についてはまだ十分分析できていないので、サポナイトーノントロナイトの中間組成を持つ充填物のスメクタイト等引き続き分析で確認したいとは考えている。

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

- ・ フィッティングのパラメータは試験体全体で均一と設定しているのか、それとも製作によって生じる不連続性をなんらかの仮定により要素（層境界等）ごとに与えているのか。
→ 分割モデル毎に全体を均一と設定してフィッティングしている。
- ・ スケールアップするときには現象に即したフィッティングを行わなければその試験ケース限りのフィッティングになってしまい、拡張が難しくなってしまうと危惧される。
→ 不連続の原因はいくつか想定しており、例えば層境界の場合では透過の異方性を考慮したフィッティングが必要であると考えている。再破過試験や解体調査により製作に係る想定事項について調査し、現象に即したフィッティングを試みる。
- ・ 再破過試験の実施により、同じところから破過するか破過しないかの再現性やガス道の生成等の新しい知見が得られると考えられる。それらを踏まえたモデルの再構築を実施していただきたい。
→ （拝承）

④ 有機物の影響評価モデルの高度化

- ・ テクネチウムの試験に関しては、固相がアモルファスを維持しているのかどうか。また、グルコン酸とイソサッカリン酸では同じような値になると考えられるので、固相の情報が気になるところ。
→ 熱力学計算で少し検討してみるとともに、より信頼できるデータを出していきたい。
- ・ ISA 錯体のセメントへの収着に関しては、カルシウム等のセメントからの溶出成分との相互作用についても抑えておく必要があるのではないか。
→ （拝承）

⑤ 硝酸塩の現象解析モデルの妥当性検討

- ・ NH_4^+ を水質環境で考えると、水溶液中での主要な陽イオンとの競合になると思われるため、 Na^+ との比でレビュー等を見たらいいのではないかと。また、カリウムと同じような挙動をすると考えられているが、実際にその通りなのかの精査も必要ではないか。
→ 本年度は、スメクタイトのアンモニウム型化が起きないかということに対して、調査を実施した。幌延も NH_4^+ 濃度が高いが、地下水中の主要な陽イオンとしては Na^+ が多い。地下水中の NH_4^+ は、粘土鉱物を介したカリウムとのイオン交換で濃度が決まっていると推測されている。このため、 NH_4^+ が長期間にわたって粘土鉱物の相関イオンとして存在し得ることが示唆される。一方、粘土鉱物のイオン型としては、 Na^+ の多い地下水なので、ナトリウム型であると考えられる。
- ・ 一般的な環境で Na^+ よりも NH_4^+ の方が高濃度になるとか、まばらになるとか、そういう条件というのは起こりえないという想定でよろしいですか。
→ 実際の地下水の環境では、高濃度の NH_4^+ が存在する場合、溶液中の陽イオンとしては、ナトリウム又はカルシウムが主要な場合が多い。一方、埋立地のような場所では、高濃度の NH_4^+ は廃棄物と考えられ、そのようなケースでは、アンモニウム型のスメクタイトというのは生じえる可能性があると考えられる。

- TRU 廃棄物からのアンモニアの濃度がどこまで上がるかによるかと思うので、今後ともこの研究でそういった所を示してほしい。
→ (拝承)

