JAEA-Research
2008-104

普通ポルトランドセメント水和物と海水系地下水との反応によるpH上昇現象の評価手法

Evaluation Method of pH Elevation Due to Reaction between Hydrates of Ordinary Portland Cement and Saline Groundwater

増田 賢太　小田 治恵　中西 博*　佐々木 良一*
高瀬 敏郎*　赤木 洋介*　藤田 英樹*　根岸 久美*
本田 明

Kenta MASUDA, Chie ODA, Hiroshi NAKANISHI*, Ryoichi SASAKI*
Toshio TAKASE*, Yosuke AKAGI*, Hideki FUJITA*, Kumi NEGISHI*
and Akira HONDA

地層処分研究開発部門
ＴＲＵ廃棄物処分研究グループ

TRU Waste Disposal Research Group
Geological Isolation Research and Development Directorate

March 2009

Japan Atomic Energy Agency　日本原子力研究開発機構

JAEA-Research

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

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

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

© Japan Atomic Energy Agency, 2009

普通ポルトランドセメント水和物と海水系地下水との反応による pH 上昇現象の評価手法

日本原子力研究開発機構
地層処分研究開発部門　地層処分基盤研究開発ユニット
増田　賢太※，小田　治恵，中西　博[*1]，　佐々木　良一[*2]，
高瀬　敏郎[*2]，赤木　洋介[*2]，藤田　英樹[*3]，根岸　久美[*3]，本田　明

(2008 年 12 月 16 日　受理)

放射性廃棄物の処分施設に使用されると想定されるセメント系材料は，地下水との反応によって，アルカリ性の間隙水を形成する。このアルカリ性の間隙水は，処分施設内の化学的条件を変化させ，核種の移行挙動や他のバリア材に影響を及ぼすことが考えられる。地下水は降水起源のものと海水起源のものに大別される。海水系地下水には，高濃度の塩化物イオンが含まれており，この塩化物イオンは，セメント水和物の一種であるハイドロガーネットと反応してフリーデル氏塩を生成し，セメント間隙水の pH を上昇させる可能性がある。

そこで本研究では，実際に処分場での使用が想定される普通ポルトランドセメントペーストに含まれると考えられるアルミネート系水和物（エトリンガイト及びハイドロガーネット）及びポルトランダイトを使って海水レベルの濃度の塩化ナトリウム水溶液による浸漬実験を行い，アルミネート系水和物と塩化ナトリウム水溶液との反応による pH 上昇を確認した。また普通ポルトランドセメントペーストの塩化ナトリウム水溶液への浸漬を行い，既往の化学平衡計算結果が示したように，pH 上昇が実際に起こるのかを確認するとともに，その評価方法について検討した。その結果，ハイドロガーネットとポルトランダイトを塩化ナトリウム水溶液と反応させると塩化物イオンを取り込みつつ，フリーデル氏塩を生成し，水酸化物イオンを放出することで，間隙水の pH が上昇することを実験的に確認し，さらに化学平衡計算により再現できることを示した。また塩水による OPC ペーストの浸漬実験では，既往の熱力学的モデルによる計算結果ほど pH が上昇しないことを確認した。そこで，初期セメント水和物におけるアルミニウムの分配を実験的に測定し，これに基づいたセメント初期水和物モデルを考案し適用した。これにより，普通ポルトランドセメントペーストと塩化ナトリウム水溶液との反応における pH 上昇を再現することができた。この初期水和物モデルを普通ポルトランドセメントペーストと人工海水との反応にも適用して化学平衡計算を行い，実験結果と比較することにより，その有効性を確認した。

核燃料サイクル工学研究所（駐在）：〒319-1194　茨城県那珂郡東海村村松 4-33
※技術開発協力員
*1　（財）原子力環境整備促進・資金管理センター
*2　三菱マテリアル株式会社
*3　株式会社太平洋コンサルタント

Evaluation Method of pH Elevation Due to Reaction between Hydrates of Ordinary Portland Cement and Saline Groundwater

Kenta MASUDA※, Chie ODA, Hiroshi NAKANISHI*1, Ryoichi SASAKI*2,
Toshio TAKASE*2, Yosuke AKAGI*2, Hideki FUJITA*3, Kumi NEGISHI*3 and Akira HONDA

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

(Received December 16, 2008)

Cementitious materials produce a hyper-alkaline pore water by reaction between cement hydrates and permeating groundwater in a radioactive waste repository. A hyper-alkaline pore water can affect behavior of radio-nuclides and other barrier components by changing the chemical conditions in the repository. Groundwater can be classified as being either saline type or fresh water type. Saline groundwater contains high concentrations of chloride ions, which possibly elevate the pH of cement pore water by reacting with hydrogarnet and producing Friedel's salt.

Calcium aluminate hydrates (hydrogarnet and ettringite) and portlandite, which can be found in hydrated ordinary Portland cement (OPC), were immersed in a sodium chloride solution, which had concentrations similar to those found in seawater. The pH elevation accompanied with the formation of Friedel's salt from the reaction of hydrogarnet and portlandite with chloride ions was observed. This process could also be predicted by thermodynamic calculation. The experiments were repeated using hardened OPC paste to confirm the pH elevation in a real system and to assess the accuracy of the predicted pH elevation by thermodynamic calculation. The pH elevation in the immersion experiment of OPC paste in sodium chloride solution was less than that predicted by thermodynamic calculation. This deviation can be explained by the residual aluminum, after being partially consumed by AFt and/or AFm, not being wholly assigned to hydrogarnet, and a better agreement between the thermodynamic calculations and the experimentally measured results can be made assuming a fraction of aluminum is incorporated into the C-S-H gel phase. The previous idea of aluminum distribution among OPC hydrates was confirmed to be valid in this case by comparing experimental data with predicted values.

Keywords : Cement, Saline Groundwater, pH, Thermodynamic Calculation, Chemical Alteration

---

※ Collaborating Engineer
*1 Radioactive Waste Management Funding and Research Center
*2 Mitsubishi Materials Corporation
*3 Taiheiyo Consultant Corporation

目　次

1. はじめに 1
2. 特定のセメント水和物（カルシウムアルミネート水和物及びカルシウムスルフォアルミネート水和物）と塩水の反応 2
2.1 目　的 2
2.2 塩水を用いたセメント水和物の浸漬実験 3
2.2.1 実験方法 3
2.2.2 実験結果 6
2.3 セメント水和物と塩水との反応による pH 上昇メカニズムの検討 9
2.4 まとめ 11

3. 普通ポルトランドセメント（**OPC**）ペーストと塩水の反応 12
3.1 目　的 12
3.2 **OPC** ペーストと塩水の反応における化学平衡計算（予察計算） 12
3.3 塩水を用いた **OPC** ペーストの浸漬実験 14
3.3.1 実験方法 14
3.3.2 実験結果 16
3.4 初期生成水和物モデルの検討 19
3.4.1 アルミネート系水和物種の設定に関する検討 19
3.4.2 C-S-H に取り込まれる Al 量を考慮した初期生成水和物モデルの構築と適用性判断 20
3.5 まとめ 26

4. 普通ポルトランドセメント（**OPC**）ペーストと人工海水の反応 27
4.1 目　的 27
4.2 人工海水を用いた **OPC** ペーストの浸漬実験 27
4.2.1 実験方法 27
4.2.2 実験結果 30
4.3 浸漬実験の化学平衡計算 35
4.4 まとめ 39
5. おわりに 40
参考文献 41
付　録 43
付 録 1　アルミネート系水和物浸漬実験　固相の X 線回折図 47
付 録 2　浸漬実験の化学平衡計算出力データ 49
付 録 3　OPC ペースト浸漬実験の化学平衡計算 出力データ 75
付 録 4　熱分析チャート 111
付 録 5　EPMA によるマッピング画像から推定した C-S-H 中の Al 量 114

付 録 6　改良した初期生成水和物モデルを使った化学平衡計算 出力データ 117
付 録 7　人工海水を用いた浸漬実験の初期試料及び浸漬試料の X 線回折図 129
付 録 8　人工海水を用いた浸漬実験の初期試料及び浸漬試料の熱分析チャート 131
付 録 9　人工海水を用いた浸漬実験の化学平衡計算　出力データ 139

Contents

1. Introduction 1
2. The reaction of NaCl solution with selected cement hydrates 2
2.1 Objective 2
2.2 Batch immersion experiment of cement hydrates in NaCl solution 3
2.2.1 Experimental procedure 3
2.2.2 Experimental result 6
2.3 The mechanizum of pH elevation due to reaction between cement hydrates and NaCl solution 9
2.4 Summary 11

3. The reaction of NaCl solution with hardened OPC paste 12
3.1 Objective 12
3.2 Geochemical calculation of reaction between hardened OPC paste and NaCl solution 12
3.3 Batch immersion experiment of hardened OPC paste in NaCl solution 14
3.3.1 Experimental procedure 14
3.3.2 Experimental result 16
3.4 Optimaization of the mineralogical composition of the initial hydrated OPC phase 19
3.4.1 Optimaization of the kind of aluminate phase in initial hydrated OPC phase 19
3.4.2 Mineralogical composition of the initial hydrated OPC phase considered Al content in C-S-Hgel 20
3.5 Summary 26

4. The reaction of artificial sea water with hardened OPC paste 27
4.1 Objective 27
4.2 Batch immersion experiment of hardened OPC paste in artificial sea water 27
4.2.1 Experimental procedure 27
4.2.2 Experimental result 30
4.3 Geochemical calculation to simulate experiments 35
4.4 Summary 39
5. Afterword 40
References 41
Appendixes 43
Appendix-1 X-ray diffraction pattern of the solid phases that aluminate hydrates were immersed 47
Appendix-2 Geochemical calculation to simulate experiments that aluminate hydrates were immersed 49
Appendix-3 Geochemical calculation to simulate experiments that hardened OPC pastes were immersed in the NaCl solution 75
Appendix-4 Thermal analysis charts 111

Appendix-5 The Al content of C-S-H gel was measured by
Electron Probe Micro Analyzer (EPMA) 114
Appendix-6 Geochemical caluculation using amended mineralgical composition
of initial OPC hydrated phases 117
Appendix-7 The X-ray diffraction patterns of the initial hardened OPC paste and
the hardened OPC paste immersed the artificial sea water 129
Appendix-8 Thermal analysis charts of the initial hardened OPC paste and
the hardened OPC paste immersed the artificial sea water 131
Appendix-9 Geochemical calculation to simulate experiments that
hardened OPC pastes were immersed in the artificial sea water 139

図目次

図 2.2-1　合成したハイドロガーネットのＸ線回折図.....4
図 2.2-2　合成したエトリンガイトのＸ線回折図 4
図 2.2-3　ハイドロガーネット-ポルトランダイト共存系浸漬実験の液相 pH 経時変化 7
図 3.3-1　OPC ペースト 初期試料のＸ線回折結果.....14
図 3.3-2　塩水及びイオン交換水に OPC ペースト粉末を浸漬した際
の浸漬液の pH 経時変化 17
図 3.3-3　塩水及びイオン交換水に浸漬した OPC ペースト粉末のＸ線回折結果.....18
図 3.4-1　OPC ペースト断面の二次電子像 21
図 3.4-2　C-S-H 中の Si/Ca mol 比と Al/Ca mol 比の関係 22
図 3.4-3　C-S-H の Si/Ca mol 比と Al/Ca mol 比の関係から導いた
C-S-H の非調和溶解による変質に伴う C-S-H の Al 取り込み量.....24
図 4.2-1　OPC ペースト初期試料のＸ線回折結果 28
図 4.2-2　人工海水に OPC ペースト粉末を浸漬した際の浸漬液の pH 経時変化.....30
図 4.3-1　人工海水による OPC ペースト水和物浸漬実験における
液相分析結果と化学平衡計算結果の比較.....38

表目次

表 2.1-1　Glasser et al.(1998)によるハイドロガーネットを塩化ナトリウム水溶液及びイオン交換水に浸漬した際の液相及び固相分析結果 (浸漬日数：173 日　浸漬温度：25℃) 2
表 2.2-1　C_3A からのハイドロガーネット及びエトリンガイトの作製条件 3
表 2.2-2　塩水を用いたセメント水和物の浸漬実験の試験ケース 5
表 2.2-3　塩水を用いたセメント水和物の浸漬実験の評価項目 5
表 2.2-4　粉末 X 線回折の測定条件 6
表 2.2-5　各試験ケースの液相 pH 及び液相の化学分析結果（浸漬 50 日及び 360 日） 6
表 2.2-6　液相の化学分析結果より求めた固相の水和物組成 7
表 2.2-7　粉末 X 線回折測定による同定結果 8
表 2.2-8　固相の化学分析結果 8
表 2.2-9　固相の化学分析結果より求めた固相の水和物組成 9
表 2.3-1　浸漬実験の実験値と化学平衡計算結果の比較（液固比 ＝2.5） 9
表 2.3-2　アルミネート系水和物-ポルトランダイト共存系と塩水の反応における化学平衡計算結果（液固比 ＝2.5） 10
表 3.2-1　初期生成水和物モデルの設定に使用した OPC の化学組成 12
表 3.2-2　Berner et al.（1992）の考えに基づく初期水和生成物モデルの設定手順 12
表 3.2-3　予察計算に用いた初期生成水和物モデル 13
表 3.2-4　OPC ペーストー各水溶液との反応における液相組成の予察計算結果 13
表 3.3-1　塩水による OPC ペーストの浸漬実験に関する浸漬条件 15
表 3.3-2　粉末Ｘ線回折の測定条件 16
表 3.3-3　熱分析装置及び測定条件 16
表 3.3-4　塩水及びイオン交換水による OPC ペースト粉末浸漬実験（360 日浸漬）の液相組成分析結果 17
表 3.3-5　塩水及びイオン交換水に浸漬した OPC ペースト粉末の熱分析結果 18
表 3.3-6　塩水及びイオン交換水に浸漬した OPC ペースト粉末の化学成分分析結果 18
表 3.4-1　OPC ペーストのＸ線回折結果と予察計算に使用した初期生成水和物モデルの比較 19
表 3.4-2　アルミネート系水和物種の設定 見直し手順 19
表 3.4-3　アルミネート系水和物種の設定を見直した初期生成水和物モデル 20
表 3.4-4　実験値と計算結果の比較 20
表 3.4-5　C-S-H 中の Ca，Si，Al の定量結果 21
表 3.4-6　EPMA によるマッピング分析から推定した Al 含有量 22
表 3.4-7　C-S-H 中に取り込まれた Al 量を考慮した初期生成水和物モデルの設定手順 23
表 3.4-8　C-S-H 中に取り込まれた Al 量を考慮した初期生成水和物モデル 23
表 3.4-9　解析結果と実験結果の比較 24

表 3.4-10　C-S-H の Si/Ca mol 比と Al/Ca mol 比の関係から導いた C-S-H の
非調和溶解による変質に伴う C-S-H の Al 取り込み量 25
表 4.2-1　人工海水による OPC ペーストの浸漬実験に関する浸漬条件 28
表 4.2-2　粉末Ｘ線回折の測定条件 29
表 4.2-3　熱分析装置及び測定条件 29
表 4.2-4　人工海水及びイオン交換水を用いた OPC ペースト
浸漬実験（180 日浸漬）の液相組成分析結果 31
表 4.2-5　人工海水及びイオン交換水を用いた OPC ペースト浸漬実験（180 日浸漬）
の初期試料及び浸漬した固相のＸ線回折による同定結果 32
表 4.2-6　イオン交換水に 180 日間浸漬した OPC ペーストのＸ線回折による同定結果 32
表 4.2-7　人工海水及びイオン交換水に 180 日間浸漬した OPC ペーストの熱分析結果 33
表 4.2-8　人工海水及びイオン交換水を用いた OPC ペースト浸漬実験（180 日浸漬）
における固相の化学成分分析結果 34
表 4.2-9　人工海水及びイオン交換水を用いた OPC ペースト浸漬実験（180 日浸漬）
の固相 100 g 中の Ca，Si，Mg モル数及び（Ca+Mg）/Si モル比 35
表 4.3-1　本解析に使用した初期生成水和物モデルにおける水和物とその量 35
表 4.3-2　浸漬条件（液固比）の異なる浸漬試料の構成水和物に関する分析結果
と初期水和物設定モデルとの比較 36
表 4.3-3　人工海水を用いた OPC ペースト浸漬実験における液相分析結果と
モデル計算結果の比較 37

This is a blank page.

1. はじめに

放射性廃棄物の地層処分施設では，その用途に応じて，様々な形態でセメント系材料を使用することが考えられる。例えば TRU 廃棄物を処分する場合には，空洞安定性の確保という目的でコンクリートが支保工として使用されるほか，セメントペースト，モルタル，あるいはコンクリートが充填固化材や構造躯体として使用されることが想定されている（電気事業連合会・核燃料サイクル開発機構, 2005）。このセメント系材料に地下水が流入（浸透）すると，セメント水和物の地下水への溶脱現象や地下水成分との反応による二次水和物生成が起こると考えられる。これに伴い周囲の地下水組成の変化（pH の上昇）が生じて，放射性核種の挙動や周囲の天然バリア（岩盤）及び人工バリアである緩衝材に影響を与える可能性がある。このため，地下水とセメント系材料の反応による間隙水の化学的条件の変化を理解することは，核種移行挙動や他のバリア材に及ぼす影響を評価する上で重要である。

地下水には，降水系起源のものと海水系起源のものに大別され，その化学組成は広範囲に及んでいる(Yui, et al., 1999)。特に海水系高 pH 型地下水（SRHP）は，降水系高 pH 型地下水(FRHP)に比べ，高濃度の塩化ナトリウムを含んでおり，この塩化物イオンがセメント水和物と反応してフリーデル氏塩を生成し，セメント硬化体中の間隙水の pH を 13 以上に上昇させる可能性がある（電気事業連合会・核燃料サイクル開発機構, 2005，Glasser et al.,1998）。

そこで本報では，海水相当濃度（0.6mol/dm^3）の塩化ナトリウム水溶液（塩水）を用いて，単一セメント水和物の組み合わせによる浸漬実験や普通ポルトランドセメント（OPC）ペーストの浸漬実験を行い，塩水とセメント水和物及び OPC ペーストの反応により，浸漬液の pH が上昇するか確認を行うとともに，両方の実験について地球化学計算コード「PHREEQC」（Parkhurst and Appelo,1999）による化学平衡計算解析を実施し，pH 上昇機構の解明と評価手法について検討を行った。また実際の人工海水を用いた OPC ペーストの浸漬実験を行い，前述した pH 上昇の評価手法が, 人工海水と OPC ペーストの反応についても適用できるのか確認した。

2. 特定のセメント水和物（カルシウムアルミネート水和物及びカルシウムスルフォアルミネート水和物）と塩水の反応

2.1 目　的

Glasser et al.（1998）は，セメント水和物の一種であるハイドロガーネットを塩化ナトリウム水溶液に浸漬させると，ハイドロガーネットはポルトランダイトとフリーデル氏塩に分解し，表 2.1-1 に示すように浸漬液の pH が上昇すること，またハイドロガーネットとポルトランダイトを共に塩水に浸漬したケースの化学平衡計算から，固相にはフリーデル氏塩が生成され，平衡液の pH が上昇することを報告している。

表 2.1-1　Glasser et al.（1998）によるハイドロガーネットを塩化ナトリウム水溶液及びイオン交換水に浸漬した際の液相及び固相分析結果
（浸漬日数：173 日　浸漬温度：25℃）

NaCl濃度 (mol/dm^3)	液相pH	液相イオン濃度 (mol/dm^3)				平衡計算によるpH	反応後の固相			
		Na	Cl	Ca	Al		CH	HG	FS	AFm-CO_3
0.00	12.3	3.00E-03	3.00E-03	5.40E-03	3.00E-03	12.3	-	S	-	M
0.92	12.7	9.50E-04	8.60E-04	1.60E-04	2.10E-05	13.2	S	S	S	-
1.44	12.7	1.40E-03	1.30E-03	8.00E-05	2.20E-05	13.0	S	S	S	-

CH：Ca $(OH)_2$（ポルトランダイト），HG：$3CaO{\cdot}Al_2O_3{\cdot}6H_2O$（ハイドロガーネット），FS：$3CaO{\cdot}Al_2O_3{\cdot}CaCl_2{\cdot}10H_2O$（フリーデル氏塩）
AFm-CO_3：$3CaO{\cdot}Al_2O_3{\cdot}CaCO_3{\cdot}10H_2O$（モノカーボネート）

セメント水和物にはアルミネート系水和物として，ハイドロガーネット，ゲーレナイト水和物等のカルシウムアルミネート水和物やエトリンガイト，モノサルフェート等のカルシウムスルフォアルミネート水和物がある。このアルミネート系水和物と塩化物イオンが共存するとフリーデル氏塩を生成し，反応液の pH が上昇することが，Glasser et al.(1998) により示唆された。そこで本章では，カルシウムアルミネート水和物としてハイドロガーネット，カルシウムスルフォアルミネートとしてエトリンガイトをそれぞれ選定し，塩化ナトリウム水溶液を用いた浸漬実験から，アルミネート系水和物と塩化物イオン共存下の反応による pH 変化について調査を行った。また，実施した浸漬実験について，地球化学計算コード「PHREEQC」（Parkhurst and Appelo,1999）を用いた化学平衡計算による解析を行うとともに，実験しなかった他のアルミネート系水和物についても化学平衡計算を実施し，双方の結果からアルミネート系水和物と塩化物イオンが共存する系の pH 変化について検討した。

なお，Glasser et al.（1998）の報告では，表 2.1-1 に示すように，計算結果と実験結果に相違が見られた。この相違について Glasser et al.（1998）では考察されていないが，NaCl 濃度が 0.0mol/dm^3 時の固相には，モノカーボネート（AFm-CO_3）が存在することから，浸漬試験が大気下で実施され，大気中の炭酸イオンが浸漬液に溶け込み，浸漬液の pH 上昇が抑えられた可能性が高い。そこで，本章の実験では，大気からの CO_2 溶け込みの影響を少なくするため，雰囲気制御下で行った。

2.2 塩水を用いたセメント水和物の浸漬実験

2.2.1 実験方法

(1) ハイドロガーネット及びエトリンガイトの合成

(a) 使用材料

ハイドロガーネット及びエトリンガイトは，以下に示す試薬を使用して合成した。

・CaO 源（クリンカー原料）
　関東化学株式会社製　試薬炭酸カルシウム（アルカリ分析用）
・Al_2O_3 源（クリンカー原料）
　関東化学株式会社製　試薬酸化アルミニウム-α型（鹿特級）
・$CaSO_4$ 源（エトリンガイト原料）
　関東化学株式会社製　試薬硫酸カルシウム二水塩（特級）
・水
　イオン交換水

(b) 合成方法

セメントの構成鉱物の一つであるアルミネート相（$3CaO{\cdot}Al_2O_3$：以下 C_3A）を合成し，これを水和させることにより，ハイドロガーネット及びエトリンガイトを作製した。C_3A は，Ca と Al のモル比が 3:2 となるように酸化カルシウムと酸化アルミニウムを十分に混合してペレットを成型した後，白金製容器に入れ電気炉で 3 時間程度の焼成を 2 回繰り返して合成した。この際，焼成温度は 1450℃とした。C_3A からのハイドロガーネット及びエトリンガイトの作製条件を表 2.2-1 に示す。得られた C_3A を振動ミルで十分粉砕した後，ハイドロガーネットは C_3A だけで，エトリンガイトは二水石膏を C_3A に対して化学量論比となるように C_3A に添加して，密閉容器に水とそれぞれの固相を混合して反応させた。反応進行状況を X 線回折より確認し，C_3A のピークが検出されなくなった時点を反応終点とみなし，目的の水和鉱物を作製した。作製したハイドロガーネット及びエトリンガイトの X 線回折図を図 2.2-1，図 2.2-2 にそれぞれ示す。

表 2.2-1 C_3A からのハイドロガーネット及びエトリンガイトの作製条件

組成割合	ハイドロガーネットはC_3A単独 エトリンガイトは，1モルのC_3Aと3モルの二水石膏を混合
水／固体比	5
温度	50℃
攪拌	終始マグネットスターラーによる攪拌
乾燥	アルゴン雰囲気でろ過後，真空乾燥

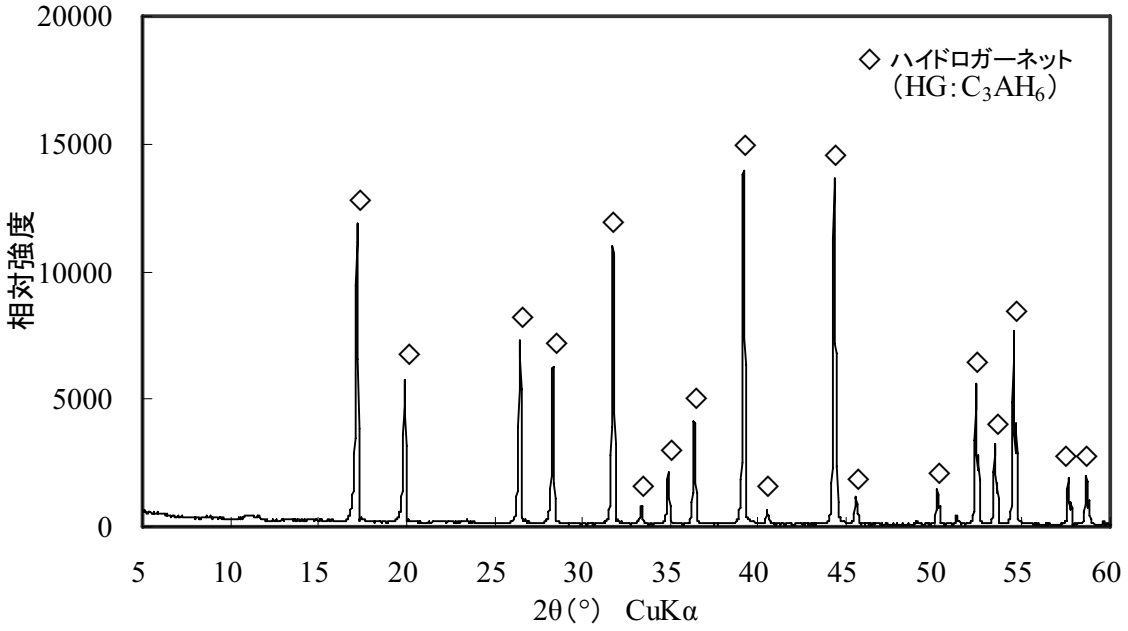


図 2.2-1 合成したハイドロガーネットのＸ線回折図

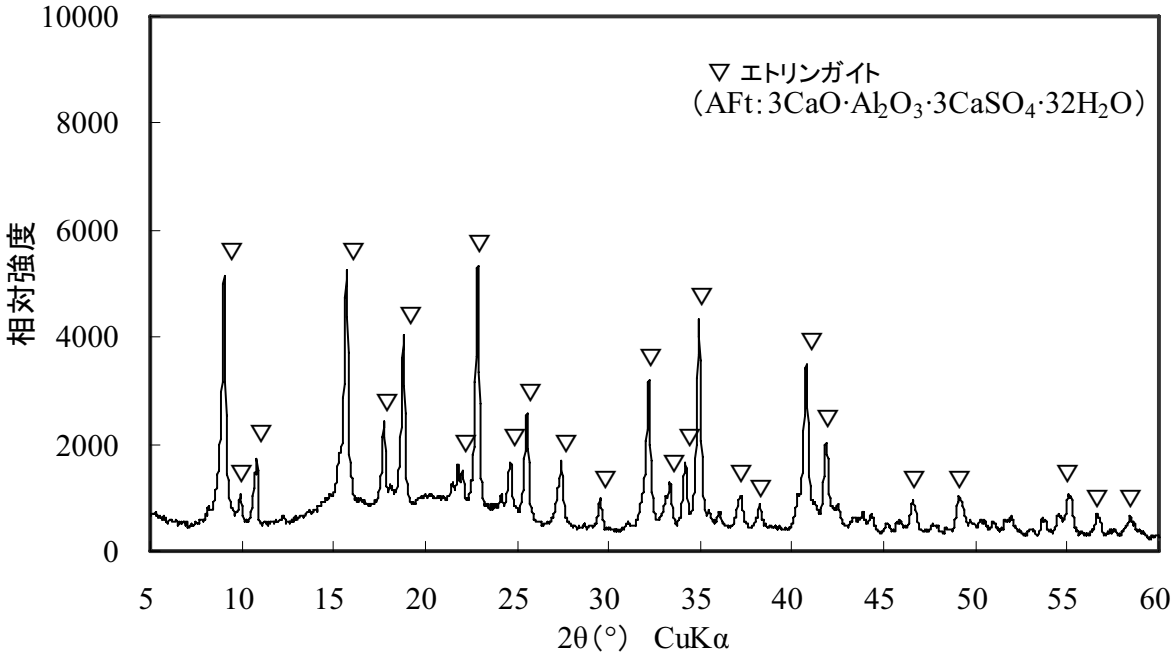


図 2.2-2 合成したエトリンガイトのＸ線回折図

(2) 実験方法

表 2.2-2 に浸漬実験の試験ケース及び実験条件を示す。ポルトランダイト（関東化学株式会社製 水酸化カルシウム（特級））と前述の方法で合成したハイドロガーネットまたはエトリンガイトを，表 2-2-2 に示す実験系で 0.6mol/dm^3 となるよう塩化ナトリウム（関東化学株式会社製　塩化カルシウム（特級））をイオン交換水に添加した水溶液（以下，塩水とする）とともにポリ容器に密封し，所定期間浸漬した。同一条件繰り返し数は n=2 とした。いずれの場合も，

試料のセットアップは空気中の二酸化炭素との反応による変質（炭酸化）を防止するため，アルゴンガス雰囲気下で実施された。また各試験における出発固相の浸漬液に対する割合は，化学平衡計算の解析結果に影響を与えない実験可能な固相量を地球化学計算コード「PHREEQC」（Parkhurst and Appelo,1999）を用いて算出して決定した。

表 2.2-2 塩水を用いたセメント水和物の浸漬実験の試験ケース

実験系	出発固相の浸漬液に対する割合（浸漬液1kgあたりの固相量）		浸漬期間	浸漬液	浸漬温度（℃）
	出発固相	固相量 (mol)			
AFt-CH系	エトリンガイト	0.1	50日	0.6mol/dm^3 NaCl水溶液（50g）	25
	ポルトランダイト	0.1			
HG-AFt－CH系	ハイドロガーネット	0.5			
	エトリンガイト	0.01			
	ポルトランダイト	0.5			
HG-CH系	ハイドロガーネット	0.5	360日		
	ポルトランダイト	0.5		イオン交換水	

※ HG：ハイドロガーネット($3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 6H_2O$)，AFt：エトリンガイト($3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 3CaSO_4 \cdot 32H_2O$)，CH：ポルトランダイト（$Ca(OH)_2$）

(3) 評価項目

所定期間浸漬した試料は，ろ過により固相と液相を分離し，表 2.2-3 に示す項目について測定した。なお，ろ過作業はアルゴン雰囲気で実施した。

表 2.2-3　塩水を用いたセメント水和物の浸漬実験の評価項目

実験系	評価項目	
	固相	液相
AFt-CH系	粉末X線回折（XRD）	pH，化学分析（Ca，Cl，Al，S）
HG-AFt－CH系	粉末X線回折（XRD）	pH，化学分析（Ca，Cl，Al，S）
HG-CH系	粉末X線回折（XRD），化学分析（Ca，Al，Na，Cl),	pH，化学分析（(Ca，Al，Na，Cl)

※ HG：ハイドロガーネット($3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 6H_2O$)，AFt：エトリンガイト($3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 3CaSO_4 \cdot 32H_2O$)，CH：ポルトランダイト（$Ca(OH)_2$）

(a) 液相

①pH の測定

液相の pH は，ガラス電極式 pH 計（(株）ホリバ製　F-14）を用いて測定した。

②化学分析

採取した液相に硝酸を加えて酸性にした後，0.45μm フィルターを用いてろ過した。Ca，Al，S，Na については，ICP 発光分光光度計（Varian 社製 VISTA AX CCD Simulataneous）による測定を行い，Cl についてはイオンクロマトアナライザ（東亜電波工業（株）製 ICA-5000）による測定を行った。

(b) 固相

①粉末X線回折（XRD）による結晶相の同定

採取した固相について，理学電機工業（株）製 RINT2500 を用いて，結晶相の同定を行った。表 2.2-4 に粉末X線回折の測定条件を示す。

表 2.2-4　粉末 X 線回折の測定条件

ターゲット	Cu
電流・電圧	50kV，250mA
スリット	DS1°　RS0.15mm　SS1°
走査速度	5°/min

②化学分析

JIS R 5202 に準拠し，固相中の CaO，Al_2O_3，Na_2O，Cl を測定した。

2.2.2 実験結果

(1) 液相（液相 pH 及び液相化学組成）

塩水に浸漬した各実験系の液相 pH 及び液相の化学分析結果を表 2.2-5 に示す。塩水中にエトリンガイトとポルトランダイトが共存する系では，液相 pH が 12.4 程度とポルトランダイト平衡に近い pH を示した。しかし，ハイドロガーネットがエトリンガイト及びポルトランダイトと共存，あるいはポルトランダイトのみと共存する系では，液相 pH が約 13.0 まで上昇する結果となった。図 2.2-3 は，塩水およびイオン交換水中にハイドロガーネットとポルトランダイトが共存した系の浸漬 360 日までの液相 pH の経時変化を示したものである。この図からイオン交換水中にハイドロガーネットとポルトランダイトが共存すると，液相の pH は 12.6 で一定となるのに対し，塩水中に共存したケースは，浸漬 50 日で液相 pH が 13，浸漬 180 日以降，pH は 13.5 付近まで上昇することが確認された。これらのことから，エトリンガイト等のカルシウムスルフォアルミネート水和物と塩化物イオンが共存した場合では液相の pH は上昇しないが，ハイドロガーネット等のカルシウムアルミネート水和物と塩化物イオンが共存すると，液相の pH は上昇するものと推察される。

表 2.2-5 各試験ケースの液相 pH 及び液相の化学分析結果（浸漬 50 日及び 360 日）

実験系	No	浸漬液	浸漬期間	pH		濃度（mol/dm^3）							
						Ca		Al		SO_3		Cl	
				測定値	平均値	測定値	平均値	測定値	平均値	測定値	平均値	測定値	平均値
AFt-CH系	1	塩水	50日	12.43	12.44	2.33E-02	2.34E-02	4.00E-06	5.00E-06	3.90E-04	3.90E-04	5.85E-01	5.82E-01
	2			12.44		2.35E-02		5.00E-06		3.90E-04		5.80E-01	
HG-AFt－CH系	1	塩水	50日	13	13.01	1.21E-03	1.21E-03	2.30E-04	2.20E-04	1.11E-03	1.12E-03	2.16E-01	2.13E-01
	2			13.01		1.21E-03		2.10E-04		1.13E-03		2.09E-01	
HG-CH系	1	塩水	50日	13.02	13.03	5.90E-04	6.20E-04	7.30E-04	7.00E-04	--	--	9.13E-02	9.16E-02
	2			13.03		6.40E-04		6.60E-04		--		9.19E-02	
	1	塩水	360日										
	2												

※ HG：ハイドロガーネット（$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 6H_2O$），AFt：エトリンガイト（$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 3CaSO_4 \cdot 32H_2O$），
CH：ポルトランダイト（$Ca(OH)_2$）

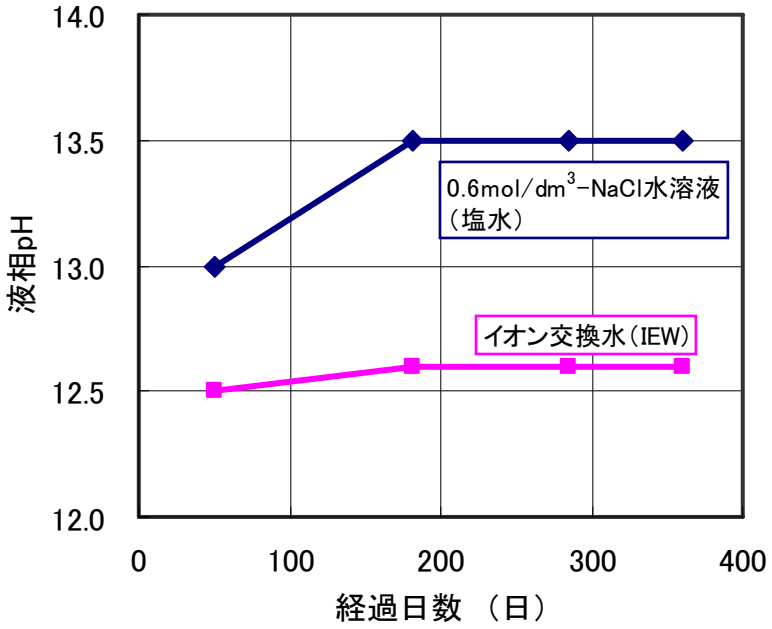


図 2.2-3 ハイドロガーネット-ポルトランダイト共存系浸漬実験の液相 pH 経時変化

ハイドロガーネット-ポルトランダイト共存系における浸漬後の固相の水和物組成を，液相の化学分析結果にもとづいて算出した。まず初期の系内に含まれる元素量から液相の各元素量を差し引いたものを固相の元素量とした。次に固相の Na はすべて浸漬液中の塩化ナトリウムが残存したものと仮定し，固相中の残存塩化ナトリウム及び液相中の塩化ナトリウム以外の Cl をフリーデル氏塩量として算出した。またフリーデル氏塩に配分された Al 以外の Al 分は，ハイドロガーネットに配分し，さらに最後に残余の Ca 分をポルトランダイトに配分して，各水和物量を算出した。この結果，浸漬後の固相は表 2.2-6 に示す水和物組成であると考えられた。

表 2.2-6 液相の化学分析結果より求めた固相の水和物組成 （wt%）

実験系	No	フリーデル氏塩	ハイドロガーネット	ポルトランダイト	塩化ナトリウム
HG-CH系	1	56.1	36.6	7.2	0.1
	2	55.8	36.3	7.8	0.2
	平均	56.0	36.5	7.5	0.2

※ HG：ハイドロガーネット($3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 6H_2O$)，CH：ポルトランダイト($Ca(OH)_2$)

(2) 固相

X 線回折による結晶相の同定結果を表 2.2-7 に示す。全てのケースで出発固相以外の結晶相としてフリーデル氏塩の生成が認められた。またエトリンガイト-ポルトランダイト共存系（AFt-CH 系）ではモノサルフェート，ハイドロガーネット-エトリンガイト-ポルトランダイト共存系（HG-AFt-CH 系）では $3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 0.5CaCl_2 \cdot 0.5CaSO_4 \cdot 12H_2O$ 組成の AFm 相の存在がそれぞれ確認された。なお，各試料の XRD 図を付録 1-1～1-4 に添付した。

表 2.2-7 粉末 X 線回折測定による同定結果

実験系	出発固相	浸漬液	HG	AFt	CH	FD	MS	CACS
HG-CH系	ハイドロガーネット ポルトランダイト	IEW	○	×	○	×	×	×
		塩水	○	×	○	○	×	×
AFt-CH系	エトリンガイト ポルトランダイト	塩水	×	○	--	○	○	×
HG-CH-AFt系	ハイドロガーネット エトリンガイト ポルトランダイト	塩水	○	×	○	○	×	○

○：X線回折ピークが確認できたもの
×：X線回折ピークが確認できなかったもの
－：他のピークと重なり判別できなかったもの
IEW：イオン交換水
塩水：0.6mol/dm^3 塩化ナトリウム水溶液

HG　：ハイドロガーネット（$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 6H_2O$）
AFt　：エトリンガイト（$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 3CaSO_4 \cdot 32H_2O$）で代表される固溶体相
CH　：水酸化カルシウム　（portlandite　$Ca(OH)_2$）
FD　：$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot CaCl_2 \cdot 10H_2O$ 組成の AFm 相 フリーデル氏塩
MS　：$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$ 組成の AFm 相　モノサルフェート
CACS　：$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 0.5CaCl_2 \cdot 0.5CaSO_4 \cdot 12H_2O$ 組成の AFm 相
（Calcium Aluminum Chloride Sulfate Hydrate)

次にハイドロガーネット-ポルトランダイト共存系（HG-CH 系）における浸漬後の固相の化学分析結果を表 2.2-8 に示す。この固相の化学分析結果から，固相の水和物組成を算出した結果を表 2.2-9 に示す。まず固相の Na はすべて塩化ナトリウムとして残存したものと仮定し，固相中の Cl 量から残存塩化ナトリウム中の Cl を差し引いた残余の Cl をフリーデル氏塩量として算出した。またフリーデル氏塩に配分された Al 以外の Al 分は，ハイドロガーネットに配分し，さらに最後に残余の Ca 分をポルトランダイトに配分して，各水和物量を算出した。この結果，固相の化学分析結果から算出した固相の水和物組成は，前記した表 2.2-6 に示す液相分析から求めた固相の水和物組成と概ね一致した。このことから，本試験におけるマテリアルバランスは整合していることが確認された。

表 2.2-8 固相の化学分析結果　　(wt%)

試料No.	insol	Al_2O_3	CaO	Na_2O	Cl
1	0.06	18.3	40.27	0.06	6.53
2	0.06	18.1	40.27	0.1	6.52
平均	0.06	18.2	40.27	0.08	6.53

表 2.2-9 固相の化学分析結果より求めた固相の水和物組成　(wt%)

No	フリーデル氏塩	ハイドロガーネット	ポルトランダイト	塩化ナトリウム
1	56.1	36.6	7.2	0.1
2	55.8	36.3	7.8	0.2
平均	56.0	36.5	7.5	0.2

2.3 セメント水和物と塩水との反応による pH 上昇メカニズムの検討

前項のハイドロガーネット-ポルトランダイト共存系（HG-CH 系）の浸漬実験における固相・液相分析結果から，初期浸漬固相におけるハイドロガーネットとポルトランダイトの重量割合は 5:1 であるが，反応後の固相についても，ハイドロガーネット：ポルトランダイトの重量割合は 5:1 と変わらない結果であることを確認した。ハイドロガーネットの分子量は，ポルトランダイトの分子量の約 5 倍であることから，ハイドロガーネット 1mol とポルトランダイト 1mol が反応してフリーデル氏塩を生成すると考えられる。従って塩水中にハイドロガーネットとポルトランダイトが共存した際，下記の 2.3-1 式に示すような反応によってフリーデル氏塩が生成し，生成時の Cl^-の消失に伴い，Na^+のカウンターアニオンとして OH^-が液相中に放出され，その結果 pH が上昇すると考えられる。

$$Ca(OH)_2 + 3CaO\cdot Al_2O_3\cdot 6H_2O + 2Na^+ + 2Cl^- + 4H_2O \Rightarrow 3CaO\cdot Al_2O_3\cdot CaCl_2\cdot 10H_2O + 2Na^+ + 2OH^- \qquad \text{2.3-1 式}$$

ハイドロガーネット-ポルトランダイト共存系の浸漬実験について，地球化学計算コード「PHREEQC」（Parkhurst and Appelo,1999）及び熱力学データベース「JNC-TDB.TRU」(http://migrationdb.jaea.go.jp/japanese.html) を用いて化学平衡計算を実施した結果を表 2.3-1 に示す。またエトリンガイト-ポルトランダイト共存系及びハイドロガーネット-エトリンガイト-ポルトランダイト共存系についても合わせて併記する。なお計算の出力データを付録 2-1-2-3 に添付した。

表 2.3-1　浸漬実験の実験値と化学平衡計算結果の比較　（液固比＝2.5）

実験系		HG-CH系					AFt-CH系		AFt-CH-HG系	
浸漬液		イオン交換水		塩水			塩水		塩水	
ケース		実験値*1	計算値	実験値*1	実験値*2	計算値	実験値*2	計算値	実験値*2	計算値
pH		12.6	12.4	13.5	13.0	13.5	12.4	12.4	13.0	13.5
液相組成 (mol/dm^3)	Ca	---	1.98E-02	5.31E-04	6.20E-04	6.72E-04	2.34E-02	3.69E-02	1.21E-03	8.13E-04
	Al	---	1.40E-06	9.05E-04	7.00E-04	1.88E-05	5.00E-06	1.23E-08	2.20E-04	1.69E-05
	Na	---	---	6.10E-01	---	6.00E-01	--	6.00E-01	--	6.00E-01
	Cl	---	---	8.40E-02	9.16E-02	5.87E-02	5.82E-01	5.89E-01	2.13E-01	5.27E-02
固相組成 (mol/dm^3)	CH量	---	4.80E-01	2.40E-01	---	2.29E-01	---	7.45E-02	---	2.56E-01
	HG量	---	5.00E-01	2.40E-01	---	2.29E-01	---	0.00E+00	---	2.36E-01
	FD量	---	0.00E+00	2.60E-01	---	2.71E-01	---	5.70E-03	---	2.74E-01

*1：浸漬期間：360日　　*2：浸漬期間：50日
HG：ハイドロガーネット，CH：ポルトランダイト，AFt：エトリンガイト，FD：フリーデル氏塩

塩水にハイドロガーネット-ポルトランダイト共存系（HG-CH 系）及びエトリンガイト-ポル

トランダイト共存系（AFt-CH 系）を浸漬したケースは，液相 pH，液相の各元素濃度及び固相のフリーデル氏塩生成量が，実験値と化学平衡計算値で概ね一致した。特にハイドロガーネット-ポルトランダイト共存系（HG-CH 系）については，固相のポルトランダイト量（CH 量），ハイドロガーネット量（HG 量），フリーデル氏塩量（FD 量）の結果から，2.3-1 式に示す反応式によってフリーデル氏塩が生成していることを裏付ける結果を示した。一方エトリンガイト-ポルトランダイト-ハイドロガーネット共存系（AFt-CH-HG 系）の塩水に浸漬したケースでは，液相 pH は計算値のほうが高く，また各元素濃度は計算値のほうがそれぞれ低く算出され，実験値と計算値で整合しない結果となった。これは，ハイドロガーネット-ポルトランダイト(（HG-CH 系）の 50 日間浸漬と 360 日間浸漬との間に相違が見られることから，エトリンガイト-ポルトランダイト-ハイドロガーネット共存系（AFt-CH-HG 系）の実験値が浸漬 50 日間と他の二つの系に比べ短いため，系内が完全に化学平衡に達していない可能性が高いことによるものと考えられる。ハイドロガーネット-ポルトランダイト共存系（HG-CH 系）の結果から類推すれば，エトリンガイト-ポルトランダイト-ハイドロガーネット共存系（AFt-CH-HG 系）においても，浸漬期間を長くすれば，計算値と整合する可能性がある。これらのことから，セメント水和物と塩化物イオンが共存した系での平衡時の pH は，化学平衡計算から予測することが可能と考えられる。

そこで、ハイドロガーネット及びエトリンガイト以外のアルミネート系水和物（カルシウムアルミネートハイドレート（$4CaO\cdot Al_2O_3\cdot 13H_2O$）及びモノサルフェート（$3CaO\cdot Al_2O_3\cdot CaSO_4\cdot 12H_2O$））とポルトランダイト共存系における塩水の反応についても、化学平衡計算から pH 上昇の可能性について検討した。表 2.3-2 に化学平衡計算結果を示す。また計算の出力データを付録 2-4-2-5 に添付する。なお，アルミネート系水和物とポルトランダイトの混合比は 1:1 とした。この結果，カルシウムアルミネートハイドレート及びモノサルフェートともに、ポルトランダイトと塩素イオンが共存した系では pH が 13.5 付近まで上昇する結果を示した。カルシウムアルミネートハイドレートの場合、カルシウムアルミネートハイドレートの分解によって生じたハイドロガーネットが、溶液中のポルトランダイトおよび塩素イオンと 2.3-1 式の反応によりフリーデル氏塩を生成し、その過程で OH^-を遊離して pH が上昇するメカニズムと考えられる。またモノサルフェートの場合は、塩素イオンとモノサルフェートの SO_4^{2-}イオンの置換反応とモノサルフェートの加水分解によって、モノサルフェートからフリーデル氏塩とエトリンガイトとハイドロガーネットが生成され、このハイドロガーネットとポルトランダイト、塩素イオンが 2.3-1 式の反応によってフリーデル氏塩を生成し，その過程で OH^-イオンを遊離して pH が上昇するメカニズムと考えられる。

表 2.3-2 アルミネート系水和物-ポルトランダイト共存系と塩水の反応における化学平衡計算結果　（液固比=2.5）

水和物*1	水和物量 (mol/kg)	反応相	平衡時のpH	FD生成量 (mol/間隙水-1dm^3)
C_4AH_{13}+CH	各0.6	塩水*2	13.5	2.71E-01
AFm+CH	各0.6		13.5	2.77E-01

*1　C_4AH_{13}（カルシウムアルミネートハイドレート：$4CaO\cdot Al_2O_3\cdot 13H_2O$）
AFm（モノサルフェート：$3CaO\cdot Al_2O_3\cdot CaSO_4\cdot 12H_2O$）
*2 ：0.6mol/dm^3-塩化ナトリウム水溶液
*3　FD（フリーデル氏塩：$3CaO\cdot Al_2O_3\cdot CaCl_2\cdot 12H_2O$）

2.4 まとめ

セメント水和物の一種であるアルミネート系水和物と塩水の反応について，大気からの CO_2 の影響のない雰囲気制御下で浸漬実験を実施するとともに地球化学計算コード「PHREEQC」による化学平衡計算を行い，その反応に伴う pH 変化について検討した。その結果，以下のことがわかった。

- ハイドロガーネット−ポルトランダイト共存系をイオン交換水に浸漬したケースの液相 pH は，ポルトランダイト平衡（12.5）を示すのに対し，塩水に浸漬したケースではフリーデル氏塩を生成し，液相 pH が 13.5 まで上昇することが確認され，化学平衡計算結果と整合する結果となった。また固相分析結果から，フリーデル氏塩の生成による pH 上昇は，下記 2.3-2 式に示す反応によるものと思われる。

$$Ca(OH)_2 + 3CaO\cdot Al_2O_3\cdot 6H_2O + 2Na^+ + 2Cl^- + 4H_2O \Rightarrow 3CaO\cdot Al_2O_3\cdot CaCl_2\cdot 10H_2O + 2Na^+ + 2OH^- \qquad \text{2.3-2 式}$$

- エトリンガイト−ポルトランダイト共存系を塩水に浸漬したケースは，ハイドロガーネット−ポルトランダイト共存系と同様，フリーデル氏塩の生成が確認されたが，ポルトランダイト平衡以上に液相 pH が上昇する現象は見られなかった。エトリンガイトは，SO_4^{2-} イオンと Cl^- イオンの置換によりフリーデル氏塩を生成したと考えられるが，この反応では液相 pH は上昇しないことがわかった。

- 化学平衡計算から，モノサルフェート−ポルトランダイト共存系及びカルシウムアルミネートハイドレート−ポルトランダイト共存系は，塩水との反応によりハイドロガーネットを生成し，そのハイドロガーネット，ポルトランダイト及び塩素イオンが共存した結果，2.3-2 式の反応メカニズムによって平衡時の液相 pH がポルトランダイト平衡（12.5）よりも高くなることが確認された。

3. 普通ポルトランドセメント（OPC）ペーストと塩水の反応

3.1 目　的

実際の処分場で使用が想定される普通ポルトランドセメント（以下，OPC）ペーストは，前章で検討したアルミネート系水和物のみで構成されているのではなく，カルシウムシリケートやフェライト相などの様々な水和物で構成されている。このため，実際の処分システムで前章の結果が示すように，セメント硬化体中の間隙水の pH が上昇するか不明確である。そこで本章では，塩水を用いた OPC ペーストの浸漬実験を実施し， OPC ペーストと塩水との反応によって反応液の pH が前章のモデルにそって変化するか確認するために，OPC ペーストと塩水のバッチ式反応実験を行うとともに，化学平衡計算コードによる解析を行った。

3.2 OPC ペーストと塩水の反応における化学平衡計算（予察計算）

OPC ペーストと塩水との反応について，地球化学計算コード「PHREEQC」（Parkhurst and Appelo,1999）及び熱力学データベース「JNC-TDB.TRU」(http://migrationdb.jaea.go.jp/japanese.html) を用いて化学平衡計算（以下，予察計算）を行った。表 3.2-1 に 1992 年～2003 年における研究用 OPC（セメント協会製）の化学組成データを平均して設定した OPC の化学組成を示す。また，表 3.2-2 に Berner et al. （1992）による OPC ペーストの初期水和生成物モデルの設定手順を示す。予察計算に使用した初期生成水和物モデルは，表 3.2-1 に示す OPC の平均化学組成を用いて，Berner et al.（1992）の考えに準じて設定した。ただし，Na 及び K は，後述する浸漬実験でも浸漬前に洗浄・除去するため，初期固相には含まれないと仮定した。表 3.2-3 に予察計算に使用した初期生成水和物モデルを示す。

表 3.2-1 初期生成水和物モデルの設定に使用した OPC の化学組成　（wt%）

CaO	SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	SO_3	Na_2O	K_2O	MgO	Residue
64.80	21.30	5.31	2.57	1.94	0.24	0.56	1.95	1.33

表 3.2-2　Berner et al.(1992)の考えに基づく初期水和生成物モデルの設定手順

1	OPCは完全に水和したものとする。
2	セメントの主要水和物として，C-S-Hゲル（$CS_{0.556}H_{1.047}$），モノサルフェート(C_4AsH_{12})， ポルトランダイト(CH)を想定する
3	セメント中に存在するSO_3はモノサルフェートに配分する。
4	モノサルフェートに寄与しない残りのAl_2O_3は，全てAl型ハイドロガーネット(C_3AH_6)に配分する。
5	Fe_2O_3はFe型ハイドロガーネット（C_3FH_6)に配分する。
6	セメント中に存在するMgOは，全てブルーサイト(MH)に配分する。
7	SiO_2は，C-S-Hゲルに配分する
8	C-S-Hゲル，モノサルフェート，Al型ハイドロガーネット，Fe型ハイドロガーネットに寄与しない 残りのCaOは，ポルトランダイトに配分する。

※C：CaO，S：SiO_2，A：Al_2O_3，s：SO_3，M：MgO，F：Fe_2O_3，H：H_2O

表 3.2-3 予察計算に用いた初期生成水和物モデル

初期設定水和物	組成式	水和物量 (mol/kg-ペースト)	二次水和物
C-S-Hゲル (Ca/Si mol比 = 1.8)	$CaO \cdot 0.556SiO_2 \cdot 1.047H_2O$	5.281	・初期設定水和物 ・C-S-Hゲル (Ca/Si mol比 = 0.1-1.7) ・エトリンガイト ・フリーデル氏塩 ・カルサイト ・ハイドロタルサイト ・セピオライト ・ゲーレナイトハイドレート
ポルトランダイト	$Ca(OH)_2$	2.595	
ブルーサイト	$Mg(OH)_2$	0.401	
モノサルフェート	$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$	0.201	
Al型ハイドロガーネット	$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 6H_2O$	0.218	
Fe型ハイドロガーネット	$3CaO \cdot Fe_2O_3 \cdot 6H_2O$	0.133	

液固比=1.8 の条件で OPC ペーストを塩水に浸漬した際の化学反応について，化学平衡計算を行った。表 3.2-4 にその解析結果を示す。比較として，イオン交換水，降水系地下水，海水系地下水に浸漬したケースについても併記した。また計算の出力データを付録 3-1～3-4 に添付した。

表 3.2-4 OPC ペースト-各水溶液との反応における液相組成の予察計算結果

液 相 種 類	pH	液相組成(mol/dm^3)					特徴的な反応後の固相変化
		Ca	Si	Al	Na	Cl	
イオン交換水	12.5	1.982E-02	4.025E-07	1.382E-06	0.000E+00	0.000E+00	-----
降水系地下水 (FRHP)	12.5	1.874E-02	4.204E-07	1.433E-06	3.550E-03	1.460E-05	-----
0.6mol/dm^3 NaCl水溶液 (塩水)	13.3	1.681E-03	7.949E-06	2.468E-06	6.000E-01	1.430E-01	フリーデル氏塩生成
海水系地下水 (SRHP)	13.3	1.963E-03	6.530E-06	2.218E-06	4.600E-01	1.170E-01	フリーデル氏塩生成

この結果，OPC ペーストをイオン交換水，降水系地下水に浸漬したケースでは，液相 pH はポルトランダイト平衡である 12.5 を示すのに対し，塩水及び海水系地下水に浸漬したケースではフリーデル氏塩を生成し，液相 pH は 13.3 まで上昇する結果となった。このことから，OPC を使用した実際の処分場において，海水系地下水のように，地下水の化学組成に塩化ナトリウムが存在した場合，Na や K の寄与とは別に，2 章に示したメカニズムにより pH が上昇する可能性があると推定された。

3.3 塩水を用いた OPC ペーストの浸漬実験

3.3.1 実験方法

(1) 浸漬試料（OPC ペースト粉末）の作製

(a) 使用材料

浸漬試料に用いた OPC ペースト粉末は, 以下の原料を用いて OPC ペースト硬化体を作製し, 粉砕して作製した。

・ 普通ポルトランドセメント（OPC）
　太平洋セメント株式会社製　普通ポルトランドセメント
・ 水
　イオン交換水

(b) 浸漬試料の作製方法

市販の OPC を水セメント比（以下, W/C）が 0.5 の条件でホバートミキサーを用いて混練し, 得られたスラリーをポリプロピレン製ボトルに流し込み, 30℃, RH70%の恒湿恒温室で 24 時間硬化させた。その後, 硬化体表面をイオン交換水で被覆し, 常温で約 5 年間密封養生した。図 3.3-1 に OPC ペースト初期試料の X 線回折図を示す。この硬化体を 2～3mm に粗粉砕して, 1 週間真空乾燥した後にアルゴンガス雰囲気下に制御されたグローブボックス中で 150μm 以下に粉砕した。浸漬試験を始める前に, OPC ペースト中に含まれる Na, K 成分を取り除くために, 粉砕した OPC ペースト粉末 40g とイオン交換水 400ml をポリプロピレン製ボトルに入れて 7 日間浸漬して洗浄処理を実施した。洗浄処理後, 遠心分離で固液分離処理を行い, 浸漬実験に使用する試料を作製した。なお固液分離作業は, 空気中からの二酸化炭素による炭酸化を防止するため, アルゴンガス雰囲気に制御されたグローブボックス内で行った。

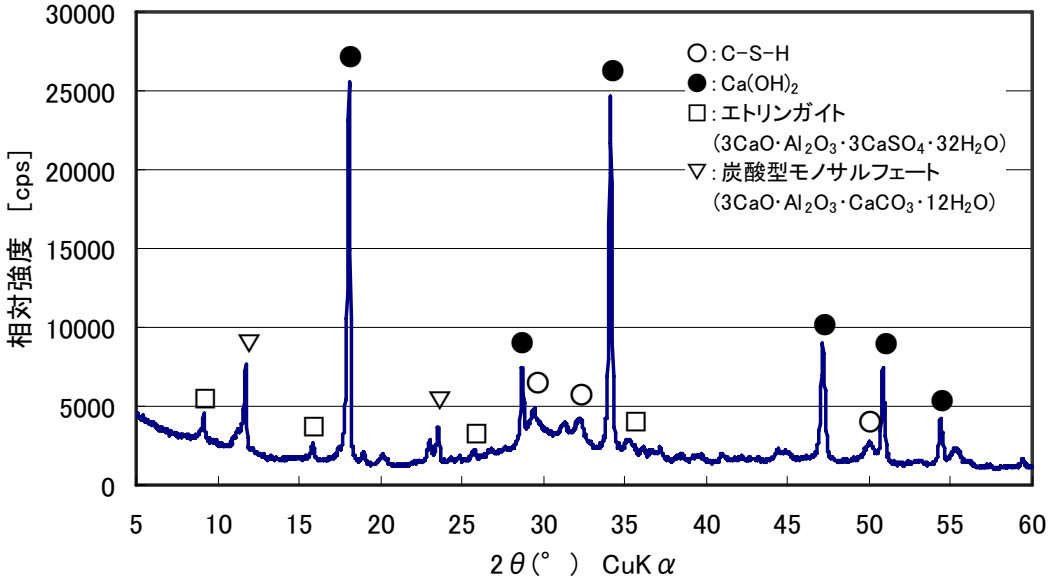


図 3.3-1 OPC ペースト 初期試料の X 線回折結果

(2) 実験方法

表 3.3-1 に本実験の塩水による OPC ペーストの浸漬実験に関する浸漬条件を示す。塩水に浸漬したケースの比較の対象として，イオン交換水に浸漬したケース（ブランク試験）も実施した。実験は所定量の液固比となるように，イオン交換水または塩水を OPC ペースト粉末とともに，それぞれポリプロピレン製ボトルに密封して行った。同一条件繰り返し数は 1 とした。浸漬はアルゴンガス雰囲気に制御されたグローブボックス内で行い，浸漬期間中は試料が封入されたポリプロピレンボトルを 25℃の恒温槽内に静置した。またボトル内の濃度勾配形成の影響を緩和するため，定期的（およそ 1 回／日の割合）にハンドシェイクによる均質化を実施した。浸漬期間中，定期的に液相 pH の測定を行い，pH の経時変化を把握した。360 日間浸漬後，吸引ろ過による固液分離を実施した。液相は化学成分分析，固相は水和物組成及び化学成分分析をそれぞれ実施した。なお，固液分離作業はアルゴン雰囲気で実施した。

表 3.3-1 塩水による OPC ペーストの浸漬実験に関する浸漬条件

浸漬液	イオン交換水（ブランク），塩水（0.6mol/dm^3−塩化ナトリウム水溶液）
液固比	10
浸漬期間	360日

(3) 評価項目

(a) 液 相

①pH 測定

液相の pH は，ガラス電極式 pH 計（（株）ホリバ製 F-14）を用いて測定した。また浸漬期間が 360 日を経過した時点で，超音波分散処理による強制的な反応促進処理を実施して，処理前後の pH 変化について検討した。

②化学分析

採取した液相に硝酸を加えて酸性にした後，0.45μm フィルターを用いてろ過した。Ca，Si，Al, Mg, SO_3, Na, K については, ICP 発光分光光度計（Varian 社製 VISTA AX CCD Simulataneous）による元素の測定を行い，S について固相分析と比較するため SO_3 換算で求めた。また Cl についてはイオンクロマトアナライザ（東亜電波工業（株）製 ICA-5000）による測定を行った。

(b) 固 相

①粉末 X 線回折（XRD）による結晶相の同定

採取した固相について，理学電機工業（株）製 RINT2500 を用いて，結晶相の同定を行った。表 3.3-2 に測定条件を示す。

表 3.3-2　粉末Ｘ線回折の測定条件

ターゲット	Cu
電流・電圧	50kV，250mA
スリット	DS1°　RS0.15mm　SS1°
走査速度	5°/min

②熱分析

採取した固相について，表 3.3-3 に示す装置及び測定条件により，熱分析を行った。

表 3.3-3 熱分析装置及び測定条件

装置種類	TG-DTA	DSC
使用装置	理学電気（株）製 TG8101D	セイコーインスツルメンツ社製 DSC200
昇温速度	20℃/min	10℃/min
測定範囲	室温～1000℃	室温～400℃
試料量	約50mg	約15mg
測定雰囲気	窒素（流速100ml/min）	窒素（流速100ml/min）

③化学分析

JIS R 5202 に準拠し，固相の CaO，SiO_2，Al_2O_3，SO_3，Fe_2O_3，MgO，Na_2O，K_2O，Cl を測定した。

3.3.2 実験結果

(1) 液相（液相 pH 及び液相化学組成）

塩水またはイオン交換水に OPC ペースト粉末を 360 日間浸漬した際の液相 pH の経時変化を図 3.3-2 に示す。塩水に浸漬したケースは，浸漬開始 180 日後に pH が 12.8 となり，イオン交換水に浸漬したケースよりも 0.2 程度上昇する結果を示した。また浸漬 360 日後に，超音波処理による反応促進処理を実施しても，処理前後で pH の値に変化は見られなかった。このことから，系内が平衡状態になっていると考えられる。また表 3.3-4 に塩水及びイオン交換水による OPC ペースト粉末の浸漬実験の液相分析結果を示す。比較として，前項の予察計算から算出された液相組成を併記する。この表から，予察計算結果は，浸漬実験によって測定された平衡時の液相 pH よりも 0.5 程度高めであることが確認された。

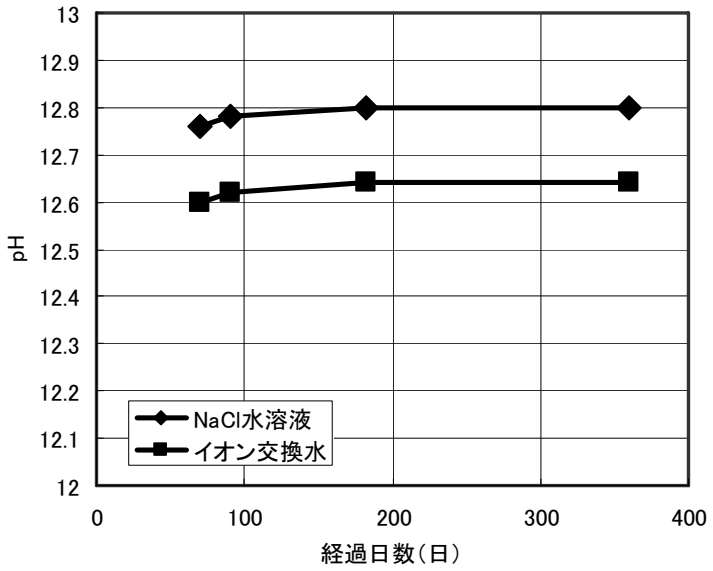


図 3.3-2 塩水及びイオン交換水に OPC ペースト粉末を浸漬した際の浸漬液の pH 経時変化

表 3.3-4 塩水及びイオン交換水による OPC ペースト粉末浸漬実験（360 日浸漬）の液相組成分析結果

ケース		pH	液相組成[mol/dm^3]				
			Ca	Si	Al	Na	Cl
実験値	塩水 (0.6mol/dm^3 NaCl水溶液)	12.8	9.00E-03	7.00E-06	＜1.00E-06	4.49E-01	3.73E-01
	イオン交換水	12.6	2.34E-02	6.00E-06	5.00E-06	2.30E-04	＜1.00E-6
予察計算	塩水 (0.6mol/dm^3 NaCl水溶液)	13.3	1.68E-03	7.95E-06	2.47E-06	6.00E-01	1.43E-01
	イオン交換水	12.5	2.00E-02	4.05E-07	1.39E-06	***	***

(2) 固相（X 線，熱分析，化学成分分析）

図 3.3-3 に本試験の初期試料とイオン交換水及び塩水に 360 日間浸漬した OPC ペースト粉末の X 線回折結果を示す。この図から，塩水に浸漬した試料にはフリーデル氏塩のピークが確認された。イオン交換水に浸漬したケースにはフリーデル氏塩の生成が認められないことから，OPC ペーストと塩水との反応によってフリーデル氏塩が生成したと思われる。

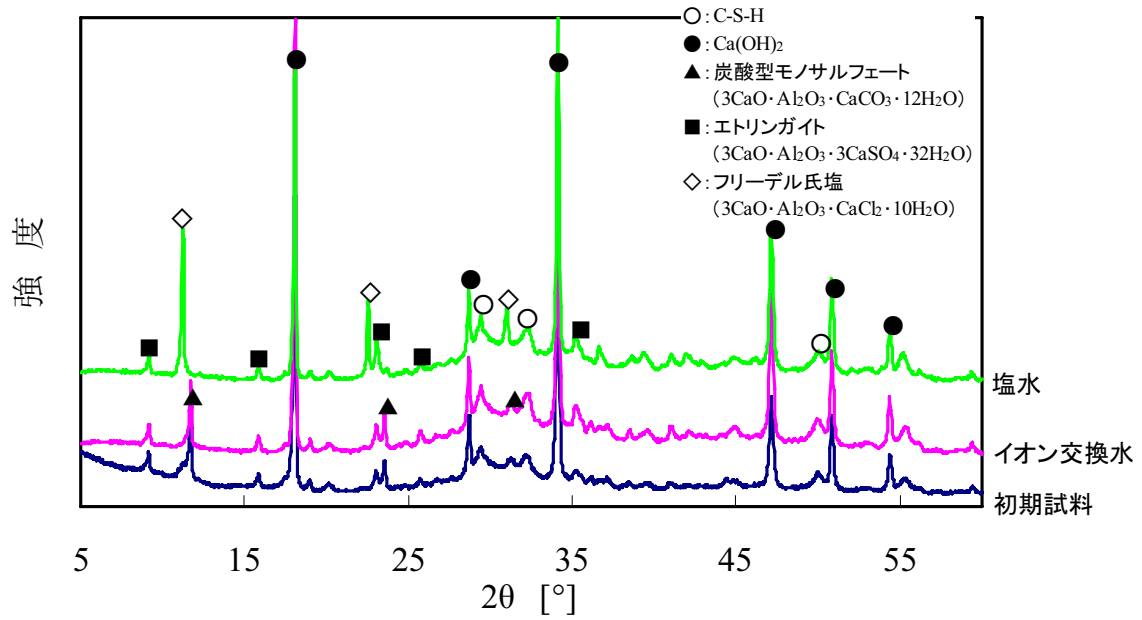


図 3.3-3　塩水及びイオン交換水に浸漬した OPC ペースト粉末の X 線回折結果

表 3.3-5 に浸漬試料の熱分析結果を示す。また付録 4 に熱分析チャートを添付する。熱分析結果から，初期試料にはモノカーボネートが 8.4%含有されるのに対し，塩水に浸漬したケースにはほとんど含まれない結果となった。また塩水に浸漬したケースでは，初期試料に比べて炭酸カルシウムの含有量が多いが，これはモノカーボネートの CO_3^{2-}イオンと Cl^-イオンとの置換によってフリーデル氏塩が生成し，モノカーボネートから遊離した CO_3^{2-}イオンが炭酸カルシウムとして析出したためと考えられる。表 3.3-6 に OPC ペーストの化学組成分析結果を示す。塩水に浸漬したケースでは，Cl が 0.87%含まれている。表 3.3-5 のフリーデル氏塩量より，固相に固定された塩素量は 0.97%と算出されることから，OPC ペースト中の Cl はほぼ全量フリーデル氏塩として固相に固定化されていると考えられる。

表 3.3-5 塩水及びイオン交換水に浸漬した OPC ペースト粉末の熱分析結果　（%）

試料名	$Ca(OH)_2$	$CaCO_3$	AFm相	
			フリーデル氏塩	モノカーボネート
初期試料	18.1	1.6	＜0.5	8.4
塩水-浸漬試料	18.5	2.4	7.7	＜0.5
イオン交換水-浸漬試料	18.4	＜0.5	＜0.5	5.8

表 3.3-6 塩水及びイオン交換水に浸漬した OPC ペースト粉末の化学成分分析結果　（%）

試料名	固相化学組成 [%]											
	SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	CaO	MgO	SO_3	Na_2O	K_2O	Cl	ig.loss	insol	total
初期試料	15.74	3.98	2.17	49.17	0.87	1.29	0.23	0.30	0.01	25.43	0.26	99.45
塩水-浸漬試料	16.06	4.03	2.19	48.32	0.93	1.46	0.04	＜0.01	0.87	25.94	0.14	99.98
イオン交換水-浸漬試料	16.08	4.04	2.19	48.73	0.94	1.5	＜0.01	0.01	0.01	25.84	0.12	99.46

3.4 初期生成水和物モデルの検討

3.4.1 アルミネート系水和物種の設定に関する検討

前項の化学平衡計算（予察計算）結果における平衡時の pH は，実測値よりも 0.5 程度高めに評価する結果となった。そこで予察計算に使用した初期生成水和物モデルが，浸漬前の OPC ペーストを適切に表現しているか検討を行った。表 3.4-1 に OPC ペーストの X 線回折結果と予察計算に設定した水和物を比較したものを示す。

表 3.4-1 OPC ペーストの X 線回折結果と予察計算に使用した初期生成水和物モデルの比較

水和物名	X線回折より同定	モデル設定
Al型ハイドロガーネット ($3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 6H_2O$)	○*	設定
モノサルフェート ($3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$)	×	設定
モノカーボネート ($3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot CaCO_3 \cdot 12H_2O$)	○	未設定
エトリンガイト ($3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 3CaSO_4 \cdot 32H_2O$)	○	未設定
C-S-H ($CaO \cdot 0.556SiO_2 \cdot 1.047H_2O$)	○	設定
ポルトランダイト ($Ca(OH)_2$)	○	設定

*:選択溶解処理により検出。○は検出，×は未検出

この表から，実際の OPC ペーストにはモノカーボネートとエトリンガイトの存在が確認されているのに対し，モデルの設定では両化合物は未設定となっていた。またモデルで設定したモノサルフェートは，OPC ペーストの分析では検出されていない。このことから，アルミネート系水和物の設定が OPC ペーストの分析結果と異なることがわかった。

そこで，表 3.4-2 に示す手順に従って，初期生成水和物モデルを再設定した。表 3.4-3 に再設定した初期生成水和物モデルを示す。また表 3.4-4 にこの初期生成水和物モデルを用いて塩水との化学平衡計算した結果を示す。また，付録 6-1 にこの化学平衡計算の出力リストを添付する。この表から OPC ペーストから同定されたアルミネート系水和物を用いて設定した初期生成水和物モデルによる解析でも，化学平衡時の pH は若干低下したが，まだ 13 を超える高めの値を算定した。

表 3.4-2　アルミネート系水和物種の設定 見直し手順

1	OPCは完全に水和したものとする。
2	セメントの主要水和物として，C-S-Hゲル（$CS_{0.556}H_{1.047}$），エトリンガイト($C_6As_3H_{32}$)，モノカーボネート(C_4AcH_{12})ポルトランダイト(CH)を想定する
3	セメント中に存在するSO_3はエトリンガイトに配分する。
4	熱分析結果から，モノカーボネートを設定する。
5	エトリンガイト，モノカーボネートに寄与しない残りのAl_2O_3は，全てAl型ハイドロガーネット(C_3AH_6)に配分する。
6	Fe_2O_3はFe型ハイドロガーネット（C_3FH_6)に配分する。
7	セメント中に存在するMgOは，全てブルーサイト(MH)に配分する。
8	SiO_2は，C-S-Hゲル（$CS_{0.556}H_{1.047}$)に配分する
9	C-S-Hゲル，エトリンガイト，モノカーボネート，Al型ハイドロガーネット，Fe型ハイドロガーネットに寄与しない残りのCaOは，ポルトランダイトに配分する。

※C：CaO，S：SiO_2，A：Al_2O_3，s：SO_3，M：MgO，F：Fe_2O_3，H：H_2O，c：$CaCO_3$

表 3.4-3 アルミネート系水和物種の設定を見直した初期生成水和物モデル

初期設定水和物	組成式	水和物量 (mol/kg-ペースト)	二次水和物
C-S-Hゲル (Ca/Si mol比 = 1.8)	$CaO \cdot 0.556SiO_2 \cdot 1.047H_2O$	5.216	・初期設定水和物 ・C-S-Hゲル (Ca/Si mol比 = 0.1-1.7) ・エトリンガイト ・フリーデル氏塩 ・カルサイト ・ハイドロタルサイト ・セピオライト ・ゲーレナイトハイドレート
ポルトランダイト	$Ca(OH)_2$	2.209	
ブルーサイト	$Mg(OH)_2$	0.396	
エトリンガイト	$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 3CaSO_4 \cdot 32H_2O$	0.066	
モノカーボネート	$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot CaCO_3 \cdot 12H_2O$	0.156	
Al型ハイドロガーネット	$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 6H_2O$	0.204	
Fe型ハイドロガーネット	$3CaO \cdot Fe_2O_3 \cdot 6H_2O$	0.132	

表 3.4-4 実験値と計算結果の比較

ケース	pH	液相組成[mol/dm^3]				
		Ca	Si	Al	Na	Cl
塩水 (0.6mol/dm^3 NaCl水溶液)-実験値	12.8	9.00E-03	7.00E-06	＜1.00E-06	4.49E-01	3.73E-01
アルミネート系水和物種 を見直したモデル-計算値	13.1	2.49E-03	8.60E-07	1.09E-06	6.00E-01	2.62E-01

3.4.2 C-S-H に取り込まれる Al 量を考慮した初期生成水和物モデルの構築と適用性判断

Richardson et al.（1992）は，セメントの主要水和生成物である C-S-H は，Si/Ca mol 比に応じて，Al を取り込むことを報告している。予察計算及び 3.4.1 項の化学平衡計算に使用した初期生成水和物モデルは, それぞれ OPC に含まれる Al 分をすべて Al 型のハイドロガーネットに配分する設定及びモノサルフェート，エトリンガイト及びモノカーボネートに配分した後，残りの Al 分を全て Al 型ハイドロガーネットに配分する設定となっている。したがって，これらの初期固相の設定では，C-S-H 中に取り込まれる Al 量を考慮していない。このため，Al 型ハイドロガーネットの設定を, 実際の OPC ペーストよりも多く見積もっている可能性が考えられる。そこで C-S-H に取り込まれる Al 量を Richardson et al.（1992）の関係式から推定するとともに, 浸漬前の OPC ペーストの C-S-H 中の Al について定量分析を行い, Richardson et al.（1992）が報告する関係と整合するか確認を行った。Al の定量は EPMA による点分析から定量する方法と EPMA によるマッピング分析結果から推定する方法の 2 通りの方法を実施した。点分析による定量は, 図 3.4-1 に示す OPC ペースト断面の二次電子像（S.E.I）を見ながら，その形状から C-S-H 部分（A の部分）と思われる箇所を任意に 10 点選定して測定した。表 3.4-5 に選定箇所における Ca，Si，Al の定量結果を示す。この結果，Ca/Si mol 比の平均値は 1.97，Al/Ca mol 比は 0.04 と測定された。

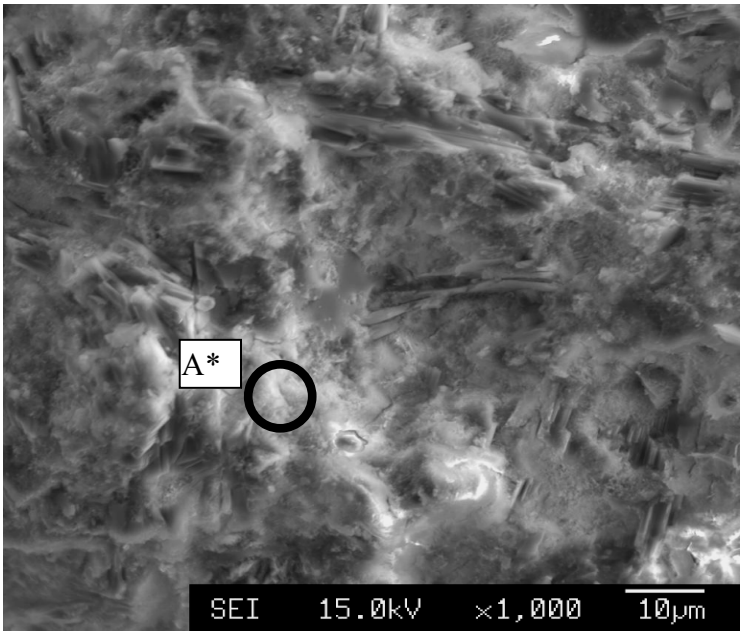


図 3.4-1 OPC ペースト断面の二次電子像
A*：C-S-H と判断された測定箇所

表 3.4-5 C-S-H 中の Ca,Si,Al の定量結果

測定点	C-S-Hの化学組成 (wt.%)			C-S-Hの化学組成 (mol)			元素モル比	
	CaO	SiO_2	Al_2O_3	CaO	SiO_2	Al_2O_3	Ca/Si	Al/Ca
1	44.3	25.6	1.7	0.79	0.43	0.02	1.86	0.04
2	44.6	26.5	2.1	0.8	0.44	0.02	1.8	0.05
3	45.8	23.8	1.9	0.82	0.4	0.02	2.07	0.04
4	40	20.6	2.9	0.71	0.34	0.03	2.08	0.08
5	44.9	22.0	1.4	0.8	0.37	0.01	2.19	0.03
6	47.2	27.2	1.5	0.84	0.45	0.01	1.86	0.03
7	47.1	28.1	1.5	0.84	0.47	0.01	1.8	0.03
8	49.2	25.4	1.1	0.88	0.42	0.01	2.08	0.02
9	41.2	21.1	2.0	0.74	0.35	0.02	2.1	0.05
10	45.1	25.6	0.9	0.80	0.43	0.01	1.89	0.02
Ave	44.9	24.6	1.7	0.80	0.41	0.02	1.97	0.04

次に OPC ペースト断面の領域（500μm×500μm）2 箇所（A 点，B 点）を任意に選択してマッピング分析を行い，C-S-H に対応するピクセルを Ca/Si mol 比から決定して，そこでの Al 含有量を測定し，平均して各測定部の Al 含有量とした。この方法による推定結果を表 3.4-6 に示す。なお詳細な測定方法は，付録 4 に添付する。この結果は，S.E.I による点分析結果とほぼ同様の結果であった。

表 3.4-6 EPMA によるマッピング分析から推定した Al 含有量

測定部	Ca/Si mol比	Al/Ca mol比	Al含有量 (wt.%)
A点	1.7	0.10	1.7
B点	1.7	0.08	1.5
Ave	1.7	0.09	1.6

これらの EPMA の測定結果を Richardson et al.(1992)が測定した結果と併せて, C-S-H の Si/Ca mol 比と Al/Ca mol 比の関係を，図 3.4-2 に示す。この図からわかるように，EPMA による実測値は，Richardson et al. (1992) が報告する関係と整合的であった。そこで，C-S-H に取り込まれる Al 量を考慮して，表 3.4-7 の手順に従って，初期生成水和物モデルを表 3.4-8 のように算定した。

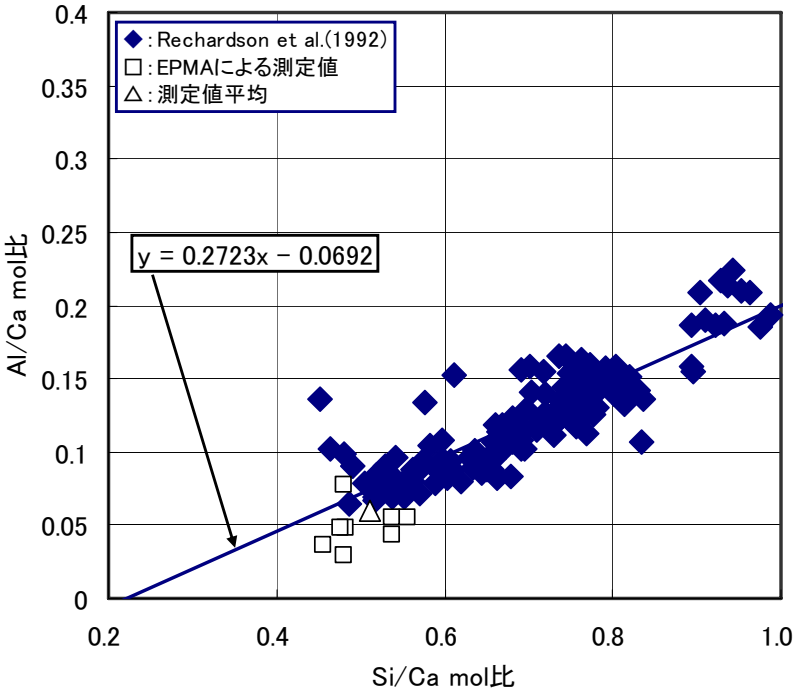


図 3.4-2 C-S-H 中の Si/Ca mol 比と Al/Ca mol 比の関係

表 3.4-7 C-S-H 中に取り込まれた Al 量を考慮した初期生成水和物モデルの設定手順

1	OPCは完全に水和したものとする。
2	セメントの主要水和物として，C-S-Hゲル（$CS_{0.556}H_{1.047}$），エトリンガイト($C_6As_3H_{32}$)，モノカーボネート(C_4AcH_{12}) ポルトランダイト(CH)を想定する
3	図3.3-5に示すC-S-Hゲル中のSi/Ca mol比とAl/Ca mol比の近似式から，C-S-Hゲル($CS_{0.556}H_{1.047}$)に含有するAl量を算出し，系内から取り除く。
4	セメント中に存在するSO_3はエトリンガイトに配分する。
5	熱分析結果から，モノカーボネートを設定する。
6	エトリンガイト，モノカーボネート，C-S-Hゲルに寄与しない残りのAl_2O_3は，全てAl型ハイドロガーネット(C_3AH_6)に配分する。
7	Fe_2O_3はFe型ハイドロガーネット（C_3FH_6)に配分する。
8	セメント中に存在するMgOは，全てブルーサイト(MH)に配分する。
9	SiO_2は，C-S-Hゲル（$CS_{0.556}H_{1.047}$)に配分する
10	C-S-Hゲル，エトリンガイト，モノカーボネート，Al型ハイドロガーネット，Fe型ハイドロガーネットに寄与しない残りのCaOは，ポルトランダイトに配分する。

※C：CaO，S：SiO_2，A：Al_2O_3，s：SO_3，M：MgO，F：Fe_2O_3，H：H_2O，c：$CaCO_3$

表 3.4-8 C-S-H 中に取り込まれた Al 量を考慮した初期生成水和物モデル

初期設定水和物	組成式	水和物量 (mol/kg-ペースト)	二次水和物
C-S-Hゲル (Ca/Si mol比 = 1.8)	$CaO \cdot 0.556SiO_2 \cdot 1.047H_2O$	5.360	・初期設定水和物 ・C-S-Hゲル (Ca/Si mol比 = 0.1-1.7) ・エトリンガイト ・フリーデル氏塩 ・カルサイト ・ハイドロタルサイト ・セピオライト ・ゲーレナイトハイドレート
ポルトランダイト	$Ca(OH)_2$	2.796	
ブルーサイト	$Mg(OH)_2$	0.407	
エトリンガイト	$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 3CaSO_4 \cdot 32H_2O$	0.068	
モノカーボネート	$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot CaCO_3 \cdot 12H_2O$	0.157	
Al型ハイドロガーネット	$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 6H_2O$	0.039	
Fe型ハイドロガーネット	$3CaO \cdot Fe_2O_3 \cdot 6H_2O$	0.135	

この設定を用いて，化学平衡計算を行った結果を表 3.4-9 に示す。またこの平衡計算の出力リストを付録 6-2 に添付する。この結果，解析により算定した pH（12.9）は，実験的に求めた pH(12.8)とほぼ一致した。

表 3.4-9 解析結果と実験結果の比較

ケース	pH	液相組成[mol/dm^3]				
		Ca	Si	Al	Na	Cl
塩水(0.6mol/dm3 NaCl水溶液) 実験値	12.8	9.00E-03	7.00E-06	＜1.00E-06	4.49E-01	3.73E-01
C-S-Hに取り込まれたAl量を想定したモデル-計算値	12.9	6.17E-03	3.50E-07	2.09E-07	6.00E-01	4.12E-01
アルミネート系水和物種 を見直したモデル-計算値(表3.4-4)	13.1	2.49E-03	8.60E-07	1.09E-06	6.00E-01	2.62E-01
予察計算(表3.3-4)	13.3	1.68E-03	7.95E-06	2.47E-06	6.00E-01	1.43E-01

また C-S-H ゲル（$CS_{0.556}H_{1.047}$）を液固比=50 の条件で浸漬させ，液交換法で積算液固比＝500 まで浸漬させ，C-S-H ゲルが変質した際の Al 取り込み量について，化学平衡計算により推測した。その結果を図 3.4-3 及び表 3.4-10 に示す。この際，変質した C-S-H の Al 取り込み量は，Richardson et al.(1992)の Si/Ca mol 比と Al/Ca mol 比の関係式から算出した。この結果，C-S-H ゲルの非調和溶解に伴い Ca/Si mol 比は減少するが，C-S-H に取り込まれる Al 量は，図 3.4-3 に示すように増加する結果を示した。したがって初期試料の OPC ペースト中の C-S-H に取り込まれた Al が，C-S-H の変質によって液相に放出され，反応に与る可能性は低いと考えられる。このため C-S-H に含まれる Al を表 3.4-7 のように初期固相から取り除くという操作は，合理性を持つと判断される。

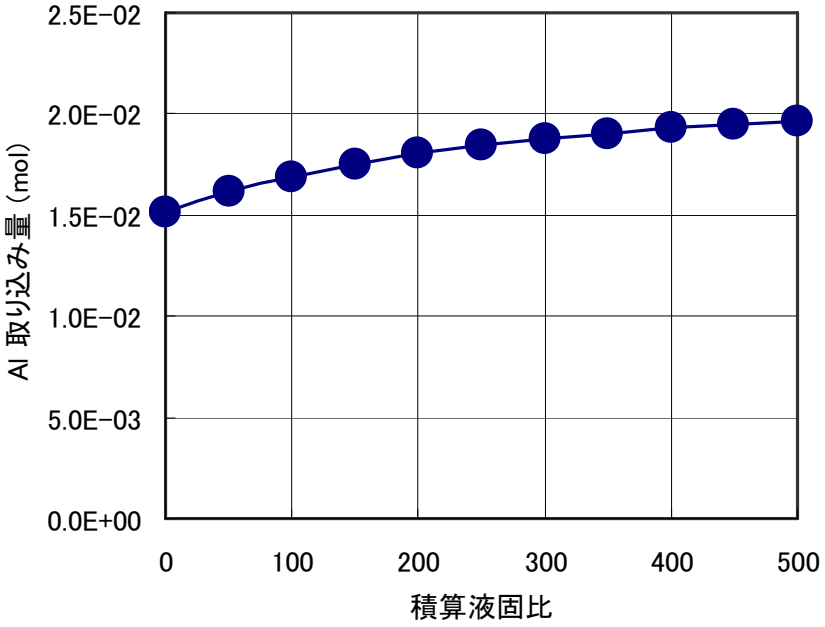


図 3.4-3 C-S-H の Si/Ca mol 比と Al/Ca mol 比の関係から導いた C-S-H の非調和溶解による変質に伴う C-S-H の Al 取り込み量

表 3.4-10. C-S-H の Si/Ca mol 比と Al/Ca mol 比の関係から導いた C-S-H の非調和溶解による変質に伴う C-S-H の Al 取り込み量

	回数	組成式	0(初期)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
	積算液固比		---	50	100	150	200	250	300	350	400	450	500
固相	CSH (1.0)	$C_{1.0}S_{1.0}O_{3.0}H_{1.084}$	**0.000E+00**	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
	CSH (1.1)	$C_{1.0}S_{0.909}O_{2.818}H_{1.076}$	**0.000E+00**	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	1.490E-03	2.683E-02
	CSH (1.2)	$C_{1.0}S_{0.833}O_{2.666}H_{1.070}$	**0.000E+00**	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	4.861E-02	9.723E-02	1.217E-01	9.392E-02
	CSH (1.3)	$C_{1.0}S_{0.769}O_{2.538}H_{1.065}$	**0.000E+00**	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	7.881E-02	1.337E-01	8.101E-02	2.832E-02	0.000E+00	0.000E+00
	CSH (1.4)	$C_{1.0}S_{0.714}O_{2.428}H_{1.060}$	**0.000E+00**	0.000E+00	0.000E+00	3.912E-02	1.440E-01	5.915E-02	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
	CSH (1.5)	$C_{1.0}S_{0.667}O_{2.334}H_{1.056}$	**0.000E+00**	0.000E+00	6.148E-02	1.123E-01	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
	CSH (1.6)	$C_{1.0}S_{0.625}O_{2.250}H_{1.053}$	**0.000E+00**	5.747E-02	9.896E-02	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
	CSH (1.7)	$C_{1.0}S_{0.588}O_{2.176}H_{1.049}$	**0.000E+00**	1.138E-01	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
	CSH (1.8)	$C_{1.0}S_{0.556}O_{2.112}H_{1.047}$	**1.850E-01**	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
	Ca	mol/kg-IEW	**1.850E-01**	1.713E-01	1.604E-01	1.514E-01	1.440E-01	1.380E-01	1.337E-01	1.296E-01	1.256E-01	1.232E-01	1.208E-01
	Si	mol/kg-IEW	**1.029E-01**	1.028E-01	1.029E-01	1.028E-01	1.028E-01	1.028E-01	1.028E-01	1.028E-01	1.028E-01	1.027E-01	1.026E-01
	Al*	mol/kg-IEW	**1.517E-02**	1.616E-02	1.690E-02	1.752E-02	1.804E-02	1.847E-02	1.875E-02	1.903E-02	1.931E-02	1.946E-02	1.960E-02
液相	pH	---	**7.00**	12.30	12.22	12.15	12.07	12.00	11.85	11.84	11.84	11.62	11.62
	Ca	mol/kg-IEW	**0.000E+00**	1.369E-02	1.087E-02	8.993E-03	7.402E-03	6.083E-03	4.258E-03	4.076E-03	4.076E-03	2.400E-03	2.400E-03
	Si	mol/kg-IEW	**0.000E+00**	1.162E-06	2.176E-06	3.543E-06	5.648E-06	9.152E-06	2.075E-05	2.300E-05	2.300E-05	7.311E-05	7.311E-05

*:Al取り込み量はRechardson et al.(1992) の推定式より算出

3.5 まとめ

実際の処分場で使用が想定される OPC ペーストについて, 塩水との反応による pH 変化を確認するため浸漬実験を行うとともに，化学平衡計算による解析を行った。その結果，以下の点を確認することができた。

- OPC ペーストをイオン交換水，降水系地下水，0.6mol/dm^3-NaCl 水溶液（塩水），海水系地下水にそれぞれ浸漬したケースについて，地球化学計算コード「PHREEQC」及び熱力学データベース「JNC-TDB.TRU」を用いて化学平衡計算（予察計算）した結果は，イオン交換水及び降水系地下水のケースでは，液相の pH がポルトランダイト平衡（pH=12.5）を呈するのに対し，塩水あるいは海水系地下水のように，水溶液中に塩化物イオンが存在するケースでは，pH が 13.2 程度まで上昇することを示唆した。

- 塩水による OPC ペーストの浸漬実験結果から，平衡時の浸漬液の pH(12.8)は，イオン交換水に浸漬したケースの pH(12.6)よりもわずかに高い値を示した。塩水に浸漬したケースの浸漬試料（固相）には，フリーデル氏塩の生成が確認されたことから，前章に記載したフリーデル氏塩の生成反応によって pH が上昇したと考えられる。しかし, その上昇の程度は, 上記の予察計算結果よりかなり小さかった。，実測された pH は，予察計算より 0.5 程度低い値であった。

- pH の上昇に寄与する Al に着目して，OPC ペースト初期試料の分析を EPMA を用いて実施し, C-S-H に Al が取り込まれており, その取り込み量は, Richardson et al. (1992) の Al/Ca mol 比と Si/Ca mol 比との関係に整合的であることを確認した。また C-S-H ゲル中に取り込まれた Al 量を定量するとともに，OPC ペーストに含まれるアルミネート系水和物を X 線回折により同定して，セメント成分中の Al 分を再配分した初期生成水和物モデルを新たに設定することにより，塩水と OPC ペーストの反応による pH 上昇現象を推測できることを示した。

4. 普通ポルトランドセメント（OPC）ペーストと人工海水の反応

4.1 目　的

放射性廃棄物を地層処分する施設では，セメント系材料と塩化物イオンが共存する環境として，海水を起源とする地下水のセメント系材料への流入が想定される。3 章の Berner et al. (1992) の考えに基づく初期生成水和物モデルによる予察計算では，海水系地下水（高 pH 型：SRHP）と OPC ペーストが反応して pH が 13.3 まで上昇することを示唆した結果となった。しかし，塩水と OPC ペーストの反応による pH 上昇について予察計算と実験値を比較した結果，予察計算は実験値よりも高 pH 側に評価することが確認されたことから，OPC ペーストと海水系地下水との反応によって，実際に pH がどの程度上昇するか不明である。そこで本章では，人工海水による OPC ペーストの浸漬実験を行い，人工海水と OPC ペーストとの反応による pH 変化に関するデータを取得した。また， OPC ペーストと人工海水との反応による pH 変化に対して、前章で提案した初期生成水和物モデル（C-S-H に取り込まれる Al 量を取り除くモデル）の適用性を評価するため，この初期生成水和物モデルを用いた化学平衡計算と実験結果との比較を行った。

4.2 人工海水を用いた OPC ペーストの浸漬実験

4.2.1 実験方法

(1) 浸漬試料（OPC ペースト粉末）の作製

(a) 使用材料

浸漬試料に用いた OPC ペースト粉末は，以下の原料を用いて OPC ペースト硬化体を作製し，粉砕して作製した。

- 普通ポルトランドセメント（OPC）
  太平洋セメント株式会社製　普通ポルトランドセメント
- 水
  イオン交換水

(b) 浸漬試料の作製方法

市販の OPC を水セメント比（以下, W/C）が 0.5 の条件でホバートミキサーを用いて混練し，得られたスラリーをポリプロピレン製ボトルに流し込み，30℃，RH70%の恒湿恒温室で 24 時間硬化させた。その後硬化体をイオン交換水に完全に水没させ, 50℃で 1 ヶ月間封緘養生した。

図 4.2-1 に OPC ペースト初期試料の X 線回折図を示す。この硬化体を 2～3mm に粗粉砕して，1 週間真空乾燥した後にアルゴンガス雰囲気下に制御されたグローブボックス中で 90μm 以下に粉砕した。浸漬試験を始める前に，OPC ペースト中に含まれる Na，K 成分を取り除くため, 粉砕した OPC ペースト粉末 40g とイオン交換水 400ml をポリプロピレン製ボトルに入れて 7 日間浸漬して洗浄処理を実施した。洗浄処理後，遠心分離で固液分離処理を行い，浸漬実験に使用する試料を作製した。なお固液分離作業は，空気中からの二酸化炭素による炭酸化を防止するため，アルゴンガス雰囲気に制御されたグローブボックス内で行った。

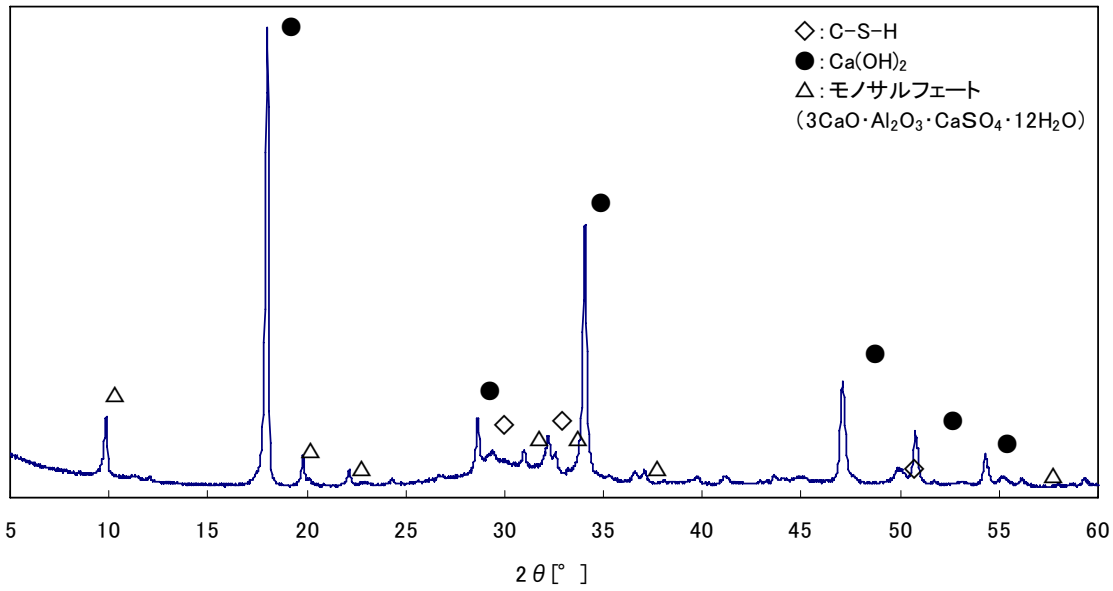


図 4.2-1 OPC ペースト 初期試料の X 線回折結果

(2) 実験方法

表 4.2-1 に本実験の人工海水による OPC ペーストの浸漬実験に関する浸漬条件を示す。実験は上述した手順で処理した OPC ペーストに対して，所定量の液固比となるように人工海水を，OPC ペーストとともにポリプロピレン製ボトルに入れて密封した。またブランク試験として，人工海水の代わりにイオン交換水を用いた試験も行った。浸漬作業はアルゴンガス雰囲気に制御されたグローブボックス内で行い，浸漬期間中は 25℃の恒温槽内に静置した。また濃度勾配形成の影響を緩和するため，定期的（およそ 1 回／日）にハンドシェイクによる均質化を実施した。所定期間浸漬した試料は，ろ過により固相と液相を分離し，それぞれ分析を行った。なお，固液分離作業はアルゴン雰囲気で実施した。液固比=2.5 の条件で浸漬したケースは，液相の pH 経時変化及び固相の X 線回折による鉱物の同定を行い，その他のケースについては，pH 経時変化及び X 線回折による鉱物の同定に加えて，固相の熱分析および液相・固相の化学組成分析を実施した。

表 4.2-1 人工海水による OPC ペーストの浸漬実験に関する浸漬条件

浸漬液	イオン交換水(ブランク)，人工海水(八洲薬品社製 アクアマリン)
液固比	2.5，10，100，500
浸漬期間※	50日，180日

※液固比＝2.5は50日浸漬，その他は180日浸漬

(3) 評価項目

(a) 液 相

①pH 測定

液相の pH は，ガラス電極式 pH 計（(株) ホリバ製 F-14）を用いて測定した。

②化学分析

採取した液相に硝酸を加えて酸性にした後，0.45μm フィルターを用いてろ過した。Ca，Si，Al, Mg, SO_3, Na, K については, ICP 発光分光光度計（Varian 社製 VISTA AX CCD Simulataneous）による測定を行い, Cl についてはイオンクロマトアナライザ（東亜電波工業（株）製 ICA-5000）による測定を行った。

(b)固 相

①粉末 X 線回折（XRD）による結晶相の同定

採取した固相について, 理学電機工業（株）製 RINT2500 を用いて, 結晶相の同定を行った。表 4.2-2 に測定条件を示す。

表 4.2-2　粉末Ｘ線回折の測定条件

ターゲット	Cu
電流・電圧	50kV，250mA
スリット	DS1°　RS0.15mm　SS1°
走査速度	5°/min

②熱分析

採取した固相について，表 4.2-3 に示す装置及び測定条件により，熱分析を行った。

表 4.2-3 熱分析装置及び測定条件

装置種類	TG-DTA	DSC
使用装置	理学電気（株）製 TG8101D	セイコーインスツルメンツ社製 DSC200
昇温速度	20℃/min	10℃/min
測定範囲	室温～1000℃	室温～400℃
試料量	約50mg	約15mg
測定雰囲気	窒素（流速100ml/min）	窒素（流速100ml/min）

③化学分析

JIS R 5202 に準拠し，固相の CaO，SiO_2，Al_2O_3，SO_3，Fe_2O_3，MgO，Na_2O，K_2O，Cl を測定した。

4.2.2 実験結果

(1) 液相（液相 pH 及び液相化学組成）

図 4.2-2 に人工海水に OPC ペースト粉末を浸漬した際の浸漬液の pH 経時変化を示す。人工海水を用いたケースでは，液固比=2.5 の条件で，浸漬開始から 30 日で pH が 12.7 まで上昇する結果を示した。また，液固比が 10，100，500 と増加するにつれ，化学平衡時の pH は低くなる傾向となった。一方，表 4.2-4 に示した人工海水及びイオン交換水を用いた OPC ペーストの浸漬実験における液固比ごとの液相分析結果から，イオン交換水を用いたケースでは，人工海水の場合と比較して液固比の変化に伴う pH 変化が小さい。イオン交換水の場合は液固比 10 及び 100 のケースでは 12.6 一定であり，液固比 500 で 12.3 に低下しただけであることがわかる。次に人工海水に浸漬したケースの Ca 濃度は，全ての液固比において，人工海水の初期濃度及びイオン交換水に浸漬したケースよりも高い値を示した。このことから，人工海水に浸漬したケースは，イオン交換水に浸漬したケースよりも Ca の溶脱が促進されると考えられる。人工海水に浸漬したケースの SO_3 濃度は，人工海水の初期濃度よりも低い値を示した。特に液固比＝10 の条件は，初期濃度よりも 1/3 程度と著しく減少したことから，SO_3 が固相に固定されていると考えられる。人工海水に浸漬したケースの Mg 濃度は，全ての液固比において，人工海水の初期濃度よりも著しく低い値を示した。このことから，SO_3 同様，Mg が固相に固定されていると考えられる。人工海水に浸漬したケースの Cl 濃度は，液相の組成分析を実施したケースの中で最も液固比の小さい液固比 10 の条件のみ，人工海水の初期濃度よりも低い値を示した。また人工海水に浸漬したケースの Si,Al,Na,K については，人工海水の初期濃度に対してほとんど変化がみられていない。

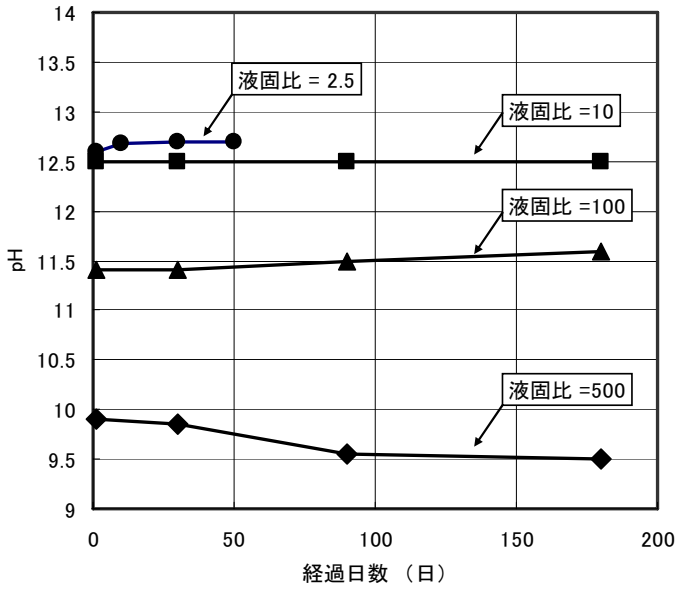


図 4.2-2 人工海水に OPC ペースト粉末を浸漬した際の浸漬液の pH 経時変化

表 4.2-4 人工海水及びイオン交換水を用いた OPC ペースト浸漬実験（180 日浸漬）の液相組成分析結果

ケース	液固比	pH	液相組成[mol/dm^3]							
			Ca	Si	Al	SO_3	Mg	Na	K	Cl
人工海水（浸漬前）	--	8.2	1.04E-02	＜1.00E-05	＜1.00E-05	2.93E-02	5.38E-02	4.93E-01	1.11E-02	5.65E-01
人工海水に浸漬したケース	10	12.5	4.28E-02	1.00E-05	＜1.00E-05	1.90E-04	＜1.00E-05	4.20E-01	1.33E-02	4.73E-01
	100	11.6	6.15E-02	4.00E-05	＜1.00E-05	2.32E-02	＜1.00E-05	5.07E-01	1.67E-02	5.64E-01
	500	9.6	2.64E-02	＜1.00E-05	＜1.00E-05	2.81E-02	3.72E-02	5.01E-01	1.59E-02	5.57E-01
イオン交換水に浸漬したケース	10	12.6	2.47E-02	＜1.00E-05	1.00E-05	＜1.00E-05	＜1.00E-05	9.40E-04	1.26E-03	＜1.00E-05
	100	12.6	2.33E-02	＜1.00E-05	2.00E-05	＜1.00E-05	＜1.00E-05	1.00E-04	1.80E-04	＜1.00E-05
	500	12.3	8.53E-03	1.00E-05	1.20E-04	4.00E-05	＜1.00E-05	3.00E-05	5.00E-05	＜1.00E-05

(2)固相（X 線，熱分析，化学成分分析）

人工海水に浸漬したケースの初期固相及び浸漬後の固相について，X 線回折により水和物を同定した。その結果を表 4.2-5 に示す。また比較として，イオン交換水に浸漬したケースの浸漬試料の同定結果を表 4.2-6 に示す。なお，付録 7 にX線回折図を添付した。イオン交換水に浸漬した試料では，液固比=2.5, 10 及び 100 の条件で同定された鉱物は同一で，C-S-H, $Ca(OH)_2$，モノサルフェートが同定された。液固比 500 になると，$Ca(OH)_2$ 及びモノサルフェートは確認されなくなり，エトリンガイトが検出された。人工海水に浸漬した試料の場合，液固比 2.5 の条件では，C-S-H，$Ca(OH)_2$，エトリンガイト，フリーデル氏塩のピークが確認された。液固比 10 の条件では C-S-H，$Ca(OH)_2$，エトリンガイトのピークが検出された。初期試料では，モノサルフェートのピークのみで，エトリンガイトが検出されていないことから，液固比=2.5 及び 10 の条件で同定されたエトリンガイトは，二次生成水和物として析出したものと考えられる。また先に記述した液相分析結果からも人工海水中の SO_4^{2-}が固相に固定されていることが推察される。以上のことから，初期固相のモノサルフェートは，液相中の SO_4^{2-}イオンと反応して，エトリンガイトを生成しているものと考えられる。液固比＝100 になると，$Ca(OH)_2$ のピークが消失し，カルサイト，エトリンガイト，二水石膏が二次生成水和物として確認された。このことから，モノサルフェートがすべてエトリンガイトとなった後，さらに液相中の SO_4^{2-}イオンは，$Ca(OH)_2$ の溶脱によって Ca 濃度が増加し，二水石膏として析出したと考えられる。液固比＝100 の条件でイオン交換水に浸漬したケースの固相には，$Ca(OH)_2$ が確認されるのに対して，同液固比で人工海水に浸漬したケースでは，$Ca(OH)_2$ が検出されないイオン交換水に浸漬したケースよりも $Ca(OH)_2$ の溶脱が促進されると考えられる。これは，イオン交換水の場合と比較して，人工海水の場合は，液相の Ca 濃度が高いこととも整合的である。人工海水に液固比=500 で浸漬した固相では，C-S-H, エトリンガイト，二水石膏のピークが消失し，二次水和生成物として，カルサイトだけでなく，アラゴナイト，ハイドロタルサイトのピークが確認された。

表.4.2-5 人工海水及びイオン交換水を用いた OPC ペースト浸漬実験（180 日浸漬）の初期試料及び浸漬した固相のＸ線回折による同定結果

水和物名	初期試料	浸漬ケース（液固比）			
		2.5	10	100	500
C-S-H	○	○	○	○	×
$Ca(OH)_2$	○	○	○	×	×
モノサルフェート	○	×	×	×	×
エトリンガイト	×	○	○	○	×
フリーデル氏塩	×	○	×	×	×
カルサイト	×	×	×	○	○
アラゴナイト	×	×	×	×	○
二水石膏	×	×	×	○	×
ブルーサイト	×	×	×	○	○
ハイドロタルサイト	×	×	×	×	○

○：検出，×：未検出

表.4.2-6 イオン交換水に 180 日間浸漬した OPC ペーストの X 線回折による同定結果

水和物名	浸漬ケース（液固比）			
	2.5	10	100	500
C-S-H	○	○	○	○
$Ca(OH)_2$	○	○	○	×
モノサルフェート	○	○	○	×
エトリンガイト	×	×	×	○
フリーデル氏塩	×	×	×	×
カルサイト	×	×	×	×
アラゴナイト	×	×	×	×
二水石膏	×	×	×	×
ブルーサイト	×	×	×	×
ハイドロタルサイト	×	×	×	×

○：検出，×：未検出

次に人工海水及びイオン交換水に浸漬した固相の熱分析結果を表 4.2-7 に示す。また付録 8 にチャート図を添付する。人工海水に浸漬した試料に含まれる $Ca(OH)_2$ は，液固比 10 で初期試料よりも大きく減少し，液固比 100，500 では検出されなかった。イオン交換水に浸漬したケースにおいても液固比の増加によって $Ca(OH)_2$ 量は減少しているが，両者を比較すると，人工海水に浸漬したケースのほうがイオン交換水に浸漬したケースよりも $Ca(OH)_2$ の溶脱は促進され

ている結果となった。これはX線回折結果とも一致する。また人工海水に浸漬した試料には，DTA チャートから全ての液固比で $Mg(OH)_2$ の脱水ピークが確認された。液固比=2.5 の条件は微量で定量できなかったが，表 4.2-7 に示すように液固比が 10，100，500 と増加するに従い，$Mg(OH)_2$ の含有量も増加する結果となった。X線回折結果からは，液固比=10 の条件では，$Mg(OH)_2$ のピークは確認されなかったが，熱分析より液固比が小さい場合でも $Mg(OH)_2$ が二次生成水和物として生成していることが確認された。

表 4.2-7 人工海水及びイオン交換水に 180 日間浸漬した OPC ペーストの熱分析結果　（%）

ケース	液固比	TG-DTA*1 (%)			DSC*2 (%)	
		$Ca(OH)_2$	$CaCO_3$	$Mg(OH)_2$	モノサルフェート	フリーデル氏塩
人工海水（浸漬前）	--	22.3	＜0.5	＜0.5	1.6	＜0.5
人工海水に浸漬したケース	10	8.5	1.7	4.4	＜0.5	＜0.5
	100	＜0.5	1.2	10.8	＜0.5	＜0.5
	500	＜0.5	0.6	12.4	＜0.5	＜0.5
イオン交換水に浸漬したケース	10	15.4	1.2	＜0.5	2.9	＜0.5
	100	7	0.4	＜0.5	3.0	＜0.5
	500	＜0.5	＜0.5	＜0.5	＜0.5	＜0.5

*1：$Ca(OH)_2$：450℃付近の質量減量，$Mg(OH)_2$：400℃付近の質量減量，$CaCO_3$：700℃付近の質量減
*2：モノサルフェート：210℃付近の吸熱ピーク　フリーデル氏塩：350℃付近の吸熱ピーク

表 4.2-8 に人工海水及びイオン交換水に浸漬した OPC ペースト粉末の化学成分分析結果を示す。固相の CaO 量は，人工海水に浸漬したケース，イオン交換水に浸漬したケースともに，液固比の増加に伴い減少するが，その減少量は人工海水に浸漬したケースのほうが大きい。このことから，人工海水に浸漬したケースのほうが，CaO の溶脱が促進されると考えられる。この現象はX線回折及び熱分析の結果と整合する。

人工海水浸漬試料の MgO 量は，液固比増加に伴い増加する傾向を示した。X線回折及び熱分析の結果を考慮すると，液固比の増加に伴い，固相に $Mg(OH)_2$ として固定化される量が増加すると考えられる。

人工海水に浸漬した試料の SO_3 量については，液固比が 10 及び 100 の条件では初期試料よりも大きく増加したが，液固比 500 では，初期試料の近い値となった。X 線回折結果から，液固比 10,100 の条件で浸漬したケースには，エトリンガイトと二水石膏が，二次生成水和物として生成することが確認されるのに対し，液固比 500 の条件で浸漬したケースには，これらの水和物が生成しないことがわかる。このことから，液固比 500 の条件は，液固比 10,100 の条件に比べ，固相に固定される SO_3 量が少ないと思われる。

人工海水に浸漬した試料の Cl 量は，液固比の増加に伴い，増加する傾向を示した。X 線回折や熱分析の結果では，液固比 2.5 以外の固相にはフリーデル氏塩の存在が確認されない結果

を示している。Cl は C-S-H やハイドロタルサイトなどフリーデル氏塩以外の水和物にも固定化されることが平尾ら（2004）及び白坂ら（1999）によって報告されていることから，本試験においても Cl が C-S-H などに固定化されている可能性が考えられる。

Al_2O_3，Fe_2O_3 は，人工海水及びイオン交換水に浸漬した両ケースとも，液固比の増加に伴いわずかではあるが増加傾向を示す。これは CaO が固相から溶出したことによって，相対的に増加したものと考えられる。

表 4.2-8 人工海水及びイオン交換水を用いた OPC ペースト浸漬実験（180 日浸漬）における固相の化学成分分析結果　（%）

ケース	液固比	化学組成[%]											
		ig.loss	insol.	CaO	SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	SO_3	MgO	Na_2O	K_2O	Cl	total
初期試料	---	22.65	0.10	49.98	16.52	4.50	2.17	1.57	1.38	0.17	0.31	0.01	99.36
人工海水に浸漬したケース	10	22.09	0.22	47.04	16.32	4.43	2.05	3.71	3.29	0.10	＜0.01	0.55	99.80
	100	26.7	0.08	20.56	16.52	4.41	2.12	4.60	23.43	0.43	0.03	1.46	100.34
	500	32.82	0.08	5.59	16.12	5.94	2.11	1.79	34.94	0.63	0.03	3.79	103.84
イオン交換水に浸漬したケース	10	21.77	0.16	50.50	17.18	4.62	2.15	1.61	1.93	＜0.01	＜0.01	0.01	99.93
	100	21.26	0.12	46.76	20.10	5.38	2.54	1.89	2.26	＜0.01	＜0.01	0.02	100.33
	500	21.54	0.10	40.09	23.79	5.72	3.08	2.08	3.46	＜0.01	＜0.01	0.01	99.87

次に表 4.2-8 の固相の化学組成を無水物基準にそれぞれ換算し，Si，Mg，Ca について，試料 100g 当たりのモル数および(Ca+Mg)/Si mol 比を求めた結果を表 4.2-9 に示す。表 4.2-8 から，人工海水に OPC ペーストを浸漬した場合，液固比の増加に伴い，浸漬試料中の MgO 量が増加することから，人工海水中の Mg が固相に固定化されると考えられる。各液固比条件で，固相中の(Ca+Mg)/Si mol 比について比較すると，イオン交換水に浸漬したケースは，液固比の上昇に伴い数値は減少し，Ca の溶脱を反映した結果となるが，人工海水に浸漬したケースは，ほぼ初期試料と同じ一定値となっており，人工海水に浸漬したケースでは，Ca と Mg の置換反応が生じていることを示唆している。武井ら（2004）は，OPC 硬化体に人工海水を通水させた実験を実施し，その変質部の固相分析から，C-S-H の Ca が Mg と置換して MgO/SiO_2 mol 比＝1.5 の 低結晶性の $MgO\text{-}SiO_2\text{-}H_2O$ 系の水和物が二次水和生成物として生成する可能性を報告している。液固比=500 の条件で人工海水に浸漬した試料には，C-S-H が確認されなかったことから，C-S-H の代わりに $MgO\text{-}SiO_2\text{-}H_2O$ 系低結晶性水和物が生成していることが推測される。

表 4.2-9　人工海水及びイオン交換水を用いた OPC ペースト浸漬実験（180 日浸漬）の固相 100g 中の Ca, Si, Mg モル数及び(Ca+Mg)/Si モル比

ケース	液固比	試料100g あたりのmol数			モル比
		CaO	SiO_2	MgO	(Ca+Mg)/Si
初期試料	---	0.36	1.15	0.04	3.40
人工海水に浸漬したケース	10	0.35	1.08	0.10	3.40
	100	0.38	0.5	0.79	3.40
	500	0.40	0.15	1.29	3.60
イオン交換水に浸漬したケース	10	0.37	1.15	0.06	3.30
	100	0.42	1.06	0.07	2.70
	500	0.5	0.91	0.11	2.00

4.3 浸漬実験の化学平衡計算

前述した人工海水による OPC ペーストの浸漬実験について，地球化学計算コード「PHREEQC」（Parkhurst and Appelo,1999）を用いた化学平衡計算による解析を実施した。なお化学平衡計算には，これまで同様，熱力学データベースとして「JNC-TDB.TRU」(http://migrationdb.jaea.go.jp/japanese.html) を用いた。表 4.3-1 に本解析に使用した OPC ペーストの初期生成水和物モデルを示す。前述したように，これまでに実施した人工海水による OPC ペーストの通水試験を通じて，二次生成水和物として Mg/Si mol 比が 1.5 程度の組成を有する $MgO-SiO_2-H_2O$ 系低結晶性水和物(Mg-Si 系水和物)が生成することが確認されているが,その水和物が何であるか特定するには至っていない。そこで本解析では，この低結晶性水和物と同じ Mg/Si mol 比の組成を有するセピオライトを，この低結晶性水和物と暫定的に想定して水和物モデルの設定を行った。またモデルは，C-S-H ゲルに取り込まれる Al を考慮したモデル（Al 取り込み想定モデル）と前章の予察計算に使用した Berner et al. (1992) の考えに基づくモデル（Al 取り込み想定なしモデル）で比較検討した。

表 4.3-1 本解析に使用した初期生成水和物モデルにおける水和物とその量

初期設定水和物	組成式	Al取り込み想定	Al取り込み想定なし	二次水和物
		水和物量 (mol/kg-ペースト)		
C-S-Hゲル (Ca/Si mol比 = 1.8)	$CaO \cdot 0.556SiO_2 \cdot 1.047H_2O$	5.281	5.361	・初期設定水和物 ・C-S-Hゲル (Ca/Si mol比 = 0.1-1.7) ・エトリンガイト ・フリーデル氏塩 ・カルサイト ・ハイドロタルサイト ・セピオライト ・ゲーレナイトハイドレート
ポルトランダイト	$Ca(OH)_2$	2.595	2.43	
ブルーサイト	$Mg(OH)_2$	0.418	0.407	
モノサルフェート	$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$	0.213	0.204	
Al型ハイドロガーネット	$3CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 6H_2O$	0.058	0.234	
Fe型ハイドロガーネット	$3CaO \cdot Fe_2O_3 \cdot 6H_2O$	0.139	0.135	

表 4.3-2 に浸漬条件（液固比）の異なる浸漬試料の構成水和物について，化学平衡計算による解析結果と試料をX線回折及び熱分析により分析した結果を比較したものを示す。この結果，Mg-Si 系水和物以外の部分では，C-S-H に Al が取り込まれることを想定することに関係なく，計算結果と実験結果はほぼ整合する結果となった。本解析の初期生成水和物モデルでは，Al 取り込み想定モデルおよび Al 取り込み想定なしモデルともに Mg-Si 系水和物をセピオライトと暫定的に想定した。その結果，全ての水準で二次生成水和物としてセピオライトが析出する結果となった。X 線回折ではセピオライトおよび Mg-Si 系水和物のピークは確認されていない。Mg-Si 系水和物は, C-S-H ゲルの Ca が Mg と置換して生成する可能性が高いことから，低結晶性であり，X 線回折では検出されにくいと考えられる。このため，Mg-Si 系水和物が浸漬試料に生成している可能性は否定できない。

表 4.3-2 浸漬条件（液固比）の異なる浸漬試料の構成水和物に関する分析結果と初期水和物設定モデルとの比較

液固比	分析手法	エトリンガイト	ポルトランダイト	C-S-H	カルサイト	アラゴナイト	ブルーサイト	ハイドロタルサイト	フリーデル氏塩	二水石膏	Mg-Si化合物注1（セピオライト）
2.5	分析結果	○	○	○	○	×	○	×	○	×	△注1
	初期生成水和物モデル（Al取り込みモデル）	○	○	○	○	×	○	×	○	×	×
	初期生成水和物モデル（Al取り込みなしモデル）	○	○	○	○	×	○	×	○	×	×
10	X線回折・熱分析	○	○	○	○	×	○	×	×	×	△注1
	初期生成水和物モデル（Al取り込みモデル）	○	○	○	○	×	○	×	○	×	×
	初期生成水和物モデル（Al取り込みなしモデル）	○	○	○	○	×	○	×	○	×	×
100	X線回折・熱分析	○	×	○	○	×	○	×	×	○	△注1
	初期生成水和物モデル（Al取り込みモデル）	×	×	○	○	×	○	×	×	○	○
	初期生成水和物モデル（Al取り込みなしモデル）	×	×	○	○	×	○	×	×	○	○
500	X線回折・熱分析	×	×	×	○	○	○	○	×	×	△注1
	初期生成水和物モデル（Al取り込みモデル）	×	×	×	○	×	○	○	×	×	○
	初期生成水和物モデル（Al取り込みなしモデル）	×	×	×	○	×	○	○	×	×	○

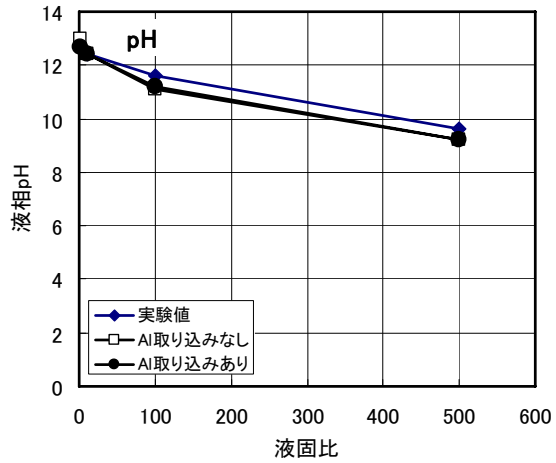
○：X線回折により検出 or 平衡計算結果より析出。△：X線回折は検出されないが，固相に生成している可能性がある。×：X線回折で検出されない及び平衡計算結果で析出しない。
注1）通水試験結果よりX線回折では検出できない低結晶～微結晶質のMg-Si化合物が生成している可能性がある。
平衡計算ではMg-Si化合物をセピオライトと仮定して計算した。

表 4.3-3 および図 4.3-1 に浸漬溶液の液相 pH および化学組成について，化学平衡計算による解析結果と実験結果を比較したものを示す。この結果，液固比が 2.5 の浸漬条件では，従来の Berner et al. (1992) の考えに基づくモデル（C-S-H に Al を取り込まないモデル）は，液相 pH が実験値よりも高めに試算されるが，Al が取り込まれることを想定したモデルは，実験値とほぼ整合する結果となった。また，液固比の増加に伴う各イオンの濃度変化は，C-S-H に Al が取り込まれることを想定することに関係なく，実験値と計算値で類似した挙動となった。以上のことから, Mg/Si mol 比が 1.5 程度の組成を有する低結晶性の Mg-Si 系水和物をセピオライトと想定することによって, 人工海水に OPC ペーストを浸漬したケースの浸漬状態をほぼ再現できることがわかった。特に C-S-H に Al が取り込まれることを想定した初期生成水和物モデルは，液固比の低い条件においても人工海水を用いた浸漬実験の固相，液相の状態を再現することができ, Berner et al. (1992) の考えに基づく初期生成水和物モデルよりも実験値に近い評価結果を得ることができる。

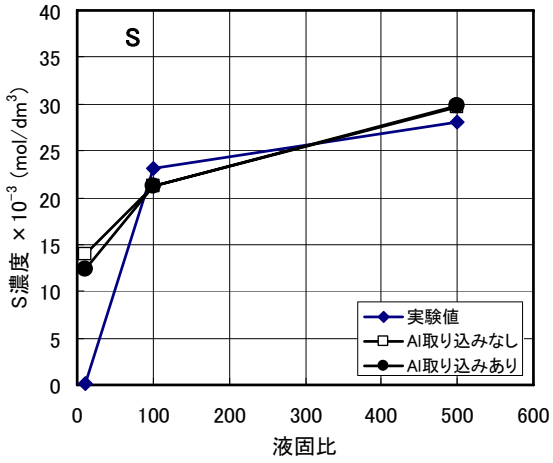
表 4.3-3 人工海水を用いた OPC ペースト浸漬実験における液相分析結果と
モデル計算結果の比較

ケース	液固比	pH	液相組成(mol/dm^3)							
			Ca	Si	Al	SO_3	Mg	Na	K	Cl
計算値 Al取り込み想定なし	2.5	13.0	4.09E-03	2.98E-06	3.85E-07	4.48E-02	5.01E-09	4.93E-01	1.11E-02	2.60E-01
計算値 (Al取り込み想定あり)		12.7	1.40E-02	9.45E-07	5.05E-08	2.25E-02	1.28E-08	4.93E-01	1.11E-02	4.10E-01
実験値＊		12.7	--	--	--	--	--	--	--	--
計算値 Al取り込み想定なし	10	12.4	3.71E-02	4.54E-07	1.36E-08	1.39E-02	2.66E-08	4.93E-01	1.11E-02	5.02E-01
計算値 (Al取り込み想定あり)		12.4	5.05E-02	3.66E-07	9.12E-09	1.24E-02	3.36E-08	4.93E-01	1.11E-02	5.37E-01
実験値		12.5	4.28E-02	1.00E-05	＜1.00E-05	1.90E-04	＜1.00E-05	4.20E-01	1.33E-02	4.73E-01
計算値 Al取り込み想定なし	100	11.1	5.30E-02	4.12E-05	3.31E-08	2.13E-02	5.35E-06	4.93E-01	1.11E-02	5.65E-01
計算値 (Al取り込み想定あり)		11.2	5.32E-02	3.21E-05	4.06E-08	2.13E-02	3.62E-06	4.93E-01	1.11E-02	5.65E-01
実験値		11.6	6.15E-02	4.00E-05	＜1.00E-05	2.32E-02	＜1.00E-05	5.07E-01	1.67E-02	5.64E-01
計算値 Al取り込み想定なし	500	9.2	2.09E-02	1.74E-06	3.81E-10	2.97E-02	3.93E-02	4.93E-01	1.11E-02	5.65E-01
計算値 (Al取り込み想定あり)		9.2	2.15E-02	1.74E-06	3.83E-10	2.98E-02	3.88E-02	4.93E-01	1.11E-02	5.65E-01
実験値		9.6	2.64E-02	＜1.00E-05	＜1.00E-05	2.81E-02	3.72E-02	5.01E-01	1.59E-02	5.57E-01

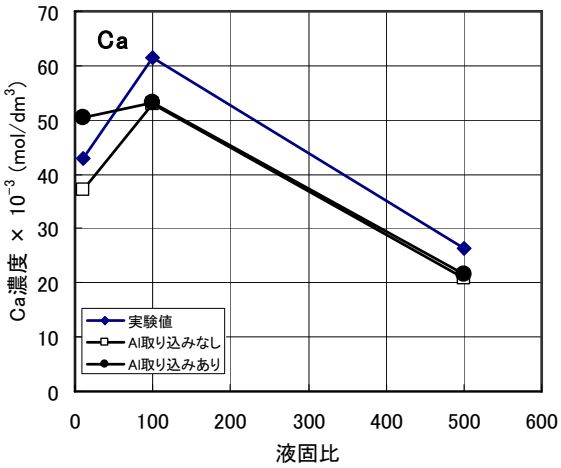
＊:液固比2.5の浸漬液の液相分析は実施していない。



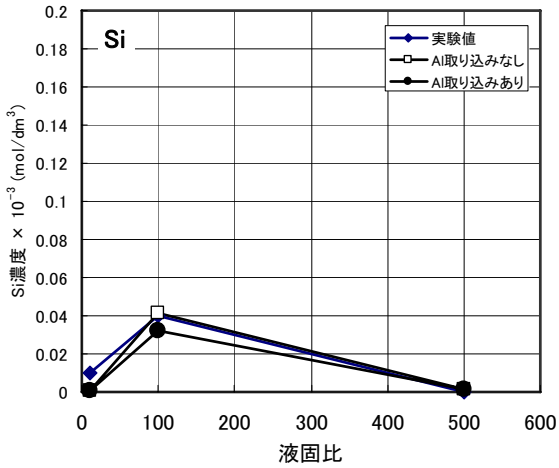
(a) pH



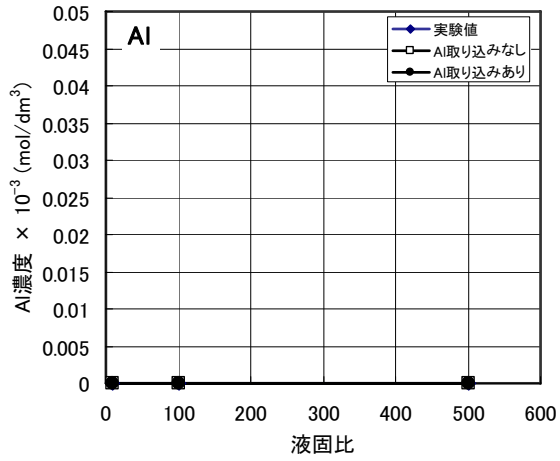
(b) S



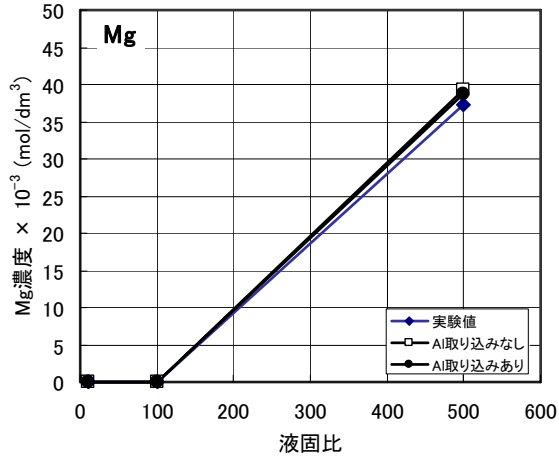
(c) Ca



(d) Si



(e) Al



(f) Mg

図 4.3-1 人工海水による OPC ペースト水和物浸漬実験における液相分析結果と化学平衡計算結果の比較

4.4 まとめ

OPC ペーストと海水系地下水との反応による pH 変化について，人工海水を用いた浸漬実験および化学平衡計算により検討を行った。その結果，以下のことを確認することができた。

- OPC ペーストを人工海水に浸漬したケースは，液固比が増加するに伴い，化学平衡時の pH は小さくなる傾向を示した。

- 人工海水に浸漬したケースは，イオン交換水に浸漬したケースに比べ，液相中の Ca 濃度が高い値を示した。このことから人工海水に浸漬したケースは，イオン交換水に浸漬したケースに比べて Ca の溶脱反応が促進するものと思われる。

- 人工海水中の SO_3，Mg，Cl は固相に固定される結果を示した。SO_3 は，エトリンガイト及び／または二水石膏，Mg は $Ca(OH)_2$ 及び C-S-H の中の Ca と置換し，$Mg(OH)_2$ 及び $MgO\text{-}SiO_2\text{-}H_2O$ 系低結晶性物質として固定されると考えられる。なお Cl については，固相への取り込み形態は，実験で確認できなかった。

- Mg/Si mol 比が 1.5 程度の組成を有する Mg-Si 系水和物をセピオライトと仮定することによって，人工海水に OPC ペーストを浸漬したケースの浸漬状態をほぼ再現できることがわかった。特に C-S-H に Al が取り込まれることを想定して初期生成水和物モデルを構築することによって，液固比の低い条件においても液相 pH をほぼ正確に再現することができ，Berner et al.の考えに基づくモデル（C-S-H 中に Al が取り込まれることを想定していない）よりも実験値に近い評価結果を得ることができる。

5. おわりに

処分施設周辺の地下水が海水のように，塩化物イオン濃度が高い場合において，処分施設を構成するセメント系材料中のハイドロガーネットが塩化物イオンと反応し，フリーデル氏塩を生成する過程で，多量の水酸化物イオンを放出しセメント系材料中の間隙水の pH を上昇させ，周囲の岩盤や人工バリアを変質する可能性が懸念されていた。

そこで本研究は，以下の①～③を目標として研究を実施した。

① OPC ペーストに含まれるカルシウムアルミネート水和物（エトリンガイト及びハイドロガーネット）やポルトランダイトを使って海水レベルの塩化ナトリウム濃度の水溶液（以下，塩水）による浸漬実験を行い，カルシウムアルミネート水和物と塩水の反応による pH 変化を実験的に確認するとともに，化学平衡計算を行うことにより，そのメカニズムについて検討すること。

② OPC ペーストと塩水の浸漬実験を行い，既往の化学平衡計算結果が示したように，pH 上昇が実際に起こるのか確認し，その評価方法について検討すること。

③ OPC ペーストと塩水の反応による pH 変化を評価する手法が，海水についても適用できるか確認すること。

その結果，ハイドロガーネット及びカルシウムアルミネートハイドレートと塩水の反応により，フリーデル氏塩が生成し，これに伴い OH^- の液相中への放出が起こり，浸漬液の pH が上昇することを実験及び化学平衡計算により示した。しかし実際のセメント系材料として想定された OPC ペーストと塩水の浸漬実験では，既往の熱力学モデルによる計算結果ほど，浸漬液の pH が上昇しないことがわかった。そこで初期セメント水和物におけるアルミニウムの分配を実験的に測定し，これに基づいて初期セメント水和物モデルを考案し，実験結果を説明できる評価方法を見出した。また，この評価方法は，人工海水と OPC ペーストの反応にも適用できることを浸漬実験及び化学平衡計算により示した。

参考文献

電気事業連合会・核燃料サイクル開発機構：TRU 廃棄物処分技術検討書−第 2 次 TRU 廃棄物処分研究開発取りまとめ−，JNC TY1400 2005-013，FEPC TRU-TR2-2005-02 (2005)

Glasser,F.P., Tyrer,M., Quillin, K., Ross, D., Pedersen, J., Goldthorpe, K., Bennett, D. and Atkins,M.：“The chemistry of blended cements and backfills intended for use in radioactive waste disposal”, Environment Agency, R&D technical report P.98 (1998).

平尾　宙，Hassan ZIBARA，高橋晴香，山田一夫：塩化物イオンの固定に及ぼすセメント組成の影響，コンクリート工学年次論文集，vol.26，No.1，pp.855-860 (2004).

I.G. Richardson, G.W. Groves：Microstructure and microanalysis of hardened cement pastes involving ground granulated blast – furnace slag, *JOURNAL OF MATERIALS SCIENE*, 27, 6204-6212 (1992).

Mikazu Yui, Hiroshi Sasamoto, Randolph C Arthur：“Groundwater Evolution Modeling for the Second Progress Performance Assessment(PA) Report”，JNC TN8400 99-030. (1999).

Parkhurst, D. L. and Appelo, C. A. J. : Use’s guide to PHREEQC (version 2) – A computer program for speciation batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations, U. S. Giological Survey Water – Resources Investigations Report, 99 – 4259. (1999).

白坂徳彦，入野清花，後藤孝治：セメントの塩素固定能に関する研究，セメント技術大会公演要旨集，vol.53，pp.22-23 (1999).

武井明彦，藤田英樹，原澤修一：セメント系材料の水理・力学特性の変遷に関する研究（Ⅲ），JNC TJ8400 2004-024 (2004).

U.R. Berner：Evolution of pore water chemistry during degradation of cement in a radioactive waste reository environment, WASTE MANAGEMENT, 12, 201-219 (1992).

This is a blank page.

付　　録

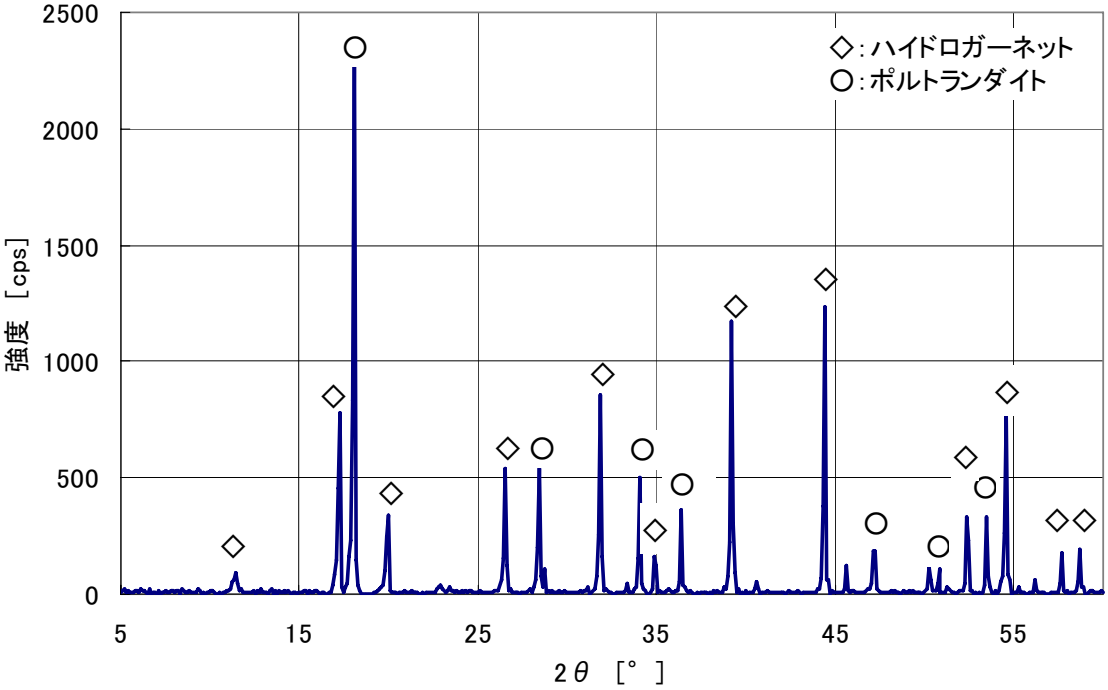
This is a blank page.

付 録 目 次

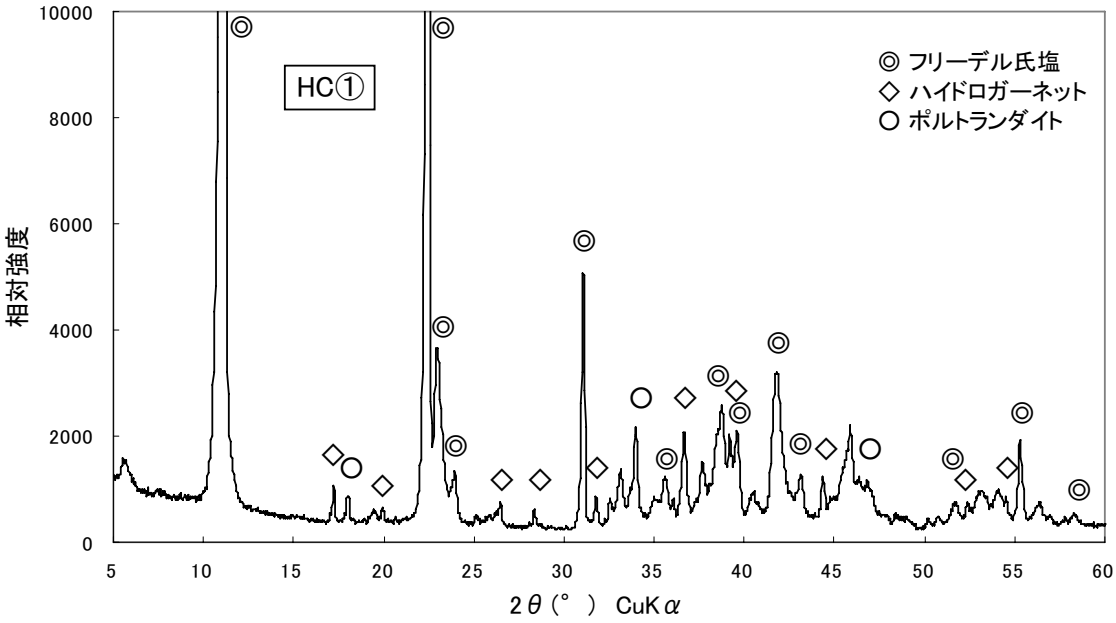
付録 1　アルミネート系水和物浸漬実験　固相の X 線回折図 47
付録 2　浸漬実験の化学平衡計算出力データ 49
付録 3　OPC ペースト浸漬実験の化学平衡計算 出力データ..... 75
付録 4　熱分析チャート 111
付録 5　EPMA によるマッピング画像から推定した C-S-H 中の Al 量..... 114
付録 6　改良した初期生成水和物モデルを使った化学平衡計算　出力データ 117
付録 7　人工海水を用いた浸漬実験の初期試料及び浸漬試料の X 線回折図 129
付録 8　人工海水を用いた浸漬実験の初期試料及び浸漬試料の熱分析チャート 131
付録 9　人工海水を用いた浸漬実験の化学平衡計算　出力データ 139

This is a blank page.

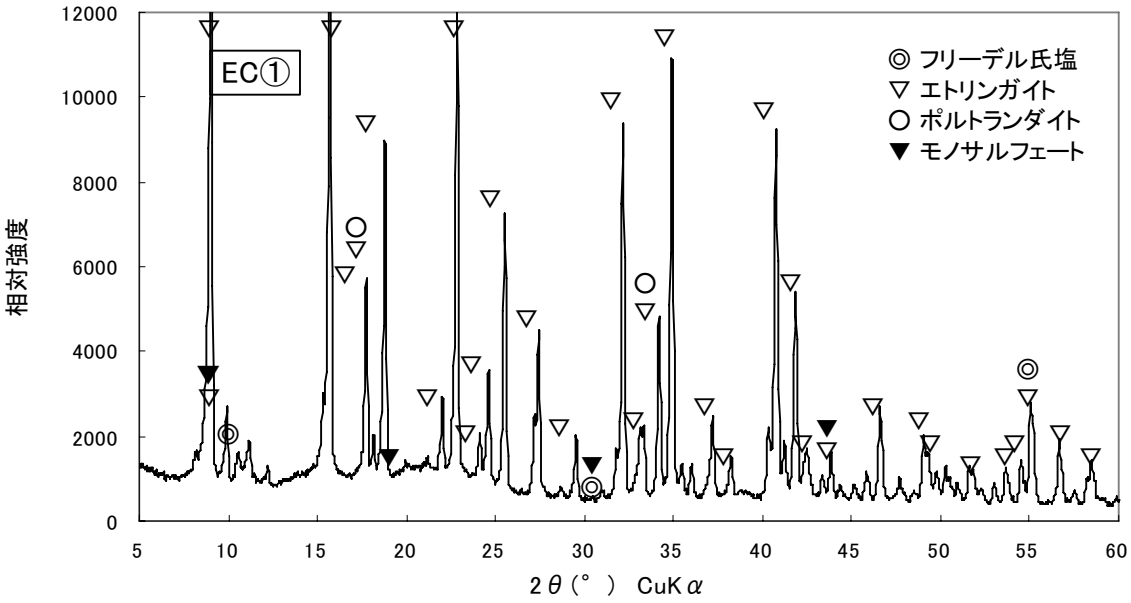
付録 1 アルミネート系水和物浸漬実験 固相の X 線回折図



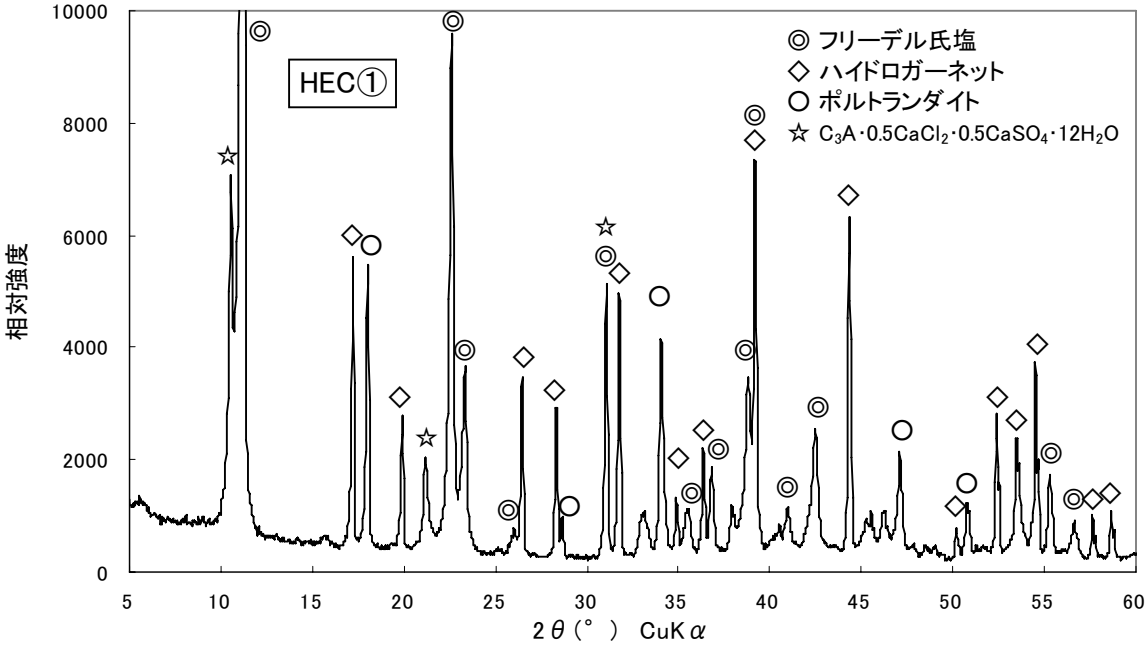
付図 1-1. ハイドロガーネット-ポルトランダイト共存系（HC 系）の X 線回折図
（浸漬液：イオン交換水）



付図 1-2. ハイドロガーネット-ポルトランダイト共存系（HC 系）の X 線回折図
（浸漬液：塩水）



付図 1-3. エトリンガイト-ポルトランダイト共存系（EC 系）の X 線回折図
（浸漬液：塩水）



付図 1-4. ハイドロガーネット-エトリンガイト-ポルトランダイト共存系（HEC 系）
の X 線回折図　（浸漬液：塩水）

付録2 浸漬実験の化学平衡計算　出力データ

リスト2-1 ハイドロガーネット-ポルトランダイト共存系の出力リスト（浸漬液：塩水）

```
Input file: C:¥Documents and Settings¥t171x053¥デスクトップ¥原子力学会¥発表用OHP¥計算結果¥0.5M-HG,CH-NaCl(0.6).pqi
Output file: C:¥Documents and Settings¥t171x053¥デスクトップ¥原子力学会¥発表用OHP¥計算結果¥0.5M-HG,CH-NaCl(0.6).pqo
Database file: C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
------------------------------------
Reading input data for simulation 1.
------------------------------------

DATABASE C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb
Title CH,C3AH6:0.6M-NaCl
PHASES
CSH(0.1)
        Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
        log_K -1.071
CSH(0.2)
        Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
        log_K 0.565
CSH(0.3)
        Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
        log_K 2.227
CSH(0.4)
        Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
        log_K 3.907
CSH(0.5)
        Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
        log_K 5.601
CSH(0.6)
        Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
        log_K 7.312
CSH(0.7)
        Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
        log_K 9.045
CSH(0.8)
        Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
        log_K 10.819
CSH(0.9)
        Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
        log_K 14.061
CSH(1.0)
        Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
        log_K 14.514
CSH(1.1)
        Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
        log_K 14.983
CSH(1.2)
        Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
        log_K 15.439
CSH(1.3)
        Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
        log_K 15.870
CSH(1.4)
        Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
        log_K 16.272
CSH(1.5)
        Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
        log_K 16.643
CSH(1.6)
        Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
        log_K 16.987
CSH(1.7)
        Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
        log_K 17.304
CSH(1.8)
        Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
        log_K 17.597
Ca(OH)2
        Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
        log_k 22.710
SiO2(am)
        Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
        log_K -2.639
CSH(0.833)
        Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
        log_K 11.436
SOLUTION 0    0.6M-NaCl
                        units      mol/kgw
                    pH          7.000
                    pe          0.0
                    density 1.000
                    temp        25.0
```

```
                    Na    0.6
                    Cl    0.6
SOLUTION 1    0.6M-NaCl
                      units     mol/kgw
                    pH          7.000
                    pe          0.0
                    density 1.000
                    temp        25.0
                    Na    0.6
                    Cl    0.6
EQUILIBRIUM_PHASES 1
          CSH(0.1)    0.0    0.0
          CSH(0.2)    0.0    0.0
          CSH(0.3)    0.0    0.0
          CSH(0.4)    0.0    0.0
          CSH(0.5)    0.0    0.0
          CSH(0.6)    0.0    0.0
          CSH(0.7)    0.0    0.0
          CSH(0.8)    0.0    0.0
          CSH(0.9)    0.0    0.0
          CSH(1.0)    0.0    0.0
          CSH(1.1)    0.0    0.0
          CSH(1.2)    0.0    0.0
          CSH(1.3)    0.0    0.0
          CSH(1.4)    0.0    0.0
          CSH(1.5)    0.0    0.0
          CSH(1.6)    0.0    0.0
          CSH(1.7)    0.0    0.0
          CSH(1.8)    0.0    0.0
          SiO2(am)    0.0    0.0
          CSH(0.833) 0.0    0.0
          Ca(OH)2      0.0    0.5
          ETTRINGI    0.0    0.0
          MONOSULF    0.0      0.0
          FRIEDEL_    0.0 0.0
          HYDROGR    0.0    0.5
          Brucite      0.0    0.0
          SEPIOLIT      0.0    0.0
          CALCITE 0.0 0.0
          GEHL_HY 0.0 0.0
          HYDROTAL 0.0 0.0
          GROSSUL 0.0 0.0
          C3ASH4    0.0 0.0
          END
-----
TITLE
-----

 CH,C3AH6:0.6M-NaCl
```

```
-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 0.            0.6M-NaCl

-----------------------------Solution composition-----------------------------

                Elements                Molality           Moles

                Cl                    6.000e-001    6.000e-001
                Na                     6.000e-001    6.000e-001

----------------------------Description of solution----------------------------

                                                    pH   =      7.000
                                                    pe   =      0.000
                                     Activity of water   =      0.980
                                         Ionic strength   =    6.000e-001
                                     Mass of water (kg)   =    1.000e+000
                          Total alkalinity (eq/kg)    =    2.659e-008
                              Total carbon (mol/kg)    =    0.000e+000
                                 Total CO2 (mol/kg)    =    0.000e+000
                                Temperature (deg C)    =    25.000
                            Electrical balance (eq)    = -2.659e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)    =    -0.00
                                            Iterations    =      4
                                                Total H    = 1.110124e+002
                                                Total O    = 5.550622e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                          Log        Log          Log
      Species                Molality    Activity   Molality   Activity        Gamma

      OH-                   1.584e-007   9.796e-008      -6.800       -7.009       -0.209
      H+                    1.318e-007   1.000e-007      -6.880       -7.000       -0.120
      H2O                   5.551e+001   9.796e-001       1.744       -0.009        0.000
Cl                    6.000e-001
      Cl-                    6.000e-001   3.788e-001      -0.222       -0.422       -0.200
      ClOH                   0.000e+000   0.000e+000     -44.006      -43.946        0.060
      ClO-                   0.000e+000   0.000e+000     -44.235      -44.366       -0.131
      ClO2-                  0.000e+000   0.000e+000     -80.186      -80.316       -0.131
      ClHO2                   0.000e+000   0.000e+000     -85.415      -85.355        0.060
      ClO3-                  0.000e+000   0.000e+000    -104.560     -104.690       -0.131
      ClO4-                  0.000e+000   0.000e+000    -132.118     -132.248       -0.131
H(0)                  1.233e-017
      H2                     6.166e-018   7.079e-018     -17.210      -17.150        0.060
```

```
Na                  6.000e-001
    Na+                 6.000e-001   4.242e-001     -0.222     -0.372     -0.151
O(0)                0.000e+000
    O2                  0.000e+000   0.000e+000    -58.158    -58.098      0.060

-----------------------------Saturation indices------------------------------

            Phase              SI      log IAP    log KT

            CL(G)            -41.86     -0.42     41.44   Cl1.000
            CL2(G)           -46.82     -0.84     45.98   Cl2.000
            H(G)             -42.61     -7.00     35.61   H1.000
            H2(G)            -14.00    -14.00      0.00   H2.000
            H2O(G)            -1.51     -0.01      1.50   H2.000O1.000
            HCL(G)           -13.71     -7.42      6.29   Cl1.000H1.000
            NA(CR)           -46.26     -0.37     45.89   Na1.000
            NA(G)            -59.75     -0.37     59.38   Na1.000
            O(G)             -68.16     13.99     82.15   O1.000
            O2(G)            -55.11     27.98     83.09   O2.000

Initial solution 1.         0.6M-NaCl

----------------------------Solution composition----------------------------

            Elements            Molality          Moles

            Cl                 6.000e-001    6.000e-001
            Na                 6.000e-001    6.000e-001

---------------------------Description of solution----------------------------

                                        pH   =     7.000
                                        pe   =     0.000
                          Activity of water   =     0.980
                             Ionic strength   =   6.000e-001
                          Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                   Total alkalinity (eq/kg)   =   2.659e-008
                      Total carbon (mol/kg)   =   0.000e+000
                        Total CO2 (mol/kg)    =   0.000e+000
                         Temperature (deg C)  =   25.000
                     Electrical balance (eq)  = -2.659e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)    =   -0.00
                                  Iterations  =     4
                                     Total H  = 1.110124e+002
                                     Total O  = 5.550622e+001

---------------------------Distribution of species----------------------------

                                  Log          Log           Log

    Species              Molality     Activity   Molality   Activity      Gamma

    OH-                 1.584e-007   9.796e-008    -6.800     -7.009     -0.209
    H+                  1.318e-007   1.000e-007    -6.880     -7.000     -0.120
    H2O                 5.551e+001   9.796e-001     1.744     -0.009      0.000
Cl                  6.000e-001
    Cl-                 6.000e-001   3.788e-001    -0.222     -0.422     -0.200
    ClOH                0.000e+000   0.000e+000   -44.006    -43.946      0.060
    ClO-                0.000e+000   0.000e+000   -44.235    -44.366     -0.131
    ClO2-               0.000e+000   0.000e+000   -80.186    -80.316     -0.131
    ClHO2               0.000e+000   0.000e+000   -85.415    -85.355      0.060
    ClO3-               0.000e+000   0.000e+000  -104.560   -104.690     -0.131
    ClO4-               0.000e+000   0.000e+000  -132.118   -132.248     -0.131
H(0)                1.233e-017
    H2                  6.166e-018   7.079e-018   -17.210    -17.150      0.060
Na                  6.000e-001
    Na+                 6.000e-001   4.242e-001    -0.222     -0.372     -0.151
O(0)                0.000e+000
    O2                  0.000e+000   0.000e+000    -58.158    -58.098      0.060

-----------------------------Saturation indices------------------------------

            Phase              SI log IAP    log KT

            CL(G)            -41.86     -0.42     41.44   Cl1.000
            CL2(G)           -46.82     -0.84     45.98   Cl2.000
            H(G)             -42.61     -7.00     35.61   H1.000
            H2(G)            -14.00    -14.00      0.00   H2.000
            H2O(G)            -1.51     -0.01      1.50   H2.000O1.000
            HCL(G)           -13.71     -7.42      6.29   Cl1.000H1.000
            NA(CR)           -46.26     -0.37     45.89   Na1.000
            NA(G)            -59.75     -0.37     59.38   Na1.000
            O(G)             -68.16     13.99     82.15   O1.000
            O2(G)            -55.11     27.98     83.09   O2.000

-----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
-----------------------------------------

Reaction step 1.

WARNING: Element Mg is contained in BRUCITE (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in C3ASH4 (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element C is contained in CALCITE (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.1) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
```

```
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.2) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.3) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.4) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.5) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.6) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.7) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.8) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.833) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.9) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.0) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.1) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.2) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.3) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.4) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.5) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.6) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.7) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.8) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element S is contained in ETTRINGI (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in GEHL_HY (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in GROSSUL (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Mg is contained in HYDROTAL (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element S is contained in MONOSULF (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Mg is contained in SEPIOLIT (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in SEPIOLIT (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in SiO2(am) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
Using solution 0.          0.6M-NaCl
Using pure phase assemblage 1.

-------------------------------Phase assemblage--------------------------------

                                Moles in assemblage
Phase                 SI log IAP   log KT      Initial        Final        Delta

BRUCITE               Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
C3ASH4                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
Ca(OH)2               0.00     22.71     22.71 5.000e-001 2.287e-001-2.713e-001
CALCITE               Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.1)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.2)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.3)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.4)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.5)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.6)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.7)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.8)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.833)            Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.9)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.0)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.1)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.2)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.3)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.4)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.5)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.6)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.7)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.8)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
ETTRINGI              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
FRIEDEL_              0.00     70.13     70.13 0.000e+000 2.707e-001 2.707e-001
GEHL_HY               Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
GROSSUL               Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
HYDROGR               -0.00    77.37     77.37 5.000e-001 2.293e-001-2.707e-001
HYDROTAL              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
MONOSULF              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
SEPIOLIT              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
SiO2(am)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000

----------------------------Solution composition-----------------------------

          Elements                Molality          Moles

          Al                    1.918e-005    1.880e-005
```

```
        Ca                  6.862e-004   6.728e-004
        Cl                  5.981e-002   5.865e-002
        Na                  6.119e-001   6.000e-001

----------Description of solution----------

                    pH   =   13.542        Charge balance
                    pe   =   -8.174        Adjusted to redox equilibrium
                    Activity of water   =     0.979
                        Ionic strength   =   6.130e-001
                    Mass of water (kg)   =   9.805e-001
            Total alkalinity (eq/kg)   =   5.536e-001
                Total carbon (mol/kg)   =   0.000e+000
                    Total CO2 (mol/kg)   =   0.000e+000
                    Temperature (deg C)   =   25.000
            Electrical balance (eq)   = -2.759e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =   -0.00
                        Iterations   =   17
                            Total H   = 1.093898e+002
                            Total O   = 5.496626e+001

----------Distribution of species----------

                                        Log        Log          Log
        Species          Molality    Activity   Molality   Activity     Gamma

        OH-             5.530e-001   3.410e-001    -0.257     -0.467    -0.210
        H+              3.788e-014   2.871e-014   -13.422    -13.542    -0.120
        H2O             5.551e+001   9.792e-001     1.744     -0.009     0.000
Al                  1.918e-005
        Al(OH)4-        1.918e-005   1.422e-005    -4.717     -4.847    -0.130
        Al(OH)3         3.620e-012   4.169e-012   -11.441    -11.380     0.061
        Al(OH)2+        1.310e-019   9.710e-020   -18.883    -19.013    -0.130
        AlOH+2          1.214e-027   3.668e-028   -26.916    -27.436    -0.520
        Al+3            1.273e-035   1.051e-036   -34.895    -35.978    -1.083
Ca                  6.862e-004
        CaOH+           5.119e-004   3.795e-004    -3.291     -3.421    -0.130
        Ca+2            1.743e-004   4.410e-005    -3.759     -4.356    -0.597
Cl                  5.981e-002
        Cl-             5.981e-002   3.768e-002    -1.223     -1.424    -0.201
        ClO-            0.000e+000   0.000e+000   -48.503    -48.633    -0.130
        ClOH            0.000e+000   0.000e+000   -54.816    -54.755     0.061
        ClO2-           0.000e+000   0.000e+000   -87.719    -87.849    -0.130
        ClHO2           0.000e+000   0.000e+000   -99.491    -99.430     0.061
        ClO3-           0.000e+000   0.000e+000  -115.358   -115.488    -0.130
        ClO4-           0.000e+000   0.000e+000  -146.181   -146.311    -0.130
H(0)                2.263e-014
        H2              1.132e-014   1.303e-014   -13.946    -13.885     0.061
Na                  6.119e-001
        Na+             6.119e-001   4.326e-001    -0.213     -0.364    -0.151
O(0)                0.000e+000
        O2              0.000e+000   0.000e+000   -64.690    -64.628     0.061

----------Saturation indices----------

Phase                 SI log IAP   log KT

C2AH8                -6.01    54.63    60.64   Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C4AH13               -1.98   100.03   102.00   Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19               -2.01    99.97   101.98   Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)              -84.86    11.99    96.85   Ca1.000
CA(G)              -110.09    11.99   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2               0.00    22.71    22.71   Ca(OH)2
CAH10                -8.52    31.90    40.42   Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CAO(CR)              -9.98    22.72    32.70   Ca1.000O1.000
CL(G)               -51.04    -9.60    41.44   Cl1.000
CL2(G)              -65.18   -19.20    45.98   Cl2.000
FRIEDEL_              0.00    70.13    70.13   Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GIBBSITE             -3.14     4.62     7.76   Al1.000H3.000O3.000
H(G)                -40.98    -5.37    35.61   H1.000
H2(G)               -10.74   -10.74     0.00   H2.000
H2O(G)               -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
HCL(G)              -21.26   -14.97     6.29   Cl1.000H1.000
HYDROGR               -0.00    77.37    77.37   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1              -4.21    77.37    81.58   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
KATOITE              -1.57    77.37    78.94   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LIME,                -9.98    22.72    32.70   Ca1.000O1.000
NA(CR)              -38.08     7.81    45.89   Na1.000
NA(G)               -51.57     7.81    59.38   Na1.000
O(G)                -71.42    10.73    82.15   O1.000
O2(G)               -61.64    21.45    83.09   O2.000
PORTLAN               0.00    22.71    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1              0.16    22.71    22.55   Ca1.000H2.000O2.000

------------------
End of simulation.
------------------

-----------------------------------
Reading input data for simulation 2.
-----------------------------------

-----------
End of run.
---------
```

リスト2-2 エトリンガイト-ポルトランダイト共存系の出力リスト
（浸漬液：塩水）

```
Input file: C:¥Documents and Settings¥t171x053¥デスクトップ¥原子力学会¥発表用OHP¥計算結果¥0.1M-AFt,CH-NaCl(0.6).pqi
Output file: C:¥Documents and Settings¥t171x053¥デスクトップ¥原子力学会¥発表用OHP¥計算結果¥0.1M-AFt,CH-NaCl(0.6).pqo
Database file: C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
-------------------------------------
Reading input data for simulation 1.
-------------------------------------

DATABASE C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb
Title CH,AFt:0.6M-NaCl
PHASES
CSH(0.1)
        Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
        log_K -1.071
CSH(0.2)
        Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
        log_K 0.565
CSH(0.3)
        Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
        log_K 2.227
CSH(0.4)
        Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
        log_K 3.907
CSH(0.5)
        Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
        log_K 5.601
CSH(0.6)
        Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
        log_K 7.312
CSH(0.7)
        Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
        log_K 9.045
CSH(0.8)
        Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
        log_K 10.819
CSH(0.9)
        Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
        log_K 14.061
CSH(1.0)
        Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
        log_K 14.514
CSH(1.1)
        Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
        log_K 14.983
CSH(1.2)
        Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
        log_K 15.439
CSH(1.3)
        Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
        log_K 15.870
CSH(1.4)
        Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
        log_K 16.272
CSH(1.5)
        Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
        log_K 16.643
CSH(1.6)
        Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
        log_K 16.987
CSH(1.7)
        Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
        log_K 17.304
CSH(1.8)
        Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
        log_K 17.597
Ca(OH)2
        Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
        log_k 22.710
SiO2(am)
        Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
        log_K -2.639
CSH(0.833)
        Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
        log_K 11.436
SOLUTION 0    0.6M-NaCl
                units      mol/kgw
                pH          7.000
                pe          0.0
                density 1.000
                temp        25.0
                Na    0.6
                Cl    0.6
```

```
SOLUTION 1    0.6M-NaCl
                    units     mol/kgw
                pH          7.000
                pe          0.0
                density 1.000
                temp        25.0
                Na    0.6
                Cl    0.6
EQUILIBRIUM_PHASES 1
        CSH(0.1)    0.0    0.0
        CSH(0.2)    0.0    0.0
        CSH(0.3)    0.0    0.0
        CSH(0.4)    0.0    0.0
        CSH(0.5)    0.0    0.0
        CSH(0.6)    0.0    0.0
        CSH(0.7)    0.0    0.0
        CSH(0.8)    0.0    0.0
        CSH(0.9)    0.0    0.0
        CSH(1.0)    0.0    0.0
        CSH(1.1)    0.0    0.0
        CSH(1.2)    0.0    0.0
        CSH(1.3)    0.0    0.0
        CSH(1.4)    0.0    0.0
        CSH(1.5)    0.0    0.0
        CSH(1.6)    0.0    0.0
        CSH(1.7)    0.0    0.0
        CSH(1.8)    0.0    0.0
        SiO2(am)    0.0    0.0
        CSH(0.833) 0.0    0.0
        Ca(OH)2     0.0    0.1
        ETTRINGI    0.0    0.1
        MONOSULF    0.0     0.0
        FRIEDEL_    0.0 0.0
        HYDROGR    0.0    0.0
        Brucite     0.0    0.0
        SEPIOLIT     0.0    0.0
        CALCITE 0.0 0.0
        GEHL_HY 0.0 0.0
        HYDROTAL 0.0 0.0
        GROSSUL 0.0 0.0
        C3ASH4    0.0 0.0
        C4AH13    0.0    0.0
        END
-----
TITLE
-----

 CH,AFt:0.6M-NaCl
```

```
-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 0.          0.6M-NaCl

-----------------------------Solution composition-----------------------------

                Elements              Molality          Moles

                Cl                  6.000e-001    6.000e-001
                Na                  6.000e-001    6.000e-001

----------------------------Description of solution----------------------------

                                          pH   =     7.000
                                          pe   =     0.000
                              Activity of water   =     0.980
                                 Ionic strength   =   6.000e-001
                              Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                     Total alkalinity (eq/kg)    =   2.659e-008
                        Total carbon (mol/kg)    =   0.000e+000
                           Total CO2 (mol/kg)    =   0.000e+000
                          Temperature (deg C)    =   25.000
                       Electrical balance (eq)    = -2.659e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)    =    -0.00
                                     Iterations    =     4
                                         Total H    = 1.110124e+002
                                         Total O    = 5.550622e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                          Log          Log            Log
      Species                Molality    Activity   Molality   Activity      Gamma

      OH-                  1.584e-007   9.796e-008    -6.800     -7.009      -0.209
      H+                   1.318e-007   1.000e-007    -6.880     -7.000      -0.120
      H2O                  5.551e+001   9.796e-001     1.744     -0.009       0.000
Cl                  6.000e-001
      Cl-                  6.000e-001   3.788e-001    -0.222     -0.422      -0.200
      ClOH                 0.000e+000   0.000e+000   -44.006    -43.946       0.060
      ClO-                 0.000e+000   0.000e+000   -44.235    -44.366      -0.131
      ClO2-                0.000e+000   0.000e+000   -80.186    -80.316      -0.131
      ClHO2                0.000e+000   0.000e+000   -85.415    -85.355       0.060
      ClO3-                0.000e+000   0.000e+000  -104.560   -104.690      -0.131
      ClO4-                0.000e+000   0.000e+000  -132.118   -132.248      -0.131
H(0)                1.233e-017
      H2                   6.166e-018   7.079e-018   -17.210    -17.150       0.060
Na                  6.000e-001
```

```
     Na+                 6.000e-001   4.242e-001     -0.222     -0.372     -0.151
O(0)              0.000e+000
     O2                  0.000e+000   0.000e+000    -58.158    -58.098      0.060

-----------------------------Saturation indices------------------------------

          Phase                SI log IAP   log KT

          CL(G)            -41.86    -0.42    41.44   Cl1.000
          CL2(G)           -46.82    -0.84    45.98   Cl2.000
          H(G)             -42.61    -7.00    35.61   H1.000
          H2(G)            -14.00   -14.00     0.00   H2.000
          H2O(G)            -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
          HCL(G)           -13.71    -7.42     6.29   Cl1.000H1.000
          NA(CR)           -46.26    -0.37    45.89   Na1.000
          NA(G)            -59.75    -0.37    59.38   Na1.000
          O(G)             -68.16    13.99    82.15   O1.000
          O2(G)            -55.11    27.98    83.09   O2.000

Initial solution 1.          0.6M-NaCl

----------------------------Solution composition-----------------------------

          Elements            Molality          Moles

          Cl                 6.000e-001    6.000e-001
          Na                 6.000e-001    6.000e-001

---------------------------Description of solution---------------------------

                                    pH   =     7.000
                                    pe   =     0.000
                        Activity of water   =     0.980
                           Ionic strength   =   6.000e-001
                        Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                 Total alkalinity (eq/kg)   =   2.659e-008
                    Total carbon (mol/kg)   =   0.000e+000
                      Total CO2 (mol/kg)   =   0.000e+000
                     Temperature (deg C)   =   25.000
                  Electrical balance (eq)   = -2.659e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =   -0.00
                            Iterations   =     4
                               Total H   = 1.110124e+002
                               Total O   = 5.550622e+001

----------------------------Distribution of species--------------------------

                                   Log          Log           Log
     Species            Molality   Activity   Molality   Activity      Gamma
```

```
     OH-                 1.584e-007   9.796e-008     -6.800     -7.009     -0.209
     H+                  1.318e-007   1.000e-007     -6.880     -7.000     -0.120
     H2O                 5.551e+001   9.796e-001      1.744     -0.009      0.000
Cl                 6.000e-001
     Cl-                 6.000e-001   3.788e-001     -0.222     -0.422     -0.200
     ClOH                0.000e+000   0.000e+000    -44.006    -43.946      0.060
     ClO-                0.000e+000   0.000e+000    -44.235    -44.366     -0.131
     ClO2-               0.000e+000   0.000e+000    -80.186    -80.316     -0.131
     ClHO2               0.000e+000   0.000e+000    -85.415    -85.355      0.060
     ClO3-               0.000e+000   0.000e+000   -104.560   -104.690     -0.131
     ClO4-               0.000e+000   0.000e+000   -132.118   -132.248     -0.131
H(0)               1.233e-017
     H2                  6.166e-018   7.079e-018    -17.210    -17.150      0.060
Na                 6.000e-001
     Na+                 6.000e-001   4.242e-001     -0.222     -0.372     -0.151
O(0)               0.000e+000
     O2                  0.000e+000   0.000e+000    -58.158    -58.098      0.060

-----------------------------Saturation indices------------------------------

          Phase                SI log IAP   log KT

          CL(G)            -41.86    -0.42    41.44   Cl1.000
          CL2(G)           -46.82    -0.84    45.98   Cl2.000
          H(G)             -42.61    -7.00    35.61   H1.000
          H2(G)            -14.00   -14.00     0.00   H2.000
          H2O(G)            -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
          HCL(G)           -13.71    -7.42     6.29   Cl1.000H1.000
          NA(CR)           -46.26    -0.37    45.89   Na1.000
          NA(G)            -59.75    -0.37    59.38   Na1.000
          O(G)             -68.16    13.99    82.15   O1.000
          O2(G)            -55.11    27.98    83.09   O2.000

-----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
-----------------------------------------

Reaction step 1.

WARNING: Element Mg is contained in BRUCITE (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in C3ASH4 (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element C is contained in CALCITE (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.1) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.2) (which has 0.0 mass),
```

```
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.3) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.4) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.5) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.6) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.7) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.8) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.833) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.9) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.0) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.1) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.2) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.3) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.4) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.5) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.6) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.7) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.8) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in GEHL_HY (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in GROSSUL (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Mg is contained in HYDROTAL (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Mg is contained in SEPIOLIT (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in SEPIOLIT (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in SiO2(am) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
Using solution 0.          0.6M-NaCl
Using pure phase assemblage 1.
```

----------Phase assemblage----------

Phase	SI	log IAP	log KT	Moles in assemblage Initial	Final	Delta
BRUCITE	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
C3ASH4	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
C4AH13	-6.15	95.85	102.00	0.000e+000		0.000e+000
Ca(OH)2	-0.00	22.71	22.71	1.000e-001	7.452e-002	-2.548e-002
CALCITE	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.1)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.2)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.3)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.4)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.5)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.6)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.7)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.8)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.833)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.9)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.0)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.1)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.2)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.3)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.4)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.5)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.6)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.7)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.8)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
ETTRINGI	0.00	58.24	58.24	1.000e-001	9.430e-002	-5.697e-003
FRIEDEL_	0.00	70.13	70.13	0.000e+000	5.697e-003	5.697e-003
GEHL_HY	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
GROSSUL	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
HYDROGR	-4.17	73.20	77.37	0.000e+000		0.000e+000
HYDROTAL	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
MONOSULF	-5.60	68.24	73.83	0.000e+000		0.000e+000
SEPIOLIT	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
SiO2(am)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000

----------Solution composition----------

Elements	Molality	Moles
Al	1.227e-008	1.230e-008
Ca	3.679e-002	3.687e-002
Cl	5.873e-001	5.886e-001
Na	5.986e-001	6.000e-001
S	1.705e-002	1.709e-002

----------Description of solution----------

pH = 12.441 Charge balance
pe = -6.974 Adjusted to redox equilibrium
Activity of water = 0.978
Ionic strength = 6.946e-001
Mass of water (kg) = 1.002e+000
Total alkalinity (eq/kg) = 5.085e-002
Total carbon (mol/kg) = 0.000e+000
Total CO2 (mol/kg) = 0.000e+000
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = -2.659e-008
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -0.00
Iterations = 15
Total H = 1.113141e+002
Total O = 5.575088e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	4.444e-002	2.698e-002	-1.352	-1.569	-0.217
H+	4.809e-013	3.627e-013	-12.318	-12.441	-0.123
H2O	5.551e+001	9.783e-001	1.744	-0.010	0.000
Al	1.227e-008				
Al(OH)4-	1.227e-008	9.195e-009	-7.911	-8.036	-0.125
Al(OH)3	2.905e-014	3.409e-014	-13.537	-13.467	0.069
Al(OH)2+	1.340e-020	1.004e-020	-19.873	-19.998	-0.125
AlOH+2	1.521e-027	4.793e-028	-26.818	-27.319	-0.502
Al+3	2.203e-034	1.737e-035	-33.657	-34.760	-1.103
AlSO4+	4.317e-035	3.234e-035	-34.365	-34.490	-0.125
Al(SO4)2-	6.100e-036	4.570e-036	-35.215	-35.340	-0.125
Ca	3.679e-002				
Ca+2	2.821e-002	7.048e-003	-1.550	-2.152	-0.602
CaOH+	6.404e-003	4.798e-003	-2.194	-2.319	-0.125
CaSO4	2.176e-003	2.554e-003	-2.662	-2.593	0.069
Cl	5.873e-001				
Cl-	5.873e-001	3.651e-001	-0.231	-0.438	-0.206
ClO-	0.000e+000	0.000e+000	-47.323	-47.448	-0.125
ClOH	0.000e+000	0.000e+000	-52.538	-52.469	0.069
ClO2-	0.000e+000	0.000e+000	-86.341	-86.466	-0.125
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-97.015	-96.945	0.069
ClO3-	0.000e+000	0.000e+000	-113.781	-113.907	-0.125
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-144.406	-144.531	-0.125
H(0)	1.405e-014				
H2	7.026e-015	8.245e-015	-14.153	-14.084	0.069
Na	5.986e-001				
Na+	5.937e-001	4.197e-001	-0.226	-0.377	-0.151
NaSO4-	4.994e-003	3.742e-003	-2.302	-2.427	-0.125
O(0)	0.000e+000				
O2	0.000e+000	0.000e+000	-64.301	-64.231	0.069
S	1.705e-002				
SO4-2	9.882e-003	1.779e-003	-2.005	-2.750	-0.745
NaSO4-	4.994e-003	3.742e-003	-2.302	-2.427	-0.125
CaSO4	2.176e-003	2.554e-003	-2.662	-2.593	0.069
HSO4-	8.354e-014	6.259e-014	-13.078	-13.203	-0.125
SO3-2	2.694e-017	8.488e-018	-16.570	-17.071	-0.502
HSO3-	6.819e-023	5.109e-023	-22.166	-22.292	-0.125
HS-	1.053e-025	6.389e-026	-24.978	-25.195	-0.217
H2S	1.921e-031	2.254e-031	-30.717	-30.647	0.069
S-2	9.160e-032	1.758e-032	-31.038	-31.755	-0.717
H2SO3	1.092e-033	1.282e-033	-32.962	-32.892	0.069
AlSO4+	4.317e-035	3.234e-035	-34.365	-34.490	-0.125
Al(SO4)2-	6.100e-036	4.570e-036	-35.215	-35.340	-0.125
S2O3-2	2.806e-036	8.842e-037	-35.552	-36.053	-0.502
HS2O3-	0.000e+000	0.000e+000	-46.779	-46.904	-0.125

----------Saturation indices----------

Phase	SI	log IAP	log KT	
ANHYDRIT	-0.52	-4.90	-4.38	Ca1.000S1.000O4.000
C2AH8	-10.18	50.46	60.64	Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C4AH13	-6.15	95.85	102.00	Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19	-6.19	95.79	101.98	Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)	-85.05	11.80	96.85	Ca1.000
CA(G)	-110.28	11.80	122.08	Ca1.000
Ca(OH)2	-0.00	22.71	22.71	Ca(OH)2
CAH10	-12.70	27.72	40.42	Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CAO(CR)	-9.98	22.72	32.70	Ca1.000O1.000
CL(G)	-48.85	-7.41	41.44	Cl1.000
CL2(G)	-60.80	-14.82	45.98	Cl2.000
ETTRINGI	0.00	58.24	58.24	Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FRIEDEL_	0.00	70.13	70.13	Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GIBBSITE	-5.22	2.53	7.76	Al1.000H3.000O3.000
GYPSUM	-0.32	-4.92	-4.60	Ca1.000S1.000H4.000O6.000
H(G)	-41.08	-5.47	35.61	H1.000
H2(G)	-10.93	-10.93	0.00	H2.000
H2O(G)	-1.51	-0.01	1.50	H2.000O1.000
H2S(G)	-29.63	-71.33	-41.70	S1.000H2.000
HCL(G)	-19.17	-12.88	6.29	Cl1.000H1.000
HYDROGR	-4.17	73.20	77.37	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1	-8.39	73.20	81.58	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
KATOITE	-5.74	73.20	78.94	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LIME,	-9.98	22.72	32.70	Ca1.000O1.000
MONOSULF	-5.60	68.24	73.83	Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000

```
NA(CR)          -39.29     6.60    45.89   Na1.000
NA(G)           -52.78     6.60    59.38   Na1.000
O(G)            -71.23    10.92    82.15   O1.000
O2(G)           -61.24    21.85    83.09   O2.000
PORTLAN          -0.00    22.71    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1          0.16    22.71    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
S(CR)           -24.55   -60.39   -35.84   S1.000
S(G)            -66.02   -60.39     5.63   S1.000
S2(G)           -63.08  -120.79   -57.71   S2.000
SO2(G)          -33.23   -38.55    -5.32   S1.000O2.000

------------------
End of simulation.
------------------
-------------------------------------
Reading input data for simulation 2.
-------------------------------------
-----------
End of run.
-----------
```

リスト2-3 ハイドロガーネット-エトリンガイト-ポルトランダイト共存系の出力リスト　（浸漬液：塩水）

```
Input file: C:¥Documents and Settings¥t171x053¥デスクトップ¥原子力学会¥実験トレース
¥CH-AFt-HG.pqi
Output file: C:¥Documents and Settings¥t171x053¥デスクトップ¥原子力学会¥実験トレース
¥CH-AFt-HG.pqo
Database file: C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
-------------------------------------
Reading input data for simulation 1.
-------------------------------------

DATABASE C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb
Title CH,AFt,C3AH6:0.6M-NaCl
PHASES
CSH(0.1)
        Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
        log_K -1.071
CSH(0.2)
        Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
        log_K 0.565
CSH(0.3)
        Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
        log_K 2.227
CSH(0.4)
        Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
        log_K 3.907
CSH(0.5)
        Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
        log_K 5.601
CSH(0.6)
        Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
        log_K 7.312
CSH(0.7)
        Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
        log_K 9.045
CSH(0.8)
        Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
        log_K 10.819
CSH(0.9)
        Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
        log_K 14.061
CSH(1.0)
        Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
        log_K 14.514
CSH(1.1)
        Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
        log_K 14.983
CSH(1.2)
        Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
        log_K 15.439
CSH(1.3)
        Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
        log_K 15.870
CSH(1.4)
        Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
        log_K 16.272
CSH(1.5)
        Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
        log_K 16.643
CSH(1.6)
        Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
        log_K 16.987
CSH(1.7)
        Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
        log_K 17.304
CSH(1.8)
        Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
        log_K 17.597
Ca(OH)2
        Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
        log_k 22.710
SiO2(am)
        Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
        log_K -2.639
CSH(0.833)
        Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
        log_K 11.436
SOLUTION 0    0.6M-NaCl
                        units      mol/kgw
                        pH          7.000
                        pe          0.0
                        density 1.000
                        temp        25.0
                        Na    0.6
                        Cl    0.6
SOLUTION 1    0.6M-NaCl
                        units      mol/kgw
```

```
                    pH          7.000
                    pe          0.0
                    density 1.000
                    temp        25.0
                    Na    0.6
                    Cl    0.6
EQUILIBRIUM_PHASES 1
          CSH(0.1)    0.0    0.0
          CSH(0.2)    0.0    0.0
          CSH(0.3)    0.0    0.0
          CSH(0.4)    0.0    0.0
          CSH(0.5)    0.0    0.0
          CSH(0.6)    0.0    0.0
          CSH(0.7)    0.0    0.0
          CSH(0.8)    0.0    0.0
          CSH(0.9)    0.0    0.0
          CSH(1.0)    0.0    0.0
          CSH(1.1)    0.0    0.0
          CSH(1.2)    0.0    0.0
          CSH(1.3)    0.0    0.0
          CSH(1.4)    0.0    0.0
          CSH(1.5)    0.0    0.0
          CSH(1.6)    0.0    0.0
          CSH(1.7)    0.0    0.0
          CSH(1.8)    0.0    0.0
          SiO2(am)    0.0    0.0
          CSH(0.833) 0.0    0.0
          Ca(OH)2     0.0    0.5
          ETTRINGI    0.0    0.01
          MONOSULF    0.0     0.0
          FRIEDEL_    0.0 0.0
          HYDROGR     0.0    0.5
          Brucite     0.0    0.0
          C3ASH4      0.0 0.0
          C4AH13      0.0    0.0
          END

-----
TITLE
-----

  CH,AFt,C3AH6:0.6M-NaCl

-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 0.          0.6M-NaCl

-----------------------------Solution composition------------------------------

                Elements              Molality          Moles

                Cl                   6.000e-001    6.000e-001
                Na                   6.000e-001    6.000e-001

----------------------------Description of solution---------------------------

                                          pH   =     7.000
                                          pe   =     0.000
                              Activity of water   =     0.980
                                 Ionic strength   =   6.000e-001
                              Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                     Total alkalinity (eq/kg)   =   2.659e-008
                        Total carbon (mol/kg)   =   0.000e+000
                           Total CO2 (mol/kg)   =   0.000e+000
                         Temperature (deg C)   =   25.000
                      Electrical balance (eq)   = -2.659e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =   -0.00
                                   Iterations   =     4
                                       Total H   = 1.110124e+002
                                       Total O   = 5.550622e+001


----------------------------Distribution of species---------------------------

                                        Log          Log          Log
    Species              Molality    Activity   Molality   Activity      Gamma

    OH-                 1.584e-007   9.796e-008    -6.800     -7.009     -0.209
    H+                  1.318e-007   1.000e-007    -6.880     -7.000     -0.120
    H2O                 5.551e+001   9.796e-001     1.744     -0.009      0.000
Cl                  6.000e-001
    Cl-                 6.000e-001   3.788e-001    -0.222     -0.422     -0.200
    ClOH                0.000e+000   0.000e+000   -44.006    -43.946      0.060
    ClO-                0.000e+000   0.000e+000   -44.235    -44.366     -0.131
    ClO2-               0.000e+000   0.000e+000   -80.186    -80.316     -0.131
    ClHO2               0.000e+000   0.000e+000   -85.415    -85.355      0.060
    ClO3-               0.000e+000   0.000e+000  -104.560   -104.690     -0.131
    ClO4-               0.000e+000   0.000e+000  -132.118   -132.248     -0.131
H(0)                1.233e-017
    H2                  6.166e-018   7.079e-018   -17.210    -17.150      0.060
Na                  6.000e-001
    Na+                 6.000e-001   4.242e-001    -0.222     -0.372     -0.151
O(0)                0.000e+000
    O2                  0.000e+000   0.000e+000   -58.158    -58.098      0.060
```

```
-----------------------------Saturation indices-------------------------------

        Phase                SI log IAP   log KT

        CL(G)              -41.86    -0.42    41.44   Cl1.000
        CL2(G)             -46.82    -0.84    45.98   Cl2.000
        H(G)               -42.61    -7.00    35.61   H1.000
        H2(G)              -14.00   -14.00     0.00   H2.000
        H2O(G)              -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
        HCL(G)             -13.71    -7.42     6.29   Cl1.000H1.000
        NA(CR)             -46.26    -0.37    45.89   Na1.000
        NA(G)              -59.75    -0.37    59.38   Na1.000
        O(G)               -68.16    13.99    82.15   O1.000
        O2(G)              -55.11    27.98    83.09   O2.000

Initial solution 1.        0.6M-NaCl

----------------------------Solution composition------------------------------

        Elements             Molality          Moles

        Cl                 6.000e-001    6.000e-001
        Na                 6.000e-001    6.000e-001

---------------------------Description of solution----------------------------

                                    pH   =     7.000
                                    pe   =     0.000
                     Activity of water   =     0.980
                         Ionic strength   =  6.000e-001
                      Mass of water (kg)   =  1.000e+000
              Total alkalinity (eq/kg)   =  2.659e-008
                  Total carbon (mol/kg)   =  0.000e+000
                     Total CO2 (mol/kg)   =  0.000e+000
                   Temperature (deg C)   =     25.000
               Electrical balance (eq)   = -2.659e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =   -0.00
                           Iterations   =     4
                              Total H   = 1.110124e+002
                              Total O   = 5.550622e+001

----------------------------Distribution of species---------------------------

                                  Log        Log        Log
  Species          Molality     Activity   Molality   Activity     Gamma

  OH-            1.584e-007   9.796e-008    -6.800     -7.009     -0.209
  H+             1.318e-007   1.000e-007    -6.880     -7.000     -0.120
  H2O            5.551e+001   9.796e-001     1.744     -0.009      0.000
Cl               6.000e-001
  Cl-            6.000e-001   3.788e-001    -0.222     -0.422     -0.200
  ClOH           0.000e+000   0.000e+000   -44.006    -43.946      0.060
  ClO-           0.000e+000   0.000e+000   -44.235    -44.366     -0.131
  ClO2-          0.000e+000   0.000e+000   -80.186    -80.316     -0.131
  ClHO2          0.000e+000   0.000e+000   -85.415    -85.355      0.060
  ClO3-          0.000e+000   0.000e+000  -104.560   -104.690     -0.131
  ClO4-          0.000e+000   0.000e+000  -132.118   -132.248     -0.131
H(0)             1.233e-017
  H2             6.166e-018   7.079e-018   -17.210    -17.150      0.060
Na               6.000e-001
  Na+            6.000e-001   4.242e-001    -0.222     -0.372     -0.151
O(0)             0.000e+000
  O2             0.000e+000   0.000e+000   -58.158    -58.098      0.060

-----------------------------Saturation indices-------------------------------

        Phase                SI log IAP   log KT

        CL(G)              -41.86    -0.42    41.44   Cl1.000
        CL2(G)             -46.82    -0.84    45.98   Cl2.000
        H(G)               -42.61    -7.00    35.61   H1.000
        H2(G)              -14.00   -14.00     0.00   H2.000
        H2O(G)              -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
        HCL(G)             -13.71    -7.42     6.29   Cl1.000H1.000
        NA(CR)             -46.26    -0.37    45.89   Na1.000
        NA(G)              -59.75    -0.37    59.38   Na1.000
        O(G)               -68.16    13.99    82.15   O1.000
        O2(G)              -55.11    27.98    83.09   O2.000

-----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
-----------------------------------------

Reaction step 1.

WARNING: Element Mg is contained in BRUCITE (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in C3ASH4 (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.1) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.2) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.3) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.4) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
```

```
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.5) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.6) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.7) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.8) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.833) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.9) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.0) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.1) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.2) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.3) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.4) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.5) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.6) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.7) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.8) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in SiO2(am) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
Using solution 0.          0.6M-NaCl
Using pure phase assemblage 1.

-----------------------------Phase assemblage-----------------------------

                                    Moles in assemblage
Phase                SI log IAP   log KT     Initial        Final        Delta

BRUCITE              Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
C3ASH4               Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
C4AH13               -1.97    100.03    102.00 0.000e+000                0.000e+000
Ca(OH)2              0.00     22.71     22.71 5.000e-001 2.556e-001-2.444e-001
CSH(0.1)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.2)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.3)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.4)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.5)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.6)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.7)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.8)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.833)           Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.9)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(1.0)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(1.1)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(1.2)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(1.3)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(1.4)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(1.5)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(1.6)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(1.7)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(1.8)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
ETTRINGI             -1.16    57.08     58.24 1.000e-002                -1.000e-002
FRIEDEL_             0.00     70.13     70.13 0.000e+000 2.736e-001 2.736e-001
HYDROGR              0.00     77.37     77.37 5.000e-001 2.364e-001-2.636e-001
MONOSULF             -3.20    70.63     73.83 0.000e+000                0.000e+000
SiO2(am)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000

-----------------------------Solution composition-----------------------------

          Elements              Molality          Moles

          Al                    1.716e-005    1.690e-005
          Ca                    8.252e-004    8.128e-004
          Cl                    5.353e-002    5.272e-002
          Na                    6.092e-001    6.000e-001
          S                     3.046e-002    3.000e-002

----------------------------Description of solution----------------------------

                                  pH    =    13.494          Charge balance
                                  pe    =    -8.038          Adjusted to redox equilibrium
                              Activity of water    =     0.980
                                 Ionic strength    =    6.195e-001
                              Mass of water (kg)   =    9.850e-001
                     Total alkalinity (eq/kg)    =    4.964e-001
                        Total carbon (mol/kg)    =    0.000e+000
                           Total CO2 (mol/kg)    =    0.000e+000
                          Temperature (deg C)    =    25.000
                       Electrical balance (eq)    = -2.696e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)    =    -0.00
                                     Iterations    =    16
                                        Total H    = 1.098323e+002
                                        Total O    = 5.528062e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------
```

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	4.958e-001	3.053e-001	-0.305	-0.515	-0.210
H+	4.236e-014	3.209e-014	-13.373	-13.494	-0.121
H2O	5.551e+001	9.800e-001	1.744	-0.009	0.000
Al	1.716e-005				
Al(OH)4-	1.716e-005	1.273e-005	-4.766	-4.895	-0.130
Al(OH)3	3.615e-012	4.169e-012	-11.442	-11.380	0.062
Al(OH)2+	1.462e-019	1.084e-019	-18.835	-18.965	-0.130
AlOH+2	1.510e-027	4.575e-028	-26.821	-27.340	-0.519
Al+3	1.780e-035	1.464e-036	-34.750	-35.834	-1.085
AlSO4+	7.706e-036	5.717e-036	-35.113	-35.243	-0.130
Al(SO4)2-	2.282e-036	1.693e-036	-35.642	-35.771	-0.130
Ca	8.252e-004				
CaOH+	5.713e-004	4.238e-004	-3.243	-3.373	-0.130
Ca+2	2.177e-004	5.501e-005	-3.662	-4.260	-0.597
CaSO4	3.622e-005	4.178e-005	-4.441	-4.379	0.062
Cl	5.353e-002				
Cl-	5.353e-002	3.368e-002	-1.271	-1.473	-0.201
ClO-	0.000e+000	0.000e+000	-48.376	-48.506	-0.130
ClOH	0.000e+000	0.000e+000	-54.641	-54.579	0.062
ClO2-	0.000e+000	0.000e+000	-87.416	-87.546	-0.130
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-99.140	-99.078	0.062
ClO3-	0.000e+000	0.000e+000	-114.879	-115.009	-0.130
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-145.526	-145.656	-0.130
H(0)	1.508e-014				
H2	7.539e-015	8.695e-015	-14.123	-14.061	0.062
Na	6.092e-001				
Na+	5.985e-001	4.231e-001	-0.223	-0.374	-0.151
NaSO4-	1.066e-002	7.906e-003	-1.972	-2.102	-0.130
O(0)	0.000e+000				
O2	0.000e+000	0.000e+000	-64.338	-64.276	0.062
S	3.046e-002				
SO4-2	1.977e-002	3.729e-003	-1.704	-2.428	-0.724
NaSO4-	1.066e-002	7.906e-003	-1.972	-2.102	-0.130
CaSO4	3.622e-005	4.178e-005	-4.441	-4.379	0.062
HSO4-	1.565e-014	1.161e-014	-13.805	-13.935	-0.130
SO3-2	6.183e-017	1.873e-017	-16.209	-16.727	-0.519
HSO3-	1.345e-023	9.977e-024	-22.871	-23.001	-0.130
HS-	2.364e-026	1.456e-026	-25.626	-25.837	-0.210
S-2	2.266e-031	4.526e-032	-30.645	-31.344	-0.700
H2S	3.941e-033	4.545e-033	-32.404	-32.342	0.062
H2SO3	1.921e-035	2.215e-035	-34.717	-34.655	0.062
AlSO4+	7.706e-036	5.717e-036	-35.113	-35.243	-0.130
Al(SO4)2-	2.282e-036	1.693e-036	-35.642	-35.771	-0.130
S2O3-2	1.232e-037	3.731e-038	-36.910	-37.428	-0.519
HS2O3-	0.000e+000	0.000e+000	-49.202	-49.332	-0.130

----------Saturation indices----------

Phase	SI	log IAP	log KT	
ANHYDRIT	-2.31	-6.69	-4.38	Ca1.000S1.000O4.000
C2AH8	-6.00	54.63	60.64	Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C4AH13	-1.97	100.03	102.00	Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19	-2.00	99.97	101.98	Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)	-85.03	11.82	96.85	Ca1.000
CA(G)	-110.26	11.82	122.08	Ca1.000
Ca(OH)2	0.00	22.71	22.71	Ca(OH)2
CAH10	-8.52	31.90	40.42	Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CAO(CR)	-9.98	22.72	32.70	Ca1.000O1.000
CL(G)	-50.95	-9.51	41.44	Cl1.000
CL2(G)	-65.00	-19.02	45.98	Cl2.000
ETTRINGI	-1.16	57.08	58.24	Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FRIEDEL_	0.00	70.13	70.13	Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GIBBSITE	-3.14	4.62	7.76	Al1.000H3.000O3.000
GYPSUM	-2.10	-6.71	-4.60	Ca1.000S1.000H4.000O6.000
H(G)	-41.07	-5.46	35.61	H1.000
H2(G)	-10.91	-10.91	0.00	H2.000
H2O(G)	-1.51	-0.01	1.50	H2.000O1.000
H2S(G)	-31.32	-73.02	-41.70	S1.000H2.000
HCL(G)	-21.26	-14.97	6.29	Cl1.000H1.000
HYDROGR	0.00	77.37	77.37	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1	-4.21	77.37	81.58	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
KATOITE	-1.57	77.37	78.94	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LIME,	-9.98	22.72	32.70	Ca1.000O1.000
MONOSULF	-3.20	70.63	73.83	Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
NA(CR)	-38.23	7.66	45.89	Na1.000
NA(G)	-51.72	7.66	59.38	Na1.000
O(G)	-71.25	10.90	82.15	O1.000
O2(G)	-61.29	21.80	83.09	O2.000
PORTLAN	0.00	22.71	22.71	Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1	0.16	22.71	22.55	Ca1.000H2.000O2.000
S(CR)	-26.27	-62.11	-35.84	S1.000
S(G)	-67.74	-62.11	5.63	S1.000
S2(G)	-66.52	-124.23	-57.71	S2.000
SO2(G)	-34.99	-40.31	-5.32	S1.000O2.000

End of simulation.

Reading input data for simulation 2.

End of run.

リスト2-4 カルシウムアルミネートハイドレート-ポルトランダイト共存系の出力リスト（浸漬液：塩水）

```
Input file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11．報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥PHREEQC-
計算¥CH+C4AH13.pqi
Output file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11．報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル
¥PHREEQC-計算¥CH+C4AH13.pqo
Database file: C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
------------------------------------
Reading input data for simulation 1.
------------------------------------

DATABASE C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb
Title 0.5M-(CH,C3AH6):0.6M-NaCl
PHASES
CSH(0.1)
        Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
        log_K -1.071
CSH(0.2)
        Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
        log_K 0.565
CSH(0.3)
        Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
        log_K 2.227
CSH(0.4)
        Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
        log_K 3.907
CSH(0.5)
        Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
        log_K 5.601
CSH(0.6)
        Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
        _K 7.312
CSH(0.7)
        Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
        log_K 9.045
CSH(0.8)
        Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
        log_K 10.819
CSH(0.9)
        Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
        log_K 14.061
CSH(1.0)
        Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
        log_K 14.514
CSH(1.1)
        Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
        log_K 14.983
CSH(1.2)
        Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
        log_K 15.439
CSH(1.3)
        Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
        log_K 15.870
CSH(1.4)
        Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
        log_K 16.272
CSH(1.5)
        Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
        log_K 16.643
CSH(1.6)
        Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
        log_K 16.987
CSH(1.7)
        Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
        log_K 17.304
CSH(1.8)
        Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
        log_K 17.597
Ca(OH)2
        Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
        log_k 22.710
SiO2(am)
        Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
                log_K -2.639
CSH(0.833)
        Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
        log_K 11.436
SOLUTION 0    0.6M-NaCl
                units     mol/kgw
                pH        7.000
                pe        0.0
                density 1.000
                temp      25.0
                Na    0.6
                Cl    0.6
SOLUTION 1    0.6M-NaCl
```

```
                    units     mol/kgw
                    pH          7.000
                    pe          0.0
                    density 1.000
                    temp       25.0
                    Na    0.6
                    Cl    0.6
EQUILIBRIUM_PHASES 1
          CSH(0.1)    0.0    0.0
          CSH(0.2)    0.0    0.0
          CSH(0.3)    0.0    0.0
          CSH(0.4)    0.0    0.0
          CSH(0.5)    0.0    0.0
          CSH(0.6)    0.0    0.0
          CSH(0.7)    0.0    0.0
          CSH(0.8)    0.0    0.0
          CSH(0.9)    0.0    0.0
          CSH(1.0)    0.0    0.0
          CSH(1.1)    0.0    0.0
          CSH(1.2)    0.0    0.0
          CSH(1.3)    0.0    0.0
          CSH(1.4)    0.0    0.0
          CSH(1.5)    0.0    0.0
          CSH(1.6)    0.0    0.0
          CSH(1.7)    0.0    0.0
          CSH(1.8)    0.0    0.0
          SiO2(am)    0.0    0.0
          CSH(0.833) 0.0    0.0
          Ca(OH)2      0.0    0.6
          ETTRINGI    0.0    0.0
          MONOSULF    0.0      0.0
          FRIEDEL_    0.0 0.0
          HYDROGR    0.0    0.0
          Brucite      0.0    0.0
          SEPIOLIT      0.0    0.0
          CALCITE 0.0 0.0
          GEHL_HY 0.0 0.0
          HYDROTAL 0.0 0.0
          GROSSUL 0.0 0.0
          C3ASH4    0.0 0.0
          C4AH13    0.0    0.6
          END
-----
TITLE
-----

 0.5M-(CH,C3AH6):0.6M-NaCl

-------------------------------------------
```

```
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 0.            0.6M-NaCl

-----------------------------Solution composition-----------------------------

                Elements                Molality           Moles

                Cl                    6.000e-001    6.000e-001
                Na                     6.000e-001    6.000e-001

----------------------------Description of solution----------------------------

                                                pH    =      7.000
                                                pe    =      0.000
                                  Activity of water    =      0.980
                                       Ionic strength    =    6.000e-001
                                   Mass of water (kg)    =    1.000e+000
                         Total alkalinity (eq/kg)    =    2.659e-008
                             Total carbon (mol/kg)    =    0.000e+000
                                 Total CO2 (mol/kg)    =    0.000e+000
                               Temperature (deg C)    =    25.000
                            Electrical balance (eq)    = -2.659e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)    =    -0.00
                                            Iterations    =      4
                                                Total H    = 1.110124e+002
                                                Total O    = 5.550622e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                          Log        Log          Log
    Species                  Molality    Activity   Molality    Activity        Gamma

    OH-                    1.584e-007   9.796e-008      -6.800      -7.009       -0.209
    H+                     1.318e-007   1.000e-007      -6.880      -7.000       -0.120
    H2O                    5.551e+001   9.796e-001       1.744      -0.009        0.000
Cl                     6.000e-001
    Cl-                    6.000e-001   3.788e-001      -0.222      -0.422       -0.200
    ClOH                   0.000e+000   0.000e+000     -44.006     -43.946        0.060
    ClO-                   0.000e+000   0.000e+000     -44.235     -44.366       -0.131
    ClO2-                  0.000e+000   0.000e+000     -80.186     -80.316       -0.131
    ClHO2                  0.000e+000   0.000e+000     -85.415     -85.355        0.060
    ClO3-                  0.000e+000   0.000e+000    -104.560    -104.690       -0.131
    ClO4-                  0.000e+000   0.000e+000    -132.118    -132.248       -0.131
H(0)                   1.233e-017
    H2                     6.166e-018   7.079e-018     -17.210     -17.150        0.060
Na                     6.000e-001
    Na+                    6.000e-001   4.242e-001      -0.222      -0.372       -0.151
```

```
O(0)            0.000e+000
   O2                0.000e+000   0.000e+000    -58.158    -58.098       0.060

-----------------------------Saturation indices-----------------------------

          Phase                SI log IAP   log KT

          CL(G)            -41.86    -0.42    41.44   Cl1.000
          CL2(G)           -46.82    -0.84    45.98   Cl2.000
          H(G)             -42.61    -7.00    35.61   H1.000
          H2(G)            -14.00   -14.00     0.00   H2.000
          H2O(G)            -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
          HCL(G)           -13.71    -7.42     6.29   Cl1.000H1.000
          NA(CR)           -46.26    -0.37    45.89   Na1.000
          NA(G)            -59.75    -0.37    59.38   Na1.000
          O(G)             -68.16    13.99    82.15   O1.000
          O2(G)            -55.11    27.98    83.09   O2.000

Initial solution 1.        0.6M-NaCl

----------------------------Solution composition----------------------------

          Elements            Molality        Moles

          Cl                 6.000e-001   6.000e-001
          Na                 6.000e-001   6.000e-001

----------------------------Description of solution----------------------------

                                    pH   =     7.000
                                    pe   =     0.000
                       Activity of water   =     0.980
                          Ionic strength   =   6.000e-001
                      Mass of water (kg)   =   1.000e+000
              Total alkalinity (eq/kg)   =   2.659e-008
                 Total carbon (mol/kg)   =   0.000e+000
                    Total CO2 (mol/kg)   =   0.000e+000
                   Temperature (deg C)   =   25.000
                 Electrical balance (eq)   = -2.659e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =   -0.00
                            Iterations   =     4
                               Total H   = 1.110124e+002
                               Total O   = 5.550622e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                  Log        Log        Log
   Species            Molality   Activity   Molality   Activity      Gamma
   OH-                1.584e-007   9.796e-008    -6.800    -7.009    -0.209
   H+                 1.318e-007   1.000e-007    -6.880    -7.000    -0.120
   H2O                5.551e+001   9.796e-001     1.744    -0.009     0.000
Cl                 6.000e-001
   Cl-                6.000e-001   3.788e-001    -0.222    -0.422    -0.200
   ClOH               0.000e+000   0.000e+000   -44.006   -43.946     0.060
   ClO-               0.000e+000   0.000e+000   -44.235   -44.366    -0.131
   ClO2-              0.000e+000   0.000e+000   -80.186   -80.316    -0.131
   ClHO2              0.000e+000   0.000e+000   -85.415   -85.355     0.060
   ClO3-              0.000e+000   0.000e+000  -104.560  -104.690    -0.131
   ClO4-              0.000e+000   0.000e+000  -132.118  -132.248    -0.131
H(0)               1.233e-017
   H2                 6.166e-018   7.079e-018   -17.210   -17.150     0.060
Na                 6.000e-001
   Na+                6.000e-001   4.242e-001    -0.222    -0.372    -0.151
O(0)               0.000e+000
   O2                 0.000e+000   0.000e+000   -58.158   -58.098     0.060

-----------------------------Saturation indices-----------------------------

          Phase                SI log IAP   log KT

          CL(G)            -41.86    -0.42    41.44   Cl1.000
          CL2(G)           -46.82    -0.84    45.98   Cl2.000
          H(G)             -42.61    -7.00    35.61   H1.000
          H2(G)            -14.00   -14.00     0.00   H2.000
          H2O(G)            -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
          HCL(G)           -13.71    -7.42     6.29   Cl1.000H1.000
          NA(CR)           -46.26    -0.37    45.89   Na1.000
          NA(G)            -59.75    -0.37    59.38   Na1.000
          O(G)             -68.16    13.99    82.15   O1.000
          O2(G)            -55.11    27.98    83.09   O2.000

-----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
-----------------------------------------

Reaction step 1.

WARNING: Element Mg is contained in BRUCITE (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in C3ASH4 (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element C is contained in CALCITE (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.1) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.2) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
```

```
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.3) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.4) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.5) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.6) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.7) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.8) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.833) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.9) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.0) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.1) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.2) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.3) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.4) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.5) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.6) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.7) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.8) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element S is contained in ETTRINGI (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in GEHL_HY (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in GROSSUL (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Mg is contained in HYDROTAL (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element S is contained in MONOSULF (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Mg is contained in SEPIOLIT (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in SEPIOLIT (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in SiO2(am) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
Using solution 0.          0.6M-NaCl
Using pure phase assemblage 1.

-------------------------------Phase assemblage--------------------------------

                                   Moles in assemblage
Phase                   SI log IAP   log KT      Initial        Final        Delta

BRUCITE                 Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
C3ASH4                  Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
C4AH13                 -1.97   100.03   102.00 6.000e-001                -6.000e-001
Ca(OH)2                 0.00    22.71    22.71 6.000e-001 9.286e-001 3.286e-001
CALCITE                 Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.1)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.2)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.3)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.4)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.5)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.6)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.7)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.8)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.833)              Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(0.9)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.0)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.1)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.2)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.3)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.4)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.5)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.6)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.7)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
CSH(1.8)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
ETTRINGI                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
FRIEDEL_                0.00    70.13    70.13 0.000e+000 2.707e-001 2.707e-001
GEHL_HY                 Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
GROSSUL                 Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
HYDROGR                 0.00    77.37    77.37 0.000e+000 3.293e-001 3.293e-001
HYDROTAL                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
MONOSULF                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
SEPIOLIT                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000
SiO2(am)                Element not present. 0.000e+000                  0.000e+000

-----------------------------Solution composition------------------------------

          Elements              Molality          Moles

          Al                   1.822e-005    1.904e-005
          Ca                   7.366e-004    7.700e-004
```

```
Cl                    5.605e-002   5.859e-002
Na                    5.740e-001   6.000e-001

----------Description of solution----------

                    pH   =   13.517        Charge balance
                    pe   =   -7.968        Adjusted to redox equilibrium
                    Activity of water   =    0.980
                    Ionic strength   =   5.751e-001
                    Mass of water (kg)   =   1.045e+000
                    Total alkalinity (eq/kg)   =   5.195e-001
                    Total carbon (mol/kg)   =   0.000e+000
                    Total CO2 (mol/kg)   =   0.000e+000
                    Temperature (deg C)   =   25.000
                    Electrical balance (eq)   = -2.659e-008
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =   -0.00
                    Iterations   =   18
                    Total H   = 1.165898e+002
                    Total O   = 5.856640e+001

----------Distribution of species----------

                                  Log        Log        Log
  Species          Molality     Activity   Molality   Activity     Gamma

  OH-              5.188e-001   3.226e-001   -0.285     -0.491     -0.206
  H+               3.999e-014   3.039e-014  -13.398    -13.517     -0.119
  H2O              5.551e+001   9.805e-001    1.744     -0.009      0.000
Al               1.822e-005
  Al(OH)4-         1.822e-005   1.345e-005   -4.740     -4.871     -0.132
  Al(OH)3          3.652e-012   4.169e-012  -11.438    -11.380      0.058
  Al(OH)2+         1.390e-019   1.026e-019  -18.857    -18.989     -0.132
  AlOH+2           1.380e-027   4.099e-028  -26.860    -27.387     -0.527
  Al+3             1.468e-035   1.242e-036  -34.833    -35.906     -1.073
Ca               7.366e-004
  CaOH+            5.434e-004   4.012e-004   -3.265     -3.397     -0.132
  Ca+2             1.932e-004   4.928e-005   -3.714     -4.307     -0.593
Cl               5.605e-002
  Cl-              5.605e-002   3.555e-002   -1.251     -1.449     -0.198
  ClO-             0.000e+000   0.000e+000  -48.163    -48.295     -0.132
  ClOH             0.000e+000   0.000e+000  -54.450    -54.392      0.058
  ClO2-            0.000e+000   0.000e+000  -87.016    -87.148     -0.132
  ClHO2            0.000e+000   0.000e+000  -98.761    -98.704      0.058
  ClO3-            0.000e+000   0.000e+000 -114.291   -114.423     -0.132
  ClO4-            0.000e+000   0.000e+000 -144.751   -144.883     -0.132
H(0)             9.899e-015
  H2               4.950e-015   5.650e-015  -14.305    -14.248      0.058
Na               5.740e-001
  Na+              5.740e-001   4.060e-001   -0.241     -0.391     -0.150
O(0)             0.000e+000
  O2               0.000e+000   0.000e+000  -63.959    -63.901      0.058

----------Saturation indices----------

Phase              SI log IAP   log KT

C2AH8              -6.00    54.63    60.64   Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C4AH13             -1.97   100.03   102.00   Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19             -2.00    99.98   101.98   Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)            -85.22    11.63    96.85   Ca1.000
CA(G)            -110.45    11.63   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2            0.00    22.71    22.71   Ca(OH)2
CAH10              -8.52    31.90    40.42   Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CAO(CR)            -9.98    22.72    32.70   Ca1.000O1.000
CL(G)             -50.86    -9.42    41.44   Cl1.000
CL2(G)            -64.81   -18.83    45.98   Cl2.000
FRIEDEL_           0.00    70.13    70.13   Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GIBBSITE           -3.14     4.62     7.76   Al1.000H3.000O3.000
H(G)              -41.16    -5.55    35.61   H1.000
H2(G)             -11.10   -11.10     0.00   H2.000
H2O(G)             -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
HCL(G)            -21.26   -14.97     6.29   Cl1.000H1.000
HYDROGR            0.00    77.37    77.37   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1          -4.21    77.37    81.58   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
KATOITE            -1.57    77.37    78.94   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LIME,              -9.98    22.72    32.70   Ca1.000O1.000
NA(CR)            -38.31     7.58    45.89   Na1.000
NA(G)             -51.80     7.58    59.38   Na1.000
O(G)              -71.06    11.09    82.15   O1.000
O2(G)             -60.91    22.18    83.09   O2.000
PORTLAN            0.00    22.71    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1           0.16    22.71    22.55   Ca1.000H2.000O2.000

------------------
End of simulation.
------------------

-----------------------------------
Reading input data for simulation 2.
-----------------------------------

-----------
End of run.
-----------
```

リスト2-5 モノサルフェート-ポルトランダイト共存系の出力リスト
（浸漬液：塩水）

```
Input file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11．報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥PHREEQC-
計算¥AFm-CH.pqi
Output file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11．報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル
¥PHREEQC-計算¥AFm-CH.pqo
Database file: C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
------------------------------------
Reading input data for simulation 1.
------------------------------------

DATABASE C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb
Title L/S=2.5(0.6M)-(AFm-CH):0.6M-NaCl
PHASES
CSH(0.1)
        Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
        log_K -1.071
CSH(0.2)
        Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
        log_K 0.565
CSH(0.3)
        Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
        log_K 2.227
CSH(0.4)
        Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
        log_K 3.907
CSH(0.5)
        Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
        log_K 5.601
CSH(0.6)
        Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
        log_K 7.312
CSH(0.7)
        Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
        log_K 9.045
CSH(0.8)
        Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
        log_K 10.819
CSH(0.9)
        Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
        log_K 14.061
CSH(1.0)
        Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
        log_K 14.514
CSH(1.1)
        Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
        log_K 14.983
CSH(1.2)
        Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
        log_K 15.439
CSH(1.3)
        Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
        log_K 15.870
CSH(1.4)
        Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
        log_K 16.272
CSH(1.5)
        Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
        log_K 16.643
CSH(1.6)
        Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
        log_K 16.987
            CSH(1.7)
        Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
        log_K 17.304
CSH(1.8)
        Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
        log_K 17.597
Ca(OH)2
        Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
        log_k 22.710
SiO2(am)
        Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
        log_K -2.639
CSH(0.833)
        Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
        log_K 11.436
SOLUTION 0    0.6M-NaCl
                    units     mol/kgw
                pH          7.000
                pe          0.0
                density 1.000
                temp        25.0
                Na    0.6
                Cl    0.6
SAVE SOLUTION 0
```

```
EQUILIBRIUM_PHASES 1
        CSH(0.1)    0.0    0.0
        CSH(0.2)    0.0    0.0
        CSH(0.3)    0.0    0.0
        CSH(0.4)    0.0    0.0
        CSH(0.5)    0.0    0.0
        CSH(0.6)    0.0    0.0
        CSH(0.7)    0.0    0.0
        CSH(0.8)    0.0    0.0
        CSH(0.9)    0.0    0.0
        CSH(1.0)    0.0    0.0
        CSH(1.1)    0.0    0.0
        CSH(1.2)    0.0    0.0
        CSH(1.3)    0.0    0.0
        CSH(1.4)    0.0    0.0
        CSH(1.5)    0.0    0.0
        CSH(1.6)    0.0    0.0
        CSH(1.7)    0.0    0.0
        CSH(1.8)    0.0    0.0
        SiO2(am)    0.0    0.0
        CSH(0.833) 0.0    0.0
        Ca(OH)2      0.0    0.6
        ETTRINGI    0.0    0.0
        MONOSULF    0.0      0.6
        FRIEDEL_    0.0 0.0
        HYDROGR    0.0    0.0
        Brucite      0.0    0.0
        SEPIOLIT      0.0    0.0
        CALCITE 0.0 0.0
        GEHL_HY 0.0 0.0
        HYDROTAL 0.0 0.0
        GROSSUL 0.0 0.0
        C3ASH4    0.0 0.0
        END
-----
TITLE
-----

  L/S=2.5(0.6M)-(AFm-CH):0.6M-NaCl

-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 0.            0.6M-NaCl

-----------------------------Solution composition------------------------------

        Elements                Molality            Moles

        Cl                    6.000e-001    6.000e-001
        Na                    6.000e-001    6.000e-001

----------------------------Description of solution----------------------------

                                        pH   =      7.000
                                        pe   =      0.000
                            Activity of water   =      0.980
                               Ionic strength   =    6.000e-001
                            Mass of water (kg)   =    1.000e+000
                  Total alkalinity (eq/kg)   =    2.659e-008
                     Total carbon (mol/kg)   =    0.000e+000
                        Total CO2 (mol/kg)   =    0.000e+000
                      Temperature (deg C)   =    25.000
                    Electrical balance (eq)   = -2.659e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =    -0.00
                                  Iterations   =      4
                                     Total H   = 1.110124e+002
                                     Total O   = 5.550622e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                    Log         Log         Log
    Species              Molality   Activity    Molality    Activity      Gamma

    OH-                 1.584e-007  9.796e-008    -6.800      -7.009      -0.209
    H+                  1.318e-007  1.000e-007    -6.880      -7.000      -0.120
    H2O                 5.551e+001  9.796e-001     1.744      -0.009       0.000
Cl                  6.000e-001
    Cl-                 6.000e-001  3.788e-001    -0.222      -0.422      -0.200
    ClOH                0.000e+000  0.000e+000   -44.006     -43.946       0.060
    ClO-                0.000e+000  0.000e+000   -44.235     -44.366      -0.131
    ClO2-               0.000e+000  0.000e+000   -80.186     -80.316      -0.131
    ClHO2               0.000e+000  0.000e+000   -85.415     -85.355       0.060
    ClO3-               0.000e+000  0.000e+000  -104.560    -104.690      -0.131
    ClO4-               0.000e+000  0.000e+000  -132.118    -132.248      -0.131
H(0)                1.233e-017
    H2                  6.166e-018  7.079e-018   -17.210     -17.150       0.060
Na                  6.000e-001
    Na+                 6.000e-001  4.242e-001    -0.222      -0.372      -0.151
O(0)                0.000e+000
    O2                  0.000e+000  0.000e+000   -58.158     -58.098       0.060

-----------------------------Saturation indices---------------------------------

        Phase                SI log IAP    log KT

        CL(G)              -41.86     -0.42     41.44    Cl1.000
```

```
CL2(G)        -46.82   -0.84   45.98   Cl2.000
H(G)          -42.61   -7.00   35.61   H1.000
H2(G)         -14.00  -14.00    0.00   H2.000
H2O(G)         -1.51   -0.01    1.50   H2.000O1.000
HCL(G)        -13.71   -7.42    6.29   Cl1.000H1.000
NA(CR)        -46.26   -0.37   45.89   Na1.000
NA(G)         -59.75   -0.37   59.38   Na1.000
O(G)          -68.16   13.99   82.15   O1.000
O2(G)         -55.11   27.98   83.09   O2.000

-----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
-----------------------------------------

Reaction step 1.

WARNING: Element Mg is contained in BRUCITE (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in C3ASH4 (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element C is contained in CALCITE (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.1) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.2) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.3) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.4) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.5) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.6) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.7) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.8) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.833) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(0.9) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.0) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.1) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.2) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.3) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.4) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.5) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.6) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.7) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in CSH(1.8) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in GEHL_HY (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in GROSSUL (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Mg is contained in HYDROTAL (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Mg is contained in SEPIOLIT (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in SEPIOLIT (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Si is contained in SiO2(am) (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
Using solution 0.          0.6M-NaCl
Using pure phase assemblage 1.

-------------------------------Phase assemblage--------------------------------

                                                          Moles in assemblage
Phase                SI log IAP   log KT      Initial        Final        Delta

BRUCITE              Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
C3ASH4               Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
Ca(OH)2               0.00    22.71    22.71 6.000e-001 3.822e-001-2.178e-001
CALCITE              Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.1)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.2)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.3)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.4)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.5)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.6)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.7)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.8)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.833)           Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(0.9)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(1.0)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(1.1)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(1.2)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
CSH(1.3)             Element not present. 0.000e+000                 0.000e+000
```

CSH(1.4)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.5)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.6)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.7)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.8)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
ETTRINGI	-0.00	58.24	58.24	0.000e+000	1.801e-001	1.801e-001
FRIEDEL_	-0.00	70.13	70.13	0.000e+000	2.765e-001	2.765e-001
GEHL_HY	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
GROSSUL	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
HYDROGR	-0.00	77.37	77.37	0.000e+000	1.433e-001	1.433e-001
HYDROTAL	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
MONOSULF	-2.82	71.02	73.83	6.000e-001		-6.000e-001
SEPIOLIT	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000
SiO2(am)	Element not present.			0.000e+000		0.000e+000

----------Solution composition----------

Elements	Molality	Moles
Al	1.554e-005	1.493e-005
Ca	9.794e-004	9.408e-004
Cl	4.883e-002	4.690e-002
Na	6.246e-001	6.000e-001
S	6.215e-002	5.970e-002

----------Description of solution----------

pH = 13.452 Charge balance
pe = -8.118 Adjusted to redox equilibrium
Activity of water = 0.980
Ionic strength = 6.450e-001
Mass of water (kg) = 9.606e-001
Total alkalinity (eq/kg) = 4.535e-001
Total carbon (mol/kg) = 0.000e+000
Total CO2 (mol/kg) = 0.000e+000
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = -2.662e-008
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -0.00
Iterations = 18
Total H = 1.070704e+002
Total O = 5.399182e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	4.528e-001	2.775e-001	-0.344	-0.557	-0.213
H+	4.670e-014	3.532e-014	-13.331	-13.452	-0.121
H2O	5.551e+001	9.801e-001	1.744	-0.009	0.000
Al	1.554e-005				
Al(OH)4-	1.554e-005	1.157e-005	-4.808	-4.937	-0.128
Al(OH)3	3.593e-012	4.169e-012	-11.444	-11.380	0.064
Al(OH)2+	1.604e-019	1.193e-019	-18.795	-18.923	-0.128
AlOH+2	1.806e-027	5.541e-028	-26.743	-27.256	-0.513
Al+3	2.409e-035	1.952e-036	-34.618	-35.710	-1.091
AlSO4+	2.063e-035	1.535e-035	-34.685	-34.814	-0.128
Al(SO4)2-	1.231e-035	9.164e-036	-34.910	-35.038	-0.128
Ca	9.794e-004				
CaOH+	6.267e-004	4.664e-004	-3.203	-3.331	-0.128
Ca+2	2.648e-004	6.662e-005	-3.577	-4.176	-0.599
CaSO4	8.789e-005	1.020e-004	-4.056	-3.992	0.064
Cl	4.883e-002				
Cl-	4.883e-002	3.059e-002	-1.311	-1.514	-0.203
ClO-	0.000e+000	0.000e+000	-48.663	-48.791	-0.128
ClOH	0.000e+000	0.000e+000	-54.887	-54.823	0.064
ClO2-	0.000e+000	0.000e+000	-87.946	-88.075	-0.128
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-99.630	-99.566	0.064
ClO3-	0.000e+000	0.000e+000	-115.653	-115.781	-0.128
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-146.544	-146.672	-0.128
H(0)	2.627e-014				
H2	1.314e-014	1.524e-014	-13.881	-13.817	0.064
Na	6.246e-001				
Na+	6.031e-001	4.263e-001	-0.220	-0.370	-0.151
NaSO4-	2.157e-002	1.605e-002	-1.666	-1.794	-0.128
O(0)	0.000e+000				
O2	0.000e+000	0.000e+000	-64.828	-64.763	0.064
S	6.215e-002				
SO4-2	4.049e-002	7.514e-003	-1.393	-2.124	-0.732
NaSO4-	2.157e-002	1.605e-002	-1.666	-1.794	-0.128
CaSO4	8.789e-005	1.020e-004	-4.056	-3.992	0.064
HSO4-	3.460e-014	2.575e-014	-13.461	-13.589	-0.128
SO3-2	2.156e-016	6.615e-017	-15.666	-16.179	-0.513
HSO3-	5.211e-023	3.878e-023	-22.283	-22.411	-0.128
HS-	4.971e-025	3.046e-025	-24.304	-24.516	-0.213
S-2	4.369e-030	8.604e-031	-29.360	-30.065	-0.706
H2S	9.023e-032	1.047e-031	-31.045	-30.980	0.064
H2SO3	8.170e-035	9.478e-035	-34.088	-34.023	0.064
AlSO4+	2.063e-035	1.535e-035	-34.685	-34.814	-0.128
Al(SO4)2-	1.231e-035	9.164e-036	-34.910	-35.038	-0.128
S2O3-2	5.644e-036	1.731e-036	-35.248	-35.762	-0.513
HS2O3-	0.000e+000	0.000e+000	-47.495	-47.624	-0.128

----------Saturation indices----------

Phase	SI	log IAP	log KT

```
ANHYDRIT          -1.92    -6.30    -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
C2AH8             -6.00    54.63    60.64   Al2.000Ca2.000H16.000O13.00
C4AH13            -1.97   100.03   102.00   Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19            -2.00    99.98   101.98   Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)           -84.79    12.06    96.85   Ca1.000
CA(G)           -110.02    12.06   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2           0.00    22.71    22.71   Ca(OH)2
CAH10             -8.52    31.90    40.42   Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CAO(CR)           -9.98    22.72    32.70   Ca1.000O1.000
CL(G)            -51.07    -9.63    41.44   Cl1.000
CL2(G)           -65.25   -19.27    45.98   Cl2.000
ETTRINGI          -0.00    58.24    58.24   Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FRIEDEL_          -0.00    70.13    70.13   Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GIBBSITE          -3.14     4.62     7.76   Al1.000H3.000O3.000
GYPSUM            -1.71    -6.32    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
H(G)             -40.94    -5.33    35.61   H1.000
H2(G)            -10.67   -10.67     0.00   H2.000
H2O(G)            -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)           -29.96   -71.66   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)           -21.26   -14.97     6.29   Cl1.000H1.000
HYDROGR           -0.00    77.37    77.37   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1          -4.21    77.37    81.58   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
KATOITE           -1.57    77.37    78.94   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LIME,             -9.98    22.72    32.70   Ca1.000O1.000
MONOSULF          -2.82    71.02    73.83   Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
NA(CR)           -38.14     7.75    45.89   Na1.000
NA(G)            -51.63     7.75    59.38   Na1.000
O(G)             -71.49    10.66    82.15   O1.000
O2(G)            -61.77    21.32    83.09   O2.000
PORTLAN            0.00    22.71    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1           0.16    22.71    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
S(CR)            -25.15   -60.99   -35.84   S1.000
S(G)             -66.62   -60.99     5.63   S1.000
S2(G)            -64.28  -121.99   -57.71   S2.000
SO2(G)           -34.36   -39.68    -5.32   S1.000O2.000

------------------
End of simulation.
------------------

-------------------------------------
Reading input data for simulation 2.
-------------------------------------

-----------
End of run.
-----------
```

付録3 OPCペースト浸漬実験の化学平衡計算　出力データ

リスト3-1　OPCペーストとイオン交換水との反応に関する化学平衡計算（液固比=1.8）

```
Input file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11. 報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥3章
¥OPC-IEW(Afm)-all.pqi
Output file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11. 報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥3章
¥OPC-IEW(Afm)-all.pqo
Database file: C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
-------------------------------------
Reading input data for simulation 1.
-------------------------------------

DATABASE C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb
Title OPC(AFt)-IEW
PHASES
CSH(0.1)
Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
log_K -1.071
CSH(0.2)
Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
log_K 0.565
CSH(0.3)
Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
log_K 2.227
CSH(0.4)
Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
log_K 3.907
CSH(0.5)
Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
log_K 5.601
CSH(0.6)
Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
log_K 7.312
CSH(0.7)
Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
log_K 9.045
CSH(0.8)
Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
log_K 10.819
CSH(0.9)
Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
log_K 14.061
CSH(1.0)
Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
log_K 14.514
CSH(1.1)
Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
log_K 14.983
CSH(1.2)
Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
log_K 15.439
CSH(1.3)
Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
log_K 15.870
CSH(1.4)
Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
log_K 16.272
CSH(1.5)
Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
log_K 16.643
CSH(1.6)
Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
log_K 16.987
CSH(1.7)
Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
log_K 17.304
CSH(1.8)
Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
log_K 17.597
Ca(OH)2
Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
log_k 22.710
SiO2(am)
Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
log_K -2.639
CSH(0.833)
Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
log_K 11.436
SOLUTION 0    0.6M-NaCl #FRHP
                    units      mol/kgw
                  pH          7.00 #8.46
                  density 1.000
                  temp       25.0
SOLUTION 1    0.6M-NaCl #FRHP
                    units      mol/kgw
```

```
                    pH          7.00 #8.46
                    density 1.000
                    temp        25.0
EQUILIBRIUM_PHASES 1
          CSH(0.1)   0.0   0.0
          CSH(0.2)   0.0   0.0
          CSH(0.3)   0.0   0.0
          CSH(0.4)   0.0   0.0
          CSH(0.5)   0.0   0.0
          CSH(0.6)   0.0   0.0
          CSH(0.7)   0.0   0.0
          CSH(0.8)   0.0   0.0
          CSH(0.9)   0.0   0.0
          CSH(1.0)   0.0   0.0
          CSH(1.1)   0.0   0.0
          CSH(1.2)   0.0   0.0
          CSH(1.3)   0.0   0.0
          CSH(1.4)   0.0   0.0
          CSH(1.5)   0.0   0.0
          CSH(1.6)   0.0   0.0
          CSH(1.7)   0.0   0.0
          CSH(1.8)   0.0   2.98 #8.678104
          SiO2(am)   0.0   0.0
          CSH(0.833) 0.0   0.0
          Ca(OH)2     0.0   1.35 #3.934656
          ETTRINGI   0.0   0.0 #0.109932
          MONOSULF   0.0     0.11
          FRIEDEL_   0.0 0.0
          HYDROGR   0.0   0.13 #0.599229
          Brucite     0.0   0.23 #0.658933
          GIBBSITE   0.0   0.0
          GYPSUM   0.0   0.0
          SEPIOLIT     0.0   0.0
          CALCITE 0.0 0.0
          GEHL_HY 0.0 0.0
          HYDROTAL 0.0 0.0
          GROSSUL 0.0 0.0
          C3ASH4   0.0 0.0
          END
-----
TITLE
-----

 OPC(AFt)-IEW

-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------
```

```
Initial solution 0.          0.6M-NaCl

-----------------------------Solution composition-----------------------------

              Elements                Molality          Moles

              Pure water

---------------------------Description of solution---------------------------

                                                pH   =     7.000
                                                pe   =     4.000
                                Activity of water   =     1.000
                                      Ionic strength   =   1.001e-007
                                  Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                     Total alkalinity (eq/kg)   =   4.230e-014
                         Total carbon (mol/kg)   =   0.000e+000
                            Total CO2 (mol/kg)   =   0.000e+000
                          Temperature (deg C)   =   25.000
                       Electrical balance (eq)   = -4.230e-014
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =   -0.00
                                      Iterations   =     0
                                          Total H   = 1.110124e+002
                                          Total O   = 5.550622e+001

---------------------------Distribution of species---------------------------

                                                Log        Log        Log
    Species                     Molality     Activity   Molality   Activity      Gamma

    OH-                       1.001e-007   1.000e-007     -7.000     -7.000     -0.000
    H+                        1.001e-007   1.000e-007     -7.000     -7.000     -0.000
    H2O                       5.551e+001   1.000e+000      1.744      0.000      0.000
H(0)              1.416e-025
    H2                        7.079e-026   7.079e-026    -25.150    -25.150      0.000
O(0)              0.000e+000
    O2                        0.000e+000   0.000e+000    -42.080    -42.080      0.000

-----------------------------Saturation indices-------------------------------

              Phase                 SI log IAP   log KT

              H(G)              -46.61   -11.00    35.61   H1.000
              H2(G)             -22.00   -22.00     0.00   H2.000
              H2O(G)             -1.50     0.00     1.50   H2.000O1.000
              O(G)              -60.15    22.00    82.15   O1.000
              O2(G)             -39.09    44.00    83.09   O2.000

Initial solution 1.          0.6M-NaCl
```

```
-----------------------------Solution composition------------------------------

              Elements                  Molality           Moles

              Pure water

----------------------------Description of solution----------------------------

                                                  pH   =     7.000
                                                  pe   =     4.000
                                   Activity of water   =     1.000
                                        Ionic strength   =   1.001e-007
                                    Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                            Total alkalinity (eq/kg)   =   4.230e-014
                                 Total carbon (mol/kg)   =   0.000e+000
                                     Total CO2 (mol/kg)   =   0.000e+000
                                   Temperature (deg C)   =   25.000
                             Electrical balance (eq)   = -4.230e-014
  Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =   -0.00
                                          Iterations   =     0
                                               Total H   = 1.110124e+002
                                               Total O   = 5.550622e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                                  Log        Log        Log
    Species                      Molality     Activity   Molality   Activity      Gamma

    OH-                         1.001e-007   1.000e-007     -7.000     -7.000     -0.000
    H+                          1.001e-007   1.000e-007     -7.000     -7.000     -0.000
    H2O                         5.551e+001   1.000e+000      1.744      0.000      0.000
H(0)              1.416e-025
    H2                          7.079e-026   7.079e-026    -25.150    -25.150      0.000
O(0)              0.000e+000
    O2                          0.000e+000   0.000e+000    -42.080    -42.080      0.000

-----------------------------Saturation indices---------------------------------

              Phase                SI log IAP    log KT

              H(G)                -46.61   -11.00     35.61   H1.000
              H2(G)               -22.00   -22.00      0.00   H2.000
              H2O(G)               -1.50     0.00      1.50   H2.000O1.000
              O(G)                -60.15    22.00     82.15   O1.000
              O2(G)               -39.09    44.00     83.09   O2.000

-----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
-----------------------------------------

Reaction step 1.

WARNING: Element C is contained in CALCITE (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
WARNING: Element Cl is contained in FRIEDEL_ (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
Using solution 0.            0.6M-NaCl
Using pure phase assemblage 1.

-------------------------------Phase assemblage-------------------------------

                                                  Moles in assemblage
Phase                SI log IAP    log KT          Initial            Final            Delta

BRUCITE                 -0.16      16.14      16.30     2.300e-001        0        -2.300e-001
C3ASH4                  -2.70      68.17      70.87     0.000e+00         0         0.000e+000
Ca(OH)2                  0.00      22.71      22.71     1.350e+000   1.503e+000    1.529e-001
CALCITE            Element not present.      0.000e+000          0    0.000e+000
CSH(0.1)                -5.85      -6.93      -1.07     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(0.2)                -5.22      -4.65       0.56     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(0.3)                -4.61      -2.38       2.23     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(0.4)                -4.02      -0.11       3.91     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(0.5)                -3.44       2.16       5.60     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(0.6)                -2.88       4.43       7.31     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(0.7)                -2.34       6.70       9.04     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(0.8)                -1.85       8.97      10.82     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(0.833)              -1.71       9.72      11.44     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(0.9)                -1.57      12.49      14.06     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(1.0)                -1.00      13.51      14.51     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(1.1)                -0.63      14.35      14.98     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(1.2)                -0.39      15.05      15.44     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(1.3)                -0.23      15.64      15.87     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(1.4)                -0.13      16.14      16.27     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(1.5)                -0.07      16.58      16.64     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(1.6)                -0.02      16.96      16.99     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(1.7)                -0.00      17.30      17.30     0.000e+000        0    0.000e+000
CSH(1.8)                 0.00      17.60      17.60     2.980e+000   2.980e+000 -7.240e-007
ETTRINGI                 0.00      58.24      58.24     0.000e+000   3.659e-002    3.659e-002
FRIEDEL_           Element not present.      0.000e+000          0    0.000e+000
GEHL_HY                 -4.86      45.46      50.32     0.000e+000        0    0.000e+000
GIBBSITE                -3.14       4.62       7.76     0.000e+000        0    0.000e+000
GROSSUL                 -8.92      49.78      58.70     0.000e+000        0    0.000e+000
GYPSUM                  -1.77      -6.37      -4.60     0.000e+000        0    0.000e+000
HYDROGR                  0.00      77.37      77.37     1.300e-001   1.459e-001    1.591e-002
HYDROTAL                 0.00      73.78      73.78     0.000e+000   5.750e-002    5.750e-002
MONOSULF                -2.84      71.00      73.83     1.100e-001        0 -1.100e-001
SEPIOLIT               -20.98       9.36      30.35     0.000e+000        0    0.000e+000
```

```
SiO2(am)          -6.56    -9.20    -2.64    0.000e+000          0   0.000e+000

----------------------------Solution composition----------------------------

        Elements              Molality          Moles

        Al                  1.394e-006    1.382e-006
        Ca                  1.999e-002    1.982e-002
        Mg                  1.339e-008    1.328e-008
        S                   2.197e-004    2.179e-004
        Si                  4.059e-007    4.025e-007

---------------------------Description of solution---------------------------

                          pH   =   12.440          Charge balance
                          pe   =   -7.119          Adjusted to redox equilibrium
                     Activity of water   =     0.999
                        Ionic strength   =   4.841e-002
                    Mass of water (kg)   =   9.916e-001
            Total alkalinity (eq/kg)   =   3.953e-002
                 Total carbon (mol/kg)   =   0.000e+000
                     Total CO2 (mol/kg)   =   0.000e+000
                   Temperature (deg C)   =   25.000
                 Electrical balance (eq)   =   1.346e-011
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =     0.00
                            Iterations   =   25
                               Total H   = 1.101237e+002
                               Total O   = 5.508235e+001

---------------------------Distribution of species---------------------------

                                          Log        Log        Log
   Species                  Molality    Activity   Molality   Activity    Gamma

   OH-                    3.382e-002  2.752e-002   -1.471     -1.560     -0.089
   H+                     4.244e-013  3.630e-013  -12.372    -12.440     -0.068
   H2O                    5.551e+001  9.991e-001    1.744     -0.000      0.000
Al                 1.394e-006
   Al(OH)4-               1.394e-006  1.147e-006   -5.856     -5.940     -0.084
   Al(OH)3                4.122e-012  4.169e-012  -11.385    -11.380      0.005
   Al(OH)2+               1.461e-018  1.203e-018  -17.835    -17.920     -0.084
   AlOH+2                 1.226e-025  5.631e-026  -24.912    -25.249     -0.338
   Al+3                   8.168e-033  1.999e-033  -32.088    -32.699     -0.611
   AlSO4+                 1.593e-034  1.311e-034  -33.798    -33.882     -0.084
   Al(SO4)2-              7.924e-037  6.524e-037  -36.101    -36.185     -0.084
Ca                 1.999e-002
   Ca+2                   1.419e-002  6.770e-003   -1.848     -2.169     -0.321
   CaOH+                  5.712e-003  4.702e-003   -2.243     -2.328     -0.084
   CaSO4                  8.542e-005  8.638e-005   -4.068     -4.064      0.005
H(0)               3.193e-014
   H2                     1.597e-014  1.614e-014  -13.797    -13.792      0.005
Mg                 1.339e-008
   MgOH+                  9.684e-009  7.973e-009   -8.014     -8.098     -0.084
   Mg+2                   3.690e-009  1.803e-009   -8.433     -8.744     -0.311
   MgSO4                  1.985e-011  2.008e-011  -10.702    -10.697      0.005
O(0)               0.000e+000
   O2                     0.000e+000  0.000e+000  -64.802    -64.797      0.005
S                  2.197e-004
   SO4-2                  1.343e-004  6.263e-005   -3.872     -4.203     -0.331
   CaSO4                  8.542e-005  8.638e-005   -4.068     -4.064      0.005
   MgSO4                  1.985e-011  2.008e-011  -10.702    -10.697      0.005
   HSO4-                  2.679e-015  2.206e-015  -14.572    -14.656     -0.084
   SO3-2                  1.247e-018  5.731e-019  -17.904    -18.242     -0.338
   HSO3-                  4.194e-024  3.452e-024  -23.377    -23.462     -0.084
   HS-                    3.740e-026  3.044e-026  -25.427    -25.517     -0.089
   H2S                    1.063e-031  1.075e-031  -30.974    -30.969      0.005
   S-2                    1.786e-032  8.366e-033  -31.748    -32.077     -0.329
   AlSO4+                 1.593e-034  1.311e-034  -33.798    -33.882     -0.084
   H2SO3                  8.574e-035  8.670e-035  -34.067    -34.062      0.005
   Al(SO4)2-              7.924e-037  6.524e-037  -36.101    -36.185     -0.084
   S2O3-2                 3.165e-038  1.454e-038  -37.500    -37.837     -0.338
   HS2O3-                 0.000e+000  0.000e+000  -48.603    -48.688     -0.084
Si                 4.059e-007
   H3SiO4-                3.294e-007  2.712e-007   -6.482     -6.567     -0.084
   H2SiO4-2               7.589e-008  3.486e-008   -7.120     -7.458     -0.338
   H4SiO4                 6.286e-010  6.356e-010   -9.202     -9.197      0.005
   H4Si2O7-2              6.680e-013  3.069e-013  -12.175    -12.513     -0.338
   H5Si2O7-               1.075e-014  8.849e-015  -13.969    -14.053     -0.084
   H5Si3O10-3             9.766e-018  1.697e-018  -17.010    -17.770     -0.760
   H3Si3O9-3              7.765e-019  1.349e-019  -18.110    -18.870     -0.760
   H4Si4O12-4             1.059e-022  4.718e-024  -21.975    -23.326     -1.351
   H5Si4O12-3             6.233e-025  1.083e-025  -24.205    -24.965     -0.760

----------------------------Saturation indices----------------------------

Phase                 SI log IAP   log KT

AFWILLIT            -10.25    49.74    59.99   Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ANHYDRIT             -1.99    -6.37    -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
ANORTHHE            -13.14    13.56    26.70   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR            -12.81    13.56    26.37   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
BEID-CA             -24.78   -19.24     5.55   Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG             -25.83   -20.32     5.51   Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BRUCITE              -0.16    16.14    16.30   Mg1.000H2.000O2.000
C2AH8                -5.98    54.66    60.64   Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4               -2.70    68.17    70.87   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1             -3.24    68.17    71.41   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13               -1.92   100.08   102.00   Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
```

```
C4AH19          -1.90   100.08   101.98   Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)         -84.78    12.07    96.85   Ca1.000
CA(G)         -110.01    12.07   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2          0.00    22.71    22.71   Ca(OH)2
CAH10           -8.47    31.95    40.42   Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CAO(CR)         -9.99    22.71    32.70   Ca1.000O1.000
CHALCEDO        -5.71    -9.20    -3.49   Si1.000O2.000
CLINOC40       -48.19   498.64   546.83 Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
CLINOZOI       -11.92    31.69    43.61   Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CSH(0.1)        -5.85    -6.93    -1.07   Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)        -5.22    -4.65     0.56   Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)        -4.61    -2.38     2.23   Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)        -4.02    -0.11     3.91   Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)        -3.44     2.16     5.60   Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)        -2.88     4.43     7.31   Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)        -2.34     6.70     9.04   Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)        -1.85     8.97    10.82   Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)      -1.71     9.72    11.44   Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)        -1.57    12.49    14.06   Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)        -1.00    13.51    14.51   Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)        -0.63    14.35    14.98   Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
CSH(1.2)        -0.39    15.05    15.44   Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)        -0.23    15.64    15.87   Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)        -0.13    16.14    16.27   Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)        -0.07    16.58    16.64   Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)        -0.02    16.96    16.99   Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)        -0.00    17.30    17.30   Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)         0.00    17.60    17.60   Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833         -1.71     9.72    11.44   Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
EPISTILB       -26.89   -23.23     3.66   CaAl2Si6O16:5H2O
ETTRINGI         0.00    58.24    58.24   Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FOSHAGIT        -2.62    63.25    65.87   Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
GEHL_HY         -4.86    45.46    50.32   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1        -3.70    45.46    49.16   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT       -10.81    45.47    56.28   Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE        -3.14     4.62     7.76   Al1.000H3.000O3.000
GROSSUL         -8.92    49.78    58.70   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1        -2.09    49.78    51.87   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM          -1.77    -6.37    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE        -5.03    17.83    22.86   Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)           -40.93    -5.32    35.61   H1.000
H2(G)          -10.64   -10.64     0.00   H2.000
H2O(G)          -1.50    -0.00     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)         -29.95   -71.65   -41.70   S1.000H2.000
HILLEBRA        -0.48    36.22    36.70   Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR          0.00    77.37    77.37   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1        -4.21    77.37    81.58   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL         0.00    73.78    73.78   Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
JENNITE          2.61   149.21   146.60   Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
KAOLINIT       -18.23   -55.15   -36.92   Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE         -1.57    77.37    78.94   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONTI       -18.47    -4.83    13.63   Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LIME,           -9.99    22.71    32.70   Ca1.000O1.000
MG2SI2O6        -9.38    13.88    23.26   Mg2.000Si2.000O6.000
MONOSULF        -2.84    71.00    73.83   Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA       -22.56   -20.00     2.56 Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-MG        -23.55   -21.08     2.47   Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
O(G)           -71.51    10.64    82.15   O1.000
O2(G)          -61.81    21.28    83.09   O2.000
OKENITE         -6.00     4.32    10.32   Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
PERICLAS        -5.44    16.14    21.58   Mg1.000O1.000
PLOMBIER        -5.38    58.37    63.75   Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN          0.00    22.71    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1         0.16    22.71    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
PYROPHYL       -28.00   -27.54     0.46   Si4.000Al2.000H2.000O12.000
QUARTZ          -5.42    -9.20    -3.78   Si1.000O2.000
RIVERSID       -10.61    58.37    68.98   Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)          -25.17   -61.01   -35.84   S1.000
S(G)           -66.64   -61.01     5.63   S1.000
S2(G)          -64.31  -122.02   -57.71   S2.000
SAPON-CA       -6.30    19.93    26.23   Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-         -7.34    18.84    26.19   Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SCOLECIT        -9.05     4.36    13.41   Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000
SEP            -14.11   -51.32   -37.21   Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT       -20.98     9.36    30.35   Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)         -93.41   -30.48    62.93   Si1.000
SI(G)         -164.45   -30.48   133.97   Si1.000
SIL             -6.18    -9.20    -3.02   Si1.000H2.000O3.000
SIL(AM)1        -6.49    -9.20    -2.71   Si1.000O2.000
SILI(AM)        -6.56    -9.20    -2.64   Si1.000O2.000
SILICA         -12.05   -14.52    -2.47   Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)        -6.56    -9.20    -2.64   Si1.000O2.000
SIO2(QUA        -5.20    -9.20    -4.00   Si1.000O2.000
SO2(G)         -34.40   -39.72    -5.32   S1.000O2.000
TALC            -9.45    11.62    21.07   Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR        -7.14    58.37    65.51   Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,         -12.77     0.04    12.81   Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLI         -5.17    52.53    57.70   Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
WAIRAKIT       -22.91    -4.83    18.08   CaAl2Si4O12:2H2O
XONOTLIT       -10.64    81.09    91.73   Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA       -27.30   -23.23     4.07   CaAl2Si6O16:4H2O

------------------
End of simulation.
------------------

-----------------------------------
```

リスト3-2 OPCペーストとFRHPとの反応に関する化学平衡計算　（液固比=1.8）

```
Input file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11．報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥3章
¥OPC-FRHP(AFm).pqi
Output file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11．報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥3章
¥OPC-FRHP(AFm).pqo
Database file: C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
-------------------------------------
Reading input data for simulation 1.
-------------------------------------

DATABASE C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb
Title OPC(AFt)-FRHP
PHASES
CSH(0.1)
Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
log_K -1.071
CSH(0.2)
Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
log_K 0.565
CSH(0.3)
Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
log_K 2.227
CSH(0.4)
Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
log_K 3.907
CSH(0.5)
Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
log_K 5.601
CSH(0.6)
Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
log_K 7.312
CSH(0.7)
Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
log_K 9.045
CSH(0.8)
Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
log_K 10.819
CSH(0.9)
Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
log_K 14.061
CSH(1.0)
Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
log_K 14.514
CSH(1.1)
Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
log_K 14.983
CSH(1.2)
Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
log_K 15.439
CSH(1.3)
Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
log_K 15.870
CSH(1.4)
Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
log_K 16.272
CSH(1.5)
Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
log_K 16.643
CSH(1.6)
Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
log_K 16.987
CSH(1.7)
Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
log_K 17.304
CSH(1.8)
Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
log_K 17.597
Ca(OH)2
Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
log_k 22.710
SiO2(am)
Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
log_K -2.639
CSH(0.833)
Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
log_K 11.436
SOLUTION 0    FRHP
                    units      mol/kgw
                    pH          8.46
                    pe         -4.76
                    density 1.000
                    temp       25.0
                    Ca          0.000109
                    S           0.000111
                    Na          0.00355
                    K           0.0000615
```

```
                Mg        0.00005
                B         0.000293
                Cl        0.0000146
                C         0.00354
                Al        0.000000343
                Si        0.000339
                Fe        0.000000000973
                P         0.00000286
                F         0.000054
                N         0.000023
SOLUTION 1    FRHP
                  units     mol/kgw
                pH        8.46
                pe        -4.76
                density 1.000
                temp      25.0
                Ca        0.000109
                S         0.000111
                Na        0.00355
                K         0.0000615
                Mg        0.00005
                B         0.000293
                Cl        0.0000146
                C         0.00354
                Al        0.000000343
                Si        0.000339
                Fe        0.000000000973
                P         0.00000286
                F         0.000054
                N         0.000023
EQUILIBRIUM_PHASES 1
            CSH(0.1)   0.0   0.0
            CSH(0.2)   0.0   0.0
            CSH(0.3)   0.0   0.0
            CSH(0.4)   0.0   0.0
            CSH(0.5)   0.0   0.0
            CSH(0.6)   0.0   0.0
            CSH(0.7)   0.0   0.0
            CSH(0.8)   0.0   0.0
            CSH(0.9)   0.0   0.0
            CSH(1.0)   0.0   0.0
            CSH(1.1)   0.0   0.0
            CSH(1.2)   0.0   0.0
            CSH(1.3)   0.0   0.0
            CSH(1.4)   0.0   0.0
            CSH(1.5)   0.0   0.0
            CSH(1.6)   0.0   0.0
            CSH(1.7)   0.0   0.0
            CSH(1.8)   0.0   2.97 #8.678104
            SiO2(am)   0.0   0.0
            CSH(0.833) 0.0   0.0
            Ca(OH)2    0.0   1.35 #3.934656
            ETTRINGI   0.0   0.0 #0.109932
            MONOSULF   0.0   0.11
            FRIEDEL_   0.0 0.0
            HYDROGR    0.0   0.13 #0.599229
            Brucite    0.0   0.23 #0.658933
            SEPIOLIT   0.0   0.0
            CALCITE 0.0 0.0
            HYDROTAL 0.0 0.0
            C3ASH4   0.0 0.0
            END
-----
TITLE
-----

 OPC(AFt)-FRHP

-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 0.          FRHP

-----------------------------Solution composition-----------------------------

            Elements              Molality          Moles

            Al                   3.430e-007   3.430e-007
            B                    2.930e-004   2.930e-004
            C                    3.540e-003   3.540e-003
            Ca                   1.090e-004   1.090e-004
            Cl                   1.460e-005   1.460e-005
            F                    5.400e-005   5.400e-005
            Fe                   9.730e-010   9.730e-010
            K                    6.150e-005   6.150e-005
            Mg                   5.000e-005   5.000e-005
            N                    2.300e-005   2.300e-005
            Na                   3.550e-003   3.550e-003
            P                    2.860e-006   2.860e-006
            S                    1.110e-004   1.110e-004
            Si                   3.390e-004   3.390e-004

----------------------------Description of solution----------------------------

                                        pH   =     8.460
                                        pe   =    -4.760
                          Activity of water   =     1.000
```

Ionic strength = 4.214e-003
Mass of water (kg) = 1.000e+000
Total alkalinity (eq/kg) = -3.576e-003
Total CO2 (mol/kg) = 3.540e-003
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = -1.204e-005
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -0.15
Iterations = 12
Total H = 1.110181e+002
Total O = 5.551951e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	3.095e-006	2.884e-006	-5.509	-5.540	-0.031
H+	3.696e-009	3.467e-009	-8.432	-8.460	-0.028
H2O	5.551e+001	9.999e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	3.430e-007				
Al(OH)4-	3.322e-007	3.098e-007	-6.479	-6.509	-0.030
Al(OH)3	1.073e-008	1.074e-008	-7.969	-7.969	0.000
Al(OH)2+	3.174e-011	2.959e-011	-10.498	-10.529	-0.030
AlF2+	6.796e-014	6.337e-014	-13.168	-13.198	-0.030
AlF3	5.912e-014	5.918e-014	-13.228	-13.228	0.000
AlOH+2	1.749e-014	1.322e-014	-13.757	-13.879	-0.122
AlF+2	3.042e-015	2.299e-015	-14.517	-14.638	-0.122
AlF4-	1.595e-015	1.487e-015	-14.797	-14.828	-0.030
Al+3	7.961e-018	4.480e-018	-17.099	-17.349	-0.250
AlSO4+	4.115e-019	3.837e-019	-18.386	-18.416	-0.030
Al(SO4)2-	2.674e-021	2.493e-021	-20.573	-20.603	-0.030
B	2.930e-004				
B(OH)3	2.487e-004	2.489e-004	-3.604	-3.604	0.000
H2BO3-	4.431e-005	4.131e-005	-4.354	-4.384	-0.030
FB(OH)3-	5.330e-009	4.970e-009	-8.273	-8.304	-0.030
F2B(OH)2-	9.888e-014	9.220e-014	-13.005	-13.035	-0.030
F3BOH-	1.877e-020	1.750e-020	-19.727	-19.757	-0.030
BF4-	1.324e-026	1.234e-026	-25.878	-25.909	-0.030
C	3.540e-003				
HCO3-	3.437e-003	3.211e-003	-2.464	-2.493	-0.030
CO3-2	5.684e-005	4.325e-005	-4.245	-4.364	-0.119
CO2	2.493e-005	2.495e-005	-4.603	-4.603	0.000
NaHCO3	5.949e-006	5.955e-006	-5.226	-5.225	0.000
CaCO3	5.932e-006	5.937e-006	-5.227	-5.226	0.000
CaHCO3+	3.174e-006	2.964e-006	-5.498	-5.528	-0.030
NaCO3-	2.840e-006	2.648e-006	-5.547	-5.577	-0.030
MgCO3	1.461e-006	1.463e-006	-5.835	-5.835	0.000
MgHCO3+	1.416e-006	1.321e-006	-5.849	-5.879	-0.030
CH4	1.537e-010	1.539e-010	-9.813	-9.813	0.000
Ca	1.090e-004				
Ca+2	9.847e-005	7.490e-005	-4.007	-4.125	-0.119
CaCO3	5.932e-006	5.937e-006	-5.227	-5.226	0.000
CaHCO3+	3.174e-006	2.964e-006	-5.498	-5.528	-0.030
CaSO4	1.247e-006	1.248e-006	-5.904	-5.904	0.000
CaHPO4	7.713e-008	7.721e-008	-7.113	-7.112	0.000
CaPO4-	5.650e-008	5.268e-008	-7.248	-7.278	-0.030
CaF+	3.509e-008	3.272e-008	-7.455	-7.485	-0.030
CaOH+	5.846e-009	5.451e-009	-8.233	-8.264	-0.030
CaH2PO4+	2.158e-010	2.012e-010	-9.666	-9.696	-0.030
Cl	1.460e-005				
Cl-	1.460e-005	1.360e-005	-4.836	-4.866	-0.031
FeCl+2	5.998e-031	4.533e-031	-30.222	-30.344	-0.122
FeCl2+	2.954e-035	2.755e-035	-34.530	-34.560	-0.030
FeCl3	0.000e+000	0.000e+000	-40.427	-40.426	0.000
ClO-	0.000e+000	0.000e+000	-55.371	-55.401	-0.030
ClOH	0.000e+000	0.000e+000	-56.442	-56.441	0.000
ClO2-	0.000e+000	0.000e+000	-97.913	-97.943	-0.030
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-104.443	-104.442	0.000
ClO3-	0.000e+000	0.000e+000	-128.878	-128.909	-0.030
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-163.027	-163.058	-0.030
F	5.400e-005				
F-	5.383e-005	5.015e-005	-4.269	-4.300	-0.031
MgF+	1.257e-007	1.172e-007	-6.901	-6.931	-0.030
CaF+	3.509e-008	3.272e-008	-7.455	-7.485	-0.030
FB(OH)3-	5.330e-009	4.970e-009	-8.273	-8.304	-0.030
HF	2.629e-010	2.632e-010	-9.580	-9.580	0.000
F2B(OH)2-	9.888e-014	9.220e-014	-13.005	-13.035	-0.030
AlF2+	6.796e-014	6.337e-014	-13.168	-13.198	-0.030
AlF3	5.912e-014	5.918e-014	-13.228	-13.228	0.000
HF2-	3.899e-014	3.636e-014	-13.409	-13.439	-0.030
AlF+2	3.042e-015	2.299e-015	-14.517	-14.638	-0.122
AlF4-	1.595e-015	1.487e-015	-14.797	-14.828	-0.030
F3BOH-	1.877e-020	1.750e-020	-19.727	-19.757	-0.030
FeF2+	2.013e-025	1.876e-025	-24.696	-24.727	-0.030
FeF+2	1.244e-025	9.398e-026	-24.905	-25.027	-0.122
FeF3	1.391e-026	1.392e-026	-25.857	-25.856	0.000
BF4-	1.324e-026	1.234e-026	-25.878	-25.909	-0.030
SiF6-2	1.490e-033	1.126e-033	-32.827	-32.948	-0.122
Fe	9.730e-010				
Fe+2	8.913e-010	6.804e-010	-9.050	-9.167	-0.117
FeOH+	6.654e-011	6.204e-011	-10.177	-10.207	-0.030
FeSO4	9.887e-012	9.897e-012	-11.005	-11.005	0.000
FeHPO4	5.087e-012	5.092e-012	-11.294	-11.293	0.000
Fe(OH)2	1.521e-013	1.523e-013	-12.818	-12.817	0.000
FeH2PO4+	3.840e-014	3.580e-014	-13.416	-13.446	-0.030
Fe(OH)4-	2.056e-015	1.917e-015	-14.687	-14.717	-0.030
Fe(OH)3-	1.750e-015	1.631e-015	-14.757	-14.787	-0.030
Fe(OH)3	6.640e-016	6.646e-016	-15.178	-15.177	0.000

Fe(OH)2+	2.104e-016	1.962e-016	-15.677	-15.707	-0.030
Fe(HS)2	6.141e-018	6.147e-018	-17.212	-17.211	0.000
FeOH+2	2.718e-021	2.054e-021	-20.566	-20.687	-0.122
Fe(HS)3-	2.286e-024	2.131e-024	-23.641	-23.671	-0.030
FeF2+	2.013e-025	1.876e-025	-24.696	-24.727	-0.030
FeF+2	1.244e-025	9.398e-026	-24.905	-25.027	-0.122
FeF3	1.391e-026	1.392e-026	-25.857	-25.856	0.000
Fe+3	1.952e-027	1.098e-027	-26.710	-26.959	-0.250
FeSO4+	8.052e-028	7.507e-028	-27.094	-27.125	-0.030
FeHPO4+	5.906e-028	5.507e-028	-27.229	-27.259	-0.030
FeH2PO4+2	4.098e-029	3.097e-029	-28.387	-28.509	-0.122
Fe(SO4)2-	2.083e-030	1.942e-030	-29.681	-29.712	-0.030
FeCl+2	5.998e-031	4.533e-031	-30.222	-30.344	-0.122
FeCl2+	2.954e-035	2.755e-035	-34.530	-34.560	-0.030
Fe2(OH)2+4	3.482e-040	1.136e-040	-39.458	-39.945	-0.486
FeCl3	0.000e+000	0.000e+000	-40.427	-40.426	0.000
Fe3(OH)4+5	0.000e+000	0.000e+000	-52.582	-53.342	-0.760
H(0)	5.631e-011				
H2	2.816e-011	2.818e-011	-10.550	-10.550	0.000
K	6.150e-005				
K+	6.146e-005	5.727e-005	-4.211	-4.242	-0.031
KSO4-	3.557e-008	3.316e-008	-7.449	-7.479	-0.030
KHPO4-	2.251e-010	2.099e-010	-9.648	-9.678	-0.030
Mg	5.000e-005				
Mg+2	4.638e-005	3.538e-005	-4.334	-4.451	-0.118
MgCO3	1.461e-006	1.463e-006	-5.835	-5.835	0.000
MgHCO3+	1.416e-006	1.321e-006	-5.849	-5.879	-0.030
MgSO4	5.142e-007	5.147e-007	-6.289	-6.288	0.000
MgF+	1.257e-007	1.172e-007	-6.901	-6.931	-0.030
MgHPO4	4.926e-008	4.931e-008	-7.307	-7.307	0.000
MgPO4-	3.600e-008	3.357e-008	-7.444	-7.474	-0.030
MgOH+	1.758e-008	1.640e-008	-7.755	-7.785	-0.030
MgH2PO4+	1.298e-010	1.210e-010	-9.887	-9.917	-0.030
N	2.300e-005				
N2	1.127e-005	1.128e-005	-4.948	-4.948	0.000
NH4+	3.941e-007	3.666e-007	-6.404	-6.436	-0.031
NH3	6.121e-008	6.127e-008	-7.213	-7.213	0.000
NH4SO4-	3.625e-010	3.380e-010	-9.441	-9.471	-0.030
NO2-	0.000e+000	0.000e+000	-57.853	-57.884	-0.031
NO3-	0.000e+000	0.000e+000	-79.023	-79.054	-0.031
Na	3.550e-003				
Na+	3.540e-003	3.302e-003	-2.451	-2.481	-0.030
NaHCO3	5.949e-006	5.955e-006	-5.226	-5.225	0.000
NaCO3-	2.840e-006	2.648e-006	-5.547	-5.577	-0.030
NaSO4-	1.452e-006	1.354e-006	-5.838	-5.868	-0.030
NaHPO4-	1.298e-008	1.211e-008	-7.887	-7.917	-0.030
O(0)	0.000e+000				
O2	0.000e+000	0.000e+000	-71.281	-71.280	0.000
P	2.860e-006				
HPO4-2	2.512e-006	1.897e-006	-5.600	-5.722	-0.122
H2PO4-	1.152e-007	1.074e-007	-6.939	-6.969	-0.030
CaHPO4	7.713e-008	7.721e-008	-7.113	-7.112	0.000
CaPO4-	5.650e-008	5.268e-008	-7.248	-7.278	-0.030
MgHPO4	4.926e-008	4.931e-008	-7.307	-7.307	0.000
MgPO4-	3.600e-008	3.357e-008	-7.444	-7.474	-0.030
NaHPO4-	1.298e-008	1.211e-008	-7.887	-7.917	-0.030
PO4-3	4.595e-010	2.444e-010	-9.338	-9.612	-0.274
KHPO4-	2.251e-010	2.099e-010	-9.648	-9.678	-0.030
CaH2PO4+	2.158e-010	2.012e-010	-9.666	-9.696	-0.030
MgH2PO4+	1.298e-010	1.210e-010	-9.887	-9.917	-0.030
FeHPO4	5.087e-012	5.092e-012	-11.294	-11.293	0.000
H3PO4	5.137e-014	5.142e-014	-13.289	-13.289	0.000
FeH2PO4+	3.840e-014	3.580e-014	-13.416	-13.446	-0.030
HP2O7-3	2.426e-014	1.292e-014	-13.615	-13.889	-0.274
P2O7-4	4.548e-015	1.484e-015	-14.342	-14.829	-0.486
H2P2O7-2	2.648e-016	2.001e-016	-15.577	-15.699	-0.122
H3P2O7-	1.324e-022	1.234e-022	-21.878	-21.909	-0.030
FeHPO4+	5.906e-028	5.507e-028	-27.229	-27.259	-0.030
FeH2PO4+2	4.098e-029	3.097e-029	-28.387	-28.509	-0.122
H4P2O7	4.275e-030	4.279e-030	-29.369	-29.369	0.000
S	1.110e-004				
SO4-2	1.077e-004	8.179e-005	-3.968	-4.087	-0.120
NaSO4-	1.452e-006	1.354e-006	-5.838	-5.868	-0.030
CaSO4	1.247e-006	1.248e-006	-5.904	-5.904	0.000
MgSO4	5.142e-007	5.147e-007	-6.289	-6.288	0.000
KSO4-	3.557e-008	3.316e-008	-7.449	-7.479	-0.030
HS-	3.773e-009	3.515e-009	-8.423	-8.454	-0.031
NH4SO4-	3.625e-010	3.380e-010	-9.441	-9.471	-0.030
H2S	1.185e-010	1.186e-010	-9.926	-9.926	0.000
HSO4-	2.951e-011	2.752e-011	-10.530	-10.560	-0.030
FeSO4	9.887e-012	9.897e-012	-11.005	-11.005	0.000
SO3-2	1.727e-015	1.306e-015	-14.763	-14.884	-0.122
HSO3-	8.057e-017	7.513e-017	-16.094	-16.124	-0.030
S2O3-2	2.769e-017	2.093e-017	-16.558	-16.679	-0.122
Fe(HS)2	6.141e-018	6.147e-018	-17.212	-17.211	0.000
AlSO4+	4.115e-019	3.837e-019	-18.386	-18.416	-0.030
S-2	1.332e-019	1.011e-019	-18.876	-18.995	-0.120
Al(SO4)2-	2.674e-021	2.493e-021	-20.573	-20.603	-0.030
H2SO3	1.800e-023	1.802e-023	-22.745	-22.744	0.000
HS2O3-	3.028e-024	2.823e-024	-23.519	-23.549	-0.030
Fe(HS)3-	2.286e-024	2.131e-024	-23.641	-23.671	-0.030
FeSO4+	8.052e-028	7.507e-028	-27.094	-27.125	-0.030
Fe(SO4)2-	2.083e-030	1.942e-030	-29.681	-29.712	-0.030
Si	3.390e-004				
H4SiO4	3.230e-004	3.233e-004	-3.491	-3.490	0.000
H3SiO4-	1.549e-005	1.444e-005	-4.810	-4.840	-0.030
H5Si2O7-	2.569e-007	2.395e-007	-6.590	-6.621	-0.030
H4Si2O7-2	1.151e-009	8.695e-010	-8.939	-9.061	-0.122

```
H2SiO4-2          2.572e-010  1.944e-010   -9.590   -9.711   -0.122
H5Si3O10-3        4.804e-013  2.558e-013  -12.318  -12.592   -0.274
H3Si3O9-3         3.816e-014  2.033e-014  -13.418  -13.692   -0.274
H5Si4O12-3        1.557e-014  8.293e-015  -13.808  -14.081   -0.274
H4Si4O12-4        1.159e-016  3.782e-017  -15.936  -16.422   -0.486
SiF6-2            1.490e-033  1.126e-033  -32.827  -32.948   -0.122

-----------------------------Saturation indices-----------------------------

Phase              SI log IAP   log KT

AFWILLIT         -28.59    31.40    59.99   Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ALBITE            -0.00     3.54     3.54   Na1.000Al1.000Si3.000O8.000
ALMANDIN         -4.56    28.85    33.41   Al2.000Si3.000Fe3.000O12.000
ALUNITE         -15.31   -13.70     1.61   Al3.000S2.000K1.000H6.000O14.000
ANALCIM1          0.10     7.03     6.93   Si2.000Na1.000Al1.000H2.000O7.000
ANALCIM2          1.12     8.81     7.69   Si4.3Na1.7Al1.7H4.0O14.0
ANDRADIT         -4.28    50.82    55.10   Si3.000Ca3.000Fe2.000O12.000
ANHYDRIT         -3.83    -8.21    -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
ANNITE           2.71    25.04    22.33   Al1.000Si3.000K1.000Fe3.000H2.000O12.000
ANORTHHE         -4.82    21.88    26.70   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR         -4.49    21.88    26.37   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ARAGONIT         -0.15    -8.49    -8.34   C1.000Ca1.000O3.000
B(CR)           -59.87   -14.70    45.17   B1.000
B(G)           -151.15   -14.70   136.45   B1.000
B(OH)3(C         -3.53    -3.60    -0.07   B1.000H3.000O3.000
B2O3(CR)        -12.96    -7.21     5.75   B2.000O3.000
BEID-CA           2.47     8.01     5.55   Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-K            2.04     7.30     5.26   K0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG           2.45     7.96     5.51   Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-NA           2.28     7.88     5.60   Na0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BF3(G)          -38.90   -41.88    -2.98   B1.000F3.000
BRUCITE          -3.83    12.47    16.30   Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)            -3.93   -36.08   -32.15   C1.000
C(G)           -121.53   -36.08    85.45   C1.000
C2AH8            -18.99    41.65    60.64   Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4           -19.91    50.96    70.87   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1         -20.45    50.96    71.41   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13           -34.76    67.24   102.00   Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19           -34.74    67.24   101.98   Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)           -91.46     5.39    96.85   Ca1.000
CA(G)           -116.69     5.39   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2           -9.92    12.79    22.71   Ca(OH)2
CAH10            -11.56    28.86    40.42   Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CALCITE           -0.01    -8.49    -8.48   C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)          -19.91    12.79    32.70   Ca1.000O1.000
CH4              -6.95   -50.88   -43.93   C1.000H4.000
CHABAZ_a    0.50   0.48    -0.02   Si4.767Na0.817Al1.233K0.15Ca0.133H12.0O18.0
CHABAZ_d    1.06   2.26     1.21   Si4.65Na0.617Al1.35K0.333Ca0.2H12.0O18.0
CHALCEDO          -0.00    -3.49    -3.49   Si1.000O2.000
CL(G)            -51.07    -9.63    41.44   Cl1.000
CL2(G)           -65.23   -19.25    45.98   Cl2.000
CLINOC26 5.45   463.06 447.61   Mg26.000Al20.000Si24.000Fe8.000H64.000O144.000
CLINOC40    -3.35   543.48   546.83   Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
CLINOCH8   257.62   435.99   178.37   Mg8.000Al25.000Si20.000Fe26.000H64.000O144.000
CLINOP_a          0.70    -1.60    -2.29
Si4.867Na0.283Al1.133K0.384Ca0.233H8.67O16.335
CLINOP_d          1.42    -0.96    -2.38
  Si4.867Na0.067Al1.133K0.132Ca0.467H8.67O16.335
CLINOZOI         -4.40    39.21    43.61   Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CO(G)           -14.04   -28.68   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)           -3.13   -21.28   -18.15   C1.000O2.000
CSH(0.1)         -1.14    -2.21    -1.07   Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)         -1.50    -0.93     0.56   Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)         -1.88     0.35     2.23   Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)         -2.28     1.63     3.91   Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)         -2.69     2.91     5.60   Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)         -3.13     4.19     7.31   Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)         -3.58     5.47     9.04   Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)         -4.07     6.75    10.82   Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)       -4.27     7.17    11.44   Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)         -5.14     8.92    14.06   Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)         -5.21     9.30    14.51   Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)         -5.36     9.62    14.98   Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
CSH(1.2)         -5.55     9.89    15.44   Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)         -5.76    10.11    15.87   Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)         -5.97    10.30    16.27   Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)         -6.18    10.47    16.64   Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)         -6.37    10.61    16.99   Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)         -6.56    10.74    17.30   Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)         -6.74    10.85    17.60   Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833          -4.27     7.17    11.44   Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
DOLOMITE         -0.21   -17.30   -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
EPIDOTE,         -2.80    42.63    45.43   Al2.000Si3.000Ca2.000Fe1.000H1.000O13.000
EPISTILB          4.25     7.91     3.66   CaAl2Si6O16:5H2O
ERIONI_a          0.79     1.10     0.31   Si4.7Na0.567Al1.3K0.467Ca0.133H10.00O17.00
ERIONI_d          1.63     2.38     0.75   Si4.633Na0.2Al1.367K0.501Ca0.333H10.0O17.0
ETTRINGI        -28.44    29.81    58.24   Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
F(G)            -69.29    -9.06    60.23   F1.000
F2(G)          -116.76   -18.12    98.64   F2.000
FAYALITE         -7.03    12.02    19.05   Fe2.000Si1.000O4.000
FE2SI2O6         -2.08     8.52    10.60   Si2.000Fe2.000O6.000
FEOH3A           -6.47    -1.58     4.89   Fe1.000H3.000O3.000
FERROSIL         -3.16     4.26     7.42   Fe1.000Si1.000O3.000
FES              -5.25   -42.85   -37.60   Fe1.000S1.000
FLUORITE         -1.76   -12.72   -10.96   Ca1.000F2.000
FOSHAGIT        -25.16    40.71    65.87   Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
FRIEDEL_        -29.54    40.59    70.13   Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
```

GEHL_HY	-12.16	38.16	50.32	Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1	-11.00	38.16	49.16	Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT	-18.12	38.16	56.28	Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE	0.27	8.03	7.76	Al1.000H3.000O3.000
GOETHITE	0.16	11.45	11.29	Fe1.000H1.000O2.000
GREENALI	-6.31	16.28	22.59	Fe3.000Si2.000H4.000O9.000
GROSSUL	-14.73	43.97	58.70	Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1	-7.90	43.97	51.87	Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM	-3.61	-8.21	-4.60	Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE	-7.74	15.12	22.86	Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)	-39.31	-3.70	35.61	H1.000
H2(G)	-7.40	-7.40	0.00	H2.000
H2O(G)	-1.50	-0.00	1.50	H2.000O1.000
H2S(G)	-8.91	-50.61	-41.70	S1.000H2.000
HCL(G)	-19.62	-13.33	6.29	Cl1.000H1.000
HEMATITE	0.51	22.91	22.40	Fe2.000O3.000
HEULANDI	2.14	2.73	0.59	
Si4.667Na0.167Al1.333K0.066Ca0.55H8.67O16.335				
HF(G)	-13.83	-12.76	1.07	F1.000H1.000
HILLEBRA	-14.61	22.10	36.70	Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR	-22.92	54.45	77.37	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1	-27.14	54.45	81.58	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL	-7.84	65.94	73.78	Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
HYDROXAP	4.68	-41.00	-45.68	P3.000Ca5.000H1.000O13.000
ILLITE	2.94	11.90	8.97	Mg0.250Al2.300Si3.500K0.600H2.000O12.000
JENNITE	-52.39	94.21	146.60	Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
K(CR)	-48.97	0.52	49.49	K1.000
K(G)	-59.57	0.52	60.09	K1.000
K-FELDSP	2.01	1.78	-0.23	Si3.000K1.000Al1.000O8.000
KAOLINIT	0.00	-36.92	-36.92	Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE	-24.49	54.45	78.94	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONTI	1.26	14.90	13.63	Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LAWRENCI	-25.72	-18.90	6.82	Cl2.000Fe1.000
LEUCITE	-0.89	5.27	6.16	Si2.000K1.000Al1.000O6.000
LIME,	-19.91	12.79	32.70	Ca1.000O1.000
MACKINIT	-4.53	-42.85	-38.32	Fe1.000S1.000
MAGNESIO	-7.45	35.37	42.82	Mg1.000Fe2.000O4.000
MAGNETIT	0.01	30.66	30.65	Fe3.000O4.000
MG2SI2O6	-5.30	17.96	23.26	Mg2.000Si2.000O6.000
MICROCLI	-0.00	1.78	1.78	Al1.000Si3.000K1.000O8.000
MOLYSITE	-53.09	-28.53	24.56	Cl3.000Fe1.000
MONOSULF	-27.60	46.23	73.83	Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA	3.11	5.68	2.56	Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-K	2.89	4.96	2.07	Mg0.330Al1.670Si4.000K0.330H2.000O12.000
MONT-MG	3.15	5.62	2.47	Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
MONT-NA	3.03	5.54	2.51	Mg0.330Al1.670Si4.000Na0.330H2.000O12.000
MORDENIT	0.39	-3.50	-3.89	Si5Na0.35Al1.0K0.15Ca0.25H7.334O15.667
MUSCOVIT	3.24	17.84	14.60	Al3.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
N(G)	-80.59	-106.01	-25.42	N1.000
N2(G)	-1.57	-212.03	-210.46	N2.000
NA(CR)	-43.61	2.28	45.89	Na1.000
NA(G)	-57.10	2.28	59.38	Na1.000
NH3(G)	-9.01	-117.11	-108.10	N1.000H3.000
NONT-CA	0.30	-11.21	-11.51	Ca0.165Al0.330Si3.670Fe2.000H2.000O12.000
NONT-K	0.06	-11.93	-11.98	K0.330Al0.330Si3.670Fe2.000H2.000O12.000
NONT-MG	0.23	-11.26	-11.49	Mg0.165Al0.330Si3.670Fe2.000H2.000O12.000
NONT-NA	0.15	-11.34	-11.50	Na0.330Al0.330Si3.670Fe2.000H2.000O12.000
O(G)	-74.75	7.40	82.15	O1.000
O2(G)	-68.29	14.80	83.09	O2.000
OKENITE	-4.50	5.81	10.32	Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
ORTHOCLA	0.92	1.78	0.86	Al1.000Si3.000K1.000O8.000
P(AM)	-66.97	-53.49	13.48	P1.000
P(CR)	-66.97	-53.49	13.48	P1.000
P(G)	-116.04	-53.49	62.55	P1.000
P2(G)	-152.06	-106.98	45.08	P2.000
P4(G)	-272.16	-213.97	58.19	P4.000
PARAGONI	0.73	19.60	18.87	Na1.000Al3.000Si3.000H2.000O12.000
PERICLAS	-9.11	12.47	21.58	Mg1.000O1.000
PHILLI_a	0.76	2.13	1.37	Si3.05Na0.4Al0.95K0.35Ca0.1H6.0O11.0
PHILLI_d	1.34	2.21	0.88	Si3.075Na0.175Al0.925K0.15Ca0.3H6.0O11.0
PHLOGOPI	2.85	39.18	36.33	Mg3.000Al1.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
PLOMBIER	-20.72	43.03	63.75	Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN	-9.92	12.79	22.71	Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1	-9.76	12.79	22.55	Ca1.000H2.000O2.000
PYRITE	-0.11	-86.06	-85.95	S2.000Fe1.000
PYROPHYL	1.64	2.10	0.46	Si4.000Al2.000H2.000O12.000
PYRRHOTI	-21.91	-343.19	-321.28	S8.000Fe7.000
QUARTZ	0.29	-3.49	-3.78	Si1.000O2.000
RIVERSID	-25.95	43.03	68.98	Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)	-7.37	-43.21	-35.84	S1.000
S(G)	-48.84	-43.21	5.63	S1.000
S2(G)	-28.70	-86.41	-57.71	S2.000
SAPON-CA	3.13	29.36	26.23	Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-K	2.70	28.64	25.94	Mg3.000Al0.330Si3.670K0.330H2.000O12.000
SAPON-MG	3.12	29.30	26.19	Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SAPON-NA	2.94	29.22	26.28	Mg3.000Al0.330Si3.670Na0.330H2.000O12.000
SCOLECIT	4.98	18.39	13.41	Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000
SEP	-4.32	-41.53	-37.21	Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT	-1.41	28.93	30.35	Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)	-81.22	-18.29	62.93	Si1.000
SI(G)	-152.26	-18.29	133.97	Si1.000
SIDERITE	-2.96	-13.53	-10.57	Fe1.000C1.000O3.000
SIF4(G)	-39.20	-54.53	-15.33	Si1.000F4.000
SIL	-0.47	-3.49	-3.02	Si1.000H2.000O3.000
SIL(AM)1	-0.78	-3.49	-2.71	Si1.000O2.000
SILI(AM)	-0.85	-3.49	-2.64	Si1.000O2.000
SILICA	-4.72	-7.19	-2.47	Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)	-0.85	-3.49	-2.64	Si1.000O2.000

SIO2(QUA	0.51	-3.49	-4.00	Si1.000O2.000
SO2(G)	-23.09	-28.41	-5.32	S1.000O2.000
STILBITE	3.28	8.79	5.51	Ca0.667Na0.333Al1.667Si4.333O12:4.666H2O
TALC	2.38	23.45	21.07	Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR	-22.48	43.03	65.51	Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,	-0.24	12.57	12.81	Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLIT	2.31	60.01	57.70	Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
VIVIANIT	-10.73	-46.73	-36.00	Fe3.000P2.000H16.000O16.000
WAIRAKIT	-3.18	14.90	18.08	CaAl2Si4O12:2H2O
XONOTLIT	-35.90	55.83	91.73	Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA	3.85	7.92	4.07	CaAl2Si6O16:4H2O

Initial solution 1. FRHP

----------Solution composition----------

Elements	Molality	Moles
Al	3.430e-007	3.430e-007
B	2.930e-004	2.930e-004
C	3.540e-003	3.540e-003
Ca	1.090e-004	1.090e-004
Cl	1.460e-005	1.460e-005
F	5.400e-005	5.400e-005
Fe	9.730e-010	9.730e-010
K	6.150e-005	6.150e-005
Mg	5.000e-005	5.000e-005
N	2.300e-005	2.300e-005
Na	3.550e-003	3.550e-003
P	2.860e-006	2.860e-006
S	1.110e-004	1.110e-004
Si	3.390e-004	3.390e-004

----------Description of solution----------

pH = 8.460
pe = -4.760
Activity of water = 1.000
Ionic strength = 4.214e-003
Mass of water (kg) = 1.000e+000
Total alkalinity (eq/kg) = -3.576e-003
Total CO2 (mol/kg) = 3.540e-003
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = -1.204e-005
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -0.15
Iterations = 12
Total H = 1.110181e+002
Total O = 5.551951e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	3.095e-006	2.884e-006	-5.509	-5.540	-0.031
H+	3.696e-009	3.467e-009	-8.432	-8.460	-0.028
H2O	5.551e+001	9.999e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	3.430e-007				
Al(OH)4-	3.322e-007	3.098e-007	-6.479	-6.509	-0.030
Al(OH)3	1.073e-008	1.074e-008	-7.969	-7.969	0.000
Al(OH)2+	3.174e-011	2.959e-011	-10.498	-10.529	-0.030
AlF2+	6.796e-014	6.337e-014	-13.168	-13.198	-0.030
AlF3	5.912e-014	5.918e-014	-13.228	-13.228	0.000
AlOH+2	1.749e-014	1.322e-014	-13.757	-13.879	-0.122
AlF+2	3.042e-015	2.299e-015	-14.517	-14.638	-0.122
AlF4-	1.595e-015	1.487e-015	-14.797	-14.828	-0.030
Al+3	7.961e-018	4.480e-018	-17.099	-17.349	-0.250
AlSO4+	4.115e-019	3.837e-019	-18.386	-18.416	-0.030
Al(SO4)2-	2.674e-021	2.493e-021	-20.573	-20.603	-0.030
B	2.930e-004				
B(OH)3	2.487e-004	2.489e-004	-3.604	-3.604	0.000
H2BO3-	4.431e-005	4.131e-005	-4.354	-4.384	-0.030
FB(OH)3-	5.330e-009	4.970e-009	-8.273	-8.304	-0.030
F2B(OH)2-	9.888e-014	9.220e-014	-13.005	-13.035	-0.030
F3BOH-	1.877e-020	1.750e-020	-19.727	-19.757	-0.030
BF4-	1.324e-026	1.234e-026	-25.878	-25.909	-0.030
C	3.540e-003				
HCO3-	3.437e-003	3.211e-003	-2.464	-2.493	-0.030
CO3-2	5.684e-005	4.325e-005	-4.245	-4.364	-0.119
CO2	2.493e-005	2.495e-005	-4.603	-4.603	0.000
NaHCO	5.949e-006	5.955e-006	-5.226	-5.225	0.000
CaCO3	5.932e-006	5.937e-006	-5.227	-5.226	0.000
CaHCO	3.174e-006	2.964e-006	-5.498	-5.528	-0.030
NaCO3-	2.840e-006	2.648e-006	-5.547	-5.577	-0.030
MgCO3	1.461e-006	1.463e-006	-5.835	-5.835	0.000
MgHCO3	1.416e-006	1.321e-006	-5.849	-5.879	-0.030
CH4	1.537e-010	1.539e-010	-9.813	-9.813	0.000
Ca	1.090e-004				
Ca+2	9.847e-005	7.490e-005	-4.007	-4.125	-0.119
CaCO3	5.932e-006	5.937e-006	-5.227	-5.226	0.000
CaHCO3+	3.174e-006	2.964e-006	-5.498	-5.528	-0.030
CaSO4	1.247e-006	1.248e-006	-5.904	-5.904	0.000
CaHPO4	7.713e-008	7.721e-008	-7.113	-7.112	0.000
CaPO4-	5.650e-008	5.268e-008	-7.248	-7.278	-0.030
CaF+	3.509e-008	3.272e-008	-7.455	-7.485	-0.030
CaOH+	5.846e-009	5.451e-009	-8.233	-8.264	-0.030
CaH2PO4+	2.158e-010	2.012e-010	-9.666	-9.696	-0.030
Cl	1.460e-005				

Cl-	1.460e-005	1.360e-005	-4.836	-4.866	-0.031
FeCl+2	5.998e-031	4.533e-031	-30.222	-30.344	-0.122
FeCl2+	2.954e-035	2.755e-035	-34.530	-34.560	-0.030
FeCl3	0.000e+000	0.000e+000	-40.427	-40.426	0.000
ClO-	0.000e+000	0.000e+000	-55.371	-55.401	-0.030
ClOH	0.000e+000	0.000e+000	-56.442	-56.441	0.000
ClO2-	0.000e+000	0.000e+000	-97.913	-97.943	-0.030
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-104.443	-104.442	0.000
ClO3-	0.000e+000	0.000e+000	-128.878	-128.909	-0.030
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-163.027	-163.058	-0.030
F	5.400e-005				
F-	5.383e-005	5.015e-005	-4.269	-4.300	-0.031
MgF+	1.257e-007	1.172e-007	-6.901	-6.931	-0.030
CaF+	3.509e-008	3.272e-008	-7.455	-7.485	-0.030
FB(OH)3-	5.330e-009	4.970e-009	-8.273	-8.304	-0.030
HF	2.629e-010	2.632e-010	-9.580	-9.580	0.000
F2B(OH)2-	9.888e-014	9.220e-014	-13.005	-13.035	-0.030
AlF2+	6.796e-014	6.337e-014	-13.168	-13.198	-0.030
AlF3	5.912e-014	5.918e-014	-13.228	-13.228	0.000
HF2-	3.899e-014	3.636e-014	-13.409	-13.439	-0.030
AlF+2	3.042e-015	2.299e-015	-14.517	-14.638	-0.122
AlF4-	1.595e-015	1.487e-015	-14.797	-14.828	-0.030
F3BOH-	1.877e-020	1.750e-020	-19.727	-19.757	-0.030
FeF2+	2.013e-025	1.876e-025	-24.696	-24.727	-0.030
FeF+2	1.244e-025	9.398e-026	-24.905	-25.027	-0.122
FeF3	1.391e-026	1.392e-026	-25.857	-25.856	0.000
BF4-	1.324e-026	1.234e-026	-25.878	-25.909	-0.030
SiF6-2	1.490e-033	1.126e-033	-32.827	-32.948	-0.122
Fe	9.730e-010				
Fe+2	8.913e-010	6.804e-010	-9.050	-9.167	-0.117
FeOH+	6.654e-011	6.204e-011	-10.177	-10.207	-0.030
FeSO4	9.887e-012	9.897e-012	-11.005	-11.005	0.000
FeHPO4	5.087e-012	5.092e-012	-11.294	-11.293	0.000
Fe(OH)2	1.521e-013	1.523e-013	-12.818	-12.817	0.000
FeH2PO4+	3.840e-014	3.580e-014	-13.416	-13.446	-0.030
Fe(OH)4-	2.056e-015	1.917e-015	-14.687	-14.717	-0.030
Fe(OH)3-	1.750e-015	1.631e-015	-14.757	-14.787	-0.030
Fe(OH)3	6.640e-016	6.646e-016	-15.178	-15.177	0.000
Fe(OH)2+	2.104e-016	1.962e-016	-15.677	-15.707	-0.030
Fe(HS)2	6.141e-018	6.147e-018	-17.212	-17.211	0.000
FeOH+2	2.718e-021	2.054e-021	-20.566	-20.687	-0.122
Fe(HS)3-	2.286e-024	2.131e-024	-23.641	-23.671	-0.030
FeF2+	2.013e-025	1.876e-025	-24.696	-24.727	-0.030
FeF+2	1.244e-025	9.398e-026	-24.905	-25.027	-0.122
FeF3	1.391e-026	1.392e-026	-25.857	-25.856	0.000
Fe+3	1.952e-027	1.098e-027	-26.710	-26.959	-0.250
FeSO4+	8.052e-028	7.507e-028	-27.094	-27.125	-0.030
FeHPO4+	5.906e-028	5.507e-028	-27.229	-27.259	-0.030
FeH2PO4+2	4.098e-029	3.097e-029	-28.387	-28.509	-0.122
Fe(SO4)2-	2.083e-030	1.942e-030	-29.681	-29.712	-0.030
FeCl+2	5.998e-031	4.533e-031	-30.222	-30.344	-0.122
FeCl2+	2.954e-035	2.755e-035	-34.530	-34.560	-0.030
Fe2(OH)2+4	3.482e-040	1.136e-040	-39.458	-39.945	-0.486
FeCl3	0.000e+000	0.000e+000	-40.427	-40.426	0.000
Fe3(OH)4+5	0.000e+000	0.000e+000	-52.582	-53.342	-0.760
H(0)	5.631e-011				
H2	2.816e-011	2.818e-011	-10.550	-10.550	0.000
K	6.150e-005				
K+	6.146e-005	5.727e-005	-4.211	-4.242	-0.031
KSO4-	3.557e-008	3.316e-008	-7.449	-7.479	-0.030
KHPO4-	2.251e-010	2.099e-010	-9.648	-9.678	-0.030
Mg	5.000e-005				
Mg+2	4.638e-005	3.538e-005	-4.334	-4.451	-0.118
MgCO3	1.461e-006	1.463e-006	-5.835	-5.835	0.000
MgHCO3+	1.416e-006	1.321e-006	-5.849	-5.879	-0.030
MgSO4	5.142e-007	5.147e-007	-6.289	-6.288	0.000
MgF+	1.257e-007	1.172e-007	-6.901	-6.931	-0.030
MgHPO4	4.926e-008	4.931e-008	-7.307	-7.307	0.000
MgPO4-	3.600e-008	3.357e-008	-7.444	-7.474	-0.030
MgOH+	1.758e-008	1.640e-008	-7.755	-7.785	-0.030
MgH2PO4+	1.298e-010	1.210e-010	-9.887	-9.917	-0.030
N	2.300e-005				
N2	1.127e-005	1.128e-005	-4.948	-4.948	0.000
NH4+	3.941e-007	3.666e-007	-6.404	-6.436	-0.031
NH3	6.121e-008	6.127e-008	-7.213	-7.213	0.000
NH4SO4-	3.625e-010	3.380e-010	-9.441	-9.471	-0.030
NO2-	0.000e+000	0.000e+000	-57.853	-57.884	-0.031
NO3-	0.000e+000	0.000e+000	-79.023	-79.054	-0.031
Na	3.550e-003				
Na+	3.540e-003	3.302e-003	-2.451	-2.481	-0.030
NaHCO3	5.949e-006	5.955e-006	-5.226	-5.225	0.000
NaCO3-	2.840e-006	2.648e-006	-5.547	-5.577	-0.030
NaSO4-	1.452e-006	1.354e-006	-5.838	-5.868	-0.030
NaHPO4-	1.298e-008	1.211e-008	-7.887	-7.917	-0.030
O(0)	0.000e+000				
O2	0.000e+000	0.000e+000	-71.281	-71.280	0.000
P	2.860e-006				
HPO4-2	2.512e-006	1.897e-006	-5.600	-5.722	-0.122
H2PO4-	1.152e-007	1.074e-007	-6.939	-6.969	-0.030
CaHPO4	7.713e-008	7.721e-008	-7.113	-7.112	0.000
CaPO4-	5.650e-008	5.268e-008	-7.248	-7.278	-0.030
MgHPO4	4.926e-008	4.931e-008	-7.307	-7.307	0.000
MgPO4-	3.600e-008	3.357e-008	-7.444	-7.474	-0.030
NaHPO4-	1.298e-008	1.211e-008	-7.887	-7.917	-0.030
PO4-3	4.595e-010	2.444e-010	-9.338	-9.612	-0.274
KHPO4-	2.251e-010	2.099e-010	-9.648	-9.678	-0.030
CaH2PO4+	2.158e-010	2.012e-010	-9.666	-9.696	-0.030
MgH2PO4+	1.298e-010	1.210e-010	-9.887	-9.917	-0.030

```
    FeHPO4          5.087e-012  5.092e-012  -11.294  -11.293   0.000
    H3PO4           5.137e-014  5.142e-014  -13.289  -13.289   0.000
    FeH2PO4+        3.840e-014  3.580e-014  -13.416  -13.446  -0.030
    HP2O7-3         2.426e-014  1.292e-014  -13.615  -13.889  -0.274
    P2O7-4          4.548e-015  1.484e-015  -14.342  -14.829  -0.486
    H2P2O7-2        2.648e-016  2.001e-016  -15.577  -15.699  -0.122
    H3P2O7-         1.324e-022  1.234e-022  -21.878  -21.909  -0.030
    FeHPO4+         5.906e-028  5.507e-028  -27.229  -27.259  -0.030
    FeH2PO4+2       4.098e-029  3.097e-029  -28.387  -28.509  -0.122
    H4P2O7          4.275e-030  4.279e-030  -29.369  -29.369   0.000
S               1.110e-004
    SO4-2           1.077e-004  8.179e-005   -3.968   -4.087  -0.120
    NaSO4-          1.452e-006  1.354e-006   -5.838   -5.868  -0.030
    CaSO4           1.247e-006  1.248e-006   -5.904   -5.904   0.000
    MgSO4           5.142e-007  5.147e-007   -6.289   -6.288   0.000
    KSO4-           3.557e-008  3.316e-008   -7.449   -7.479  -0.030
    HS-             3.773e-009  3.515e-009   -8.423   -8.454  -0.031
    NH4SO4-         3.625e-010  3.380e-010   -9.441   -9.471  -0.030
    H2S             1.185e-010  1.186e-010   -9.926   -9.926   0.000
    HSO4-           2.951e-011  2.752e-011  -10.530  -10.560  -0.030
    FeSO4           9.887e-012  9.897e-012  -11.005  -11.005   0.000
    SO3-2           1.727e-015  1.306e-015  -14.763  -14.884  -0.122
    HSO3-           8.057e-017  7.513e-017  -16.094  -16.124  -0.030
    S2O3-2          2.769e-017  2.093e-017  -16.558  -16.679  -0.122
    Fe(HS)2         6.141e-018  6.147e-018  -17.212  -17.211   0.000
    AlSO4+          4.115e-019  3.837e-019  -18.386  -18.416  -0.030
    S-2             1.332e-019  1.011e-019  -18.876  -18.995  -0.120
    Al(SO4)2-       2.674e-021  2.493e-021  -20.573  -20.603  -0.030
    H2SO3           1.800e-023  1.802e-023  -22.745  -22.744   0.000
    HS2O3-          3.028e-024  2.823e-024  -23.519  -23.549  -0.030
    Fe(HS)3-        2.286e-024  2.131e-024  -23.641  -23.671  -0.030
    FeSO4+          8.052e-028  7.507e-028  -27.094  -27.125  -0.030
    Fe(SO4)2-       2.083e-030  1.942e-030  -29.681  -29.712  -0.030
Si              3.390e-004
    H4SiO4          3.230e-004  3.233e-004   -3.491   -3.490   0.000
    H3SiO4-         1.549e-005  1.444e-005   -4.810   -4.840  -0.030
    H5Si2O7-        2.569e-007  2.395e-007   -6.590   -6.621  -0.030
    H4Si2O7-2       1.151e-009  8.695e-010   -8.939   -9.061  -0.122
    H2SiO4-2        2.572e-010  1.944e-010   -9.590   -9.711  -0.122
    H5Si3O10-3      4.804e-013  2.558e-013  -12.318  -12.592  -0.274
    H3Si3O9-3       3.816e-014  2.033e-014  -13.418  -13.692  -0.274
    H5Si4O12-3      1.557e-014  8.293e-015  -13.808  -14.081  -0.274
    H4Si4O12-4      1.159e-016  3.782e-017  -15.936  -16.422  -0.486
    SiF6-2          1.490e-033  1.126e-033  -32.827  -32.948  -0.122

-----------------------------Saturation indices-------------------------------

Phase                 SI log IAP   log KT

AFWILLIT          -28.59   31.40   59.99   Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ALBITE             -0.00    3.54    3.54   Na1.000Al1.000Si3.000O8.000
ALMANDIN           -4.56   28.85   33.41   Al2.000Si3.000Fe3.000O12.000
ALUNITE           -15.31  -13.70    1.61   Al3.000S2.000K1.000H6.000O14.000
ANALCIM1            0.10    7.03    6.93   Si2.000Na1.000Al1.000H2.000O7.000
ANALCIM2            1.12    8.81    7.69   Si4.3Na1.7Al1.7H4.0O14.0
ANDRADIT           -4.28   50.82   55.10   Si3.000Ca3.000Fe2.000O12.000
ANHYDRIT           -3.83   -8.21   -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
ANNITE              2.71   25.04   22.33   Al1.000Si3.000K1.000Fe3.000H2.000O12.000
ANORTHHE           -4.82   21.88   26.70   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR           -4.49   21.88   26.37   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ARAGONIT           -0.15   -8.49   -8.34   C1.000Ca1.000O3.000
B(CR)             -59.87  -14.70   45.17   B1.000
B(G)             -151.15  -14.70  136.45   B1.000
B(OH)3(C           -3.53   -3.60   -0.07   B1.000H3.000O3.000
B2O3(CR)          -12.96   -7.21    5.75   B2.000O3.000
BEID-CA             2.47    8.01    5.55   Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-K              2.04    7.30    5.26   K0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG             2.45    7.96    5.51   Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-NA             2.28    7.88    5.60   Na0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BF3(G)            -38.90  -41.88   -2.98   B1.000F3.000
BRUCITE            -3.83   12.47   16.30   Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)              -3.93  -36.08  -32.15   C1.000
C(G)             -121.53  -36.08   85.45   C1.000
C2AH8              -18.99   41.65   60.64   Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4             -19.91   50.96   70.87   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1           -20.45   50.96   71.41   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13             -34.76   67.24  102.00   Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19             -34.74   67.24  101.98   Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)             -91.46    5.39   96.85   Ca1.000
CA(G)             -116.69    5.39  122.08   Ca1.000
Ca(OH)2            -9.92   12.79   22.71   Ca(OH)2
CAH10              -11.56   28.86   40.42   Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CALCITE            -0.01   -8.49   -8.48   C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)            -19.91   12.79   32.70   Ca1.000O1.000
CH4                 -6.95  -50.88  -43.93   C1.000H4.000
CHABAZ_a             0.50    0.48   -0.02 Si4.767Na0.817Al1.233K0.15Ca0.133H12.0O18.0
CHABAZ_d             1.06    2.26    1.21   Si4.65Na0.617Al1.35K0.333Ca0.2H12.0O18.0
CHALCEDO            -0.00   -3.49   -3.49   Si1.000O2.000
CL(G)              -51.07   -9.63   41.44   Cl1.000
CL2(G)             -65.23  -19.25   45.98   Cl2.000
CLINOC26            15.45  463.06  447.61
  Mg26.000Al20.000Si24.000Fe8.000H64.000O144.000
CLINOC40            -3.35  543.48  546.83   Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
CLINOCH8           257.62  435.99  178.37
  Mg8.000Al25.000Si20.000Fe26.000H64.000O144.000
CLINOP_a             0.70   -1.60   -2.29
  Si4.867Na0.283Al1.133K0.384Ca0.233H8.67O16.335
CLINOP_d             1.42   -0.96   -2.38
```

Si4.867Na0.067Al1.133K0.132Ca0.467H8.67O16.335				
CLINOZOI	-4.40	39.21	43.61	Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CO(G)	-14.04	-28.68	-14.64	C1.000O1.000
CO2(G)	-3.13	-21.28	-18.15	C1.000O2.000
CSH(0.1)	-1.14	-2.21	-1.07	Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)	-1.50	-0.93	0.56	Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)	-1.88	0.35	2.23	Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)	-2.28	1.63	3.91	Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)	-2.69	2.91	5.60	Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)	-3.13	4.19	7.31	Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)	-3.58	5.47	9.04	Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)	-4.07	6.75	10.82	Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)	-4.27	7.17	11.44	Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)	-5.14	8.92	14.06	Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)	-5.21	9.30	14.51	Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)	-5.36	9.62	14.98	Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
CSH(1.2)	-5.55	9.89	15.44	Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)	-5.76	10.11	15.87	Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)	-5.97	10.30	16.27	Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)	-6.18	10.47	16.64	Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)	-6.37	10.61	16.99	Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)	-6.56	10.74	17.30	Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)	-6.74	10.85	17.60	Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833	-4.27	7.17	11.44	Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
DOLOMITE	-0.21	-17.30	-17.09	Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
EPIDOTE,	-2.80	42.63	45.43	Al2.000Si3.000Ca2.000Fe1.000H1.000O13.000
EPISTILB	4.25	7.91	3.66	CaAl2Si6O16:5H2O
ERIONI_a	0.79	1.10	0.31	Si4.7Na0.567Al1.3K0.467Ca0.133H10.00O17.00
ERIONI_d	1.63	2.38	0.75	Si4.633Na0.2Al1.367K0.501Ca0.333H10.0O17.0
ETTRINGI	-28.44	29.81	58.24	Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
F(G)	-69.29	-9.06	60.23	F1.000
F2(G)	-116.76	-18.12	98.64	F2.000
FAYALITE	-7.03	12.02	19.05	Fe2.000Si1.000O4.000
FE2SI2O6	-2.08	8.52	10.60	Si2.000Fe2.000O6.000
FEOH3A	-6.47	-1.58	4.89	Fe1.000H3.000O3.000
FERROSIL	-3.16	4.26	7.42	Fe1.000Si1.000O3.000
FES	-5.25	-42.85	-37.60	Fe1.000S1.000
FLUORITE	-1.76	-12.72	-10.96	Ca1.000F2.000
FOSHAGIT	-25.16	40.71	65.87	Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
FRIEDEL_	-29.54	40.59	70.13	Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GEHL_HY	-12.16	38.16	50.32	Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1	-11.00	38.16	49.16	Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT	-18.12	38.16	56.28	Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE	0.27	8.03	7.76	Al1.000H3.000O3.000
GOETHITE	0.16	11.45	11.29	Fe1.000H1.000O2.000
GREENALI	-6.31	16.28	22.59	Fe3.000Si2.000H4.000O9.000
GROSSUL	-14.73	43.97	58.70	Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1	-7.90	43.97	51.87	Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM	-3.61	-8.21	-4.60	Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE	-7.74	15.12	22.86	Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)	-39.31	-3.70	35.61	H1.000
H2(G)	-7.40	-7.40	0.00	H2.000
H2O(G)	-1.50	-0.00	1.50	H2.000O1.000
H2S(G)	-8.91	-50.61	-41.70	S1.000H2.000
HCL(G)	-19.62	-13.33	6.29	Cl1.000H1.000
HEMATITE	0.51	22.91	22.40	Fe2.000O3.000
HEULANDI	2.14	2.73	0.59	
Si4.667Na0.167Al1.333K0.066Ca0.55H8.67O16.335				
HF(G)	-13.83	-12.76	1.07	F1.000H1.000
HILLEBRA	-14.61	22.10	36.70	Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR	-22.92	54.45	77.37	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1	-27.14	54.45	81.58	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL	-7.84	65.94	73.78	Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
HYDROXAP	4.68	-41.00	-45.68	P3.000Ca5.000H1.000O13.000
ILLITE	2.94	11.90	8.97	Mg0.250Al2.300Si3.500K0.600H2.000O12.000
JENNITE	-52.39	94.21	146.60	Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
K(CR)	-48.97	0.52	49.49	K1.000
K(G)	-59.57	0.52	60.09	K1.000
K-FELDSP	2.01	1.78	-0.23	Si3.000K1.000Al1.000O8.000
KAOLINIT	0.00	-36.92	-36.92	Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE	-24.49	54.45	78.94	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONTI	1.26	14.90	13.63	Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LAWRENCI	-25.72	-18.90	6.82	Cl2.000Fe1.000
LEUCITE	-0.89	5.27	6.16	Si2.000K1.000Al1.000O6.000
LIME,	-19.91	12.79	32.70	Ca1.000O1.000
MACKINIT	-4.53	-42.85	-38.32	Fe1.000S1.000
MAGNESIO	-7.45	35.37	42.82	Mg1.000Fe2.000O4.000
MAGNETIT	0.01	30.66	30.65	Fe3.000O4.000
MG2SI2O6	-5.30	17.96	23.26	Mg2.000Si2.000O6.000
MICROCLI	-0.00	1.78	1.78	Al1.000Si3.000K1.000O8.000
MOLYSITE	-53.09	-28.53	24.56	Cl3.000Fe1.000
MONOSULF	-27.60	46.23	73.83	Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA	3.11	5.68	2.56	Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-K	2.89	4.96	2.07	Mg0.330Al1.670Si4.000K0.330H2.000O12.000
MONT-MG	3.15	5.62	2.47	Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
MONT-NA	3.03	5.54	2.51	Mg0.330Al1.670Si4.000Na0.330H2.000O12.000
MORDENIT	0.39	-3.50	-3.89	Si5Na0.35Al1.0K0.15Ca0.25H7.334O15.667
MUSCOVIT	3.24	17.84	14.60	Al3.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
N(G)	-80.59	-106.01	-25.42	N1.000
N2(G)	-1.57	-212.03	-210.46	N2.000
NA(CR)	-43.61	2.28	45.89	Na1.000
NA(G)	-57.10	2.28	59.38	Na1.000
NH3(G)	-9.01	-117.11	-108.10	N1.000H3.000
NONT-CA	0.30	-11.21	-11.51	Ca0.165Al0.330Si3.670Fe2.000H2.000O12.000
NONT-K	0.06	-11.93	-11.98	K0.330Al0.330Si3.670Fe2.000H2.000O12.000
NONT-MG	0.23	-11.26	-11.49	Mg0.165Al0.330Si3.670Fe2.000H2.000O12.000
NONT-NA	0.15	-11.34	-11.50	Na0.330Al0.330Si3.670Fe2.000H2.000O12.000
O(G)	-74.75	7.40	82.15	O1.000

```
O2(G)          -68.29    14.80    83.09   O2.000
OKENITE         -4.50     5.81    10.32   Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
ORTHOCLA         0.92     1.78     0.86   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
P(AM)          -66.97   -53.49    13.48   P1.000
P(CR)          -66.97   -53.49    13.48   P1.000
P(G)          -116.04   -53.49    62.55   P1.000
P2(G)         -152.06  -106.98    45.08   P2.000
P4(G)         -272.16  -213.97    58.19   P4.000
PARAGONI         0.73    19.60    18.87   Na1.000Al3.000Si3.000H2.000O12.000
PERICLAS        -9.11    12.47    21.58   Mg1.000O1.000
PHILLI_a         0.76     2.13     1.37   Si3.05Na0.4Al0.95K0.35Ca0.1H6.0O11.0
PHILLI_d         1.34     2.21     0.88   Si3.075Na0.175Al0.925K0.15Ca0.3H6.0O11.0
PHLOGOPI         2.85    39.18    36.33   Mg3.000Al1.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
PLOMBIER       -20.72    43.03    63.75   Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN         -9.92    12.79    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1        -9.76    12.79    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
PYRITE          -0.11   -86.06   -85.95   S2.000Fe1.000
PYROPHYL         1.64     2.10     0.46   Si4.000Al2.000H2.000O12.000
PYRRHOTI       -21.91  -343.19  -321.28   S8.000Fe7.000
QUARTZ           0.29    -3.49    -3.78   Si1.000O2.000
RIVERSID       -25.95    43.03    68.98   Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)           -7.37   -43.21   -35.84   S1.000
S(G)           -48.84   -43.21     5.63   S1.000
S2(G)          -28.70   -86.41   -57.71   S2.000
SAPON-CA         3.13    29.36    26.23   Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-K          2.70    28.64    25.94   Mg3.000Al0.330Si3.670K0.330H2.000O12.000
SAPON-MG         3.12    29.30    26.19   Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SAPON-NA         2.94    29.22    26.28   Mg3.000Al0.330Si3.670Na0.330H2.000O12.000
SCOLECIT         4.98    18.39    13.41   Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000
SEP             -4.32   -41.53   -37.21   Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT        -1.41    28.93    30.35   Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)         -81.22   -18.29    62.93   Si1.000
SI(G)         -152.26   -18.29   133.97   Si1.000
SIDERITE        -2.96   -13.53   -10.57   Fe1.000C1.000O3.000
SIF4(G)        -39.20   -54.53   -15.33   Si1.000F4.000
SIL             -0.47    -3.49    -3.02   Si1.000H2.000O3.000
SIL(AM)1        -0.78    -3.49    -2.71   Si1.000O2.000
SILI(AM)        -0.85    -3.49    -2.64   Si1.000O2.000
SILICA          -4.72    -7.19    -2.47   Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)        -0.85    -3.49    -2.64   Si1.000O2.000
SIO2(QUA         0.51    -3.49    -4.00   Si1.000O2.000
SO2(G)         -23.09   -28.41    -5.32   S1.000O2.000
STILBITE         3.28     8.79     5.51   Ca0.667Na0.333Al1.667Si4.333O12:4.666H2O
TALC             2.38    23.45    21.07   Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR       -22.48    43.03    65.51   Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,          -0.24    12.57    12.81   Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLIT         2.31    60.01    57.70   Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
VIVIANIT       -10.73   -46.73   -36.00   Fe3.000P2.000H16.000O16.000
WAIRAKIT        -3.18    14.90    18.08   CaAl2Si4O12:2H2O
XONOTLIT       -35.90    55.83    91.73   Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA         3.85     7.92     4.07   CaAl2Si6O16:4H2O

-----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
-----------------------------------------

Reaction step 1.

Using solution 0.          FRHP
Using pure phase assemblage 1.

-------------------------------Phase assemblage--------------------------------

                          Moles in assemblage
Phase                SI log IAP   log KT       Initial         Final         Delta

BRUCITE           -0.16    16.14    16.30    2.300e-001             0 -2.300e-001
C3ASH4            -2.70    68.17    70.87    0.000e+000             0  0.000e+000
Ca(OH)2           -0.00    22.71    22.71    1.350e+000  1.500e+000  1.499e-001
CALCITE           -0.00    -8.48    -8.48    0.000e+000  3.533e-003  3.533e-003
CSH(0.1)          -5.85    -6.93    -1.07    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(0.2)          -5.22    -4.65     0.56    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(0.3)          -4.61    -2.38     2.23    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(0.4)          -4.02    -0.11     3.91    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(0.5)          -3.44     2.16     5.60    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(0.6)          -2.88     4.43     7.31    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(0.7)          -2.34     6.70     9.04    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(0.8)          -1.85     8.97    10.82    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(0.833)        -1.71     9.72    11.44    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(0.9)          -1.57    12.49    14.06    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(1.0)          -1.00    13.51    14.51    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(1.1)          -0.63    14.35    14.98    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(1.2)          -0.39    15.05    15.44    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(1.3)          -0.23    15.64    15.87    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(1.4)          -0.13    16.14    16.27    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(1.5)          -0.07    16.58    16.64    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(1.6)          -0.02    16.96    16.99    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(1.7)          -0.00    17.30    17.30    0.000e+000             0  0.000e+000
CSH(1.8)           0.00    17.60    17.60    2.970e+000  2.971e+000  6.090e-004
ETTRINGI          -0.00    58.24    58.24    0.000e+000  3.663e-002  3.663e-002
FRIEDEL_          -4.80    65.33    70.13    0.000e+000             0  0.000e+000
HYDROGR           -0.00    77.37    77.37    1.300e-001  1.459e-001  1.586e-002
HYDROTAL          -0.00    73.78    73.78    0.000e+000  5.751e-002  5.751e-002
MONOSULF          -2.84    71.00    73.83    1.100e-001             0 -1.100e-001
SEPIOLIT         -20.98     9.36    30.35    0.000e+000             0  0.000e+000
SiO2(am)          -6.56    -9.20    -2.64    0.000e+000             0  0.000e+000

-----------------------------Solution composition------------------------------
```

Elements	Molality	Moles
Al	1.445e-006	1.433e-006
B	2.955e-004	2.930e-004
C	7.091e-006	7.033e-006
Ca	1.889e-002	1.874e-002
Cl	1.472e-005	1.460e-005
F	5.445e-005	5.400e-005
Fe	9.811e-010	9.730e-010
K	6.201e-005	6.150e-005
Mg	1.284e-008	1.273e-008
N	2.319e-005	2.300e-005
Na	3.580e-003	3.550e-003
P	2.884e-006	2.860e-006
S	2.315e-004	2.295e-004
Si	4.239e-007	4.204e-007

----------Description of solution----------

pH = 12.455 Charge balance
pe = -9.051 Adjusted to redox equilibrium
Activity of water = 0.999
Ionic strength = 4.915e-002
Mass of water (kg) = 9.917e-001
Total alkalinity (eq/kg) = 4.075e-002
Total CO2 (mol/kg) = 7.091e-006
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = -1.204e-005
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -0.02
Iterations = 21
Total H = 1.101323e+002
Total O = 5.508782e+001

----------Distribution of species----------

Species	Log Molality	Log Activity	Log Molality	Activity	Gamma
OH-	3.507e-002	2.851e-002	-1.455	-1.545	-0.090
H+	4.100e-013	3.504e-013	-12.387	-12.455	-0.068
H2O	5.551e+001	9.990e-001	1.744	-0.000	0.000
Al	1.445e-006				
Al(OH)4-	1.445e-006	1.188e-006	-5.840	-5.925	-0.085
Al(OH)3	4.122e-012	4.169e-012	-11.385	-11.380	0.005
Al(OH)2+	1.412e-018	1.162e-018	-17.850	-17.935	-0.085
AlOH+2	1.147e-025	5.249e-026	-24.940	-25.280	-0.340
AlF2+	2.168e-029	1.783e-029	-28.664	-28.749	-0.085
AlF3	1.378e-029	1.394e-029	-28.861	-28.856	0.005
AlF+2	1.690e-030	7.730e-031	-29.772	-30.112	-0.340
AlF4-	3.567e-031	2.933e-031	-30.448	-30.533	-0.085
Al+3	7.398e-033	1.799e-033	-32.131	-32.745	-0.614
AlSO4+	1.540e-034	1.267e-034	-33.812	-33.897	-0.085
Al(SO4)2-	8.227e-037	6.766e-037	-36.085	-36.170	-0.085
B	2.955e-004				
H2BO3-	2.953e-004	2.429e-004	-3.530	-3.615	-0.085
B(OH)3	1.462e-007	1.479e-007	-6.835	-6.830	0.005
FB(OH)3-	3.006e-012	2.472e-012	-11.522	-11.607	-0.085
F2B(OH)2-	4.721e-021	3.883e-021	-20.326	-20.411	-0.085
F3BOH-	7.588e-032	6.240e-032	-31.120	-31.205	-0.085
BF4-	0.000e+000	0.000e+000	-41.344	-41.429	-0.085
C	7.091e-006				
CaCO3	5.953e-006	6.021e-006	-5.225	-5.220	0.005
CO3-2	1.098e-006	5.206e-007	-5.959	-6.283	-0.324
NaCO3-	3.462e-008	2.847e-008	-7.461	-7.546	-0.085
HCO3-	4.707e-009	3.906e-009	-8.327	-8.408	-0.081
CaHCO3+	3.661e-010	3.038e-010	-9.436	-9.517	-0.081
NaHCO3	6.400e-012	6.472e-012	-11.194	-11.189	0.005
MgCO3	8.267e-013	8.361e-013	-12.083	-12.078	0.005
CO2	3.036e-015	3.070e-015	-14.518	-14.513	0.005
MgHCO3+	9.278e-017	7.630e-017	-16.033	-16.117	-0.085
CH4	4.315e-018	4.364e-018	-17.365	-17.360	0.005
Ca	1.889e-002				
Ca+2	1.328e-002	6.311e-003	-1.877	-2.200	-0.323
CaOH+	5.520e-003	4.540e-003	-2.258	-2.343	-0.085
CaSO4	8.546e-005	8.643e-005	-4.068	-4.063	0.005
CaCO3	5.953e-006	6.021e-006	-5.225	-5.220	0.005
CaPO4-	2.883e-006	2.371e-006	-5.540	-5.625	-0.085
CaF+	2.806e-006	2.307e-006	-5.552	-5.637	-0.085
CaHCO3+	3.661e-010	3.038e-010	-9.436	-9.517	-0.081
CaHPO4	3.472e-010	3.511e-010	-9.459	-9.455	0.005
CaH2PO4+	1.125e-016	9.249e-017	-15.949	-16.034	-0.085
Cl	1.472e-005				
Cl-	1.472e-005	1.199e-005	-4.832	-4.921	-0.089
FeCl+2	0.000e+000	0.000e+000	-40.845	-41.185	-0.340
FeCl2+	0.000e+000	0.000e+000	-45.371	-45.456	-0.085
FeCl3	0.000e+000	0.000e+000	-51.382	-51.377	0.005
ClO-	0.000e+000	0.000e+000	-55.962	-56.047	-0.085
ClOH	0.000e+000	0.000e+000	-61.087	-61.083	0.005
ClO2-	0.000e+000	0.000e+000	-99.095	-99.180	-0.085
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-109.679	-109.674	0.005
ClO3-	0.000e+000	0.000e+000	-130.651	-130.736	-0.085
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-165.391	-165.476	-0.085
F	5.445e-005				
F-	5.165e-005	4.198e-005	-4.287	-4.377	-0.090
CaF+	2.806e-006	2.307e-006	-5.552	-5.637	-0.085
MgF+	5.667e-012	4.661e-012	-11.247	-11.332	-0.085
FB(OH)3-	3.006e-012	2.472e-012	-11.522	-11.607	-0.085

HF	2.202e-014	2.227e-014	-13.657	-13.652	0.005
HF2-	3.131e-018	2.575e-018	-17.504	-17.589	-0.085
F2B(OH)2-	4.721e-021	3.883e-021	-20.326	-20.411	-0.085
AlF2+	2.168e-029	1.783e-029	-28.664	-28.749	-0.085
AlF3	1.378e-029	1.394e-029	-28.861	-28.856	0.005
AlF+2	1.690e-030	7.730e-031	-29.772	-30.112	-0.340
AlF4-	3.567e-031	2.933e-031	-30.448	-30.533	-0.085
F3BOH-	7.588e-032	6.240e-032	-31.120	-31.205	-0.085
FeF+2	2.813e-036	1.287e-036	-35.551	-35.891	-0.340
FeF2+	2.615e-036	2.151e-036	-35.583	-35.667	-0.085
FeF3	1.320e-037	1.335e-037	-36.879	-36.874	0.005
BF4-	0.000e+000	0.000e+000	-41.344	-41.429	-0.085
SiF6-2	0.000e+000	0.000e+000	-54.759	-55.098	-0.340
Fe	9.811e-010				
Fe(OH)3-	6.121e-010	5.034e-010	-9.213	-9.298	-0.085
Fe(OH)4-	3.641e-010	2.994e-010	-9.439	-9.524	-0.085
Fe(OH)2	4.700e-012	4.753e-012	-11.328	-11.323	0.005
FeOH+	2.382e-013	1.959e-013	-12.623	-12.708	-0.085
Fe(OH)3	1.038e-014	1.050e-014	-13.984	-13.979	0.005
Fe+2	4.481e-016	2.173e-016	-15.349	-15.663	-0.314
FeSO4	2.569e-018	2.598e-018	-17.590	-17.585	0.005
Fe(OH)2+	3.813e-019	3.136e-019	-18.419	-18.504	-0.085
FeHPO4	8.680e-023	8.779e-023	-22.061	-22.057	0.005
FeOH+2	7.262e-028	3.322e-028	-27.139	-27.479	-0.340
Fe(HS)2	7.141e-028	7.222e-028	-27.146	-27.141	0.005
FeH2PO4+	7.585e-029	6.238e-029	-28.120	-28.205	-0.085
Fe(HS)3-	5.839e-036	4.802e-036	-35.234	-35.319	-0.085
FeF+2	2.813e-036	1.287e-036	-35.551	-35.891	-0.340
FeF2+	2.615e-036	2.151e-036	-35.583	-35.667	-0.085
FeF3	1.320e-037	1.335e-037	-36.879	-36.874	0.005
Fe+3	7.386e-038	1.797e-038	-37.132	-37.746	-0.614
FeSO4+	1.227e-038	1.009e-038	-37.911	-37.996	-0.085
Fe(SO4)2-	0.000e+000	0.000e+000	-40.583	-40.668	-0.085
FeCl+2	0.000e+000	0.000e+000	-40.845	-41.185	-0.340
FeHPO4+	0.000e+000	0.000e+000	-42.228	-42.313	-0.085
FeCl2+	0.000e+000	0.000e+000	-45.371	-45.456	-0.085
FeH2PO4+2	0.000e+000	0.000e+000	-47.219	-47.559	-0.340
FeCl3	0.000e+000	0.000e+000	-51.382	-51.377	0.005
Fe2(OH)2+4	0.000e+000	0.000e+000	-52.169	-53.527	-1.359
Fe3(OH)4+5	0.000e+000	0.000e+000	-67.598	-69.721	-2.123
H(0)	2.171e-010				
H2	1.085e-010	1.098e-010	-9.964	-9.960	0.005
K	6.201e-005				
K+	6.199e-005	5.047e-005	-4.208	-4.297	-0.089
KSO4-	2.921e-008	2.402e-008	-7.534	-7.619	-0.085
KHPO4-	1.214e-014	9.987e-015	-13.916	-14.001	-0.085
Mg	1.284e-008				
MgOH+	9.360e-009	7.698e-009	-8.029	-8.114	-0.085
Mg+2	3.452e-009	1.680e-009	-8.462	-8.775	-0.313
MgSO4	1.986e-011	2.009e-011	-10.702	-10.697	0.005
MgF+	5.667e-012	4.661e-012	-11.247	-11.332	-0.085
MgPO4-	1.035e-012	8.515e-013	-11.985	-12.070	-0.085
MgCO3	8.267e-013	8.361e-013	-12.083	-12.078	0.005
MgHPO4	1.250e-016	1.264e-016	-15.903	-15.898	0.005
MgHCO3+	9.278e-017	7.630e-017	-16.033	-16.117	-0.085
MgH2PO4+	3.814e-023	3.136e-023	-22.419	-22.504	-0.085
N	2.319e-005				
N2	1.136e-005	1.149e-005	-4.945	-4.940	0.005
NH3	4.698e-007	4.752e-007	-6.328	-6.323	0.005
NH4+	3.581e-010	2.874e-010	-9.446	-9.542	-0.096
NH4SO4-	2.648e-013	2.178e-013	-12.577	-12.662	-0.085
NO2-	0.000e+000	0.000e+000	-54.678	-54.771	-0.093
NO3-	0.000e+000	0.000e+000	-76.439	-76.532	-0.093
Na	3.580e-003				
Na+	3.578e-003	2.951e-003	-2.446	-2.530	-0.084
NaSO4-	1.209e-006	9.943e-007	-5.918	-6.002	-0.085
NaCO3-	3.462e-008	2.847e-008	-7.461	-7.546	-0.085
NaHCO3	6.400e-012	6.472e-012	-11.194	-11.189	0.005
NaHPO4-	7.100e-013	5.839e-013	-12.149	-12.234	-0.085
O(0)	0.000e+000				
O2	0.000e+000	0.000e+000	-72.467	-72.462	0.005
P	2.884e-006				
CaPO4-	2.883e-006	2.371e-006	-5.540	-5.625	-0.085
PO4-3	7.995e-010	1.306e-010	-9.097	-9.884	-0.787
CaHPO4	3.472e-010	3.511e-010	-9.459	-9.455	0.005
HPO4-2	2.292e-010	1.024e-010	-9.640	-9.990	-0.350
MgPO4-	1.035e-012	8.515e-013	-11.985	-12.070	-0.085
NaHPO4-	7.100e-013	5.839e-013	-12.149	-12.234	-0.085
KHPO4-	1.214e-014	9.987e-015	-13.916	-14.001	-0.085
H2PO4-	7.130e-016	5.861e-016	-15.147	-15.232	-0.085
MgHPO4	1.250e-016	1.264e-016	-15.903	-15.898	0.005
CaH2PO4+	1.125e-016	9.249e-017	-15.949	-16.034	-0.085
P2O7-4	9.881e-023	4.327e-024	-22.005	-23.364	-1.359
FeHPO4	8.680e-023	8.779e-023	-22.061	-22.057	0.005
MgH2PO4+	3.814e-023	3.136e-023	-22.419	-22.504	-0.085
H3PO4	2.804e-026	2.835e-026	-25.552	-25.547	0.005
HP2O7-3	2.213e-026	3.809e-027	-25.655	-26.419	-0.764
FeH2PO4+	7.585e-029	6.238e-029	-28.120	-28.205	-0.085
H2P2O7-2	1.303e-032	5.963e-033	-31.885	-32.225	-0.340
FeHPO4+	0.000e+000	0.000e+000	-42.228	-42.313	-0.085
H3P2O7-	0.000e+000	0.000e+000	-42.345	-42.430	-0.085
FeH2PO4+2	0.000e+000	0.000e+000	-47.219	-47.559	-0.340
H4P2O7	0.000e+000	0.000e+000	-53.890	-53.885	0.005
S	2.315e-004				
SO4-2	1.448e-004	6.723e-005	-3.839	-4.172	-0.333
CaSO4	8.546e-005	8.643e-005	-4.068	-4.063	0.005
NaSO4-	1.209e-006	9.943e-007	-5.918	-6.002	-0.085
KSO4-	2.921e-008	2.402e-008	-7.534	-7.619	-0.085

```
    HS-              8.294e-011   6.742e-011   -10.081   -10.171    -0.090
    MgSO4            1.986e-011   2.009e-011   -10.702   -10.697     0.005
    NH4SO4-          2.648e-013   2.178e-013   -12.577   -12.662    -0.085
    SO3-2            9.144e-015   4.183e-015   -14.039   -14.379    -0.340
    HSO4-            2.780e-015   2.286e-015   -14.556   -14.641    -0.085
    H2S              2.272e-016   2.298e-016   -15.644   -15.639     0.005
    S-2              4.114e-017   1.919e-017   -16.386   -16.717    -0.331
    FeSO4            2.569e-018   2.598e-018   -17.590   -17.585     0.005
    HSO3-            2.958e-020   2.433e-020   -19.529   -19.614    -0.085
    S2O3-2           7.296e-023   3.338e-023   -22.137   -22.477    -0.340
    Fe(HS)2          7.141e-028   7.222e-028   -27.146   -27.141     0.005
    H2SO3            5.832e-031   5.898e-031   -30.234   -30.229     0.005
    HS2O3-           5.533e-034   4.550e-034   -33.257   -33.342    -0.085
    AlSO4+           1.540e-034   1.267e-034   -33.812   -33.897    -0.085
    Fe(HS)3-         5.839e-036   4.802e-036   -35.234   -35.319    -0.085
    Al(SO4)2-        8.227e-037   6.766e-037   -36.085   -36.170    -0.085
    FeSO4+           1.227e-038   1.009e-038   -37.911   -37.996    -0.085
    Fe(SO4)2-        0.000e+000   0.000e+000   -40.583   -40.668    -0.085
Si                 4.239e-007
    H3SiO4-          3.415e-007   2.809e-007    -6.467    -6.551    -0.085
    H2SiO4-2         8.176e-008   3.740e-008    -7.087    -7.427    -0.340
    H4SiO4           6.284e-010   6.355e-010    -9.202    -9.197     0.005
    H4Si2O7-2        7.196e-013   3.292e-013   -12.143   -12.483    -0.340
    H5Si2O7-         1.114e-014   9.164e-015   -13.953   -14.038    -0.085
    H5Si3O10-3       1.096e-017   1.885e-018   -16.960   -17.725    -0.764
    H3Si3O9-3        8.710e-019   1.499e-019   -18.060   -18.824    -0.764
    H4Si4O12-4       1.240e-022   5.430e-024   -21.907   -23.265    -1.359
    H5Si4O12-3       6.992e-025   1.203e-025   -24.155   -24.920    -0.764
    SiF6-2           0.000e+000   0.000e+000   -54.759   -55.098    -0.340

-----------------------------Saturation indices-------------------------------

Phase                SI log IAP   log KT

AFWILLIT           -10.25    49.74    59.99   Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ALBITE             -16.58   -13.04     3.54   Na1.000Al1.000Si3.000O8.000
ALMANDIN           -24.01     9.40    33.41   Al2.000Si3.000Fe3.000O12.000
ALUNITE            -37.76   -36.15     1.61   Al3.000S2.000K1.000H6.000O14.000
ANALCIM1           -10.77    -3.85     6.93   Si2.000Na1.000Al1.000H2.000O7.000
ANALCIM2           -22.50   -14.82     7.69   Si4.3Na1.7Al1.7H4.0O14.0
ANDRADIT            10.75    65.85    55.10   Si3.000Ca3.000Fe2.000O12.000
ANHYDRIT            -1.99    -6.37    -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
ANNITE              -9.40    12.93    22.33   Al1.000Si3.000K1.000Fe3.000H2.000O12.000
ANORTHHE           -13.14    13.56    26.70   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR           -12.81    13.56    26.37   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ARAGONIT            -0.14    -8.48    -8.34   C1.000Ca1.000O3.000
B(CR)              -62.21   -17.04    45.17   B1.000
B(G)              -153.49   -17.04   136.45   B1.000
B(OH)3(C            -6.76    -6.83    -0.07   B1.000H3.000O3.000
B2O3(CR)           -19.41   -13.66     5.75   B2.000O3.000
BEID-CA            -24.78   -19.24     5.55   Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-K             -25.55   -20.29     5.26   K0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG            -25.83   -20.32     5.51   Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-NA            -25.31   -19.71     5.60   Na0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BF3(G)             -54.35   -57.33    -2.98   B1.000F3.000
BRUCITE             -0.16    16.14    16.30   Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)              -12.66   -44.81   -32.15   C1.000
C(G)              -130.26   -44.81    85.45   C1.000
C2AH8               -5.98    54.66    60.64   Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4              -2.70    68.17    70.87   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1            -3.24    68.17    71.41   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13              -1.92   100.08   102.00   Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19              -1.90   100.07   101.98   Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)             -80.95    15.90    96.85   Ca1.000
CA(G)             -106.18    15.90   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2             -0.00    22.71    22.71   Ca(OH)2
CAH10               -8.47    31.95    40.42   Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CALCITE             -0.00    -8.48    -8.48   C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)             -9.99    22.71    32.70   Ca1.000O1.000
CH4                -14.50   -58.43   -43.93   C1.000H4.000
CHABAZ_a           -25.77   -25.79    -0.02   Si4.767Na0.817Al1.233K0.15Ca0.133H12.0O18.0
CHABAZ_d           -24.35   -23.14     1.21   Si4.65Na0.617Al1.35K0.333Ca0.2H12.0O18.0
CHALCEDO            -5.71    -9.20    -3.49   Si1.000O2.000
CL(G)              -55.41   -13.97    41.44   Cl1.000
CL2(G)             -73.92   -27.94    45.98   Cl2.000
CLINOC26           -82.41   365.20   447.61
  Mg26.000Al20.000Si24.000Fe8.000H64.000O144.000
CLINOC40           -48.19   498.64   546.83   Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
CLINOCH8           126.14   304.51   178.37
  Mg8.000Al25.000Si20.000Fe26.000H64.000O144.000
CLINOP_a           -26.00   -28.29    -2.29   Si4.867Na0.283Al1.133K0.384Ca0.233H8.67O16.335
CLINOP_d           -24.80   -27.18    -2.38
  Si4.867Na0.067Al1.133K0.132Ca0.467H8.67O16.335
CLINOZOI           -11.92    31.69    43.61   Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CO(G)              -23.36   -38.00   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)             -13.04   -31.19   -18.15   C1.000O2.000
CSH(0.1)            -5.85    -6.93    -1.07   Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)            -5.22    -4.65     0.56   Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)            -4.61    -2.38     2.23   Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)            -4.02    -0.11     3.91   Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)            -3.44     2.16     5.60   Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)            -2.88     4.43     7.31   Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)            -2.34     6.70     9.04   Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)            -1.85     8.97    10.82   Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)          -1.71     9.72    11.44   Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)            -1.57    12.49    14.06   Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)            -1.00    13.51    14.51   Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)            -0.63    14.35    14.98   Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
```

CSH(1.2)	-0.39	15.05	15.44	Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)	-0.23	15.64	15.87	Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)	-0.13	16.14	16.27	Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)	-0.07	16.58	16.64	Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)	-0.02	16.96	16.99	Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)	-0.00	17.30	17.30	Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)	0.00	17.60	17.60	Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833	-1.71	9.72	11.44	Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
DOLOMITE	-6.45	-23.54	-17.09	Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
EPIDOTE,	-5.70	39.73	45.43	Al2.000Si3.000Ca2.000Fe1.000H1.000O13.000
EPISTILB	-26.89	-23.23	3.66	CaAl2Si6O16:5H2O
ERIONI_a	-25.07	-24.76	0.31	Si4.7Na0.567Al1.3K0.467Ca0.133H10.00O17.00
ERIONI_d	-23.40	-22.66	0.75	Si4.633Na0.2Al1.367K0.501Ca0.333H10.0O17.0
ETTRINGI	-0.00	58.24	58.24	Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
F(G)	-73.66	-13.43	60.23	F1.000
F2(G)	-125.50	-26.86	98.64	F2.000
FAYALITE	-9.75	9.30	19.05	Fe2.000Si1.000O4.000
FE2SI2O6	-10.50	0.10	10.60	Si2.000Fe2.000O6.000
FEOH3A	-5.27	-0.38	4.89	Fe1.000H3.000O3.000
FERROSIL	-7.37	0.05	7.42	Fe1.000Si1.000O3.000
FES	-9.47	-47.07	-37.60	Fe1.000S1.000
FLUORITE	0.01	-10.95	-10.96	Ca1.000F2.000
FOSHAGIT	-2.62	63.25	65.87	Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
FRIEDEL_	-4.80	65.33	70.13	Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GEHL_HY	-4.86	45.46	50.32	Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1	-3.70	45.46	49.16	Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT	-10.81	45.47	56.28	Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE	-3.14	4.62	7.76	Al1.000H3.000O3.000
GOETHITE	1.36	12.65	11.29	Fe1.000H1.000O2.000
GREENALI	-13.24	9.35	22.59	Fe3.000Si2.000H4.000O9.000
GROSSUL	-8.92	49.78	58.70	Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1	-2.09	49.78	51.87	Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM	-1.77	-6.37	-4.60	Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE	-5.03	17.83	22.86	Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)	-39.01	-3.40	35.61	H1.000
H2(G)	-6.81	-6.81	0.00	H2.000
H2O(G)	-1.50	-0.00	1.50	H2.000O1.000
H2S(G)	-14.62	-56.32	-41.70	S1.000H2.000
HCL(G)	-23.67	-17.38	6.29	Cl1.000H1.000
HEMATITE	2.90	25.30	22.40	Fe2.000O3.000
HEULANDI	-22.67	-22.07	0.59	
Si4.667Na0.167Al1.333K0.066Ca0.55H8.67O16.335				
HF(G)	-17.90	-16.83	1.07	F1.000H1.000
HILLEBRA	-0.48	36.22	36.70	Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR	-0.00	77.37	77.37	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1	-4.21	77.37	81.58	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL	-0.00	73.78	73.78	Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
HYDROXAP	17.48	-28.20	-45.68	P3.000Ca5.000H1.000O13.000
ILLITE	-21.60	-12.63	8.97	Mg0.250Al2.300Si3.500K0.600H2.000O12.000
JENNITE	2.61	149.21	146.60	Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
K(CR)	-44.74	4.75	49.49	K1.000
K(G)	-55.34	4.75	60.09	K1.000
K-FELDSP	-14.58	-14.81	-0.23	Si3.000K1.000Al1.000O8.000
KAOLINIT	-18.23	-55.15	-36.92	Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE	-1.57	77.37	78.94	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONTI	-18.47	-4.83	13.63	Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LAWRENCI	-32.33	-25.51	6.82	Cl2.000Fe1.000
LEUCITE	-11.77	-5.61	6.16	Si2.000K1.000Al1.000O6.000
LIME,	-9.99	22.71	32.70	Ca1.000O1.000
MACKINIT	-8.75	-47.07	-38.32	Fe1.000S1.000
MAGNESIO	-1.38	41.44	42.82	Mg1.000Fe2.000O4.000
MAGNETIT	3.90	34.55	30.65	Fe3.000O4.000
MG2SI2O6	-9.38	13.88	23.26	Mg2.000Si2.000O6.000
MICROCLI	-16.59	-14.81	1.78	Al1.000Si3.000K1.000O8.000
MOLYSITE	-64.04	-39.48	24.56	Cl3.000Fe1.000
MONOSULF	-2.84	71.00	73.83	Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA	-22.56	-20.00	2.56	Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-K	-23.12	-21.05	2.07	Mg0.330Al1.670Si4.000K0.330H2.000O12.000
MONT-MG	-23.55	-21.08	2.47	Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
MONT-NA	-22.97	-20.47	2.51	Mg0.330Al1.670Si4.000Na0.330H2.000O12.000
MORDENIT	-27.10	-30.99	-3.89	Si5Na0.35Al1.0K0.15Ca0.25H7.334O15.667
MUSCOVIT	-20.17	-5.57	14.60	Al3.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
N(G)	-80.59	-106.01	-25.42	N1.000
N2(G)	-1.56	-212.02	-210.46	N2.000
NA(CR)	-39.37	6.52	45.89	Na1.000
NA(G)	-52.86	6.52	59.38	Na1.000
NH3(G)	-8.12	-116.22	-108.10	N1.000H3.000
NONT-CA	-17.73	-29.24	-11.51	Ca0.165Al0.330Si3.670Fe2.000H2.000O12.000
NONT-K	-18.31	-30.29	-11.98	K0.330Al0.330Si3.670Fe2.000H2.000O12.000
NONT-MG	-18.83	-30.32	-11.49	Mg0.165Al0.330Si3.670Fe2.000H2.000O12.000
NONT-NA	-18.21	-29.71	-11.50	Na0.330Al0.330Si3.670Fe2.000H2.000O12.000
O(G)	-75.34	6.81	82.15	O1.000
O2(G)	-69.47	13.62	83.09	O2.000
OKENITE	-6.00	4.32	10.32	Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
ORTHOCLA	-15.67	-14.81	0.86	Al1.000Si3.000K1.000O8.000
P(AM)	-77.75	-64.27	13.48	P1.000
P(CR)	-77.75	-64.27	13.48	P1.000
P(G)	-126.82	-64.27	62.55	P1.000
P2(G)	-173.62	-128.54	45.08	P2.000
P4(G)	-315.28	-257.09	58.19	P4.000
PARAGONI	-22.67	-3.80	18.87	Na1.000Al3.000Si3.000H2.000O12.000
PERICLAS	-5.44	16.14	21.58	Mg1.000O1.000
PHILLI_a	-15.94	-14.56	1.37	Si3.05Na0.4Al0.95K0.35Ca0.1H6.0O11.0
PHILLI_d	-15.11	-14.23	0.88	Si3.075Na0.175Al0.925K0.15Ca0.3H6.0O11.0
PHLOGOPI	-2.73	33.60	36.33	Mg3.000Al1.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
PLOMBIER	-5.38	58.37	63.75	Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN	-0.00	22.71	22.71	Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1	0.16	22.71	22.55	Ca1.000H2.000O2.000

```
PYRITE          -10.63   -96.58   -85.95   S2.000Fe1.000
PYROPHYL        -28.00   -27.54     0.46   Si4.000Al2.000H2.000O12.000
PYRRHOTI        -57.73 -379.01 -321.28   S8.000Fe7.000
QUARTZ           -5.42    -9.20    -3.78   Si1.000O2.000
RIVERSID        -10.61    58.37    68.98   Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)           -13.67   -49.51   -35.84   S1.000
S(G)            -55.14   -49.51     5.63   S1.000
S2(G)           -41.31   -99.02   -57.71   S2.000
SAPON-CA         -6.30    19.93    26.23   Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-K          -7.07    18.87    25.94   Mg3.000Al0.330Si3.670K0.330H2.000O12.000
SAPON-MG         -7.34    18.84    26.19   Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SAPON-NA         -6.83    19.46    26.28   Mg3.000Al0.330Si3.670Na0.330H2.000O12.000
SCOLECIT         -9.05     4.36    13.41   Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000
SEP             -14.11   -51.32   -37.21   Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT        -20.98     9.36    30.35   Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)          -85.74   -22.81    62.93   Si1.000
SI(G)          -156.78   -22.81   133.97   Si1.000
SIDERITE        -11.38   -21.95   -10.57   Fe1.000C1.000O3.000
SIF4(G)         -61.19   -76.52   -15.33   Si1.000F4.000
SIL              -6.18    -9.20    -3.02   Si1.000H2.000O3.000
SIL(AM)1         -6.49    -9.20    -2.71   Si1.000O2.000
SILI(AM)         -6.56    -9.20    -2.64   Si1.000O2.000
SILICA          -10.13   -12.60    -2.47   Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)         -6.56    -9.20    -2.64   Si1.000O2.000
SIO2(QUA         -5.20    -9.20    -4.00   Si1.000O2.000
SO2(G)          -30.57   -35.89    -5.32   S1.000O2.000
STILBITE        -19.20   -13.69     5.51   Ca0.667Na0.333Al1.667Si4.333O12:4.666H2O
TALC             -9.45    11.62    21.07   Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR         -7.14    58.37    65.51   Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,          -12.77     0.04    12.81   Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLIT         -5.17    52.53    57.70   Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
VIVIANIT        -30.76   -66.76   -36.00   Fe3.000P2.000H16.000O16.000
WAIRAKIT        -22.91    -4.83    18.08   CaAl2Si4O12:2H2O
XONOTLIT        -10.64    81.09    91.73   Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA        -27.30   -23.23     4.07   CaAl2Si6O16:4H2O

------------------
End of simulation.
------------------

-------------------------------------
Reading input data for simulation 2.
-------------------------------------

-----------
End of run.
-----------
```

リスト3-3 OPCペーストと塩水との反応に関する化学平衡計算（液固比=1.8）

```
Input file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11．報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥3章
¥OPC-0.6M-NaCl(AFm)-All.pqi
Output file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11．報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥3章
¥OPC-0.6M-NaCl(AFm)-All.pqo
Database file: C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
-----------------------------------
Reading input data for simulation 1.
-----------------------------------

DATABASE C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb
Title OPC(AFt)-0.6M-NaCl
PHASES
CSH(0.1)
Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
log_K -1.071
CSH(0.2)
Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
log_K 0.565
CSH(0.3)
Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
log_K 2.227
CSH(0.4)
Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
log_K 3.907
CSH(0.5)
Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
log_K 5.601
CSH(0.6)
Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
log_K 7.312
CSH(0.7)
Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
log_K 9.045
CSH(0.8)
Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
log_K 10.819
CSH(0.9)
Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
log_K 14.061
CSH(1.0)
Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
log_K 14.514
CSH(1.1)
Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
log_K 14.983
CSH(1.2)
Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
log_K 15.439
CSH(1.3)
Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
log_K 15.870
CSH(1.4)
Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
log_K 16.272
CSH(1.5)
Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
log_K 16.643
CSH(1.6)
Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
log_K 16.987
CSH(1.7)
Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O -.000 H+
log_K 17.304
CSH(1.8)
Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
log_K 17.597
Ca(OH)2
Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
log_k 22.710
SiO2(am)
Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
log_K -2.639
CSH(0.833)
Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
log_K 11.436

SOLUTION 0    0.6M-NaCl #FRHP
                units     mol/kgw
                pH        7.00 #8.46
                density 1.000
                temp      25.0
                Na        0.6 #0.00355
                Cl        0.6 #0.0000146
```

```
SOLUTION 1    0.6M-NaCl #FRHP
                    units      mol/kgw
                pH          7.00 #8.46
                density 1.000
                temp        25.0
                Na          0.6 #0.00355
                Cl          0.6 #0.0000146
EQUILIBRIUM_PHASES 1
        CSH(0.1)    0.0    0.0
        CSH(0.2)    0.0    0.0
        CSH(0.3)    0.0    0.0
        CSH(0.4)    0.0    0.0
        CSH(0.5)    0.0    0.0
        CSH(0.6)    0.0    0.0
        CSH(0.7)    0.0    0.0
        CSH(0.8)    0.0    0.0
        CSH(0.9)    0.0    0.0
        CSH(1.0)    0.0    0.0
        CSH(1.1)    0.0    0.0
        CSH(1.2)    0.0    0.0
        CSH(1.3)    0.0    0.0
        CSH(1.4)    0.0    0.0
        CSH(1.5)    0.0    0.0
        CSH(1.6)    0.0    0.0
        CSH(1.7)    0.0    0.0
        CSH(1.8)    0.0    2.97 #8.678104
        SiO2(am)    0.0    0.0
        CSH(0.833) 0.0    0.0
        Ca(OH)2     0.0    1.35 #3.934656
        ETTRINGI    0.0    0.0 #0.109932
        MONOSULF    0.0      0.11
        FRIEDEL_    0.0 0.0
        HYDROGR     0.0    0.13 #0.599229
        Brucite     0.0    0.23 #0.658933
        GIBBSITE    0.0    0.0
        GYPSUM      0.0    0.0
        SEPIOLIT    0.0    0.0
        CALCITE 0.0 0.0
        GEHL_HY 0.0 0.0
        HYDROTAL 0.0 0.0
        GROSSUL 0.0 0.0
        C3ASH4    0.0 0.0
        END
-----
TITLE
-----

 OPC(AFt)-0.6M-NaCl
```

```
-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 0.          0.6M-NaCl

-----------------------------Solution composition-----------------------------

                Elements              Molality          Moles

                Cl                  6.000e-001    6.000e-001
                Na                  6.000e-001    6.000e-001

----------------------------Description of solution----------------------------

                                          pH   =     7.000
                                          pe   =     4.000
                              Activity of water   =     0.980
                                 Ionic strength   =   6.000e-001
                              Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                     Total alkalinity (eq/kg)    =   2.659e-008
                        Total carbon (mol/kg)    =   0.000e+000
                           Total CO2 (mol/kg)    =   0.000e+000
                          Temperature (deg C)    =   25.000
                       Electrical balance (eq)    = -2.659e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)    =    -0.00
                                     Iterations    =     4
                                        Total H    = 1.110124e+002
                                        Total O    = 5.550622e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                          Log         Log         Log
    Species                  Molality    Activity    Molality    Activity      Gamma

    OH-                    1.584e-007   9.796e-008     -6.800      -7.009      -0.209
    H+                     1.318e-007   1.000e-007     -6.880      -7.000      -0.120
    H2O                    5.551e+001   9.796e-001      1.744      -0.009       0.000
Cl                  6.000e-001
    Cl-                    6.000e-001   3.788e-001     -0.222      -0.422      -0.200
    ClOH                   9.874e-037   1.134e-036    -36.006     -35.946       0.060
    ClO-                   5.822e-037   4.310e-037    -36.235     -36.366      -0.131
    ClO2-                  0.000e+000   0.000e+000    -64.186     -64.316      -0.131
    ClHO2                  0.000e+000   0.000e+000    -69.415     -69.355       0.060
    ClO3-                  0.000e+000   0.000e+000    -80.560     -80.690      -0.131
    ClO4-                  0.000e+000   0.000e+000   -100.118    -100.248      -0.131
H(0)                1.233e-025
    H2                     6.166e-026   7.079e-026    -25.210     -25.150       0.060
Na                  6.000e-001
```

```
    Na+                 6.000e-001   4.242e-001     -0.222     -0.372     -0.151
O(0)            0.000e+000
    O2                  0.000e+000   0.000e+000    -42.158    -42.098      0.060

-----------------------------Saturation indices------------------------------

            Phase                SI log IAP   log KT

            CL(G)            -37.86     3.58    41.44   Cl1.000
            CL2(G)           -38.82     7.16    45.98   Cl2.000
            H(G)             -46.61   -11.00    35.61   H1.000
            H2(G)            -22.00   -22.00     0.00   H2.000
            H2O(G)            -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
            HCL(G)           -13.71    -7.42     6.29   Cl1.000H1.000
            NA(CR)           -50.26    -4.37    45.89   Na1.000
            NA(G)            -63.75    -4.37    59.38   Na1.000
            O(G)             -60.16    21.99    82.15   O1.000
            O2(G)            -39.11    43.98    83.09   O2.000

Initial solution 1.          0.6M-NaCl

----------------------------Solution composition-----------------------------

            Elements            Molality          Moles

            Cl                 6.000e-001    6.000e-001
            Na                 6.000e-001    6.000e-001

---------------------------Description of solution---------------------------

                                        pH   =     7.000
                                        pe   =     4.000
                          Activity of water   =     0.980
                             Ionic strength   =   6.000e-001
                          Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                 Total alkalinity (eq/kg)   =   2.659e-008
                    Total carbon (mol/kg)   =   0.000e+000
                      Total CO2 (mol/kg)   =   0.000e+000
                     Temperature (deg C)   =   25.000
                  Electrical balance (eq)   = -2.659e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =   -0.00
                              Iterations   =     4
                                 Total H   = 1.110124e+002
                                 Total O   = 5.550622e+001

----------------------------Distribution of species--------------------------

                                   Log        Log       Log
    Species            Molality   Activity   Molality   Activity     Gamma
    OH-                1.584e-007   9.796e-008    -6.800     -7.009     -0.209
    H+                 1.318e-007   1.000e-007    -6.880     -7.000     -0.120
    H2O                5.551e+001   9.796e-001     1.744     -0.009      0.000
Cl                 6.000e-001
    Cl-                6.000e-001   3.788e-001    -0.222     -0.422     -0.200
    ClOH               9.874e-037   1.134e-036   -36.006    -35.946      0.060
    ClO-               5.822e-037   4.310e-037   -36.235    -36.366     -0.131
    ClO2-              0.000e+000   0.000e+000   -64.186    -64.316     -0.131
    ClHO2              0.000e+000   0.000e+000   -69.415    -69.355      0.060
    ClO3-              0.000e+000   0.000e+000   -80.560    -80.690     -0.131
    ClO4-              0.000e+000   0.000e+000  -100.118   -100.248     -0.131
H(0)               1.233e-025
    H2                 6.166e-026   7.079e-026   -25.210    -25.150      0.060
Na                 6.000e-001
    Na+                6.000e-001   4.242e-001    -0.222     -0.372     -0.151
O(0)               0.000e+000
    O2                 0.000e+000   0.000e+000   -42.158    -42.098      0.060

-----------------------------Saturation indices------------------------------

            Phase                SI log IAP   log KT

            CL(G)            -37.86     3.58    41.44   Cl1.000
            CL2(G)           -38.82     7.16    45.98   Cl2.000
            H(G)             -46.61   -11.00    35.61   H1.000
            H2(G)            -22.00   -22.00     0.00   H2.000
            H2O(G)            -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
            HCL(G)           -13.71    -7.42     6.29   Cl1.000H1.000
            NA(CR)           -50.26    -4.37    45.89   Na1.000
            NA(G)            -63.75    -4.37    59.38   Na1.000
            O(G)             -60.16    21.99    82.15   O1.000
            O2(G)            -39.11    43.98    83.09   O2.000

----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
----------------------------------------

Reaction step 1.

WARNING: Element C is contained in CALCITE (which has 0.0 mass),
but is not in solution or other phases.
Using solution 0.            0.6M-NaCl
Using pure phase assemblage 1.

-----------------------------Phase assemblage--------------------------------

                                        Moles in assemblage
Phase                SI log IAP   log KT        Initial          Final          Delta
```

BRUCITE	0.00	16.30	16.30	2.300e-001	2.300e-001	-2.496e-009
C3ASH4	-3.95	66.92	70.87	0.000e+000	0	0.000e+000
Ca(OH)2	0.00	22.71	22.71	1.350e+000	1.195e+000	-1.546e-001
CALCITE	Element not present.			0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.1)	-5.85	-6.92	-1.07	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.2)	-5.22	-4.65	0.56	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.3)	-4.61	-2.38	2.23	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.4)	-4.02	-0.11	3.91	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.5)	-3.44	2.16	5.60	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.6)	-2.88	4.43	7.31	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.7)	-2.34	6.70	9.04	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.8)	-1.85	8.97	10.82	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.833)	-1.71	9.72	11.44	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.9)	-1.57	12.49	14.06	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.0)	-1.00	13.51	14.51	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.1)	-0.63	14.35	14.98	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.2)	-0.39	15.05	15.44	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.3)	-0.23	15.64	15.87	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.4)	-0.13	16.14	16.27	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.5)	-0.07	16.58	16.64	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.6)	-0.02	16.96	16.99	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.7)	-0.00	17.30	17.30	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.8)	0.00	17.60	17.60	2.970e+000	2.970e+000	-1.430e-005
ETTRINGI	-0.00	58.24	58.24	0.000e+000	1.148e-002	1.148e-002
FRIEDEL_	0.00	70.13	70.13	0.000e+000	2.285e-001	2.285e-001
GEHL_HY	-6.15	44.17	50.32	0.000e+000	0	0.000e+000
GIBBSITE	-3.77	3.99	7.76	0.000e+000	0	0.000e+000
GROSSUL	-10.13	48.57	58.70	0.000e+000	0	0.000e+000
GYPSUM	-1.29	-5.90	-4.60	0.000e+000	0	0.000e+000
HYDROGR	-1.27	76.10	77.37	1.300e-001	0	-1.300e-001
HYDROTAL	-0.63	73.15	73.78	0.000e+000	0	0.000e+000
MONOSULF	-3.66	70.17	73.83	1.100e-001	0	-1.100e-001
SEPIOLIT	-20.34	10.00	30.35	0.000e+000	0	0.000e+000
SiO2(am)	-6.56	-9.20	-2.64	0.000e+000	0	0.000e+000

----------Solution composition----------

Elements	Molality	Moles
Al	2.493e-006	2.468e-006
Ca	1.698e-003	1.681e-003
Cl	1.444e-001	1.430e-001
Mg	2.522e-009	2.496e-009
Na	6.060e-001	6.000e-001
S	7.631e-002	7.555e-002
Si	8.029e-006	7.949e-006

----------Description of solution----------

pH = 13.290 Charge balance
pe = -8.042 Adjusted to redox equilibrium
Activity of water = 0.981
Ionic strength = 6.328e-001
Mass of water (kg) = 9.900e-001
Total alkalinity (eq/kg) = 3.124e-001
Total carbon (mol/kg) = 0.000e+000
Total CO2 (mol/kg) = 0.000e+000
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = -2.716e-008
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -0.00
Iterations = 23
Total H = 1.102165e+002
Total O = 5.556514e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	3.115e-001	1.913e-001	-0.507	-0.718	-0.212
H+	6.774e-014	5.128e-014	-13.169	-13.290	-0.121
H2O	5.551e+001	9.811e-001	1.744	-0.008	0.000
Al	2.493e-006				
Al(OH)4-	2.493e-006	1.852e-006	-5.603	-5.732	-0.129
Al(OH)3	8.369e-013	9.682e-013	-12.077	-12.014	0.063
Al(OH)2+	5.409e-020	4.020e-020	-19.267	-19.396	-0.129
AlOH+2	8.877e-028	2.707e-028	-27.052	-27.568	-0.516
AlSO4+	1.827e-035	1.358e-035	-34.738	-34.867	-0.129
Al+3	1.694e-035	1.383e-036	-34.771	-35.859	-1.088
Al(SO4)2-	1.361e-035	1.011e-035	-34.866	-34.995	-0.129
Ca	1.698e-003				
CaOH+	9.103e-004	6.765e-004	-3.041	-3.170	-0.129
Ca+2	5.558e-004	1.401e-004	-3.255	-3.854	-0.598
CaSO4	2.314e-004	2.677e-004	-3.636	-3.572	0.063
Cl	1.444e-001				
Cl-	1.444e-001	9.066e-002	-0.840	-1.043	-0.202
ClO-	0.000e+000	0.000e+000	-48.361	-48.490	-0.129
ClOH	0.000e+000	0.000e+000	-54.423	-54.360	0.063
ClO2-	0.000e+000	0.000e+000	-87.814	-87.943	-0.129
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-99.336	-99.272	0.063
ClO3-	0.000e+000	0.000e+000	-115.691	-115.820	-0.129
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-146.752	-146.881	-0.129
H(0)	3.903e-014				
H2	1.951e-014	2.257e-014	-13.710	-13.646	0.063
Mg	2.522e-009				
MgOH+	2.255e-009	1.675e-009	-8.647	-8.776	-0.129
Mg+2	1.883e-010	5.450e-011	-9.725	-10.264	-0.539

```
    MgSO4          7.856e-011   9.088e-011    -10.105    -10.042      0.063
Na                 6.060e-001
    Na+            5.801e-001   4.100e-001     -0.236     -0.387     -0.151
    NaSO4-         2.593e-002   1.927e-002     -1.586     -1.715     -0.129
O(0)               0.000e+000
    O2             0.000e+000   0.000e+000    -65.167    -65.104      0.063
S                  7.631e-002
    SO4-2          5.015e-002   9.378e-003     -1.300     -2.028     -0.728
    NaSO4-         2.593e-002   1.927e-002     -1.586     -1.715     -0.129
    CaSO4          2.314e-004   2.677e-004     -3.636     -3.572      0.063
    MgSO4          7.856e-011   9.088e-011    -10.105    -10.042      0.063
    HSO4-          6.279e-014   4.666e-014    -13.202    -13.331     -0.129
    SO3-2          4.007e-016   1.222e-016    -15.397    -15.913     -0.516
    HSO3-          1.399e-022   1.040e-022    -21.854    -21.983     -0.129
    HS-            4.309e-024   2.647e-024    -23.366    -23.577     -0.212
    S-2            2.598e-029   5.150e-030    -28.585    -29.288     -0.703
    H2S            1.141e-030   1.320e-030    -29.943    -29.879      0.063
    H2SO3          3.189e-034   3.689e-034    -33.496    -33.433      0.063
    S2O3-2         8.931e-035   2.723e-035    -34.049    -34.565     -0.516
    AlSO4+         1.827e-035   1.358e-035    -34.738    -34.867     -0.129
    Al(SO4)2-      1.361e-035   1.011e-035    -34.866    -34.995     -0.129
    HS2O3-         0.000e+000   0.000e+000    -46.136    -46.265     -0.129
Si                 8.029e-006
    H2SiO4-2       5.533e-006   1.687e-006     -5.257     -5.773     -0.516
    H3SiO4-        2.495e-006   1.854e-006     -5.603     -5.732     -0.129
    H4SiO4         5.306e-010   6.138e-010     -9.275     -9.212      0.063
    H4Si2O7-2      4.790e-011   1.461e-011    -10.320    -10.835     -0.516
    H5Si2O7-       8.006e-014   5.949e-014    -13.097    -13.226     -0.129
    H5Si3O10-3     8.139e-015   5.622e-016    -14.089    -15.250     -1.161
    H3Si3O9-3      6.589e-016   4.552e-017    -15.181    -16.342     -1.161
    H4Si4O12-4     1.282e-018   1.108e-020    -17.892    -19.955     -2.063
    H5Si4O12-3     5.202e-022   3.594e-023    -21.284    -22.444     -1.161

-----------------------------Saturation indices-------------------------------

Phase                SI log IAP   log KT

AFWILLIT           -10.25    49.74    59.99   Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ALBITE             -14.23   -10.69     3.54   Na1.000Al1.000Si3.000O8.000
ANALCIM1            -8.43    -1.50     6.93   Si2.000Na1.000Al1.000H2.000O7.000
ANALCIM2           -18.52   -10.83     7.69   Si4.3Na1.7Al1.7H4.0O14.0
ANHYDRIT            -1.50    -5.88    -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
ANORTHHE           -14.38    12.32    26.70   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR           -14.05    12.32    26.37   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
BEID-CA            -26.24   -20.69     5.55   Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG            -27.26   -21.75     5.51   Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-NA            -25.78   -20.18     5.60   Na0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BRUCITE              0.00    16.30    16.30   Mg1.000H2.000O2.000
C2AH8               -7.27    53.37    60.64   Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4              -3.95    66.92    70.87   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1            -4.49    66.92    71.41   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13              -3.24    98.76   102.00   Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19              -3.26    98.71   101.98   Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)             -84.62    12.23    96.85   Ca1.000
CA(G)             -109.85    12.23   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2              0.00    22.71    22.71   Ca(OH)2
CAH10               -9.78    30.63    40.42   Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CAO(CR)             -9.98    22.72    32.70   Ca1.000O1.000
CHALCEDO            -5.71    -9.20    -3.49   Si1.000O2.000
CL(G)              -50.52    -9.08    41.44   Cl1.000
CL2(G)             -64.15   -18.17    45.98   Cl2.000
CLINOC40           -51.48   495.35   546.83   Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
CLINOZOI           -13.77    29.84    43.61   Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CSH(0.1)            -5.85    -6.92    -1.07   Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)            -5.22    -4.65     0.56   Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)            -4.61    -2.38     2.23   Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)            -4.02    -0.11     3.91   Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)            -3.44     2.16     5.60   Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)            -2.88     4.43     7.31   Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)            -2.34     6.70     9.04   Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)            -1.85     8.97    10.82   Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)          -1.71     9.72    11.44   Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)            -1.57    12.49    14.06   Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)            -1.00    13.51    14.51   Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)            -0.63    14.35    14.98   Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
CSH(1.2)            -0.39    15.05    15.44   Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)            -0.23    15.64    15.87   Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)            -0.13    16.14    16.27   Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)            -0.07    16.58    16.64   Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)            -0.02    16.96    16.99   Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)            -0.00    17.30    17.30   Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)             0.00    17.60    17.60   Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833             -1.71     9.72    11.44   Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
EPISTILB           -28.16   -24.50     3.66   CaAl2Si6O16:5H2O
ETTRINGI            -0.00    58.24    58.24   Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FOSHAGIT            -2.60    63.27    65.87   Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
FRIEDEL_             0.00    70.13    70.13   Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GEHL_HY             -6.15    44.17    50.32   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1            -4.99    44.17    49.16   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT           -12.04    44.24    56.28   Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE            -3.77     3.99     7.76   Al1.000H3.000O3.000
GROSSUL            -10.13    48.57    58.70   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1            -3.31    48.57    51.87   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM              -1.29    -5.90    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE            -5.03    17.83    22.86   Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)               -40.86    -5.25    35.61   H1.000
H2(G)              -10.50   -10.50     0.00   H2.000
H2O(G)              -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
```

```
H2S(G)          -28.86   -70.56   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)          -20.62   -14.33     6.29   Cl1.000H1.000
HILLEBRA         -0.47    36.23    36.70   Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR          -1.27    76.10    77.37   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1         -5.48    76.10    81.58   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL         -0.63    73.15    73.78   Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
JENNITE           2.60   149.20   146.60   Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
KAOLINIT        -19.49   -56.41   -36.92   Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE          -2.84    76.10    78.94   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONTI        -19.73    -6.10    13.63   Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LIME,            -9.98    22.72    32.70   Ca1.000O1.000
MG2SI2O6         -9.03    14.23    23.26   Mg2.000Si2.000O6.000
MONOSULF         -3.66    70.17    73.83   Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA         -23.55   -20.98     2.56   Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-MG         -24.51   -22.04     2.47   Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
MONT-NA         -22.98   -20.47     2.51   Mg0.330Al1.670Si4.000Na0.330H2.000O12.000
NA(CR)          -38.24     7.65    45.89   Na1.000
NA(G)           -51.73     7.65    59.38   Na1.000
O(G)            -71.66    10.49    82.15   O1.000
O2(G)           -62.11    20.98    83.09   O2.000
OKENITE          -6.01     4.31    10.32   Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
PARAGONI        -21.57    -2.70    18.87   Na1.000Al3.000Si3.000H2.000O12.000
PERICLAS         -5.27    16.31    21.58   Mg1.000O1.000
PLOMBIER         -5.42    58.33    63.75   Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN           0.00    22.71    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1          0.16    22.71    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
PYROPHYL        -29.25   -28.79     0.46   Si4.000Al2.000H2.000O12.000
QUARTZ           -5.42    -9.20    -3.78   Si1.000O2.000
RIVERSID        -10.59    58.39    68.98   Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)           -24.22   -60.06   -35.84   S1.000
S(G)            -65.69   -60.06     5.63   S1.000
S2(G)           -62.42  -120.13   -57.71   S2.000
SAPON-CA         -5.99    20.24    26.23   Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-MG         -7.01    19.18    26.19   Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SAPON-NA         -5.54    20.75    26.28   Mg3.000Al0.330Si3.670Na0.330H2.000O12.000
SCOLECIT        -10.31     3.10    13.41   Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000
SEP             -13.79   -51.00   -37.21   Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT        -20.34    10.00    30.35   Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)          -93.10   -30.17    62.93   Si1.000
SI(G)          -164.14   -30.17   133.97   Si1.000
SIL              -6.18    -9.20    -3.02   Si1.000H2.000O3.000
SIL(AM)1         -6.49    -9.20    -2.71   Si1.000O2.000
SILI(AM)         -6.56    -9.20    -2.64   Si1.000O2.000
SILICA          -11.97   -14.44    -2.47   Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)         -6.56    -9.20    -2.64   Si1.000O2.000
SIO2(QUA         -5.20    -9.20    -4.00   Si1.000O2.000
SO2(G)          -33.77   -39.09    -5.32   S1.000O2.000
STILBITE        -19.28   -13.77     5.51   Ca0.667Na0.333Al1.667Si4.333O12:4.666H2O
TALC             -8.94    12.13    21.07   Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR         -7.14    58.37    65.51   Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,          -14.02    -1.21    12.81   Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLIT         -4.29    53.41    57.70   Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
WAIRAKIT        -24.16    -6.08    18.08   CaAl2Si4O12:2H2O
XONOTLIT        -10.60    81.13    91.73   Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA        -28.56   -24.49     4.07   CaAl2Si6O16:4H2O
------------------
End of simulation.
------------------
------------------------------------
Reading input data for simulation 2.
------------------------------------
-----------
End of run.
-----------
```

リスト3-4　OPCペーストとSRHPとの反応に関する化学平衡計算
（液固比=1.8）

```
Input file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11．報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥3章
¥OPC-人工海水（AFm）-3.pqi
Output file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11．報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥3章
¥OPC-人工海水（AFm）-3.pqo
Database file: C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
-------------------------------------
Reading input data for simulation 1.
-------------------------------------

DATABASE C:¥nakanishi¥PHREEQ-C¥TDB¥050124_QC_a_small.tdb
Title OPC(AFt)-SRHP-3
PHASES
CSH(0.1)
Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
log_K -1.071
CSH(0.2)
Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
log_K 0.565
CSH(0.3)
Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
log_K 2.227
CSH(0.4)
Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
log_K 3.907
CSH(0.5)
Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
log_K 5.601
CSH(0.6)
Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
log_K 7.312
CSH(0.7)
Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
log_K 9.045
CSH(0.8)
Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
log_K 10.819
CSH(0.9)
Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
log_K 14.061
CSH(1.0)
Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
log_K 14.514
CSH(1.1)
Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
log_K 14.983
CSH(1.2)
Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
log_K 15.439
CSH(1.3)
Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
log_K 15.870
CSH(1.4)
Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
log_K 16.272
CSH(1.5)
Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
log_K 16.643
CSH(1.6)
Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
log_K 16.987
CSH(1.7)
Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
log_K 17.304
CSH(1.8)
Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
log_K 17.597
Ca(OH)2
Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
log_k 22.710
SiO2(am)
Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
log_K -2.639
CSH(0.833)
Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
log_K 11.436

SOLUTION 0    SRHP
                    units     mol/kgw
                pH          8.200
                density 1.000
                temp        25.0
                Ca          0.0093
                S           0.0264
```

```
                Na          0.460
                K             0.0133
                Mg           0.0524
                B            0.00036
                Sr          0.00011
                Cl           0.538
                C           0.0024
                Al           0.0
                Si           0.0
SOLUTION 1-10   SRHP
                   units     mol/kgw
                pH          8.200
                density 1.000
                temp       25.0
                Ca           0.0093
                S            0.0264
                Na           0.460
                K             0.0133
                Mg           0.0524
                B            0.00036
                Sr          0.00011
                Cl           0.538
                C           0.0024
                Al           0.0
                Si           0.0
EQUILIBRIUM_PHASES 1
        CSH(0.1)    0.0    0.0
        CSH(0.2)    0.0    0.0
        CSH(0.3)    0.0    0.0
        CSH(0.4)    0.0    0.0
        CSH(0.5)    0.0    0.0
        CSH(0.6)    0.0    0.0
        CSH(0.7)    0.0    0.0
        CSH(0.8)    0.0    0.0
        CSH(0.9)    0.0    0.0
        CSH(1.0)    0.0    0.0
        CSH(1.1)    0.0    0.0
        CSH(1.2)    0.0    0.0
        CSH(1.3)    0.0    0.0
        CSH(1.4)    0.0    0.0
        CSH(1.5)    0.0    0.0
        CSH(1.6)    0.0    0.0
        CSH(1.7)    0.0    0.0
        CSH(1.8)    0.0    2.97 #8.678104
        SiO2(am)    0.0    0.0
        CSH(0.833) 0.0    0.0
        Ca(OH)2      0.0    1.35 #3.934656
        ETTRINGI    0.0    0.0 #0.109932
        MONOSULF    0.0      0.11
        FRIEDEL_    0.0 0.0
        HYDROGR     0.0    0.13 #0.599229
        Brucite      0.0    0.23 #0.658933
        SEPIOLIT      0.0    0.0
        CALCITE 0.0 0.0
        HYDROTAL 0.0 0.0
        C3ASH4    0.0 0.0
        END
-----
TITLE
-----

 OPC(AFt)-SRHP-3

-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 0.            SRHP

----------------------------Solution composition-----------------------------

                Elements              Molality          Moles

                B                     3.600e-004    3.600e-004
                C                     2.400e-003    2.400e-003
                Ca                    9.300e-003    9.300e-003
                Cl                    5.380e-001    5.380e-001
                K                     1.330e-002    1.330e-002
                Mg                    5.240e-002    5.240e-002
                Na                    4.600e-001    4.600e-001
                S                     2.640e-002    2.640e-002
                Sr                    1.100e-004    1.100e-004

---------------------------Description of solution---------------------------

                                          pH   =     8.200
                                          pe   =     4.000
                          Activity of water   =     0.981
                              Ionic strength   =   6.449e-001
                           Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                 Total alkalinity (eq/kg)   = -2.132e-003
                        Total CO2 (mol/kg)   =   2.400e-003
                       Temperature (deg C)   =   25.000
                   Electrical balance (eq)   =   3.452e-003
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =     0.30
                                  Iterations   =     7
                                      Total H   = 1.110156e+002
                                      Total O   = 5.562009e+001
```

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	2.539e-006	1.556e-006	-5.595	-5.808	-0.213
H+	8.342e-009	6.310e-009	-8.079	-8.200	-0.121
H2O	5.551e+001	9.815e-001	1.744	-0.008	0.000
B	3.600e-004				
B(OH)3	3.152e-004	3.656e-004	-3.501	-3.437	0.064
H2BO3-	4.481e-005	3.335e-005	-4.349	-4.477	-0.128
C	2.400e-003				
HCO3-	1.692e-003	1.147e-003	-2.772	-2.940	-0.169
MgHCO3+	2.417e-004	1.799e-004	-3.617	-3.745	-0.128
NaHCO3	1.782e-004	2.067e-004	-3.749	-3.685	0.064
MgCO3	9.436e-005	1.095e-004	-4.025	-3.961	0.064
NaCO3-	6.787e-005	5.051e-005	-4.168	-4.297	-0.128
CaHCO3+	4.338e-005	2.942e-005	-4.363	-4.531	-0.169
CO3-2	4.018e-005	8.491e-006	-4.396	-5.071	-0.675
CaCO3	2.791e-005	3.238e-005	-4.554	-4.490	0.064
CO2	1.424e-005	1.652e-005	-4.846	-4.782	0.064
SrHCO3+	5.380e-007	3.648e-007	-6.269	-6.438	-0.169
SrCO3	9.761e-008	1.132e-007	-7.011	-6.946	0.064
CH4	0.000e+000	0.000e+000	-78.040	-77.976	0.064
Ca	9.300e-003				
Ca+2	8.270e-003	2.081e-003	-2.082	-2.682	-0.599
CaSO4	9.581e-004	1.111e-003	-3.019	-2.954	0.064
CaHCO3+	4.338e-005	2.942e-005	-4.363	-4.531	-0.169
CaCO3	2.791e-005	3.238e-005	-4.554	-4.490	0.064
CaOH+	1.098e-007	8.168e-008	-6.960	-7.088	-0.128
Cl	5.380e-001				
Cl-	5.380e-001	3.371e-001	-0.269	-0.472	-0.203
SrCl+	5.970e-006	4.443e-006	-5.224	-5.352	-0.128
SrCl2	2.046e-006	2.374e-006	-5.689	-5.625	0.064
ClO-	1.297e-034	9.652e-035	-33.887	-34.015	-0.128
ClOH	1.381e-035	1.602e-035	-34.860	-34.795	0.064
ClO2-	0.000e+000	0.000e+000	-59.437	-59.566	-0.128
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-65.869	-65.805	0.064
ClO3-	0.000e+000	0.000e+000	-73.410	-73.539	-0.128
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-90.567	-90.696	-0.128
H(0)	4.859e-028				
H2	2.429e-028	2.818e-028	-27.614	-27.550	0.064
K	1.330e-002				
K+	1.310e-002	8.205e-003	-1.883	-2.086	-0.203
KSO4-	2.047e-004	1.523e-004	-3.689	-3.817	-0.128
Mg	5.240e-002				
Mg+2	4.664e-002	1.349e-002	-1.331	-1.870	-0.539
MgSO4	5.422e-003	6.290e-003	-2.266	-2.201	0.064
MgHCO3+	2.417e-004	1.799e-004	-3.617	-3.745	-0.128
MgCO3	9.436e-005	1.095e-004	-4.025	-3.961	0.064
MgOH+	4.531e-006	3.372e-006	-5.344	-5.472	-0.128
Na	4.600e-001				
Na+	4.541e-001	3.210e-001	-0.343	-0.494	-0.151
NaSO4-	5.668e-003	4.218e-003	-2.247	-2.375	-0.128
NaHCO3	1.782e-004	2.067e-004	-3.749	-3.685	0.064
NaCO3-	6.787e-005	5.051e-005	-4.168	-4.297	-0.128
O(0)	8.716e-038				
O2	4.358e-038	5.055e-038	-37.361	-37.296	0.064
S	2.640e-002				
SO4-2	1.413e-002	2.622e-003	-1.850	-2.581	-0.732
NaSO4-	5.668e-003	4.218e-003	-2.247	-2.375	-0.128
MgSO4	5.422e-003	6.290e-003	-2.266	-2.201	0.064
CaSO4	9.581e-004	1.111e-003	-3.019	-2.954	0.064
KSO4-	2.047e-004	1.523e-004	-3.689	-3.817	-0.128
SrSO4	1.675e-005	1.944e-005	-4.776	-4.711	0.064
HSO4-	2.157e-009	1.605e-009	-8.666	-8.794	-0.128
SO3-2	1.390e-030	4.264e-031	-29.857	-30.370	-0.513
HSO3-	5.999e-032	4.465e-032	-31.222	-31.350	-0.128
H2SO3	1.680e-038	1.949e-038	-37.775	-37.710	0.064
HS-	0.000e+000	0.000e+000	-74.443	-74.656	-0.213
H2S	0.000e+000	0.000e+000	-75.932	-75.868	0.064
S2O3-2	0.000e+000	0.000e+000	-80.594	-81.107	-0.513
S-2	0.000e+000	0.000e+000	-84.751	-85.457	-0.706
HS2O3-	0.000e+000	0.000e+000	-87.589	-87.717	-0.128
Sr	1.100e-004				
Sr+2	8.459e-005	2.089e-005	-4.073	-4.680	-0.607
SrSO4	1.675e-005	1.944e-005	-4.776	-4.711	0.064
SrCl+	5.970e-006	4.443e-006	-5.224	-5.352	-0.128
SrCl2	2.046e-006	2.374e-006	-5.689	-5.625	0.064
SrHCO3+	5.380e-007	3.648e-007	-6.269	-6.438	-0.169
SrCO3	9.761e-008	1.132e-007	-7.011	-6.946	0.064
SrOH+	3.238e-010	2.157e-010	-9.490	-9.666	-0.176
Sr(OH)2	1.378e-017	1.598e-017	-16.861	-16.796	0.064

----------Saturation indices----------

Phase	SI	log IAP	log KT	
ANHYDRIT	-0.88	-5.26	-4.38	Ca1.000S1.000O4.000
ARAGONIT	0.59	-7.75	-8.34	C1.000Ca1.000O3.000
B(CR)	-85.18	-40.01	45.17	B1.000
B(G)	-176.46	-40.01	136.45	B1.000
B(OH)3(C	-3.37	-3.44	-0.07	B1.000H3.000O3.000
B2O3(CR)	-12.60	-6.85	5.75	B2.000O3.000
BRUCITE	-1.79	14.51	16.30	Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)	-38.10	-70.25	-32.15	C1.000
C(G)	-155.70	-70.25	85.45	C1.000

CA(CR)	-107.53	-10.68	96.85	Ca1.000
CA(G)	-132.76	-10.68	122.08	Ca1.000
Ca(OH)2	-9.01	13.70	22.71	Ca(OH)2
CALCITE	0.73	-7.75	-8.48	C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)	-18.99	13.71	32.70	Ca1.000O1.000
CELESTIT	-0.68	-7.26	-6.58	Sr1.000S1.000O4.000
CH4	-75.12	-119.05	-43.93	C1.000H4.000
CL(G)	-37.91	3.53	41.44	Cl1.000
CL2(G)	-38.92	7.06	45.98	Cl2.000
CO(G)	-31.21	-45.85	-14.64	C1.000O1.000
CO2(G)	-3.31	-21.46	-18.15	C1.000O2.000
DOLOMITE	2.40	-14.69	-17.09	Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
GYPSUM	-0.68	-5.28	-4.60	Ca1.000S1.000H4.000O6.000
H(G)	-47.81	-12.20	35.61	H1.000
H2(G)	-24.40	-24.40	0.00	H2.000
H2O(G)	-1.51	-0.01	1.50	H2.000O1.000
H2S(G)	-74.85	-116.55	-41.70	S1.000H2.000
HCL(G)	-14.96	-8.67	6.29	Cl1.000H1.000
K(CR)	-55.58	-6.09	49.49	K1.000
K(G)	-66.18	-6.09	60.09	K1.000
LIME,	-18.99	13.71	32.70	Ca1.000O1.000
NA(CR)	-50.38	-4.49	45.89	Na1.000
NA(G)	-63.87	-4.49	59.38	Na1.000
O(G)	-57.76	24.39	82.15	O1.000
O2(G)	-34.31	48.78	83.09	O2.000
PERICLAS	-7.06	14.52	21.58	Mg1.000O1.000
PORTLAN	-9.01	13.70	22.71	Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1	-8.85	13.70	22.55	Ca1.000H2.000O2.000
S(CR)	-56.31	-92.15	-35.84	S1.000
S(G)	-97.78	-92.15	5.63	S1.000
S2(G)	-126.59	-184.30	-57.71	S2.000
SO2(G)	-38.05	-43.37	-5.32	S1.000O2.000
SR(CR)	-111.47	-12.68	98.79	Sr1.000
SRCL2(CR	-12.86	-5.62	7.24	Sr1.000Cl2.000
SRCO3	-0.50	-9.75	-9.25	Sr1.000C1.000O3.000
SRO(CR)	-30.52	11.71	42.23	Sr1.000O1.000
SROH2	-13.28	11.70	24.98	Sr1.000H2.000O2.000
SRSO4	-0.84	-7.26	-6.42	Sr1.000S1.000O4.000
STRONTIT	-0.48	-9.75	-9.27	Sr1.000C1.000O3.000

Initial solution 1. SRHP

----------Solution composition----------

Elements	Molality	Moles
B	3.600e-004	3.600e-004
C	2.400e-003	2.400e-003
Ca	9.300e-003	9.300e-003
Cl	5.380e-001	5.380e-001
K	1.330e-002	1.330e-002
Mg	5.240e-002	5.240e-002
Na	4.600e-001	4.600e-001
S	2.640e-002	2.640e-002
Sr	1.100e-004	1.100e-004

----------Description of solution----------

pH = 8.200
pe = 4.000
Activity of water = 0.981
Ionic strength = 6.449e-001
Mass of water (kg) = 1.000e+000
Total alkalinity (eq/kg) = -2.132e-003
Total CO2 (mol/kg) = 2.400e-003
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = 3.452e-003
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = 0.30
Iterations = 7
Total H = 1.110156e+002
Total O = 5.562009e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	2.539e-006	1.556e-006	-5.595	-5.808	-0.213
H+	8.342e-009	6.310e-009	-8.079	-8.200	-0.121
H2O	5.551e+001	9.815e-001	1.744	-0.008	0.000
B 3.600e-004					
B(OH)3	3.152e-004	3.656e-004	-3.501	-3.437	0.064
H2BO3-	4.481e-005	3.335e-005	-4.349	-4.477	-0.128
C 2.400e-003					
HCO3-	1.692e-003	1.147e-003	-2.772	-2.940	-0.169
MgHCO3+	2.417e-004	1.799e-004	-3.617	-3.745	-0.128
NaHCO3	1.782e-004	2.067e-004	-3.749	-3.685	0.064
MgCO3	9.436e-005	1.095e-004	-4.025	-3.961	0.064
NaCO3-	6.787e-005	5.051e-005	-4.168	-4.297	-0.128
CaHCO3+	4.338e-005	2.942e-005	-4.363	-4.531	-0.169
CO3-2	4.018e-005	8.491e-006	-4.396	-5.071	-0.675
CaCO3	2.791e-005	3.238e-005	-4.554	-4.490	0.064
CO2	1.424e-005	1.652e-005	-4.846	-4.782	0.064
SrHCO3+	5.380e-007	3.648e-007	-6.269	-6.438	-0.169
SrCO3	9.761e-008	1.132e-007	-7.011	-6.946	0.064
CH4	0.000e+000	0.000e+000	-78.040	-77.976	0.064
Ca 9.300e-003					
Ca+2	8.270e-003	2.081e-003	-2.082	-2.682	-0.599

CaSO4	9.581e-004	1.111e-003	-3.019	-2.954	0.064
CaHCO3+	4.338e-005	2.942e-005	-4.363	-4.531	-0.169
CaCO3	2.791e-005	3.238e-005	-4.554	-4.490	0.064
CaOH+	1.098e-007	8.168e-008	-6.960	-7.088	-0.128
Cl	5.380e-001				
Cl-	5.380e-001	3.371e-001	-0.269	-0.472	-0.203
SrCl+	5.970e-006	4.443e-006	-5.224	-5.352	-0.128
SrCl2	2.046e-006	2.374e-006	-5.689	-5.625	0.064
ClO-	1.297e-034	9.652e-035	-33.887	-34.015	-0.128
ClOH	1.381e-035	1.602e-035	-34.860	-34.795	0.064
ClO2-	0.000e+000	0.000e+000	-59.437	-59.566	-0.128
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-65.869	-65.805	0.064
ClO3-	0.000e+000	0.000e+000	-73.410	-73.539	-0.128
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-90.567	-90.696	-0.128
H(0)	4.859e-028				
H2	2.429e-028	2.818e-028	-27.614	-27.550	0.064
K	1.330e-002				
K+	1.310e-002	8.205e-003	-1.883	-2.086	-0.203
KSO4-	2.047e-004	1.523e-004	-3.689	-3.817	-0.128
Mg	5.240e-002				
Mg+2	4.664e-002	1.349e-002	-1.331	-1.870	-0.539
MgSO4	5.422e-003	6.290e-003	-2.266	-2.201	0.064
MgHCO3+	2.417e-004	1.799e-004	-3.617	-3.745	-0.128
MgCO3	9.436e-005	1.095e-004	-4.025	-3.961	0.064
MgOH+	4.531e-006	3.372e-006	-5.344	-5.472	-0.128
Na	4.600e-001				
Na+	4.541e-001	3.210e-001	-0.343	-0.494	-0.151
NaSO4-	5.668e-003	4.218e-003	-2.247	-2.375	-0.128
NaHCO3	1.782e-004	2.067e-004	-3.749	-3.685	0.064
NaCO3-	6.787e-005	5.051e-005	-4.168	-4.297	-0.128
O(0)	8.716e-038				
O2	4.358e-038	5.055e-038	-37.361	-37.296	0.064
S	2.640e-002				
SO4-2	1.413e-002	2.622e-003	-1.850	-2.581	-0.732
NaSO4-	5.668e-003	4.218e-003	-2.247	-2.375	-0.128
MgSO4	5.422e-003	6.290e-003	-2.266	-2.201	0.064
CaSO4	9.581e-004	1.111e-003	-3.019	-2.954	0.064
KSO4-	2.047e-004	1.523e-004	-3.689	-3.817	-0.128
SrSO4	1.675e-005	1.944e-005	-4.776	-4.711	0.064
HSO4-	2.157e-009	1.605e-009	-8.666	-8.794	-0.128
SO3-2	1.390e-030	4.264e-031	-29.857	-30.370	-0.513
HSO3-	5.999e-032	4.465e-032	-31.222	-31.350	-0.128
H2SO3	1.680e-038	1.949e-038	-37.775	-37.710	0.064
HS-	0.000e+000	0.000e+000	-74.443	-74.656	-0.213
H2S	0.000e+000	0.000e+000	-75.932	-75.868	0.064
S2O3-2	0.000e+000	0.000e+000	-80.594	-81.107	-0.513
S-2	0.000e+000	0.000e+000	-84.751	-85.457	-0.706
HS2O3-	0.000e+000	0.000e+000	-87.589	-87.717	-0.128
Sr	1.100e-004				
Sr+2	8.459e-005	2.089e-005	-4.073	-4.680	-0.607
SrSO4	1.675e-005	1.944e-005	-4.776	-4.711	0.064
SrCl+	5.970e-006	4.443e-006	-5.224	-5.352	-0.128
SrCl2	2.046e-006	2.374e-006	-5.689	-5.625	0.064
SrHCO3+	5.380e-007	3.648e-007	-6.269	-6.438	-0.169
SrCO3	9.761e-008	1.132e-007	-7.011	-6.946	0.064
SrOH+	3.238e-010	2.157e-010	-9.490	-9.666	-0.176
Sr(OH)2	1.378e-017	1.598e-017	-16.861	-16.796	0.064

----------Saturation indices----------

Phase	SI	log IAP	log KT	
ANHYDRIT	-0.88	-5.26	-4.38	Ca1.000S1.000O4.000
ARAGONIT	0.59	-7.75	-8.34	C1.000Ca1.000O3.000
B(CR)	-85.18	-40.01	45.17	B1.000
B(G)	-176.46	-40.01	136.45	B1.000
B(OH)3(C	-3.37	-3.44	-0.07	B1.000H3.000O3.000
B2O3(CR)	-12.60	-6.85	5.75	B2.000O3.000
BRUCITE	-1.79	14.51	16.30	Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)	-38.10	-70.25	-32.15	C1.000
C(G)	-155.70	-70.25	85.45	C1.000
CA(CR)	-107.53	-10.68	96.85	Ca1.000
CA(G)	-132.76	-10.68	122.08	Ca1.000
Ca(OH)2	-9.01	13.70	22.71	Ca(OH)2
CALCITE	0.73	-7.75	-8.48	C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)	-18.99	13.71	32.70	Ca1.000O1.000
CELESTIT	-0.68	-7.26	-6.58	Sr1.000S1.000O4.000
CH4	-75.12	-119.05	-43.93	C1.000H4.000
CL(G)	-37.91	3.53	41.44	Cl1.000
CL2(G)	-38.92	7.06	45.98	Cl2.000
CO(G)	-31.21	-45.85	-14.64	C1.000O1.000
CO2(G)	-3.31	-21.46	-18.15	C1.000O2.000
DOLOMITE	2.40	-14.69	-17.09	Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
GYPSUM	-0.68	-5.28	-4.60	Ca1.000S1.000H4.000O6.000
H(G)	-47.81	-12.20	35.61	H1.000
H2(G)	-24.40	-24.40	0.00	H2.000
H2O(G)	-1.51	-0.01	1.50	H2.000O1.000
H2S(G)	-74.85	-116.55	-41.70	S1.000H2.000
HCL(G)	-14.96	-8.67	6.29	Cl1.000H1.000
K(CR)	-55.58	-6.09	49.49	K1.000
K(G)	-66.18	-6.09	60.09	K1.000
LIME,	-18.99	13.71	32.70	Ca1.000O1.000
NA(CR)	-50.38	-4.49	45.89	Na1.000
NA(G)	-63.87	-4.49	59.38	Na1.000
O(G)	-57.76	24.39	82.15	O1.000
O2(G)	-34.31	48.78	83.09	O2.000
PERICLAS	-7.06	14.52	21.58	Mg1.000O1.000
PORTLAN	-9.01	13.70	22.71	Ca1.000H2.000O2.000

PORTLAN1	-8.85	13.70	22.55	Ca1.000H2.000O2.000
S(CR)	-56.31	-92.15	-35.84	S1.000
S(G)	-97.78	-92.15	5.63	S1.000
S2(G)	-126.59	-184.30	-57.71	S2.000
SO2(G)	-38.05	-43.37	-5.32	S1.000O2.000
SR(CR)	-111.47	-12.68	98.79	Sr1.000
SRCL2(CR	-12.86	-5.62	7.24	Sr1.000Cl2.000
SRCO3	-0.50	-9.75	-9.25	Sr1.000C1.000O3.000
SRO(CR)	-30.52	11.71	42.23	Sr1.000O1.000
SROH2	-13.28	11.70	24.98	Sr1.000H2.000O2.000
SRSO4	-0.84	-7.26	-6.42	Sr1.000S1.000O4.000
STRONTIT	-0.48	-9.75	-9.27	Sr1.000C1.000O3.000

Beginning of batch-reaction calculations.

Reaction step 1.

Using solution 0. SRHP
Using pure phase assemblage 1.

----------Phase assemblage----------

Phase	SI	log IAP	log KT	Moles in assemblage Initial	Final	Delta
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	2.300e-001	2.824e-001	5.240e-002
C3ASH4	-3.93	66.94	70.87	0.000e+000	0	0.000e+000
Ca(OH)2	0.00	22.71	22.71	1.350e+000	1.166e+000	-1.838e-001
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	0.000e+000	2.176e-003	2.176e-003
CSH(0.1)	-5.85	-6.92	-1.07	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.2)	-5.22	-4.65	0.56	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.3)	-4.61	-2.38	2.23	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.4)	-4.02	-0.11	3.91	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.5)	-3.44	2.16	5.60	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.6)	-2.88	4.43	7.31	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.7)	-2.34	6.70	9.04	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.8)	-1.85	8.97	10.82	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.833)	-1.71	9.72	11.44	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.9)	-1.57	12.49	14.06	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.0)	-1.00	13.51	14.51	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.1)	-0.63	14.35	14.98	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.2)	-0.39	15.05	15.44	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.3)	-0.23	15.64	15.87	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.4)	-0.13	16.14	16.27	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.5)	-0.07	16.58	16.64	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.6)	-0.02	16.96	16.99	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.7)	-0.00	17.30	17.30	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.8)	0.00	17.60	17.60	2.970e+000	2.970e+000	-1.174e-005
ETTRINGI	0.00	58.24	58.24	0.000e+000	2.948e-002	2.948e-002
FRIEDEL_	0.00	70.13	70.13	0.000e+000	2.105e-001	2.105e-001
HYDROGR	-1.25	76.12	77.37	1.300e-001	0	-1.300e-001
HYDROTAL	-0.61	73.17	73.78	0.000e+000	0	0.000e+000
MONOSULF	-3.65	70.18	73.83	1.100e-001	0	-1.100e-001
SEPIOLIT	-20.34	10.01	30.35	0.000e+000	0	0.000e+000
SiO2(am)	-6.56	-9.20	-2.64	0.000e+000	0	0.000e+000

----------Solution composition----------

Elements	Molality	Moles
Al	2.257e-006	2.218e-006
B	3.662e-004	3.600e-004
C	2.281e-004	2.242e-004
Ca	1.997e-003	1.963e-003
Cl	1.190e-001	1.170e-001
K	1.353e-002	1.330e-002
Mg	2.941e-009	2.891e-009
Na	4.680e-001	4.600e-001
S	4.879e-002	4.796e-002
Si	6.643e-006	6.530e-006
Sr	1.119e-004	1.100e-004

----------Description of solution----------

pH = 13.229 Charge balance
pe = -7.656 Adjusted to redox equilibrium
Activity of water = 0.985
Ionic strength = 5.007e-001
Mass of water (kg) = 9.830e-001
Total alkalinity (eq/kg) = 2.652e-001
Total CO2 (mol/kg) = 2.281e-004
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = 3.452e-003
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = 0.38
Iterations = 21
Total H = 1.093813e+002
Total O = 5.501402e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	2.637e-001	1.669e-001	-0.579	-0.778	-0.199
H+	7.718e-014	5.901e-014	-13.112	-13.229	-0.117
H2O	5.551e+001	9.847e-001	1.744	-0.007	0.000

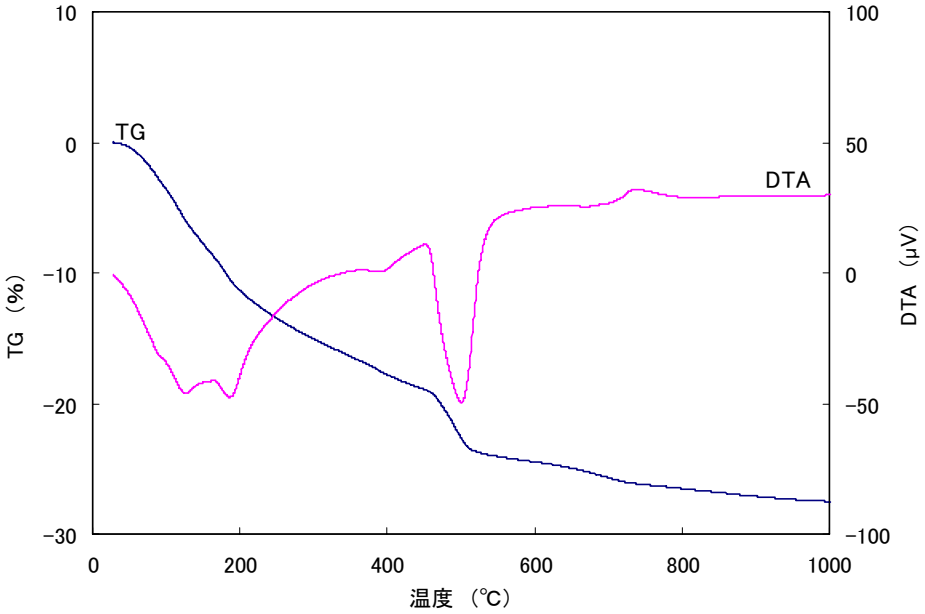
Al	2.257e-006				
Al(OH)4-	2.257e-006	1.655e-006	-5.647	-5.781	-0.135
Al(OH)3	8.840e-013	9.920e-013	-12.054	-12.003	0.050
Al(OH)2+	6.437e-020	4.722e-020	-19.191	-19.326	-0.135
AlOH+2	1.259e-027	3.645e-028	-26.900	-27.438	-0.538
Al+3	2.392e-035	2.135e-036	-34.621	-35.671	-1.049
AlSO4+	2.072e-035	1.520e-035	-34.684	-34.818	-0.135
Al(SO4)2-	1.119e-035	8.207e-036	-34.951	-35.086	-0.135
B	3.662e-004				
H2BO3-	3.662e-004	2.687e-004	-3.436	-3.571	-0.135
B(OH)3	2.455e-008	2.755e-008	-7.610	-7.560	0.050
C	2.281e-004				
NaCO3-	1.448e-004	1.062e-004	-3.839	-3.974	-0.135
CO3-2	7.777e-005	1.784e-005	-4.109	-4.749	-0.639
CaCO3	5.366e-006	6.021e-006	-5.270	-5.220	0.050
SrCO3	1.468e-007	1.647e-007	-6.833	-6.783	0.050
HCO3-	3.256e-008	2.254e-008	-7.487	-7.647	-0.160
NaHCO3	3.622e-009	4.065e-009	-8.441	-8.391	0.050
CaHCO3+	7.392e-011	5.116e-011	-10.131	-10.291	-0.160
SrHCO3+	7.170e-012	4.962e-012	-11.144	-11.304	-0.160
MgCO3	1.088e-012	1.221e-012	-11.963	-11.913	0.050
CO2	2.697e-015	3.026e-015	-14.569	-14.519	0.050
MgHCO3+	2.558e-017	1.877e-017	-16.592	-16.727	-0.135
CH4	1.761e-035	1.976e-035	-34.754	-34.704	0.050
Ca	1.997e-003				
CaOH+	1.057e-003	7.755e-004	-2.976	-3.110	-0.135
Ca+2	7.071e-004	1.842e-004	-3.151	-3.735	-0.584
CaSO4	2.273e-004	2.551e-004	-3.643	-3.593	0.050
CaCO3	5.366e-006	6.021e-006	-5.270	-5.220	0.050
CaHCO3+	7.392e-011	5.116e-011	-10.131	-10.291	-0.160
Cl	1.190e-001				
Cl-	1.190e-001	7.661e-002	-0.924	-1.116	-0.191
SrCl+	9.528e-007	6.990e-007	-6.021	-6.156	-0.135
SrCl2	7.562e-008	8.486e-008	-7.121	-7.071	0.050
ClO-	0.000e+000	0.000e+000	-47.776	-47.910	-0.135
ClOH	0.000e+000	0.000e+000	-53.769	-53.719	0.050
ClO2-	0.000e+000	0.000e+000	-86.577	-86.712	-0.135
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-98.030	-97.980	0.050
ClO3-	0.000e+000	0.000e+000	-113.802	-113.936	-0.135
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-144.210	-144.345	-0.135
H(0)	8.991e-015				
H2	4.496e-015	5.045e-015	-14.347	-14.297	0.050
K	1.353e-002				
K+	1.298e-002	8.358e-003	-1.887	-2.078	-0.191
KSO4-	5.484e-004	4.023e-004	-3.261	-3.395	-0.135
Mg	2.941e-009				
MgOH+	2.618e-009	1.921e-009	-8.582	-8.717	-0.135
Mg+2	2.442e-010	7.163e-011	-9.612	-10.145	-0.533
MgSO4	7.717e-011	8.660e-011	-10.113	-10.063	0.050
MgCO3	1.088e-012	1.221e-012	-11.963	-11.913	0.050
MgHCO3+	2.558e-017	1.877e-017	-16.592	-16.727	-0.135
Na	4.680e-001				
Na+	4.529e-001	3.212e-001	-0.344	-0.493	-0.149
NaSO4-	1.492e-002	1.094e-002	-1.826	-1.961	-0.135
NaCO3-	1.448e-004	1.062e-004	-3.839	-3.974	-0.135
NaHCO3	3.622e-009	4.065e-009	-8.441	-8.391	0.050
O(0)	0.000e+000				
O2	0.000e+000	0.000e+000	-63.849	-63.799	0.050
S	4.879e-002				
SO4-2	3.306e-002	6.799e-003	-1.481	-2.168	-0.687
NaSO4-	1.492e-002	1.094e-002	-1.826	-1.961	-0.135
KSO4-	5.484e-004	4.023e-004	-3.261	-3.395	-0.135
CaSO4	2.273e-004	2.551e-004	-3.643	-3.593	0.050
SrSO4	3.108e-005	3.488e-005	-4.507	-4.457	0.050
MgSO4	7.717e-011	8.660e-011	-10.113	-10.063	0.050
HSO4-	5.306e-014	3.892e-014	-13.275	-13.410	-0.135
SO3-2	6.810e-017	1.972e-017	-16.167	-16.705	-0.538
HSO3-	2.633e-023	1.931e-023	-22.580	-22.714	-0.135
HS-	8.576e-027	5.427e-027	-26.067	-26.265	-0.199
S-2	4.261e-032	9.175e-033	-31.371	-32.037	-0.667
H2S	2.776e-033	3.115e-033	-32.557	-32.507	0.050
H2SO3	7.026e-035	7.885e-035	-34.153	-34.103	0.050
AlSO4+	2.072e-035	1.520e-035	-34.684	-34.818	-0.135
Al(SO4)2-	1.119e-035	8.207e-036	-34.951	-35.086	-0.135
S2O3-2	1.602e-037	4.640e-038	-36.795	-37.333	-0.538
HS2O3-	0.000e+000	0.000e+000	-48.838	-48.973	-0.135
Si	6.643e-006				
H2SiO4-2	4.431e-006	1.283e-006	-5.354	-5.892	-0.538
H3SiO4-	2.212e-006	1.623e-006	-5.655	-5.790	-0.135
H4SiO4	5.509e-010	6.182e-010	-9.259	-9.209	0.050
H4Si2O7-2	3.849e-011	1.115e-011	-10.415	-10.953	-0.538
H5Si2O7-	7.122e-014	5.225e-014	-13.147	-13.282	-0.135
H5Si3O10-3	6.081e-015	3.742e-016	-14.216	-15.427	-1.211
H3Si3O9-3	4.905e-016	3.018e-017	-15.309	-16.520	-1.211
H4Si4O12-4	9.107e-019	6.407e-021	-18.041	-20.193	-2.153
H5Si4O12-3	3.886e-022	2.391e-023	-21.411	-22.621	-1.211
Sr	1.119e-004				
Sr+2	5.602e-005	1.446e-005	-4.252	-4.840	-0.588
SrSO4	3.108e-005	3.488e-005	-4.507	-4.457	0.050
SrOH+	2.351e-005	1.602e-005	-4.629	-4.795	-0.167
SrCl+	9.528e-007	6.990e-007	-6.021	-6.156	-0.135
SrCO3	1.468e-007	1.647e-007	-6.833	-6.783	0.050
Sr(OH)2	1.135e-007	1.273e-007	-6.945	-6.895	0.050
SrCl2	7.562e-008	8.486e-008	-7.121	-7.071	0.050
SrHCO3+	7.170e-012	4.962e-012	-11.144	-11.304	-0.160

----------Saturation indices----------

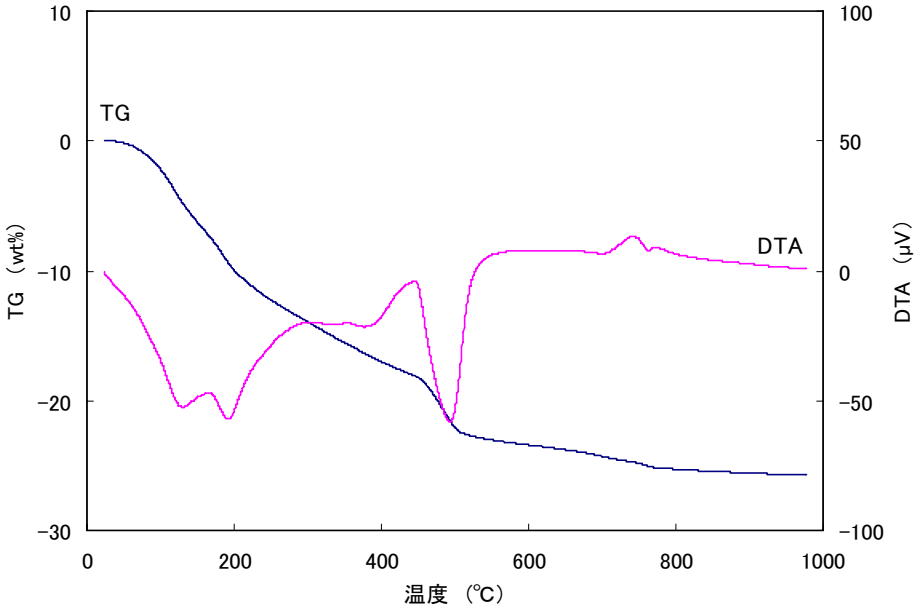
Phase	SI	log IAP	log KT	
AFWILLIT	-10.25	49.74	59.99	Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ALBITE	-14.39	-10.85	3.54	Na1.000Al1.000Si3.000O8.000
ALUNITE	-35.70	-34.09	1.61	Al3.000S2.000K1.000H6.000O14.000
ANALCIM1	-8.59	-1.66	6.93	Si2.000Na1.000Al1.000H2.000O7.000
ANALCIM2	-18.79	-11.10	7.69	Si4.3Na1.7Al1.7H4.0O14.0
ANHYDRIT	-1.52	-5.90	-4.38	Ca1.000S1.000O4.000
ANORTHHE	-14.36	12.34	26.70	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR	-14.03	12.34	26.37	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	C1.000Ca1.000O3.000
B(CR)	-69.43	-24.26	45.17	B1.000
B(G)	-160.71	-24.26	136.45	B1.000
B(OH)3(C	-7.49	-7.56	-0.07	B1.000H3.000O3.000
B2O3(CR)	-20.85	-15.10	5.75	B2.000O3.000
BEID-CA	-26.22	-20.67	5.55	Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-K	-26.00	-20.74	5.26	K0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG	-27.24	-21.73	5.51	Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-NA	-25.82	-20.22	5.60	Na0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)	-21.33	-53.48	-32.15	C1.000
C(G)	-138.93	-53.48	85.45	C1.000
C2AH8	-7.25	53.39	60.64	Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4	-3.93	66.94	70.87	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1	-4.47	66.94	71.41	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13	-3.21	98.79	102.00	Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19	-3.22	98.75	101.98	Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)	-85.27	11.58	96.85	Ca1.000
CA(G)	-110.50	11.58	122.08	Ca1.000
Ca(OH)2	0.00	22.71	22.71	Ca(OH)2
CAH10	-9.75	30.66	40.42	Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)	-9.98	22.72	32.70	Ca1.000O1.000
CELESTIT	-0.43	-7.01	-6.58	Sr1.000S1.000O4.000
CH4	-31.84	-75.78	-43.93	C1.000H4.000
CHABAZ_a	-23.82	-23.84	-0.02	Si4.767Na0.817Al1.233K0.15Ca0.133H12.0O18.0
CHABAZ_d	-22.49	-21.28	1.21	Si4.65Na0.617Al1.35K0.333Ca0.2H12.0O18.0
CHALCEDO	-5.71	-9.20	-3.49	Si1.000O2.000
CL(G)	-50.21	-8.77	41.44	Cl1.000
CL2(G)	-63.52	-17.54	45.98	Cl2.000
CLINOC40	-51.37	495.46	546.83	Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
CLINOP_a	-24.77	-27.07	-2.29	Si4.867Na0.283Al1.133K0.384Ca0.233H8.67O16.335
CLINOP_d	-24.93	-27.31	-2.38	Si4.867Na0.067Al1.133K0.132Ca0.467H8.67O16.335
CLINOZOI	-13.75	29.86	43.61	Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CO(G)	-27.70	-42.34	-14.64	C1.000O1.000
CO2(G)	-13.05	-31.20	-18.15	C1.000O2.000
CSH(0.1)	-5.85	-6.92	-1.07	Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)	-5.22	-4.65	0.56	Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)	-4.61	-2.38	2.23	Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)	-4.02	-0.11	3.91	Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)	-3.44	2.16	5.60	Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)	-2.88	4.43	7.31	Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)	-2.34	6.70	9.04	Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)	-1.85	8.97	10.82	Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)	-1.71	9.72	11.44	Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)	-1.57	12.49	14.06	Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)	-1.00	13.51	14.51	Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)	-0.63	14.35	14.98	Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
CSH(1.2)	-0.39	15.05	15.44	Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)	-0.23	15.64	15.87	Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)	-0.13	16.14	16.27	Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)	-0.07	16.58	16.64	Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)	-0.02	16.96	16.99	Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)	-0.00	17.30	17.30	Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)	0.00	17.60	17.60	Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833	-1.71	9.72	11.44	Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
DOLOMITE	-6.29	-23.38	-17.09	Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
EPISTILB	-28.14	-24.48	3.66	CaAl2Si6O16:5H2O
ERIONI_a	-22.91	-22.60	0.31	Si4.7Na0.567Al1.3K0.467Ca0.133H10.00O17.00
ERIONI_d	-22.21	-21.46	0.75	Si4.633Na0.2Al1.367K0.501Ca0.333H10.0O17.0
ETTRINGI	0.00	58.24	58.24	Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FOSHAGIT	-2.60	63.27	65.87	Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
FRIEDEL_	0.00	70.13	70.13	Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GEHL_HY	-6.12	44.20	50.32	Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1	-4.96	44.20	49.16	Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT	-12.03	44.25	56.28	Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE	-3.76	4.00	7.76	Al1.000H3.000O3.000
GROSSUL	-10.12	48.58	58.70	Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1	-3.30	48.58	51.87	Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM	-1.31	-5.92	-4.60	Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE	-5.03	17.83	22.86	Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)	-41.18	-5.57	35.61	H1.000
H2(G)	-11.15	-11.15	0.00	H2.000
H2O(G)	-1.51	-0.01	1.50	H2.000O1.000
H2S(G)	-31.49	-73.19	-41.70	S1.000H2.000
HCL(G)	-20.63	-14.34	6.29	Cl1.000H1.000
HEULANDI	-22.84	-22.25	0.59	Si4.667Na0.167Al1.333K0.066Ca0.55H8.67O16.335
HILLEBRA	-0.47	36.23	36.70	Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR	-1.25	76.12	77.37	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1	-5.46	76.12	81.58	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL	-0.61	73.17	73.78	Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
ILLITE	-21.18	-12.21	8.97	Mg0.250Al2.300Si3.500K0.600H2.000O12.000
JENNITE	2.60	149.20	146.60	Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
K(CR)	-43.91	5.58	49.49	K1.000
K(G)	-54.51	5.58	60.09	K1.000
K-FELDSP	-12.20	-12.43	-0.23	Si3.000K1.000Al1.000O8.000

```
KAOLINIT        -19.47   -56.39   -36.92   Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE          -2.82    76.12    78.94   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONTI        -19.71    -6.08    13.63   Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LEUCITE          -9.39    -3.24     6.16   Si2.000K1.000Al1.000O6.000
LIME,            -9.98    22.72    32.70   Ca1.000O1.000
MG2SI2O6         -9.04    14.22    23.26   Mg2.000Si2.000O6.000
MICROCLI        -14.21   -12.43     1.78   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
MONOSULF         -3.65    70.18    73.83   Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA         -23.53   -20.97     2.56   Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-K          -23.11   -21.04     2.07   Mg0.330Al1.670Si4.000K0.330H2.000O12.000
MONT-MG         -24.49   -22.03     2.47   Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
MONT-NA         -23.02   -20.51     2.51   Mg0.330Al1.670Si4.000Na0.330H2.000O12.000
MORDENIT        -26.30   -30.19    -3.89   Si5Na0.35Al1.0K0.15Ca0.25H7.334O15.667
MUSCOVIT        -19.03    -4.43    14.60   Al3.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
NA(CR)          -38.73     7.16    45.89   Na1.000
NA(G)           -52.22     7.16    59.38   Na1.000
O(G)            -71.01    11.14    82.15   O1.000
O2(G)           -60.81    22.28    83.09   O2.000
OKENITE          -6.00     4.31    10.32   Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
ORTHOCLA        -13.29   -12.43     0.86   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
PARAGONI        -21.71    -2.84    18.87   Na1.000Al3.000Si3.000H2.000O12.000
PERICLAS         -5.27    16.31    21.58   Mg1.000O1.000
PHILLI_a        -14.37   -12.99     1.37   Si3.05Na0.4Al0.95K0.35Ca0.1H6.0O11.0
PHILLI_d        -14.75   -13.87     0.88   Si3.075Na0.175Al0.925K0.15Ca0.3H6.0O11.0
PHLOGOPI          0.15    36.48    36.33   Mg3.000Al1.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
PLOMBIER         -5.41    58.34    63.75   Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN           0.00    22.71    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1          0.16    22.71    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
PYROPHYL        -29.23   -28.78     0.46   Si4.000Al2.000H2.000O12.000
QUARTZ           -5.42    -9.20    -3.78   Si1.000O2.000
RIVERSID        -10.59    58.39    68.98   Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)           -26.20   -62.04   -35.84   S1.000
S(G)            -67.67   -62.04     5.63   S1.000
S2(G)           -66.37  -124.08   -57.71   S2.000
SAPON-CA         -5.99    20.24    26.23   Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-K          -5.78    20.17    25.94   Mg3.000Al0.330Si3.670K0.330H2.000O12.000
SAPON-MG         -7.01    19.18    26.19   Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SAPON-NA         -5.59    20.69    26.28   Mg3.000Al0.330Si3.670Na0.330H2.000O12.000
SCOLECIT        -10.29     3.12    13.41   Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000
SEP             -13.79   -51.00   -37.21   Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT        -20.34    10.01    30.35   Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)          -94.41   -31.48    62.93   Si1.000
SI(G)          -165.45   -31.48   133.97   Si1.000
SIL              -6.18    -9.20    -3.02   Si1.000H2.000O3.000
SIL(AM)1         -6.49    -9.20    -2.71   Si1.000O2.000
SILI(AM)         -6.56    -9.20    -2.64   Si1.000O2.000
SILICA          -12.30   -14.77    -2.47   Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)         -6.56    -9.20    -2.64   Si1.000O2.000
SIO2(QUA         -5.20    -9.20    -4.00   Si1.000O2.000
SO2(G)          -34.44   -39.76    -5.32   S1.000O2.000
SR(CR)          -88.32    10.47    98.79   Sr1.000
SRCL2(CR        -14.31    -7.07     7.24   Sr1.000Cl2.000
SRCO3            -0.34    -9.59    -9.25   Sr1.000C1.000O3.000
SRO(CR)         -20.62    21.61    42.23   Sr1.000O1.000
SROH2            -3.38    21.60    24.98   Sr1.000H2.000O2.000
SRSO4            -0.59    -7.01    -6.42   Sr1.000S1.000O4.000
STILBITE        -19.31   -13.80     5.51   Ca0.667Na0.333Al1.667Si4.333O12:4.666H2O
STRONTIT         -0.32    -9.59    -9.27   Sr1.000C1.000O3.000
TALC             -8.94    12.13    21.07   Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR         -7.14    58.37    65.51   Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,          -14.00    -1.19    12.81   Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLIT         -4.30    53.40    57.70   Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
WAIRAKIT        -24.15    -6.07    18.08   CaAl2Si4O12:2H2O
XONOTLIT        -10.61    81.12    91.73   Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA        -28.54   -24.47     4.07   CaAl2Si6O16:4H2O

------------------
End of simulation.
------------------

------------------------------------
Reading input data for simulation 2.
------------------------------------

-----------
End of run.
---------
```

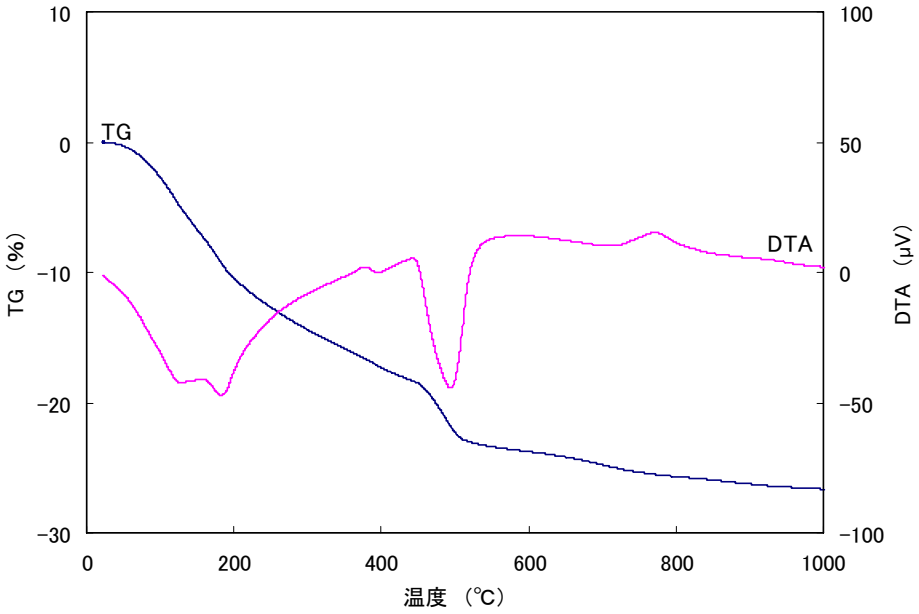
付録4 熱分析チャート



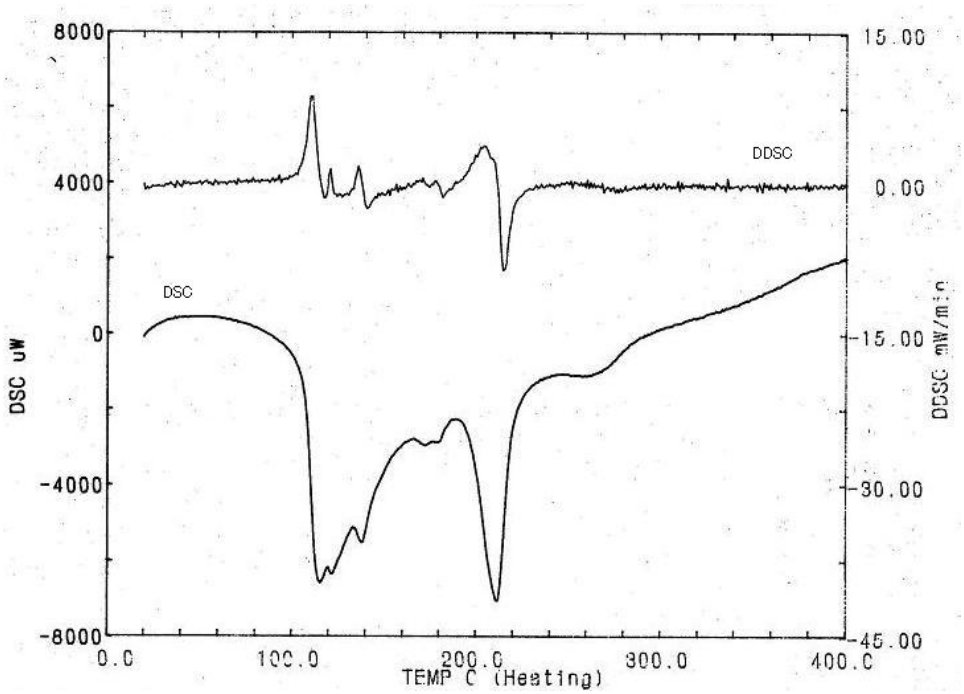
付図 4-1. OPC ペースト粉末 初期試料の TG-DTA 曲線



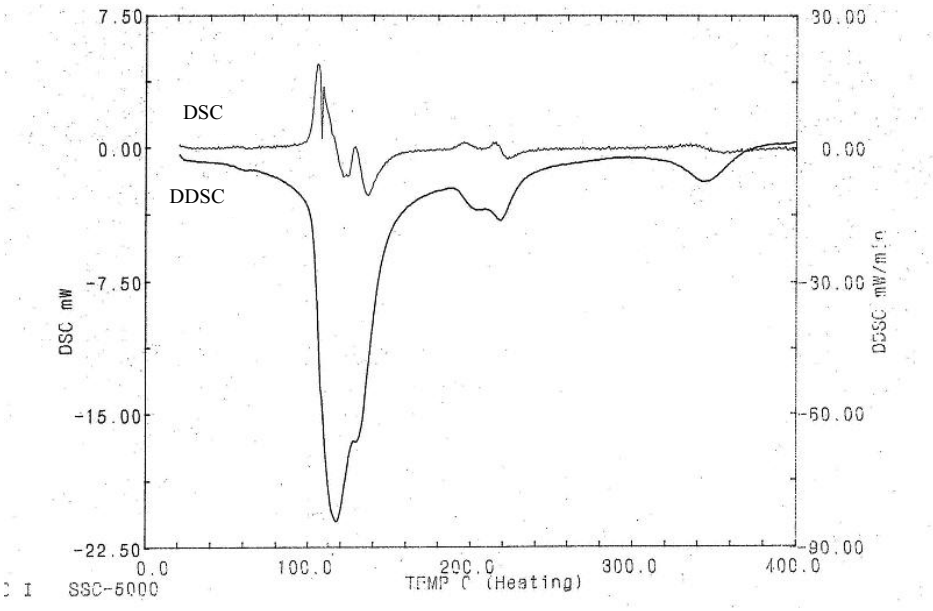
付図4-2. 塩水に浸漬したOPCペースト粉末のTG-DTA曲線



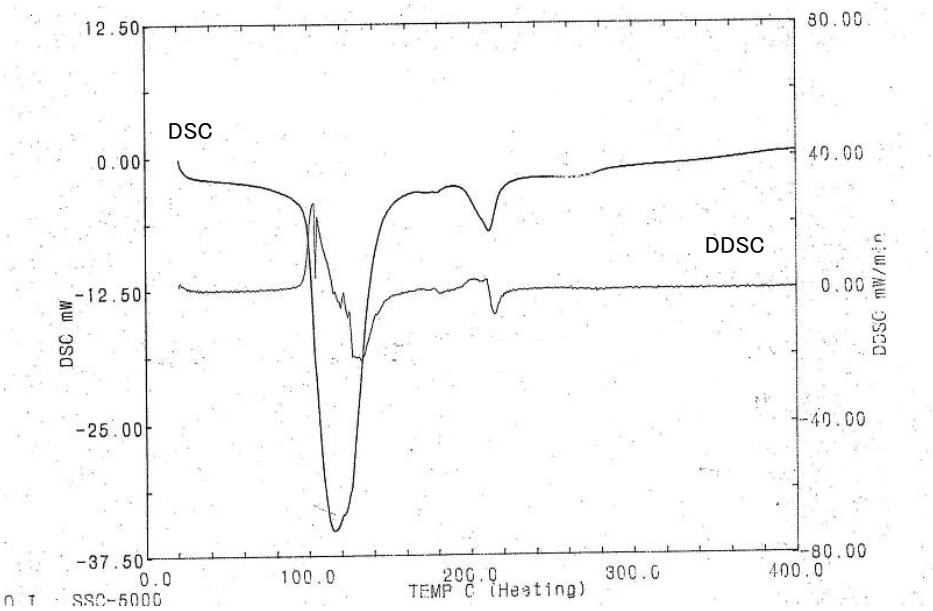
付図 4-3.　イオン交換水に浸漬した OPC ペースト粉末の TG-DTA 曲線



付図 4-4.　OPC ペースト粉末 初期試料の DSC 曲線



付図4-5. 塩水に浸漬したOPCペースト粉末のDSC曲線



付図 4-6. イオン交換水に浸漬した OPC ペースト粉末の DSC 曲線

付録5 EPMAによるマッピング画像から推定したC-S-H中のAl量

1. 目的

OPC ペーストの C-S-H 中に含まれる Al 量を測定することを目的とした。

2. 実験

OPC ペーストをエポキシ樹脂中に含浸し表面を研磨した。研磨した表面の微少領域（500μm×500μm）の Ca，Si，Al の濃度分布を EPMA により測定した。測定点は任意の 2 箇所について実施した。

Ca および Si の測定結果より，測定範囲の CaO/SiO_2 モル比を求めた。CaO/SiO_2 モル比より C-S-H にあたる箇所を抽出し，その箇所に含まれる Al 量を C-S-H に含有する Al として求めた。

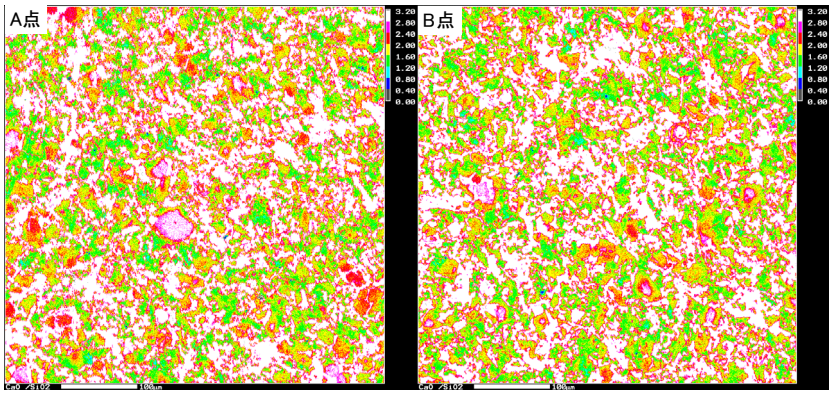
使用機器　EPMA：日本電子社　JXA-8100

測定条件

加速電圧	15 kV
照射電流	5.0×10^{-8} A
蒸着	カーボン蒸着
１ピクセルあたりの測定サイズ	0.5μm×0.5μm
総ピクセル数	1000×1000

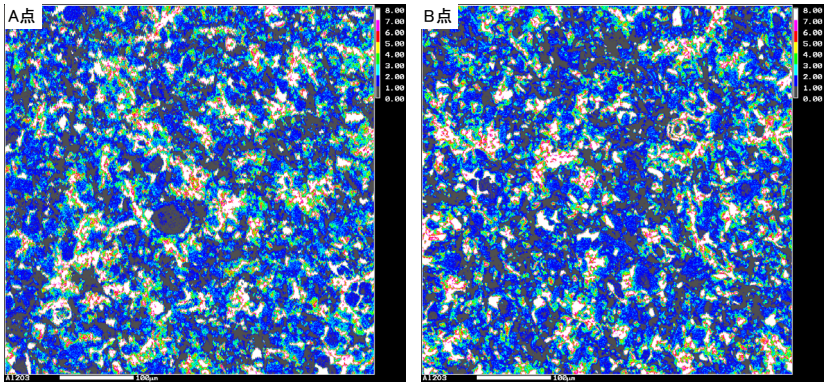
3. 結果

CaO/SiO_2 モル比のマッピング画像を付図 5-1 に，Al_2O_3 のマッピング画像を付図 5-2 に示す。



A 点(500×500μm)　　B 点(500×500μm)

付図 5-1　CaO/SiO_2 モル比のマッピング画像

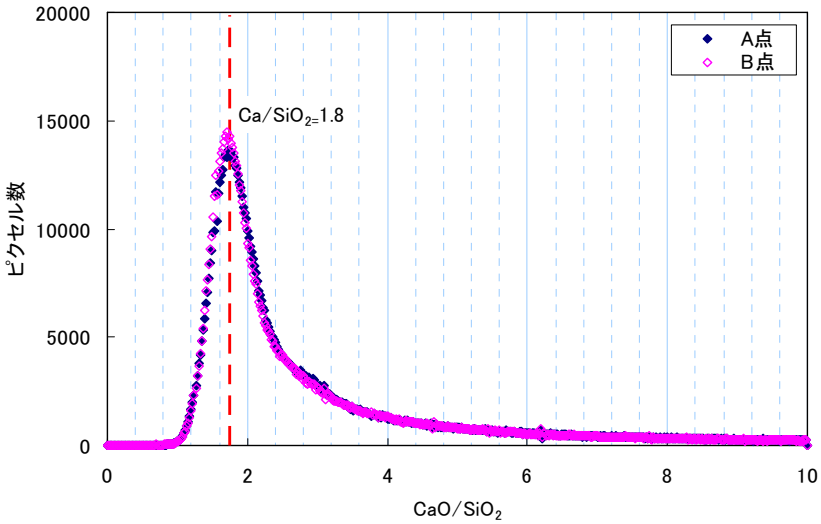


A 点(500×500μm)　　B 点(500×500μm)

付図 5-2　Al_2O_3 マッピング画像

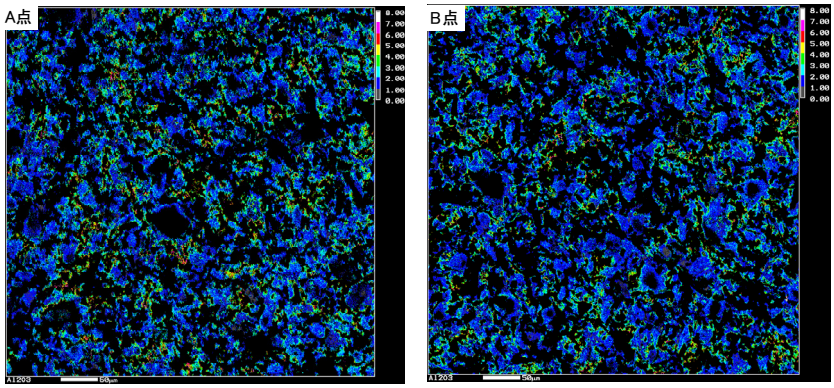
500μm×500μm の測定領域において，各ピクセルがどの水和物を検出しているか特定することはできない。しかし，CaO/SiO_2 モル比の値により測定した部分がどのような水和物であるか推定することは可能である。CaO/SiO_2 モル比が大きい場合は，SiO_2 を含まない $Ca(OH)_2$ や AFm 等のアルミネート水和物である可能性が高いと考えられ，CaO/SiO_2 モル比 ＝0.8～2.0 を示すピクセルが，C-S-H にあたる部分と考えられる。

すべてデータを CaO/SiO_2 モル比で 0.02 ごとに区切り，その範囲に対応するピクセル数を表した頻度分布を付図 5-3 に示す。測定点 A 点，B 点ともに CaO/SiO_2 モル比が約 1.8 の場合にピクセル数が最も多い結果となった。したがって，CaO/SiO_2 モル比 ＝0.8～2.0 の部分は C-S-H である可能性が高いが，この試料においては，CaO/SiO_2 モル比 ＝1.8 の C-S-H が最も多く含まれていると推定される

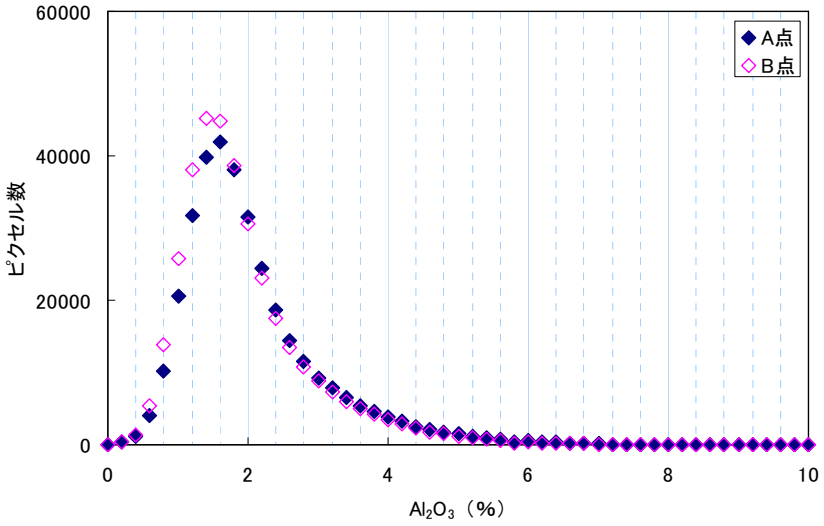


付図 5-3　CaO/SiO_2 モル比の頻度分布

次に，付図 5-3 をもとに，測定領域の中から C-S-H にあたる部分を測定しているピクセルのみを抽出した。C-S-H の CaO/SiO_2 モル比として，0.8～2.0 の範囲が可能性として考えられるが，ここでは C-S-H 以外の水和物の影響をできるだけ取り除くために，CaO/SiO_2 モル比 ＝1.8±0.2 の範囲に限定した。1.4≦CaO/SiO_2 モル比 ≦2.0 の範囲のピクセルを抽出処理し，そこに含まれる Al_2O_3 のマッピング画像を付図 5-4 に示す。CaO/SiO_2 モル比で抽出したことにより，アルミネート水和物と考えられる Al_2O_3 量の高い部分は取り除かれた。付図 5-4 の Al_2O_3 データを 0.2%ごとに区切り，その範囲に対応するピクセル数を表した頻度分布を付図 5-5 に示す。Al_2O_3 量のピーク値は 1.6%であった。



付図 5-4　抽出処理後の Al_2O_3 マッピング画像（抽出条件：1.4≦CaO/SiO_2 モル比 ≦2.0）



付図 5-5　抽出処理した Al_2O_3 の頻度分布

付録6 改良した初期生成水和物モデルを使った化学平衡計算出力データ

リスト6-1 アルミネート水和物種を見直した初期生成水和物モデルによる化学平衡計算

```
Input file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥10. 発表資料¥080414_2008原子力学会¥OHP資料¥ＯＨＰ
適用データ¥PHREEQ計算¥THC-EPMA-Al固溶量仮定¥080609_AFt-AFmCO(Al固溶なし）
_JNC-TDBケース(AFmCO-ZHANG-abst).pqi
 Output file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥10. 発表資料¥080414_2008原子力学会¥OHP資料¥ＯＨ
Ｐ適用データ¥PHREEQ計算¥THC-EPMA-Al固溶量仮定¥080609_AFt-AFmCO(Al固溶なし）
_JNC-TDBケース(AFmCO-ZHANG-abst).pqo
Database file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
-------------------------------------
Reading input data for simulation 1.
-------------------------------------

DATABASE C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb
Title    0.6M-NaCl溶液-OPC浸漬（L/S=1000/400=2.5)
PHASES
CSH(0.1)
Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
log_K -1.276
CSH(0.2)
Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
log_K 0.296
CSH(0.3)
Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
log_K 1.894
CSH(0.4)
Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
log_K 3.509
CSH(0.5)
Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
log_K 5.139
CSH(0.6)
Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
log_K 6.786
CSH(0.7)
Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
log_K 8.454
CSH(0.8)
Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
log_K 10.164
CSH(0.9)
Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
log_K 13.291
CSH(1.0)
Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
log_K 13.795
CSH(1.1)
Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
log_K 14.308
CSH(1.2)
Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
log_K 14.80
CSH(1.3)
Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
log_K 15.261
CSH(1.4)
Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
log_K 15.688
CSH(1.5)
Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
log_K 16.082
CSH(1.6)
Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
log_K 16.446
CSH(1.7)
Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
log_K 16.78
CSH(1.8)
Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
log_K 17.089
Ca(OH)2
Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
log_k 22.55
SiO2(am)
Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
log_K -2.710
CSH(0.833)
Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
log_K 10.759
```

```
Afm(CO)
Al 2.000 Ca 4.000 C 1.000 H 22.000 O 20.000 = 4.000 Ca+2 +2.000 Al(OH)4-1 + CO3-2 +4.000
OH-1 +5.000 H2O
log_k     -29.85
SOLUTION 1    0.6M-NaCl
                    units     mol/kgw
                pH          7.000
                pe          0.0
                density 1.000
                temp        25.0
                Na    0.6
                Cl    0.6
SAVE SOLUTION 2
EQUILIBRIUM_PHASES 1
        CSH(0.1)    0.0    0.0
        CSH(0.2)    0.0    0.0
        CSH(0.3)    0.0    0.0
        CSH(0.4)    0.0    0.0
        CSH(0.5)    0.0    0.0
        CSH(0.6)    0.0    0.0
        CSH(0.7)    0.0    0.0
        CSH(0.8)    0.0    0.0
        CSH(0.9)    0.0    0.0
        CSH(1.0)    0.0    0.0
        CSH(1.1)    0.0    0.0
        CSH(1.2)    0.0    0.0
        CSH(1.3)    0.0    0.0
        CSH(1.4)    0.0    0.0
        CSH(1.5)    0.0    0.0
        CSH(1.6)    0.0    0.0
        CSH(1.7)    0.0    0.0
        CSH(1.8)    0.0    2.086
        SiO2(am)    0.0    0.0
        CSH(0.833) 0.0    0.0
        Ca(OH)2     0.0    0.883
        Afm(CO) 0.0 0.0625
        ETTRINGI    0.0    0.0263
        MONOSULF    0.0     0.0
        FRIEDEL_    0.0 0.0
        HYDROGR     0.0    0.0815
        Brucite     0.0    0.158
        SEPIOLIT    0.0    0.0
        CALCITE 0.0 0.0
        GEHL_HY 0.0 0.0
        HYDROTAL 0.0 0.0
        GROSSUL 0.0 0.0
        C3ASH4    0.0 0.0
        END
-----
```

```
TITLE
-----

   0.6M-NaCl溶液-OPC浸漬（L/S=1000/400=2.5)

-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 1.          0.6M-NaCl

-----------------------------Solution composition-----------------------------

                Elements              Molality          Moles

                Cl                   6.000e-001    6.000e-001
                Na                   6.000e-001    6.000e-001

----------------------------Description of solution----------------------------

                                                pH   =     7.000
                                                pe   =     0.000
                                Activity of water   =     0.980
                                     Ionic strength   =   6.000e-001
                                  Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                        Total alkalinity (eq/kg)   =   2.659e-008
                            Total carbon (mol/kg)   =   0.000e+000
                               Total CO2 (mol/kg)   =   0.000e+000
                             Temperature (deg C)   =   25.000
                         Electrical balance (eq)   = -2.659e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =   -0.00
                                        Iterations   =     4
                                            Total H   = 1.110124e+002
                                            Total O   = 5.550622e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                          Log       Log        Log
Species                  Molality     Activity   Molality   Activity       Gamma

    OH-                 1.584e-007   9.796e-008     -6.800     -7.009      -0.209
    H+                  1.318e-007   1.000e-007     -6.880     -7.000      -0.120
    H2O                 5.551e+001   9.796e-001      1.744     -0.009       0.000
Cl                  6.000e-001
    Cl-                 6.000e-001   3.788e-001     -0.222     -0.422      -0.200
    ClOH                0.000e+000   0.000e+000    -44.006    -43.946       0.060
    ClO-                0.000e+000   0.000e+000    -44.235    -44.366      -0.131
    ClO2-               0.000e+000   0.000e+000    -80.186    -80.316      -0.131
    ClHO2               0.000e+000   0.000e+000    -85.415    -85.355       0.060
```

```
    ClO3-          0.000e+000  0.000e+000  -104.560  -104.690   -0.131
    ClO4-          0.000e+000  0.000e+000  -132.118  -132.248   -0.131
H(0)            1.233e-017
    H2             6.166e-018  7.079e-018   -17.210   -17.150    0.060
Na              6.000e-001
    Na+            6.000e-001  4.242e-001    -0.222    -0.372   -0.151
O(0)            0.000e+000
    O2             0.000e+000  0.000e+000   -58.158   -58.098    0.060

-----------------------------Saturation indices-------------------------------

Phase                SI log IAP   log KT

CL(G)           -41.86   -0.42   41.44   Cl1.000
CL2(G)          -46.82   -0.84   45.98   Cl2.000
H(G)            -42.61   -7.00   35.61   H1.000
H2(G)           -14.00  -14.00    0.00   H2.000
H2O(G)           -1.51   -0.01    1.50   H2.000O1.000
HCL(G)          -13.71   -7.42    6.29   Cl1.000H1.000
NA(CR)          -46.26   -0.37   45.89   Na1.000
NA(G)           -59.75   -0.37   59.38   Na1.000
O(G)            -68.16   13.99   82.15   O1.000
O2(G)           -55.11   27.98   83.09   O2.000

-----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
-----------------------------------------

Reaction step 1.

Using solution 1.          0.6M-NaCl
Using pure phase assemblage 1.

------------------------------Phase assemblage--------------------------------

                                                        Moles in assemblage
Phase                SI log IAP   log KT      Initial        Final       Delta

Afm(CO)          -5.35   66.80   72.15 6.250e-002                  -6.250e-002
BRUCITE           0.00   16.30   16.30 1.580e-001 1.580e-001-4.418e-009
C3ASH4           -5.35   65.52   70.87 0.000e+000                   0.000e+000
Ca(OH)2           0.00   22.55   22.55 8.830e-001 7.868e-001-9.622e-002
CALCITE           0.00   -8.48   -8.48 0.000e+000 6.231e-002 6.231e-002
CSH(0.1)         -6.29   -7.57   -1.28 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.2)         -5.61   -5.31    0.30 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.3)         -4.95   -3.06    1.89 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.4)         -4.31   -0.80    3.51 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.5)         -3.69    1.45    5.14 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.6)         -3.08    3.71    6.79 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.7)         -2.49    5.96    8.45 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.8)         -1.95    8.22   10.16 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.833)       -1.80    8.96   10.76 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.9)         -1.65   11.64   13.29 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.0)         -1.07   12.73   13.80 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.1)         -0.69   13.62   14.31 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.2)         -0.43   14.37   14.80 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.3)         -0.26   15.00   15.26 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.4)         -0.15   15.54   15.69 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.5)         -0.08   16.00   16.08 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.6)         -0.03   16.41   16.45 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.7)         -0.01   16.77   16.78 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.8)          0.00   17.09   17.09 2.086e+000 2.086e+000-1.546e-006
ETTRINGI          0.00   58.24   58.24 2.630e-002 1.265e-003-2.504e-002
FRIEDEL_          0.00   70.13   70.13 0.000e+000 1.690e-001 1.690e-001
GEHL_HY          -7.39   42.93   50.32 0.000e+000                   0.000e+000
GROSSUL         -12.79   45.91   58.70 0.000e+000                   0.000e+000
HYDROGR          -2.05   75.32   77.37 8.150e-002                  -8.150e-002
HYDROTAL         -0.93   72.85   73.78 0.000e+000                   0.000e+000
MONOSULF         -4.18   69.65   73.83 0.000e+000                   0.000e+000
SEPIOLIT        -24.10    6.25   30.35 0.000e+000                   0.000e+000
SiO2(am)         -7.11   -9.82   -2.71 0.000e+000                   0.000e+000

-----------------------------Solution composition-----------------------------

                Elements          Molality        Moles

                Al              1.081e-006   1.087e-006
                C               1.930e-004   1.940e-004
                Ca              2.480e-003   2.492e-003
                Cl              2.606e-001   2.619e-001
                Mg              4.396e-009   4.418e-009
                Na              5.969e-001   6.000e-001
                S               7.472e-002   7.511e-002
                Si              8.551e-007   8.595e-007

---------------------------Description of solution---------------------------

                                pH   =   13.077          Charge balance
                                pe   =   -7.685         Adjusted to redox equilibrium
                          Activity of water   =    0.981
                             Ionic strength   =   6.249e-001
                          Mass of water (kg)   =   1.005e+000
                 Total alkalinity (eq/kg)   =   1.915e-001
                          Total CO2 (mol/kg)   =   1.930e-004
                         Temperature (deg C)   =   25.000
                      Electrical balance (eq)   = -2.660e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =   -0.00
                                Iterations   =   20
```

Total H = 1.117794e+002
Total O = 5.628695e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	1.904e-001	1.172e-001	-0.720	-0.931	-0.211
H+	1.106e-013	8.376e-014	-12.956	-13.077	-0.121
H2O	5.551e+001	9.813e-001	1.744	-0.008	0.000
Al	1.081e-006				
Al(OH)4-	1.081e-006	8.028e-007	-5.966	-6.095	-0.129
Al(OH)3	5.934e-013	6.852e-013	-12.227	-12.164	0.062
Al(OH)2+	6.258e-020	4.646e-020	-19.204	-19.333	-0.129
AlOH+2	1.682e-027	5.108e-028	-26.774	-27.292	-0.518
AlSO4+	5.549e-035	4.119e-035	-34.256	-34.385	-0.129
Al+3	5.197e-035	4.261e-036	-34.284	-35.371	-1.086
Al(SO4)2-	4.069e-035	3.021e-035	-34.390	-34.520	-0.129
C	1.930e-004				
NaCO3-	1.282e-004	9.519e-005	-3.892	-4.021	-0.129
CO3-2	5.953e-005	1.271e-005	-4.225	-4.896	-0.671
CaCO3	5.214e-006	6.021e-006	-5.283	-5.220	0.062
HCO3-	3.353e-008	2.279e-008	-7.475	-7.642	-0.168
NaHCO3	4.478e-009	5.171e-009	-8.349	-8.286	0.062
CaHCO3+	1.068e-010	7.261e-011	-9.971	-10.139	-0.168
MgCO3	1.529e-012	1.765e-012	-11.816	-11.753	0.062
CO2	3.775e-015	4.359e-015	-14.423	-14.361	0.062
MgHCO3+	5.186e-017	3.850e-017	-16.285	-16.415	-0.129
CH4	7.089e-034	8.186e-034	-33.149	-33.087	0.062
Ca	2.480e-003				
CaOH+	1.029e-003	7.642e-004	-2.987	-3.117	-0.129
Ca+2	1.024e-003	2.585e-004	-2.990	-3.588	-0.598
CaSO4	4.210e-004	4.861e-004	-3.376	-3.313	0.062
CaCO3	5.214e-006	6.021e-006	-5.283	-5.220	0.062
CaHCO3+	1.068e-010	7.261e-011	-9.971	-10.139	-0.168
Cl	2.606e-001				
Cl-	2.606e-001	1.638e-001	-0.584	-0.786	-0.202
ClO-	0.000e+000	0.000e+000	-47.816	-47.946	-0.129
ClOH	0.000e+000	0.000e+000	-53.665	-53.603	0.062
ClO2-	0.000e+000	0.000e+000	-86.983	-87.113	-0.129
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-98.291	-98.229	0.062
ClO3-	0.000e+000	0.000e+000	-114.573	-114.703	-0.129
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-145.347	-145.477	-0.129
H(0)	2.020e-014				
H2	1.010e-014	1.166e-014	-13.996	-13.933	0.062
Mg	4.396e-009				
MgOH+	3.685e-009	2.736e-009	-8.434	-8.563	-0.129
Mg+2	5.021e-010	1.453e-010	-9.299	-9.838	-0.538
MgSO4	2.066e-010	2.386e-010	-9.685	-9.622	0.062
MgCO3	1.529e-012	1.765e-012	-11.816	-11.753	0.062
MgHCO3+	5.186e-017	3.850e-017	-16.285	-16.415	-0.129
Na	5.969e-001				
Na+	5.716e-001	4.040e-001	-0.243	-0.394	-0.151
NaSO4-	2.518e-002	1.870e-002	-1.599	-1.728	-0.129
NaCO3-	1.282e-004	9.519e-005	-3.892	-4.021	-0.129
NaHCO3	4.478e-009	5.171e-009	-8.349	-8.286	0.062
O(0)	0.000e+000				
O2	0.000e+000	0.000e+000	-64.593	-64.530	0.062
S	7.472e-002				
SO4-2	4.911e-002	9.232e-003	-1.309	-2.035	-0.726
NaSO4-	2.518e-002	1.870e-002	-1.599	-1.728	-0.129
CaSO4	4.210e-004	4.861e-004	-3.376	-3.313	0.062
MgSO4	2.066e-010	2.386e-010	-9.685	-9.622	0.062
HSO4-	1.011e-013	7.503e-014	-12.995	-13.125	-0.129
SO3-2	2.046e-016	6.213e-017	-15.689	-16.207	-0.518
HSO3-	1.163e-022	8.637e-023	-21.934	-22.064	-0.129
HS-	4.925e-025	3.030e-025	-24.308	-24.519	-0.211
S-2	1.813e-030	3.609e-031	-29.742	-30.443	-0.701
H2S	2.138e-031	2.469e-031	-30.670	-30.608	0.062
H2SO3	4.334e-034	5.005e-034	-33.363	-33.301	0.062
AlSO4+	5.549e-035	4.119e-035	-34.256	-34.385	-0.129
Al(SO4)2-	4.069e-035	3.021e-035	-34.390	-34.520	-0.129
S2O3-2	1.650e-035	5.011e-036	-34.783	-35.300	-0.518
HS2O3-	0.000e+000	0.000e+000	-46.658	-46.787	-0.129
Si	8.551e-007				
H2SiO4-2	4.930e-007	1.497e-007	-6.307	-6.825	-0.518
H3SiO4-	3.620e-007	2.687e-007	-6.441	-6.571	-0.129
H4SiO4	1.259e-010	1.453e-010	-9.900	-9.838	0.062
H4Si2O7-2	1.010e-012	3.068e-013	-11.996	-12.513	-0.518
H5Si2O7-	2.750e-015	2.041e-015	-14.561	-14.690	-0.129
H5Si3O10-3	2.499e-017	1.711e-018	-16.602	-17.767	-1.164
H3Si3O9-3	2.023e-018	1.385e-019	-17.694	-18.858	-1.164
H4Si4O12-4	5.743e-022	4.888e-024	-21.241	-23.311	-2.070
H5Si4O12-3	3.780e-025	2.589e-026	-24.422	-25.587	-1.164

----------Saturation indices----------

Phase	SI	log IAP	log KT	
Afm(CO)	-5.35	-35.20	-29.85	Al2.000Ca4.000C1.000H22.000O20.000
AFWILLIT	-11.98	48.01	59.99	Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ALBITE	-16.48	-12.94	3.54	Na1.000Al1.000Si3.000O8.000
ANALCIM1	-10.05	-3.12	6.93	Si2.000Na1.000Al1.000H2.000O7.000
ANALCIM2	-131.04	-84.91	46.13	Si25.800Na10.200Al10.200H24.000O84.000
ANHYDRIT	-1.24	-5.62	-4.38	Ca1.000S1.000O4.000
ANORTHHE	-16.09	10.61	26.70	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR	-15.76	10.61	26.37	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000

ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	C1.000Ca1.000O3.000
BEID-CA	-28.91	-23.36	5.55	Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG	-29.91	-24.40	5.51	Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-NA	-28.50	-22.90	5.60	Na0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)	-20.44	-52.59	-32.15	C1.000
C(G)	-138.04	-52.59	85.45	C1.000
C2AH8	-7.89	52.75	60.64	Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4	-5.35	65.52	70.87	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1	-5.89	65.52	71.41	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13	-4.18	97.82	102.00	Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19	-4.20	97.77	101.98	Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)	-85.07	11.78	96.85	Ca1.000
CA(G)	-110.30	11.78	122.08	Ca1.000
Ca(OH)2	0.00	22.55	22.55	Ca(OH)2
CAH10	-10.24	30.17	40.42	Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)	-10.14	22.56	32.70	Ca1.000O1.000
CH4	-30.23	-74.16	-43.93	C1.000H4.000
CHALCEDO	-6.33	-9.82	-3.49	Si1.000O2.000
CL(G)	-49.91	-8.47	41.44	Cl1.000
CL2(G)	-62.92	-16.94	45.98	Cl2.000
CLINOC40	-68.91	477.92	546.83	Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
CLINOZOI	-16.42	27.19	43.61	Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CO(G)	-27.18	-41.82	-14.64	C1.000O1.000
CO2(G)	-12.89	-31.04	-18.15	C1.000O2.000
CSH(0.1)	-6.29	-7.57	-1.28	Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)	-5.61	-5.31	0.30	Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)	-4.95	-3.06	1.89	Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)	-4.31	-0.80	3.51	Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)	-3.69	1.45	5.14	Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)	-3.08	3.71	6.79	Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)	-2.49	5.96	8.45	Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)	-1.95	8.22	10.16	Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)	-1.80	8.96	10.76	Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)	-1.65	11.64	13.29	Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)	-1.07	12.73	13.80	Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)	-0.69	13.62	14.31	Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
CSH(1.2)	-0.43	14.37	14.80	Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)	-0.26	15.00	15.26	Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)	-0.15	15.54	15.69	Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)	-0.08	16.00	16.08	Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)	-0.03	16.41	16.45	Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)	-0.01	16.77	16.78	Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)	0.00	17.09	17.09	Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833	-2.47	8.96	11.44	Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
DOLOMITE	-6.13	-23.22	-17.09	Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
EPISTILB	-32.37	-28.71	3.66	Si6.000Ca1.000Al2.000H10.000O21.000
ETTRINGI	0.00	58.24	58.24	Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FOSHAGIT	-5.11	60.76	65.87	Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
FRIEDEL_	0.00	70.13	70.13	Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GEHL_HY	-7.39	42.93	50.32	Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1	-6.23	42.93	49.16	Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT	-13.29	42.99	56.28	Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE	-3.92	3.84	7.76	Al1.000H3.000O3.000
GROSSUL	-12.79	45.91	58.70	Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1	-5.97	45.91	51.87	Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM	-1.03	-5.64	-4.60	Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE	-7.23	15.63	22.86	Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)	-41.00	-5.39	35.61	H1.000
H2(G)	-10.78	-10.78	0.00	H2.000
H2O(G)	-1.51	-0.01	1.50	H2.000O1.000
H2S(G)	-29.59	-71.29	-41.70	S1.000H2.000
HCL(G)	-20.15	-13.86	6.29	Cl1.000H1.000
HILLEBRA	-1.42	35.29	36.70	Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR	-2.05	75.32	77.37	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1	-6.26	75.32	81.58	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL	-0.93	72.85	73.78	Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
JENNITE	-2.59	144.01	146.60	Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
KAOLINIT	-21.04	-57.96	-36.92	Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE	-3.62	75.32	78.94	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONTI	-22.70	-9.06	13.63	Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LIME,	-10.14	22.56	32.70	Ca1.000O1.000
MG2SI2O6	-10.29	12.97	23.26	Mg2.000Si2.000O6.000
MONOSULF	-4.18	69.65	73.83	Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA	-26.33	-23.76	2.56	Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-MG	-27.26	-24.79	2.47	Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
MONT-NA	-25.81	-23.30	2.51	Mg0.330Al1.670Si4.000Na0.330H2.000O12.000
NA(CR)	-38.60	7.29	45.89	Na1.000
NA(G)	-52.09	7.29	59.38	Na1.000
O(G)	-71.38	10.77	82.15	O1.000
O2(G)	-61.54	21.55	83.09	O2.000
OKENITE	-7.42	2.90	10.32	Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
PARAGONI	-24.12	-5.25	18.87	Na1.000Al3.000Si3.000H2.000O12.000
PERICLAS	-5.27	16.31	21.58	Mg1.000O1.000
PLOMBIER	-9.97	53.78	63.75	Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN	-0.16	22.55	22.71	Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1	-0.00	22.55	22.55	Ca1.000H2.000O2.000
PYROPHYL	-32.06	-31.60	0.46	Si4.000Al2.000H2.000O12.000
QUARTZ	-6.04	-9.82	-3.78	Si1.000O2.000
RIVERSID	-15.14	53.84	68.98	Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)	-24.67	-60.51	-35.84	S1.000
S(G)	-66.14	-60.51	5.63	S1.000
S2(G)	-63.30	-121.01	-57.71	S2.000
SAPON-CA	-8.36	17.86	26.23	Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-MG	-9.36	16.83	26.19	Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SAPON-NA	-7.96	18.33	26.28	Mg3.000Al0.330Si3.670Na0.330H2.000O12.000
SCOLECIT	-12.64	0.77	13.41	Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000

```
SEP              -15.67   -52.88   -37.21   Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT         -24.10     6.25    30.35   Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)           -94.30   -31.37    62.93   Si1.000
SI(G)           -165.34   -31.37   133.97   Si1.000
SIL               -6.81    -9.83    -3.02   Si1.000H2.000O3.000
SIL(AM)1          -7.11    -9.82    -2.71   Si1.000O2.000
SILI(AM)          -7.18    -9.82    -2.64   Si1.000O2.000
SILICA           -12.74   -15.21    -2.47   Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)          -7.11    -9.82    -2.71   Si1.000O2.000
SIO2(QUA          -5.82    -9.82    -4.00   Si1.000O2.000
SO2(G)           -33.64   -38.96    -5.32   S1.000O2.000
STILBITE         -67.27   -50.75    16.52   Si13.000Ca2.000Al5.000Na1.000H28.000O50.000
TALC             -11.44     9.63    21.07   Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR         -11.70    53.82    65.51   Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,           -14.94    -2.13    12.81   Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLIT          -9.62    48.08    57.70   Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
WAIRAKIT         -27.05    -9.05    18.01   Si4.000Ca1.000Al2.000H4.000O14.000
XONOTLIT         -15.31    76.41    91.73   Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA         -32.78   -28.71     4.07   Si6.000Ca1.000Al2.000H8.000O20.000

------------------
End of simulation.
------------------

-------------------------------------
Reading input data for simulation 2.
-------------------------------------

-----------
End of run.
-----------
```

リスト6-2 C-S-Hに取り込まれたAl量を想定した初期生成水和物モデルによる化学平衡計算

```
Input file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥10. 発表資料¥080414_2008原子力学会¥OHP資料¥ＯＨＰ
適用データ¥PHREEQ計算¥THC-EPMA-Al固溶量仮定¥080609_THC実測値からAl量算出
_JNC-TDBケース(AFt＆AFmCO-ZHANG-abst).pqi
Output file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥10. 発表資料¥080414_2008原子力学会¥OHP資料¥ＯＨＰ
適用データ¥PHREEQ計算¥THC-EPMA-Al固溶量仮定¥080609_THC実測値からAl量算出
_JNC-TDBケース(AFt＆AFmCO-ZHANG-abst).pqo
Database file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
-----------------------------------
Reading input data for simulation 1.
-----------------------------------

DATABASE C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb
Title    0.6M-NaCl溶液-OPC浸漬（L/S=1000/400=2.5)
PHASES
CSH(0.1)
Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
log_K -1.276
CSH(0.2)
Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
log_K 0.296
CSH(0.3)
Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
log_K 1.894
CSH(0.4)
Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
log_K 3.509
CSH(0.5)
Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
log_K 5.139
CSH(0.6)
Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
log_K 6.786
CSH(0.7)
Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
log_K 8.454
CSH(0.8)
Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
log_K 10.164
CSH(0.9)
Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
log_K 13.291
CSH(1.0)
Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
log_K 13.795
CSH(1.1)
Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
log_K 14.308
CSH(1.2)
Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
log_K 14.80
CSH(1.3)
Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
log_K 15.261
CSH(1.4)
Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
log_K 15.688
CSH(1.5)
Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
log_K 16.082
CSH(1.6)
Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
log_K 16.446
CSH(1.7)
Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
log_K 16.78
CSH(1.8)
Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
log_K 17.089
Ca(OH)2
Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
log_k 22.55
SiO2(am)
Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
log_K -2.710
CSH(0.833)
Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
log_K 10.759
Afm(CO)
Al 2.000 Ca 4.000 C 1.000 H 22.000 O 20.000 = 4.000 Ca+2 +2.000 Al(OH)4-1 + CO3-2 +4.000
OH-1 +5.000 H2O
log_k      -29.85
SOLUTION 1    0.6M-NaCl
```

```
                units     mol/kgw
              pH          7.000
              pe          0.0
              density 1.000
              temp        25.0
              Na    0.6
              Cl    0.6
SAVE SOLUTION 2
EQUILIBRIUM_PHASES 1
        CSH(0.1)    0.0    0.0
        CSH(0.2)    0.0    0.0
        CSH(0.3)    0.0    0.0
        CSH(0.4)    0.0    0.0
        CSH(0.5)    0.0    0.0
        CSH(0.6)    0.0    0.0
        CSH(0.7)    0.0    0.0
        CSH(0.8)    0.0    0.0
        CSH(0.9)    0.0    0.0
        CSH(1.0)    0.0    0.0
        CSH(1.1)    0.0    0.0
        CSH(1.2)    0.0    0.0
        CSH(1.3)    0.0    0.0
        CSH(1.4)    0.0    0.0
        CSH(1.5)    0.0    0.0
        CSH(1.6)    0.0    0.0
        CSH(1.7)    0.0    0.0
        CSH(1.8)    0.0    2.144
        SiO2(am)    0.0    0.0
        CSH(0.833) 0.0    0.0
        Ca(OH)2     0.0    1.119
        Afm(CO) 0.0 0.0626
        ETTRINGI    0.0    0.0272
        MONOSULF    0.0    0.0
        FRIEDEL_    0.0 0.0
        HYDROGR     0.0    0.016
        Brucite     0.0    0.163
        SEPIOLIT    0.0    0.0
        CALCITE 0.0 0.0
        GEHL_HY 0.0 0.0
        HYDROTAL 0.0 0.0
        GROSSUL 0.0 0.0
        C3ASH4    0.0 0.0
        END
-----
TITLE
-----

  0.6M-NaCl溶液-OPC浸漬（L/S=1000/400=2.5)
```

```
-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 1.          0.6M-NaCl

-----------------------------Solution composition-----------------------------

                Elements              Molality          Moles

                Cl                  6.000e-001    6.000e-001
                Na                  6.000e-001    6.000e-001

----------------------------Description of solution----------------------------

                                          pH   =     7.000
                                          pe   =     0.000
                              Activity of water   =     0.980
                                 Ionic strength   =   6.000e-001
                              Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                     Total alkalinity (eq/kg)    =   2.659e-008
                        Total carbon (mol/kg)    =   0.000e+000
                           Total CO2 (mol/kg)    =   0.000e+000
                          Temperature (deg C)    =   25.000
                       Electrical balance (eq)   = -2.659e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)    =   -0.00
                                     Iterations   =     4
                                        Total H   = 1.110124e+002
                                        Total O   = 5.550622e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                        Log       Log       Log
    Species              Molality     Activity  Molality  Activity     Gamma

    OH-                 1.584e-007   9.796e-008   -6.800    -7.009     -0.209
    H+                  1.318e-007   1.000e-007   -6.880    -7.000     -0.120
    H2O                 5.551e+001   9.796e-001    1.744    -0.009      0.000
Cl                  6.000e-001
    Cl-                 6.000e-001   3.788e-001   -0.222    -0.422     -0.200
    ClOH                0.000e+000   0.000e+000  -44.006   -43.946      0.060
    ClO-                0.000e+000   0.000e+000  -44.235   -44.366     -0.131
    ClO2-               0.000e+000   0.000e+000  -80.186   -80.316     -0.131
    ClHO2               0.000e+000   0.000e+000  -85.415   -85.355      0.060
    ClO3-               0.000e+000   0.000e+000 -104.560  -104.690     -0.131
    ClO4-               0.000e+000   0.000e+000 -132.118  -132.248     -0.131
H(0)                1.233e-017
    H2                  6.166e-018   7.079e-018  -17.210   -17.150      0.060
Na                  6.000e-001
```

```
    Na+                 6.000e-001   4.242e-001     -0.222     -0.372     -0.151
O(0)              0.000e+000
    O2                  0.000e+000   0.000e+000    -58.158    -58.098      0.060

-----------------------------Saturation indices------------------------------

          Phase                SI log IAP   log KT

          CL(G)            -41.86   -0.42   41.44   Cl1.000
          CL2(G)           -46.82   -0.84   45.98   Cl2.000
          H(G)             -42.61   -7.00   35.61   H1.000
          H2(G)            -14.00  -14.00    0.00   H2.000
          H2O(G)            -1.51   -0.01    1.50   H2.000O1.000
          HCL(G)           -13.71   -7.42    6.29   Cl1.000H1.000
          NA(CR)           -46.26   -0.37   45.89   Na1.000
          NA(G)            -59.75   -0.37   59.38   Na1.000
          O(G)             -68.16   13.99   82.15   O1.000
          O2(G)            -55.11   27.98   83.09   O2.000

-----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
-----------------------------------------

Reaction step 1.

Using solution 1.          0.6M-NaCl
Using pure phase assemblage 1.

-----------------------------Phase assemblage--------------------------------

                                   Moles in assemblage
Phase                SI log IAP   log KT      Initial        Final        Delta

Afm(CO)            -6.27   65.88   72.15 6.260e-002                  -6.260e-002
BRUCITE             0.00   16.30   16.30 1.630e-001 1.630e-001-8.852e-009
C3ASH4             -6.26   64.61   70.87 0.000e+000                   0.000e+000
Ca(OH)2             0.00   22.55   22.55 1.119e+000 1.065e+000-5.353e-002
CALCITE             0.00   -8.48   -8.48 0.000e+000 6.254e-002 6.254e-002
CSH(0.1)           -6.29   -7.57   -1.28 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.2)           -5.61   -5.31    0.30 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.3)           -4.95   -3.06    1.89 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.4)           -4.31   -0.80    3.51 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.5)           -3.69    1.45    5.14 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.6)           -3.08    3.71    6.79 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.7)           -2.49    5.96    8.45 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.8)           -1.95    8.22   10.16 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.833)         -1.80    8.96   10.76 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(0.9)           -1.65   11.64   13.29 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.0)           -1.07   12.73   13.80 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.1)           -0.69   13.62   14.31 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.2)           -0.43   14.37   14.80 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.3)           -0.26   15.00   15.26 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.4)           -0.15   15.54   15.69 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.5)           -0.08   16.00   16.08 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.6)           -0.03   16.41   16.45 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.7)           -0.01   16.77   16.78 0.000e+000                   0.000e+000
CSH(1.8)            0.00   17.09   17.09 2.144e+000 2.144e+000-6.291e-007
ETTRINGI            0.00   58.24   58.24 2.720e-002 1.161e-002-1.559e-002
FRIEDEL_           -0.00   70.13   70.13 0.000e+000 9.419e-002 9.419e-002
GEHL_HY            -8.31   42.01   50.32 0.000e+000                   0.000e+000
GROSSUL           -13.70   45.00   58.70 0.000e+000                   0.000e+000
HYDROGR            -2.96   74.41   77.37 1.600e-002                  -1.600e-002
HYDROTAL           -1.85   71.93   73.78 0.000e+000                   0.000e+000
MONOSULF           -4.79   69.04   73.83 0.000e+000                   0.000e+000
SEPIOLIT          -24.10    6.25   30.35 0.000e+000                   0.000e+000
SiO2(am)           -7.11   -9.82   -2.71 0.000e+000                   0.000e+000

-----------------------------Solution composition----------------------------

          Elements              Molality          Moles

          Al                  2.080e-007   2.093e-007
          C                   6.246e-005   6.285e-005
          Ca                  6.128e-003   6.165e-003
          Cl                  4.091e-001   4.116e-001
          Mg                  8.798e-009   8.852e-009
          Na                  5.963e-001   6.000e-001
          S                   4.647e-002   4.676e-002
          Si                  3.477e-007   3.498e-007

----------------------------Description of solution--------------------------

                                    pH   =   12.817          Charge balance
                                    pe   =   -7.433          Adjusted to redox equilibrium
                              Activity of water   =    0.981
                                 Ionic strength   =   6.227e-001
                              Mass of water (kg)   =   1.006e+000
                     Total alkalinity (eq/kg)   =   1.064e-001
                              Total CO2 (mol/kg)   =   6.246e-005
                             Temperature (deg C)   =   25.000
                          Electrical balance (eq)   = -2.659e-008
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =   -0.00
                                       Iterations   =   17
                                          Total H   = 1.118025e+002
                                          Total O   = 5.614199e+001

----------------------------Distribution of species-------------------------
```

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	1.045e-001	6.434e-002	-0.981	-1.192	-0.211
H+	2.012e-013	1.524e-013	-12.696	-12.817	-0.121
H2O	5.551e+001	9.805e-001	1.744	-0.009	0.000
Al	2.080e-007				
Al(OH)4-	2.080e-007	1.544e-007	-6.682	-6.811	-0.129
Al(OH)3	2.079e-013	2.400e-013	-12.682	-12.620	0.062
Al(OH)2+	3.992e-020	2.963e-020	-19.399	-19.528	-0.129
AlOH+2	1.955e-027	5.932e-028	-26.709	-27.227	-0.518
Al+3	1.098e-034	9.010e-036	-33.960	-35.045	-1.086
AlSO4+	7.174e-035	5.324e-035	-34.144	-34.274	-0.129
Al(SO4)2-	3.216e-035	2.387e-035	-34.493	-34.622	-0.129
C	6.246e-005				
NaCO3-	3.929e-005	2.916e-005	-4.406	-4.535	-0.129
CO3-2	1.793e-005	3.833e-006	-4.746	-5.416	-0.670
CaCO3	5.217e-006	6.021e-006	-5.283	-5.220	0.062
HCO3-	1.839e-008	1.251e-008	-7.735	-7.903	-0.168
NaHCO3	2.498e-009	2.883e-009	-8.602	-8.540	0.062
CaHCO3+	1.943e-010	1.321e-010	-9.712	-9.879	-0.168
MgCO3	1.529e-012	1.765e-012	-11.815	-11.753	0.062
CO2	3.774e-015	4.356e-015	-14.423	-14.361	0.062
MgHCO3+	9.439e-017	7.006e-017	-16.025	-16.155	-0.129
CH4	8.234e-034	9.503e-034	-33.084	-33.022	0.062
Ca	6.128e-003				
Ca+2	3.394e-003	8.572e-004	-2.469	-3.067	-0.598
CaOH+	1.875e-003	1.392e-003	-2.727	-2.856	-0.129
CaSO4	8.537e-004	9.853e-004	-3.069	-3.006	0.062
CaCO3	5.217e-006	6.021e-006	-5.283	-5.220	0.062
CaHCO3+	1.943e-010	1.321e-010	-9.712	-9.879	-0.168
Cl	4.091e-001				
Cl-	4.091e-001	2.573e-001	-0.388	-0.590	-0.201
ClO-	0.000e+000	0.000e+000	-47.637	-47.766	-0.129
ClOH	0.000e+000	0.000e+000	-53.225	-53.163	0.062
ClO2-	0.000e+000	0.000e+000	-86.820	-86.950	-0.129
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-97.868	-97.806	0.062
ClO3-	0.000e+000	0.000e+000	-114.427	-114.556	-0.129
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-145.217	-145.347	-0.129
H(0)	2.097e-014				
H2	1.049e-014	1.210e-014	-13.979	-13.917	0.062
Mg	8.798e-009				
MgOH+	6.713e-009	4.982e-009	-8.173	-8.303	-0.129
Mg+2	1.665e-009	4.819e-010	-8.779	-9.317	-0.538
MgSO4	4.190e-010	4.836e-010	-9.378	-9.316	0.062
MgCO3	1.529e-012	1.765e-012	-11.815	-11.753	0.062
MgHCO3+	9.439e-017	7.006e-017	-16.025	-16.155	-0.129
Na	5.963e-001				
Na+	5.807e-001	4.104e-001	-0.236	-0.387	-0.151
NaSO4-	1.564e-002	1.161e-002	-1.806	-1.935	-0.129
NaCO3-	3.929e-005	2.916e-005	-4.406	-4.535	-0.129
NaHCO3	2.498e-009	2.883e-009	-8.602	-8.540	0.062
O(0)	0.000e+000				
O2	0.000e+000	0.000e+000	-64.625	-64.563	0.062
S	4.647e-002				
SO4-2	2.998e-002	5.643e-003	-1.523	-2.248	-0.725
NaSO4-	1.564e-002	1.161e-002	-1.806	-1.935	-0.129
CaSO4	8.537e-004	9.853e-004	-3.069	-3.006	0.062
MgSO4	4.190e-010	4.836e-010	-9.378	-9.316	0.062
HSO4-	1.124e-013	8.344e-014	-12.949	-13.079	-0.129
SO3-2	1.300e-016	3.945e-017	-15.886	-16.404	-0.518
HSO3-	1.344e-022	9.977e-023	-21.872	-22.001	-0.129
HS-	6.371e-025	3.921e-025	-24.196	-24.407	-0.211
S-2	1.288e-030	2.567e-031	-29.890	-30.591	-0.700
H2S	5.036e-031	5.813e-031	-30.298	-30.236	0.062
H2SO3	9.114e-034	1.052e-033	-33.040	-32.978	0.062
AlSO4+	7.174e-035	5.324e-035	-34.144	-34.274	-0.129
Al(SO4)2-	3.216e-035	2.387e-035	-34.493	-34.622	-0.129
S2O3-2	2.379e-035	7.219e-036	-34.624	-35.142	-0.518
HS2O3-	0.000e+000	0.000e+000	-46.239	-46.369	-0.129
Si	3.477e-007				
H3SiO4-	1.987e-007	1.475e-007	-6.702	-6.831	-0.129
H2SiO4-2	1.488e-007	4.516e-008	-6.827	-7.345	-0.518
H4SiO4	1.257e-010	1.451e-010	-9.901	-9.838	0.062
H4Si2O7-2	3.047e-013	9.246e-014	-12.516	-13.034	-0.518
H5Si2O7-	1.508e-015	1.119e-015	-14.822	-14.951	-0.129
H5Si3O10-3	4.146e-018	2.833e-019	-17.382	-18.548	-1.165 H3Si3O9-3
3.359e-019	2.295e-020	-18.474	-19.639	-1.165	
H4Si4O12-4	5.247e-023	4.446e-025	-22.280	-24.352	-2.072
H5Si4O12-3	6.272e-026	4.285e-027	-25.203	-26.368	-1.165

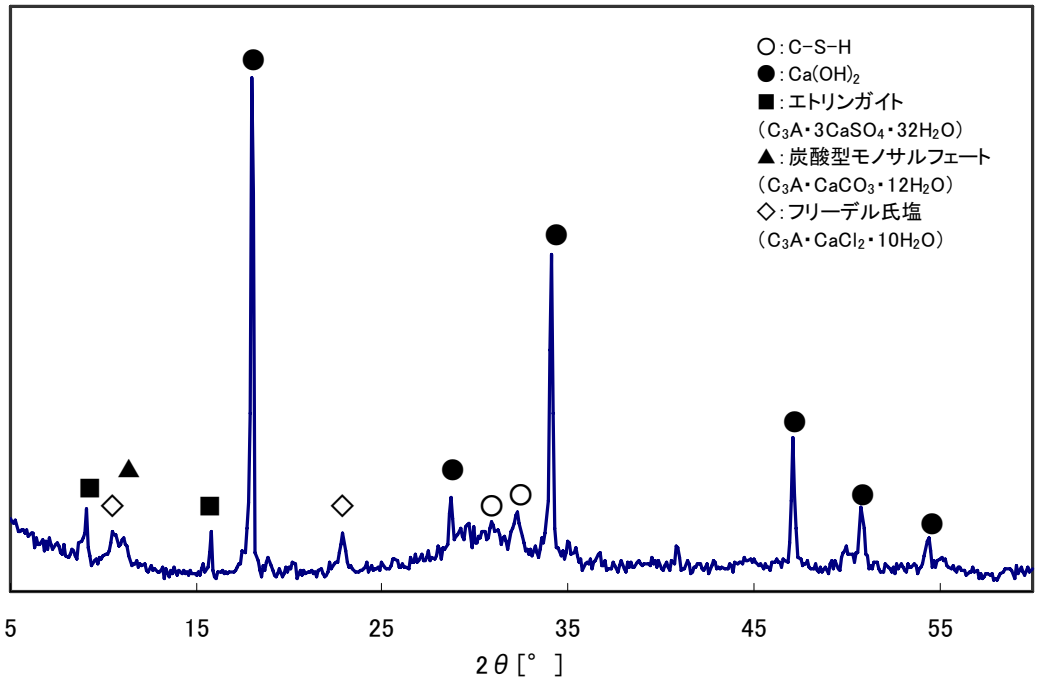
----------Saturation indices----------

Phase	SI	log IAP	log KT	
Afm(CO)	-6.27	-36.12	-29.85	Al2.000Ca4.000C1.000H22.000O20.000
AFWILLIT	-11.98	48.01	59.99	Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ALBITE	-17.18	-13.64	3.54	Na1.000Al1.000Si3.000O8.000
ANALCIM1	-10.76	-3.83	6.93	Si2.000Na1.000Al1.000H2.000O7.000
ANALCIM2	-138.27	-92.14	46.13	Si25.800Na10.200Al10.200H24.000O84.000
ANHYDRIT	-0.94	-5.32	-4.38	Ca1.000S1.000O4.000
ANORTHHE	-17.00	9.70	26.70	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR	-16.67	9.70	26.37	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	C1.000Ca1.000O3.000
BEID-CA	-29.97	-24.42	5.55	Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG	-30.97	-25.46	5.51	Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-NA	-29.65	-24.05	5.60	Na0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	Mg1.000H2.000O2.000

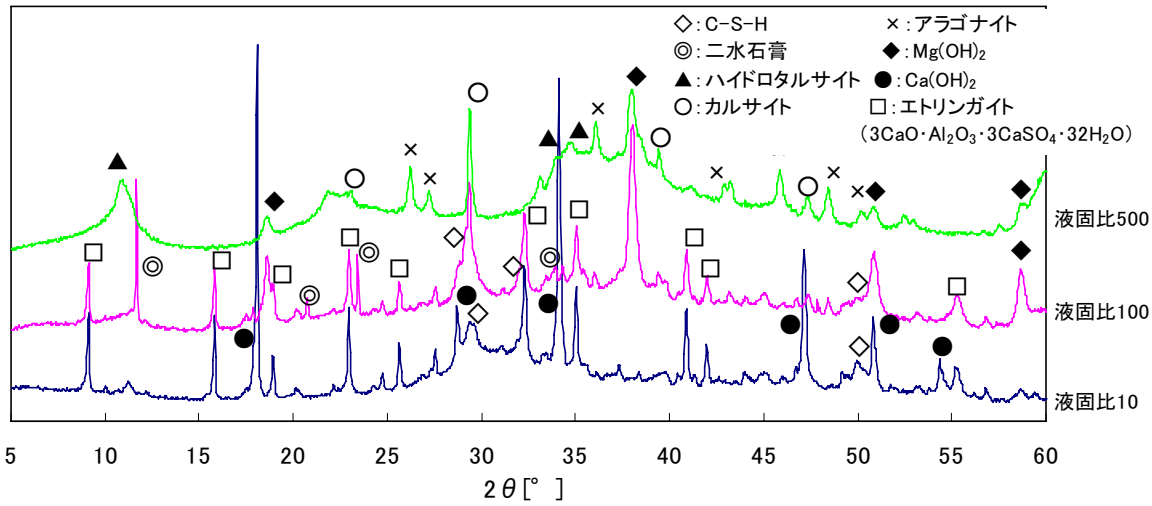
C(CR)	-20.41	-52.56	-32.15	C1.000
C(G)	-138.01	-52.56	85.45	C1.000
C2AH8	-8.80	51.83	60.64	Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4	-6.26	64.61	70.87	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1	-6.80	64.61	71.41	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13	-5.09	96.91	102.00	Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19	-5.12	96.86	101.98	Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)	-85.05	11.80	96.85	Ca1.000
CA(G)	-110.28	11.80	122.08	Ca1.000
Ca(OH)2	0.00	22.55	22.55	Ca(OH)2
CAH10	-11.16	29.26	40.42	Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)	-10.14	22.56	32.70	Ca1.000O1.000
CH4	-30.16	-74.09	-43.93	C1.000H4.000
CHALCEDO	-6.33	-9.82	-3.49	Si1.000O2.000
CL(G)	-49.46	-8.02	41.44	Cl1.000
CL2(G)	-62.03	-16.05	45.98	Cl2.000
CLINOC40	-76.19	470.64	546.83	Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
CLINOZOI	-17.78	25.83	43.61	Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CO(G)	-27.16	-41.80	-14.64	C1.000O1.000
CO2(G)	-12.89	-31.04	-18.15	C1.000O2.000
CSH(0.1)	-6.29	-7.57	-1.28	Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)	-5.61	-5.31	0.30	Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)	-4.95	-3.06	1.89	Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)	-4.31	-0.80	3.51	Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)	-3.69	1.45	5.14	Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)	-3.08	3.71	6.79	Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)	-2.49	5.96	8.45	Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)	-1.95	8.22	10.16	Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)	-1.80	8.96	10.76	Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)	-1.65	11.64	13.29	Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)	-1.07	12.73	13.80	Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)	-0.69	13.62	14.31	Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
CSH(1.2)	-0.43	14.37	14.80	Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)	-0.26	15.00	15.26	Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)	-0.15	15.54	15.69	Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)	-0.08	16.00	16.08	Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)	-0.03	16.41	16.45	Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)	-0.01	16.77	16.78	Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)	0.00	17.09	17.09	Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833	-2.47	8.96	11.44	Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
DOLOMITE	-6.13	-23.22	-17.09	Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
EPISTILB	-33.29	-29.63	3.66	Si6.000Ca1.000Al2.000H10.000O21.000
ETTRINGI	0.00	58.24	58.24	Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FOSHAGIT	-5.11	60.76	65.87	Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
FRIEDEL_	-0.00	70.13	70.13	Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GEHL_HY	-8.31	42.01	50.32	Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1	-7.15	42.01	49.16	Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT	-14.20	42.08	56.28	Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE	-4.38	3.38	7.76	Al1.000H3.000O3.000
GROSSUL	-13.70	45.00	58.70	Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1	-6.88	45.00	51.87	Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM	-0.73	-5.33	-4.60	Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE	-7.23	15.63	22.86	Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)	-40.99	-5.38	35.61	H1.000
H2(G)	-10.77	-10.77	0.00	H2.000
H2O(G)	-1.51	-0.01	1.50	H2.000O1.000
H2S(G)	-29.22	-70.92	-41.70	S1.000H2.000
HCL(G)	-19.70	-13.41	6.29	Cl1.000H1.000
HILLEBRA	-1.42	35.29	36.70	Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR	-2.96	74.41	77.37	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1	-7.17	74.41	81.58	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL	-1.85	71.93	73.78	Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
JENNITE	-2.59	144.01	146.60	Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
KAOLINIT	-21.95	-58.87	-36.92	Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE	-4.53	74.41	78.94	Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONI	-23.61	-9.97	13.63	Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LIME,	-10.14	22.56	32.70	Ca1.000O1.000
MG2SI2O6	-10.29	12.97	23.26	Mg2.000Si2.000O6.000
MONOSULF	-4.79	69.04	73.83	Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA	-27.09	-24.52	2.56	Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-MG	-28.02	-25.55	2.47	Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
MONT-NA	-26.65	-24.14	2.51	Mg0.33Al1.670Si4.000Na0.330H2.000O12.000
NA(CR)	-38.84	7.05	45.89	Na1.000
NA(G)	-52.33	7.05	59.38	Na1.000
O(G)	-71.39	10.76	82.15	O1.000
O2(G)	-61.57	21.52	83.09	O2.000
OKENITE	-7.42	2.90	10.32	Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
PARAGONI	-25.74	-6.87	18.87	Na1.000Al3.000Si3.000H2.000O12.000
PERICLAS	-5.27	16.31	21.58	Mg1.000O1.000
PLOMBIER	-9.97	53.78	63.75	Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN	-0.16	22.55	22.71	Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1	-0.00	22.55	22.55	Ca1.000H2.000O2.000
PYROPHYL	-32.97	-32.51	0.46	Si4.000Al2.000H2.000O12.000
QUARTZ	-6.04	-9.82	-3.78	Si1.000O2.000
RIVERSID	-15.14	53.84	68.98	Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)	-24.31	-60.15	-35.84	S1.000
S(G)	-65.78	-60.15	5.63	S1.000
S2(G)	-62.59	-120.30	-57.71	S2.000
SAPON-CA	-8.51	17.71	26.23	Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-MG	-9.50	16.68	26.19	Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SAPON-NA	-8.19	18.09	26.28	Mg3.000Al0.330Si3.670Na0.330H2.000O12.000
SCOLECIT	-13.55	-0.14	13.41	Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000
SEP	-15.67	-52.88	-37.21	Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT	-24.10	6.25	30.35	Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)	-94.27	-31.34	62.93	Si1.000
SI(G)	-165.31	-31.34	133.97	Si1.000
SIL	-6.81	-9.83	-3.02	Si1.000H2.000O3.000

```
SIL(AM)1          -7.11    -9.82    -2.71   Si1.000O2.000
SILI(AM)          -7.18    -9.82    -2.64   Si1.000O2.000
SILICA           -12.73   -15.20    -2.47   Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)          -7.11    -9.82    -2.71   Si1.000O2.000
SO2(G)           -33.31   -38.63    -5.32   S1.000O2.000
STILBITE         -69.81   -53.29    16.52   Si13.000Ca2.000Al5.000Na1.000H28.000O50.000
TALC             -11.44     9.63    21.07   Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR         -11.70    53.82    65.51   Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,           -15.85    -3.04    12.81   Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLIT          -9.62    48.08    57.70   Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
WAIRAKIT         -27.97    -9.96    18.01   Si4.000Ca1.000Al2.000H4.000O14.000
XONOTLIT         -15.31    76.42    91.73   Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA         -33.69   -29.62     4.07   Si6.000Ca1.000Al2.000H8.000O20.000

------------------
End of simulation.
------------------

-------------------------------------
Reading input data for simulation 2.
-------------------------------------
```

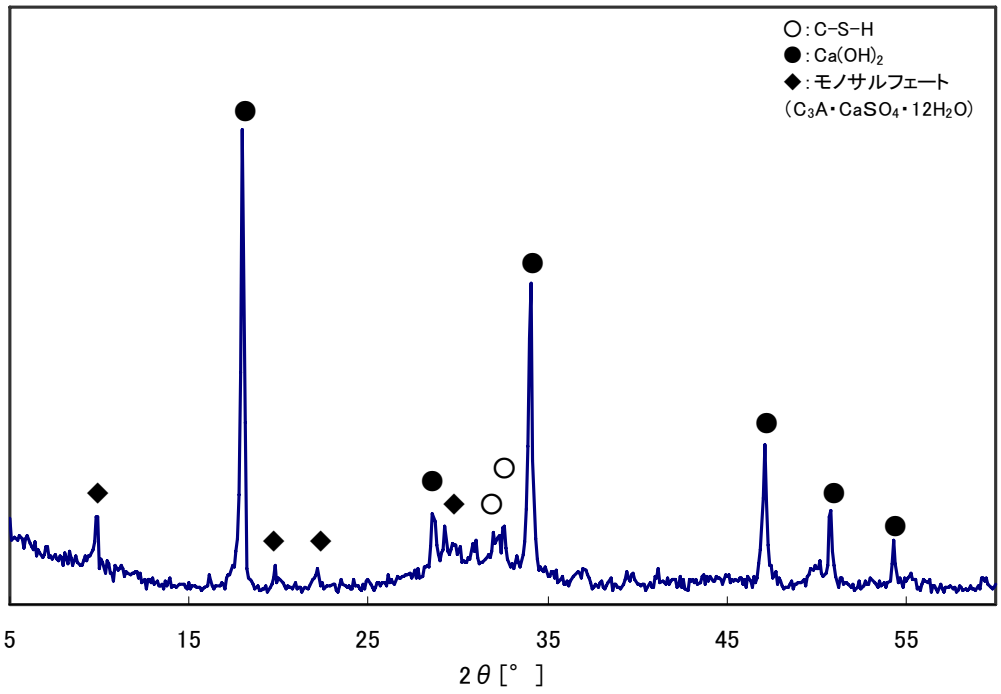
付録 7 人工海水を用いた浸漬実験の初期試料及び浸漬試料のＸ線回折図



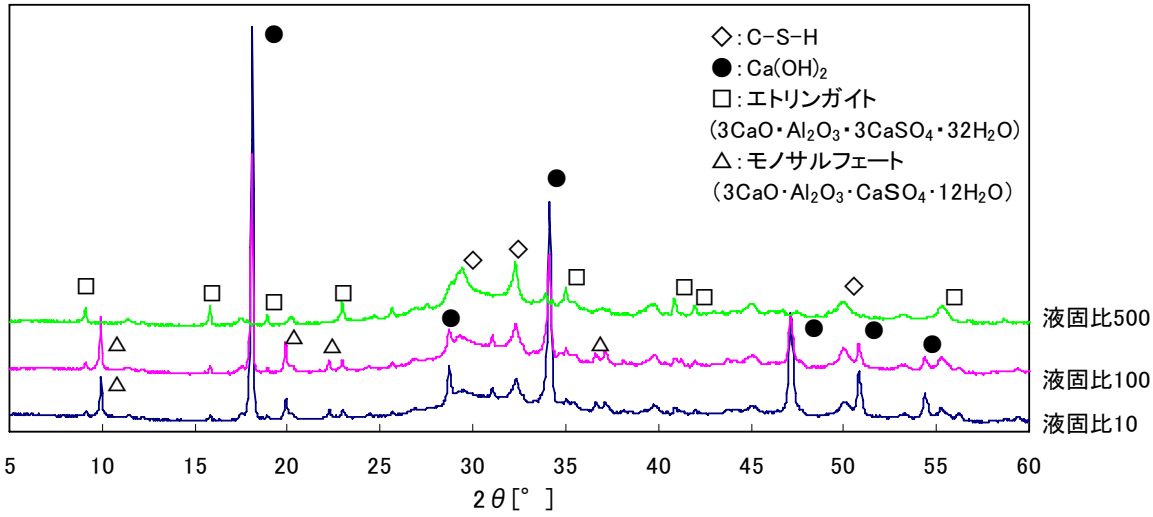
付図 7-1. 人工海水に浸漬した OPC ペーストのＸ線回折図
（浸漬条件：液固比=2.5）



付図 7-2. 人工海水に浸漬した OPC ペーストのＸ線回折図
（浸漬条件：液固比=10，100，500）

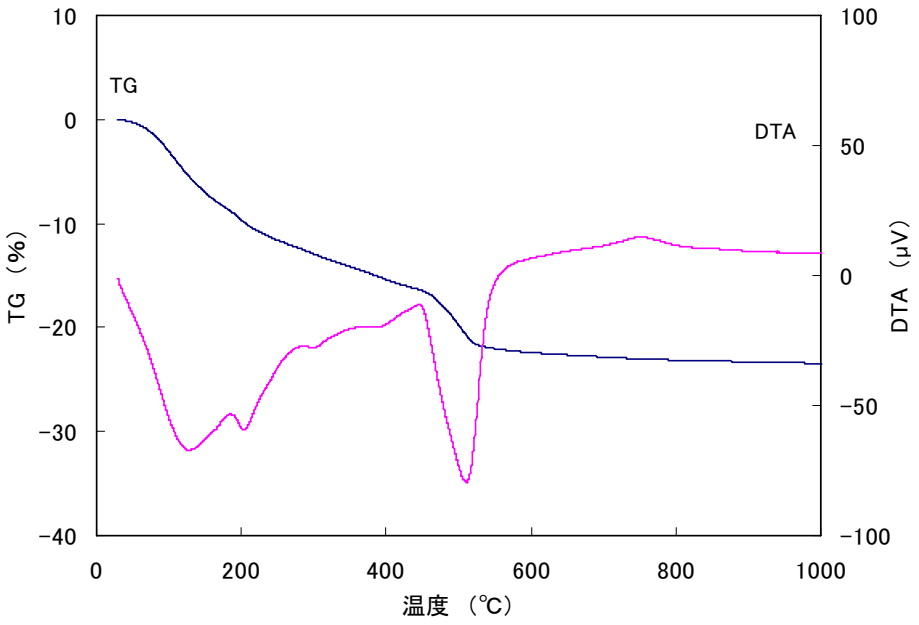


付図 7-3. イオン交換水に浸漬した OPC ペーストのＸ線回折図
（浸漬条件：液固比=2.5）

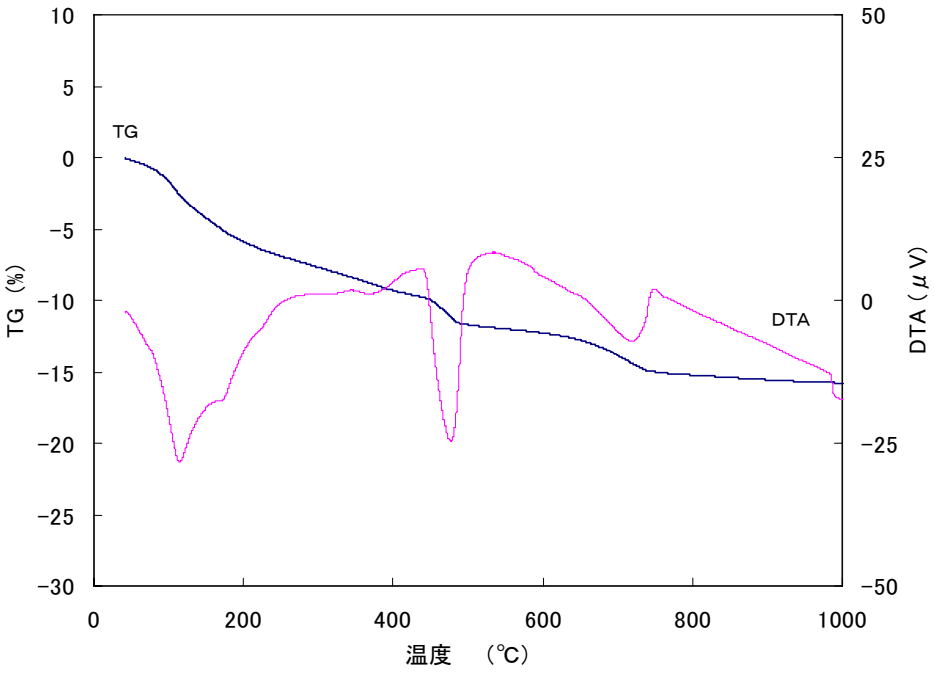


付図 7-4. イオン交換水に浸漬した OPC ペーストのＸ線回折図
（浸漬条件：液固比=10，100，500）

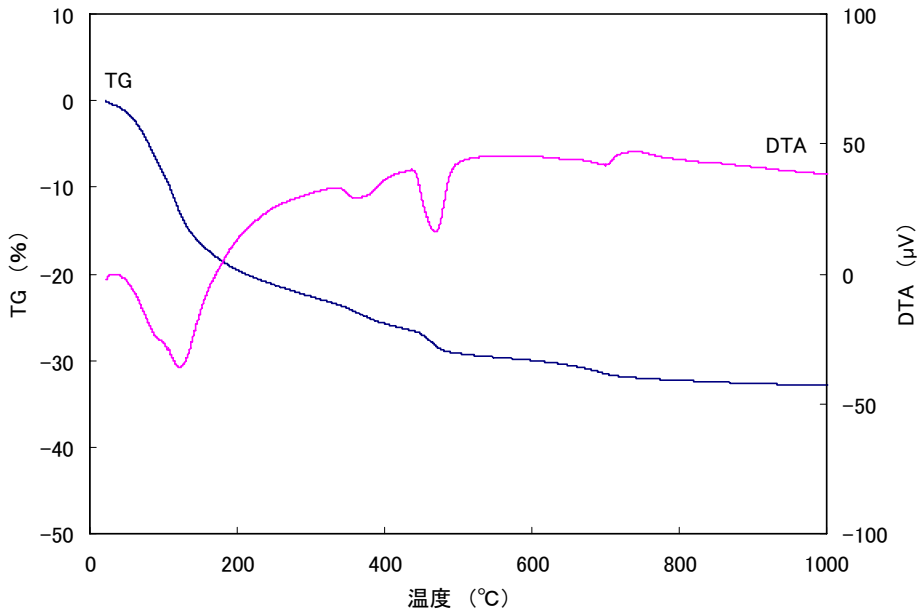
付録 8 人工海水を用いた浸漬実験の初期試料及び浸漬試料の熱分析チャート



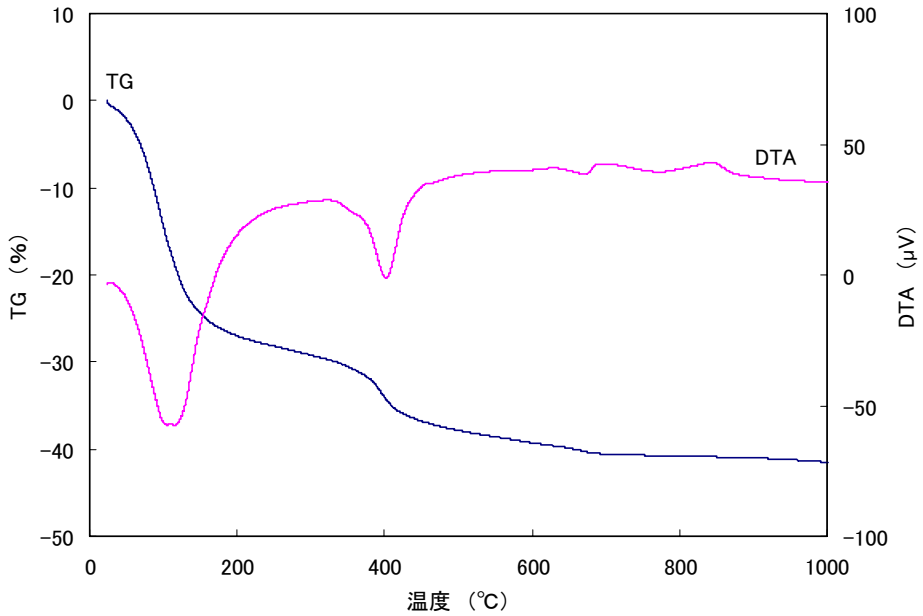
付図 8-1 OPC ペースト粉末 初期試料の TG-DTA 曲線



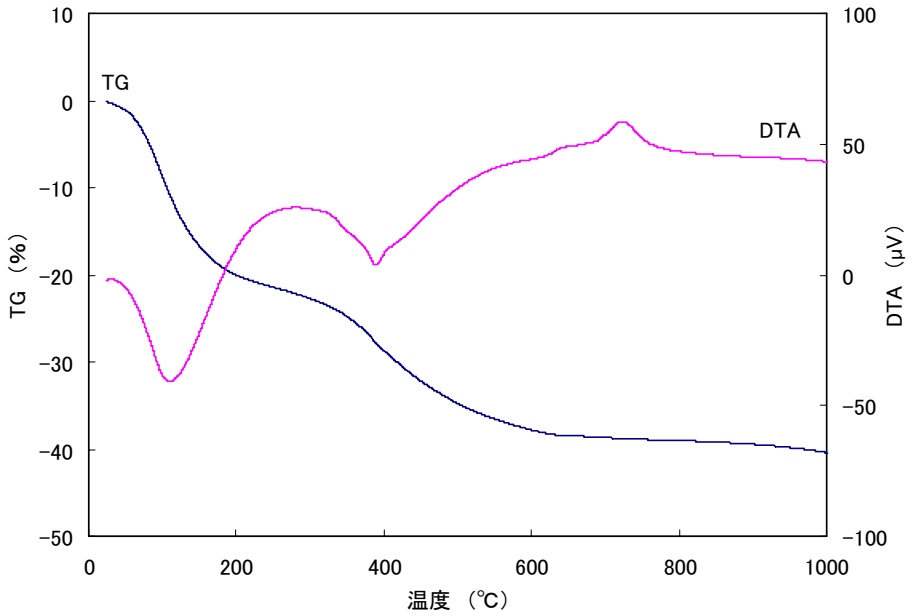
付図 8-2 人工海水に浸漬した OPC ペースト粉末の TG-DTA 曲線
（液固比=2.5）



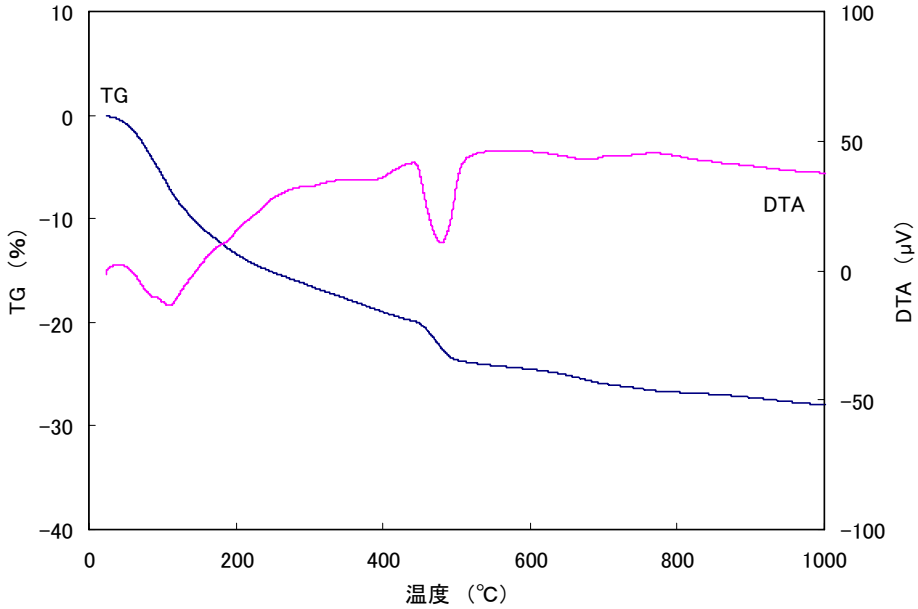
付図 8-3 人工海水に浸漬した OPC ペースト粉末の TG-DTA 曲線
（液固比=10）



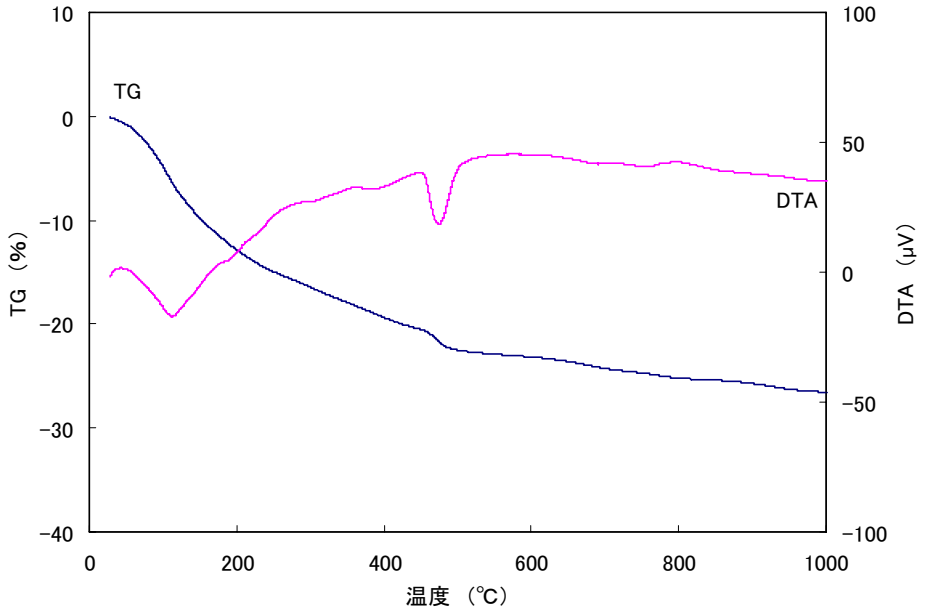
付図 8-4 人工海水に浸漬した OPC ペースト粉末の TG-DTA 曲線
（液固比=100）



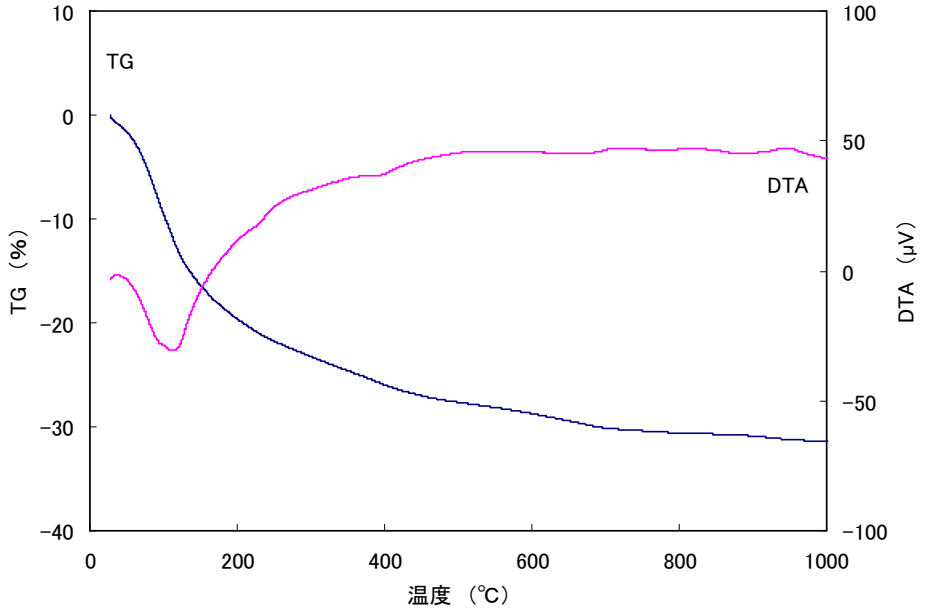
付図 8-5 人工海水に浸漬した OPC ペースト粉末の TG-DTA 曲線
（液固比=500）



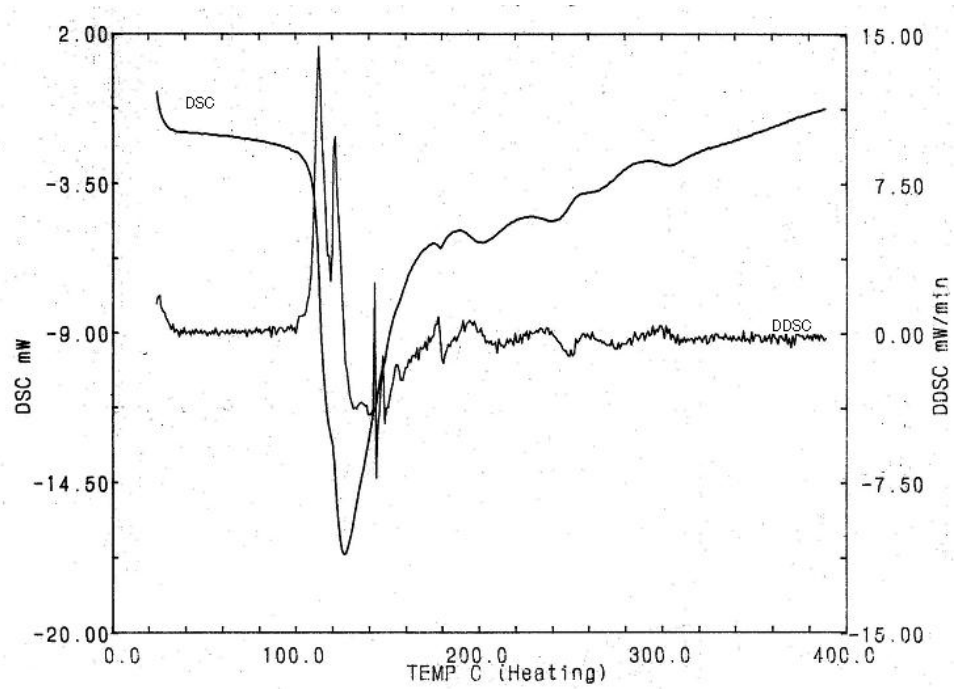
付図 8-6 イオン交換水に浸漬した OPC ペースト粉末の TG-DTA 曲線
（液固比=10）



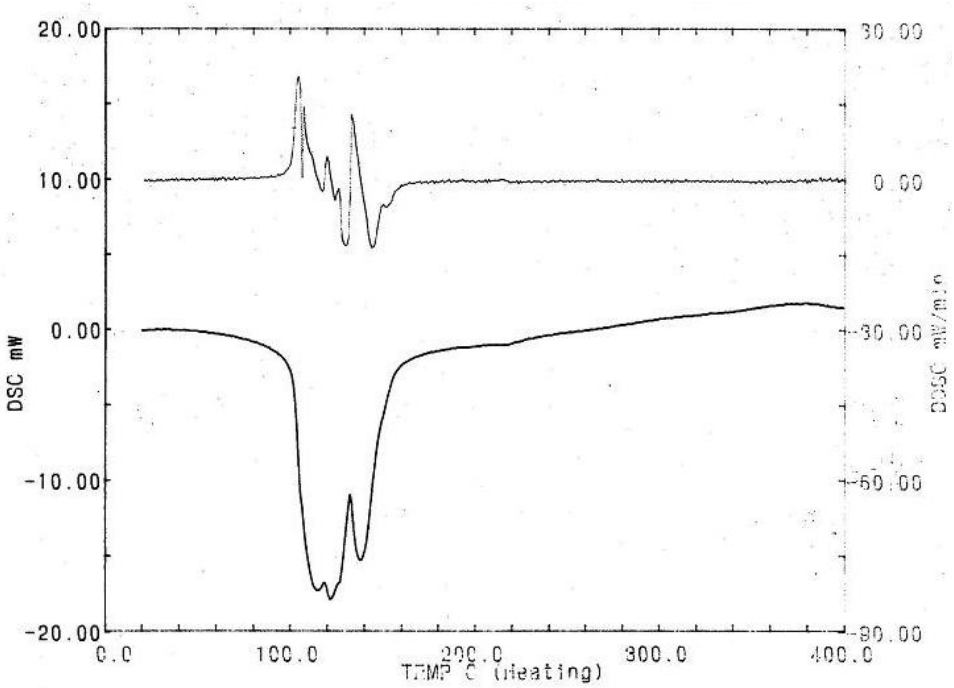
付図 8-7　イオン交換水に浸漬した OPC ペースト粉末の TG-DTA 曲線
（液固比=100）



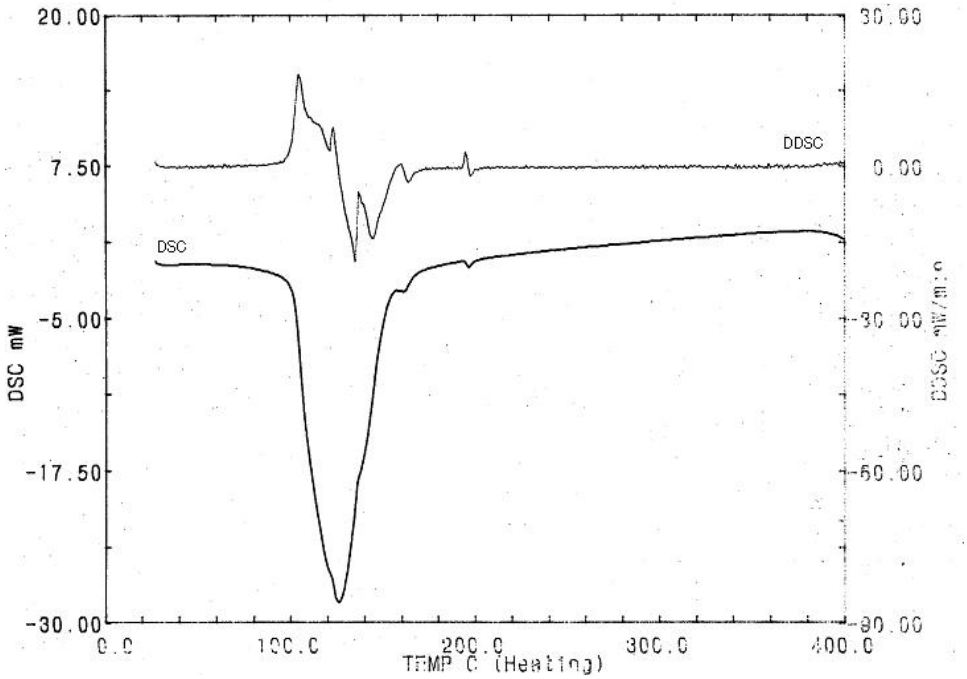
付図 8-8　イオン交換水に浸漬した OPC ペースト粉末の TG-DTA 曲線
（液固比=500）



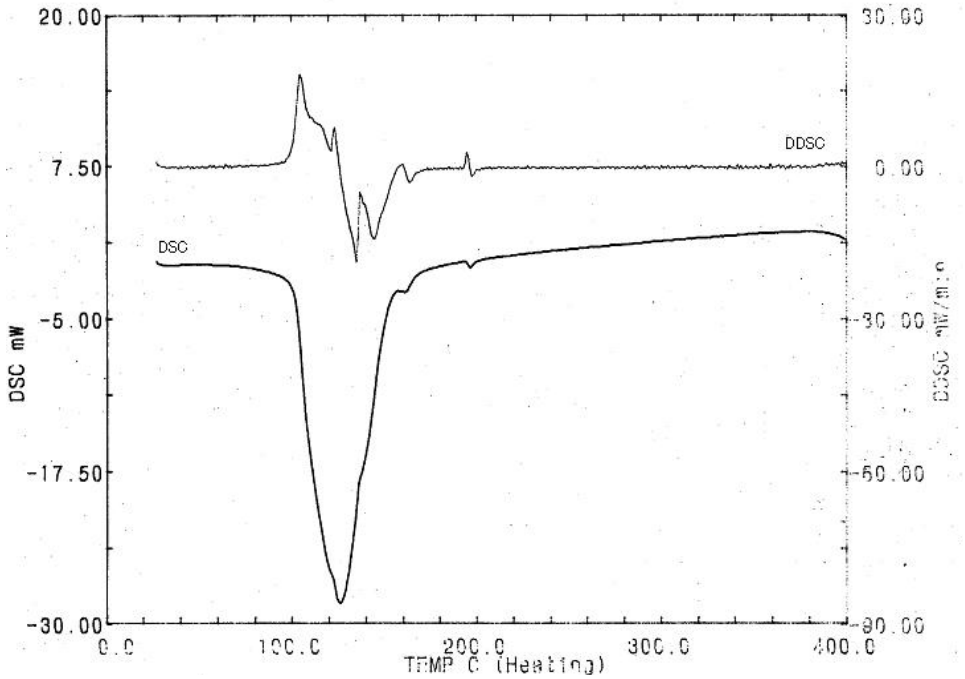
付図 8-9 OPC ペースト粉末 初期試料の DSC 曲線



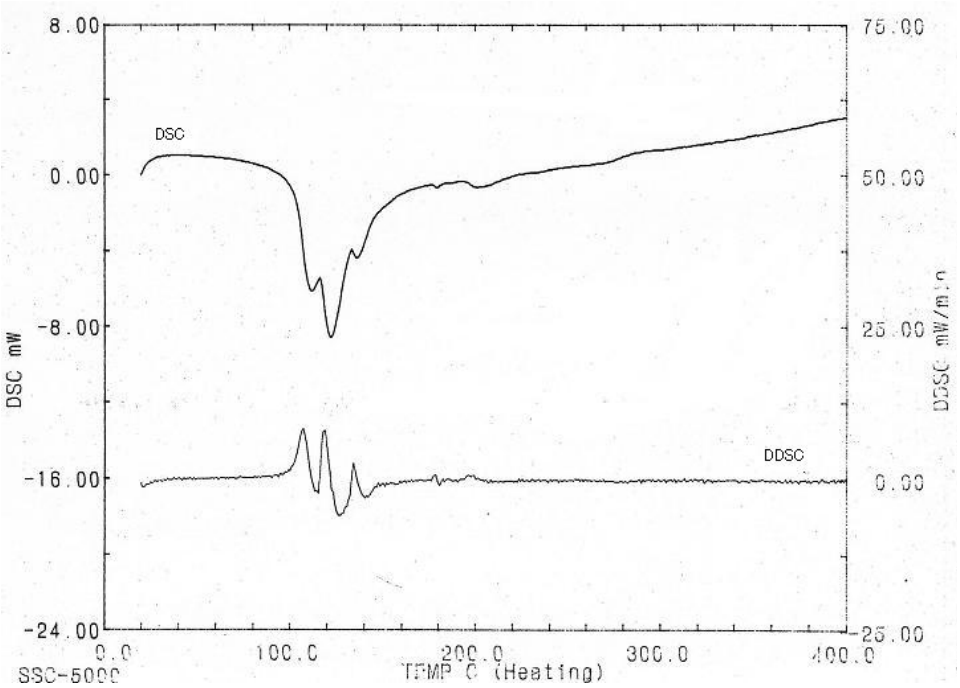
付図 8-10 人工海水に浸漬した OPC ペースト粉末の DSC 曲線
（液固比=10）



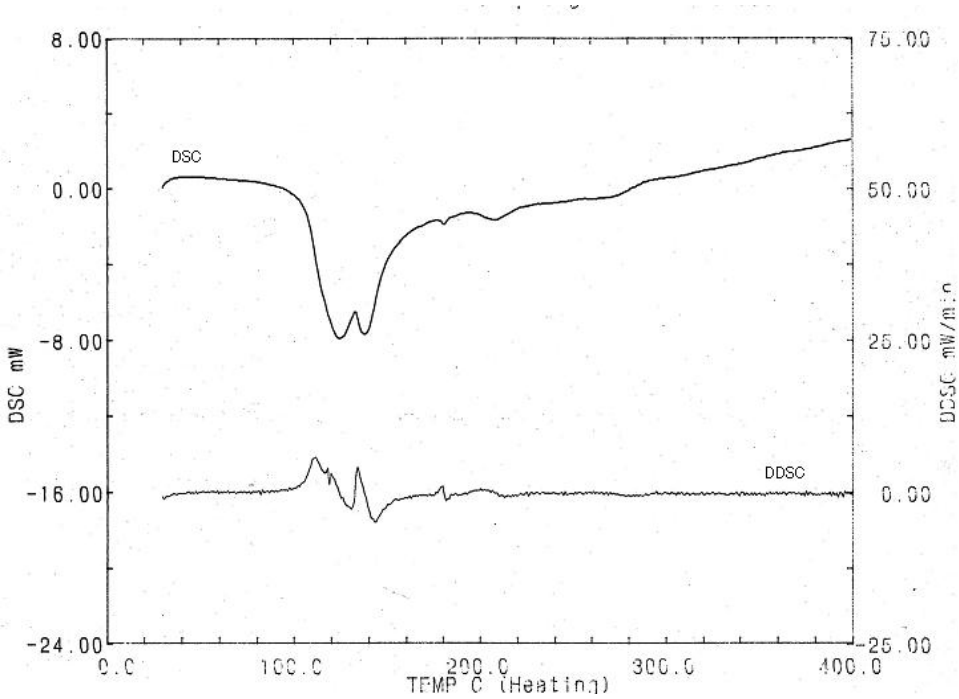
付図 8-11 人工海水に浸漬した OPC ペースト粉末の DSC 曲線
（液固比=100）



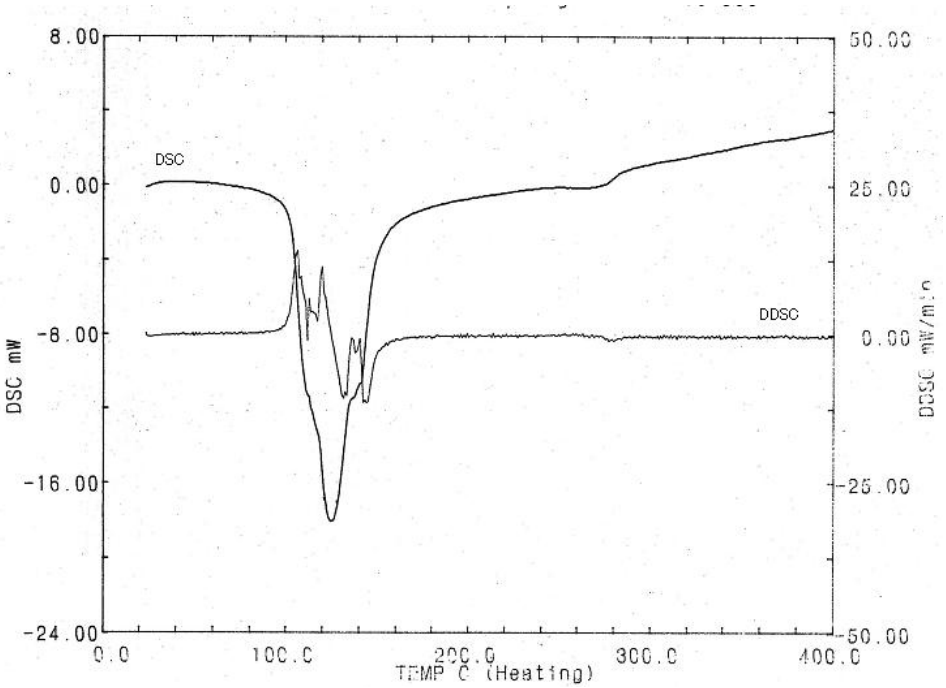
付図 8-12 人工海水に浸漬した OPC ペースト粉末の DSC 曲線
（液固比=500）



付図 8-13 イオン交換水に浸漬した OPC ペースト粉末の DSC 曲線
（液固比=10）



付図 8-14 イオン交換水に浸漬した OPC ペースト粉末の DSC 曲線
（液固比=100）



付図 8-15 イオン交換水に浸漬した OPC ペースト粉末の DSC 曲線
（液固比=500）

付録9 人工海水を用いた浸漬実験の化学平衡計算　出力データ

リスト9-1 人工海水とOPCペーストの反応における化学平衡計算（液固比=2.5，C-S-HにAl取り込み想定）

```
Input file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11. 報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥4章
¥PHREEQ-new080925¥080928_THC実測値からAl量算出(SW_LS2.5_AFm).pqi
Output file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11. 報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥4章
¥PHREEQ-new080925¥080928_THC実測値からAl量算出(SW_LS2.5_AFm).pqo
Database file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
-------------------------------------
Reading input data for simulation 1.
-------------------------------------

DATABASE C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb
Title    SW-OPC浸漬（L/S=1000/400=2.5)
PHASES
CSH(0.1)
Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
log_K -1.071
CSH(0.2)
Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
log_K 0.565
CSH(0.3)
Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
log_K 2.227
CSH(0.4)
Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
log_K 3.907
CSH(0.5)
Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
log_K 5.601
CSH(0.6)
Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
log_K 7.312
CSH(0.7)
Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
log_K 9.045
CSH(0.8)
Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
log_K 10.819
CSH(0.9)
Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
log_K 14.061
CSH(1.0)
Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
log_K 14.514
CSH(1.1)
Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
log_K 14.983
CSH(1.2)
Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
log_K 15.439
CSH(1.3)
Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
log_K 15.870
CSH(1.4)
Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
log_K 16.272
CSH(1.5)
Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
log_K 16.643
CSH(1.6)
Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
log_K 16.987
CSH(1.7)
Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
log_K 17.304
CSH(1.8)
Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
log_K 17.597
Ca(OH)2
Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
log_k 22.710
SiO2(am)
Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
log_K -2.639
CSH(0.833)
Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
log_K 11.436
SOLUTION 0    jinko-SW
            units     mol/kgw
                      pH        8.2
                      pe        0.0
```

```
                    density 1.000
                    temp      25.0
                    Ca   0.01035
                    S   0.02933
                    Mg   0.05379
                    Na   0.4934
                    K     0.01112
                    Cl   0.5653
                    C   0.5653       charge
SAVE SOLUTION 1
EQUILIBRIUM_PHASES 1
          CSH(0.1)   0.0   0.0
          CSH(0.2)   0.0   0.0
          CSH(0.3)   0.0   0.0
          CSH(0.4)   0.0   0.0
          CSH(0.5)   0.0   0.0
          CSH(0.6)   0.0   0.0
          CSH(0.7)   0.0   0.0
          CSH(0.8)   0.0   0.0
          CSH(0.9)   0.0   0.0
          CSH(1.0)   0.0   0.0
          CSH(1.1)   0.0   0.0
          CSH(1.2)   0.0   0.0
          CSH(1.3)   0.0   0.0
          CSH(1.4)   0.0   0.0
          CSH(1.5)   0.0   0.0
          CSH(1.6)   0.0   0.0
          CSH(1.7)   0.0   0.0
          CSH(1.8)   0.0   2.2028 #6.461
          SiO2(am)   0.0   0.0
          CSH(0.833) 0.0   0.0
          Ca(OH)2    0.0   1.212 #2.92949
          ETTRINGI   0.0   0.0 #0.08184
          MONOSULF   0.0    0.0852
          FRIEDEL_   0.0 0.0
          HYDROGR   0.0   0.0231 #0.2161
          Brucite    0.0   0.1673 #0.4906
          SEPIOLIT    0.0   0.0
          CALCITE 0.0 0.0
          ARAGONIT 0.0 0.0
          GEHL_HY 0.0 0.0
          HYDROTAL 0.0 0.0
          GROSSUL 0.0 0.0
          C3ASH4   0.0 0.0
          END
-----
TITLE
-----
```

```
SW-OPC浸漬（L/S=1000/400=2.5)

-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 0.          jinko-SW

----------------------------Solution composition-----------------------------

                Elements              Molality          Moles

                C                   8.090e-003   8.090e-003   Charge balance
                Ca                  1.035e-002   1.035e-002
                Cl                  5.653e-001   5.653e-001
                K                   1.112e-002   1.112e-002
                Mg                  5.379e-002   5.379e-002
                Na                  4.934e-001   4.934e-001
                S                   2.933e-002   2.933e-002

----------------------------Description of solution----------------------------

                                          pH   =     8.200
                                          pe   =     0.000
                              Activity of water   =     0.980
                                 Ionic strength   =   6.811e-001
                              Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                     Total alkalinity (eq/kg)   = -7.340e-003
                              Total CO2 (mol/kg)   =   8.090e-003
                            Temperature (deg C)   =   25.000
                         Electrical balance (eq)   = -8.727e-014
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =   -0.00
                                     Iterations   =     7
                                        Total H   = 1.110197e+002
                                        Total O   = 5.564777e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                          Log       Log       Log
Species                   Molality     Activity  Molality  Activity     Gamma

   OH-                   2.553e-006   1.554e-006   -5.593    -5.809    -0.216
   H+                    8.361e-009   6.310e-009   -8.078    -8.200    -0.122
   H2O                   5.551e+001   9.804e-001    1.744    -0.009     0.000
C                   8.090e-003
   HCO3-                 5.662e-003   3.822e-003   -2.247    -2.418    -0.171
   MgHCO3+               8.044e-004   6.015e-004   -3.095    -3.221    -0.126
   NaHCO3                6.304e-004   7.374e-004   -3.200    -3.132     0.068
   MgCO3                 3.129e-004   3.661e-004   -3.505    -3.436     0.068
```

```
    NaCO3-          2.410e-004  1.802e-004   -3.618    -3.744    -0.126
    CaHCO3+         1.569e-004  1.059e-004   -3.805    -3.975    -0.171
    CO3-2           1.362e-004  2.830e-005   -3.866    -4.548    -0.683
    CaCO3           9.964e-005  1.166e-004   -4.002    -3.933     0.068
    CO2             4.712e-005  5.512e-005   -4.327    -4.259     0.068
    CH4             0.000e+000  0.000e+000   -45.520   -45.451    0.068
Ca                  1.035e-002
    Ca+2            8.982e-003  2.248e-003   -2.047    -2.648    -0.602
    CaSO4           1.112e-003  1.300e-003   -2.954    -2.886     0.068
    CaHCO3+         1.569e-004  1.059e-004   -3.805    -3.975    -0.171
    CaCO3           9.964e-005  1.166e-004   -4.002    -3.933     0.068
    CaOH+           1.179e-007  8.813e-008   -6.929    -7.055    -0.126
Cl                  5.653e-001
    Cl-             5.653e-001  3.522e-001   -0.248    -0.453    -0.206
    ClO-            0.000e+000  0.000e+000   -41.871   -41.997   -0.126
    ClOH            0.000e+000  0.000e+000   -42.845   -42.777    0.068
    ClO2-           0.000e+000  0.000e+000   -75.421   -75.547   -0.126
    ClHO2           0.000e+000  0.000e+000   -81.855   -81.786    0.068
    ClO3-           0.000e+000  0.000e+000   -97.395   -97.521   -0.126
    ClO4-           0.000e+000  0.000e+000   -122.552  -122.679  -0.126
H(0)                4.819e-020
    H2              2.409e-020  2.818e-020   -19.618   -19.550    0.068
K                   1.112e-002
    K+              1.094e-002  6.814e-003   -1.961    -2.167    -0.206
    KSO4-           1.832e-004  1.370e-004   -3.737    -3.863    -0.126
Mg                  5.379e-002
    Mg+2            4.682e-002  1.354e-002   -1.330    -1.868    -0.539
    MgSO4           5.844e-003  6.837e-003   -2.233    -2.165     0.068
    MgHCO3+         8.044e-004  6.015e-004   -3.095    -3.221    -0.126
    MgCO3           3.129e-004  3.661e-004   -3.505    -3.436     0.068
    MgOH+           4.520e-006  3.380e-006   -5.345    -5.471    -0.126
Na                  4.934e-001
    Na+             4.860e-001  3.436e-001   -0.313    -0.464    -0.151
    NaSO4-          6.539e-003  4.890e-003   -2.184    -2.311    -0.126
    NaHCO3          6.304e-004  7.374e-004   -3.200    -3.132     0.068
    NaCO3-          2.410e-004  1.802e-004   -3.618    -3.744    -0.126
O(0)                0.000e+000
    O2              0.000e+000  0.000e+000   -53.365   -53.297    0.068
S                   2.933e-002
    SO4-2           1.565e-002  2.840e-003   -1.805    -2.547    -0.741
    NaSO4-          6.539e-003  4.890e-003   -2.184    -2.311    -0.126
    MgSO4           5.844e-003  6.837e-003   -2.233    -2.165     0.068
    CaSO4           1.112e-003  1.300e-003   -2.954    -2.886     0.068
    KSO4-           1.832e-004  1.370e-004   -3.737    -3.863    -0.126
    HSO4-           2.325e-009  1.739e-009   -8.634    -8.760    -0.126
    SO3-2           1.478e-022  4.623e-023   -21.830   -22.335   -0.505
    HSO3-           6.474e-024  4.841e-024   -23.189   -23.315   -0.126
    H2SO3           1.806e-030  2.113e-030   -29.743   -29.675    0.068
    HS-             0.000e+000  0.000e+000   -42.403   -42.619   -0.216
    H2S             0.000e+000  0.000e+000   -43.899   -43.831    0.068
    S2O3-2          0.000e+000  0.000e+000   -48.530   -49.035   -0.505
    S-2             0.000e+000  0.000e+000   -52.706   -53.420   -0.714
    HS2O3-          0.000e+000  0.000e+000   -55.519   -55.645   -0.126

-----------------------------Saturation indices-------------------------------

Phase                SI log IAP   log KT

ANHYDRIT            -0.81    -5.19    -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
ARAGONIT             1.14    -7.20    -8.34   C1.000Ca1.000O3.000
BRUCITE             -1.79    14.51    16.30   Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)              -21.57   -53.72   -32.15   C1.000
C(G)               -139.17  -53.72    85.45   C1.000
CA(CR)              -99.50   -2.65    96.85   Ca1.000
CA(G)              -124.73   -2.65   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2             -8.98    13.73    22.71   Ca(OH)2
CALCITE              1.29    -7.20    -8.48   C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)            -18.96    13.74    32.70   Ca1.000O1.000
CH4                -42.59   -86.52   -43.93   C1.000H4.000
CL(G)              -41.89    -0.45    41.44   Cl1.000
CL2(G)             -46.89    -0.91    45.98   Cl2.000
CO(G)              -22.69   -37.33   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)              -2.79   -20.94   -18.15   C1.000O2.000
DOLOMITE             3.48   -13.61   -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
GYPSUM              -0.61    -5.21    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
H(G)               -43.81    -8.20    35.61   H1.000
H2(G)              -16.40   -16.40     0.00   H2.000
H2O(G)              -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)             -42.81   -84.51   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)             -14.94    -8.65     6.29   Cl1.000H1.000
K(CR)              -51.66    -2.17    49.49   K1.000
K(G)               -62.26    -2.17    60.09   K1.000
LIME,              -18.96    13.74    32.70   Ca1.000O1.000
NA(CR)             -46.35    -0.46    45.89   Na1.000
NA(G)              -59.84    -0.46    59.38   Na1.000
O(G)               -65.76    16.39    82.15   O1.000
O2(G)              -50.31    32.78    83.09   O2.000
PERICLAS            -7.06    14.52    21.58   Mg1.000O1.000
PORTLAN             -8.98    13.73    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1            -8.82    13.73    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
S(CR)              -32.27   -68.11   -35.84   S1.000
S(G)               -73.74   -68.11     5.63   S1.000
S2(G)              -78.51  -136.22   -57.71   S2.000
SO2(G)             -30.01   -35.33    -5.32   S1.000O2.000

----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
----------------------------------------
```

Reaction step 1.

Using solution 0. jinko-SW
Using pure phase assemblage 1.

----------Phase assemblage----------

Phase	SI	log IAP	log KT	Moles in assemblage Initial	Final	Delta
ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	0.000e+000	0	0.000e+000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	1.673e-001	2.211e-001	5.379e-002
C3ASH4	-6.11	64.76	70.87	0.000e+000	0	0.000e+000
Ca(OH)2	0.00	22.71	22.71	1.212e+000	1.116e+000	-9.619e-002
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	0.000e+000	8.067e-003	8.067e-003
CSH(0.1)	-5.85	-6.92	-1.07	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.2)	-5.22	-4.65	0.56	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.3)	-4.61	-2.38	2.23	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.4)	-4.02	-0.11	3.91	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.5)	-3.44	2.16	5.60	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.6)	-2.88	4.43	7.31	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.7)	-2.34	6.70	9.04	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.8)	-1.85	8.97	10.82	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.833)	-1.71	9.72	11.44	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.9)	-1.57	12.49	14.06	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.0)	-1.00	13.51	14.51	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.1)	-0.63	14.35	14.98	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.2)	-0.39	15.05	15.44	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.3)	-0.23	15.64	15.87	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.4)	-0.13	16.14	16.27	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.5)	-0.07	16.58	16.64	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.6)	-0.02	16.96	16.99	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.7)	-0.00	17.30	17.30	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.8)	0.00	17.60	17.60	2.203e+000	2.203e+000	-1.700e-006
ETTRINGI	0.00	58.24	58.24	0.000e+000	3.067e-002	3.067e-002
FRIEDEL_	-0.00	70.13	70.13	0.000e+000	7.763e-002	7.763e-002
GEHL_HY	-8.30	42.02	50.32	0.000e+000	0	0.000e+000
GROSSUL	-12.30	46.40	58.70	0.000e+000	0	0.000e+000
HYDROGR	-3.43	73.94	77.37	2.310e-002	0	-2.310e-002
HYDROTAL	-2.79	70.99	73.78	0.000e+000	0	0.000e+000
MONOSULF	-5.10	68.73	73.83	8.520e-002	0	-8.520e-002
SEPIOLIT	-20.34	10.00	30.35	0.000e+000	0	0.000e+000
SiO2(am)	-6.56	-9.20	-2.64	0.000e+000	0	0.000e+000

----------Solution composition----------

Elements	Molality	Moles
Al	5.108e-008	5.054e-008
C	2.376e-005	2.351e-005
Ca	1.419e-002	1.404e-002
Cl	4.144e-001	4.100e-001
K	1.124e-002	1.112e-002
Mg	1.291e-008	1.277e-008
Na	4.987e-001	4.934e-001
S	2.277e-002	2.253e-002
Si	9.552e-007	9.451e-007

----------Description of solution----------

pH = 12.676 Charge balance
pe = 5.204 Adjusted to redox equilibrium
Activity of water = 0.983
Ionic strength = 5.488e-001
Mass of water (kg) = 9.894e-001
Total alkalinity (eq/kg) = 7.829e-002
Total CO2 (mol/kg) = 2.376e-005
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = -6.656e-013
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -0.00
Iterations = 19
Total H = 1.099111e+002
Total O = 5.508447e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	7.452e-002	4.661e-002	-1.128	-1.332	-0.204
H+	2.768e-013	2.108e-013	-12.558	-12.676	-0.118
H2O	5.551e+001	9.825e-001	1.744	-0.008	0.000
Al	5.108e-008				
Al(OH)4-	5.108e-008	3.762e-008	-7.292	-7.425	-0.133
Al(OH)3	7.113e-014	8.071e-014	-13.148	-13.093	0.055
Al(OH)2+	1.868e-020	1.375e-020	-19.729	-19.862	-0.133
AlOH+2	1.293e-027	3.801e-028	-26.889	-27.420	-0.532
Al+3	9.253e-035	7.970e-036	-34.034	-35.099	-1.065
AlSO4+	3.263e-035	2.403e-035	-34.486	-34.619	-0.133
Al(SO4)2-	7.464e-036	5.497e-036	-35.127	-35.260	-0.133
C	2.376e-005				
NaCO3-	1.220e-005	8.981e-006	-4.914	-5.047	-0.133
CO3-2	6.251e-006	1.392e-006	-5.204	-5.856	-0.652
CaCO3	5.306e-006	6.021e-006	-5.275	-5.220	0.055
HCO3-	9.143e-009	6.281e-009	-8.039	-8.202	-0.163
NaHCO3	1.082e-009	1.228e-009	-8.966	-8.911	0.055
CaHCO3+	2.660e-010	1.827e-010	-9.575	-9.738	-0.163

```
    MgCO3          1.076e-012  1.221e-012   -11.968   -11.913    0.055
    CO2            2.661e-015  3.020e-015   -14.575   -14.520    0.055
    MgHCO3+        9.103e-017  6.704e-017   -16.041   -16.174   -0.133
    CH4            0.000e+000  0.000e+000   -133.211  -133.156   0.055
Ca                 1.419e-002
    Ca+2           9.194e-003  2.361e-003    -2.036    -2.627   -0.590
    CaOH+          3.771e-003  2.777e-003    -2.424    -2.556   -0.133
    CaSO4          1.220e-003  1.385e-003    -2.914    -2.859    0.055
    CaCO3          5.306e-006  6.021e-006    -5.275    -5.220    0.055
    CaHCO3+        2.660e-010  1.827e-010    -9.575    -9.738   -0.163
Cl                 4.144e-001
    Cl-            4.144e-001  2.642e-001    -0.383    -0.578   -0.196
    ClO-           2.358e-023  1.736e-023   -22.628   -22.760   -0.133
    ClOH           8.483e-029  9.626e-029   -28.071   -28.017    0.055
    ClO2-          1.525e-037  1.123e-037   -36.817   -36.950   -0.133
    ClO3-          3.722e-040  2.741e-040   -39.429   -39.562   -0.133
    ClO4-          0.000e+000  0.000e+000   -45.225   -45.358   -0.133
    ClHO2          0.000e+000  0.000e+000   -47.720   -47.665    0.055
H(0)               2.167e-039
    H2             1.083e-039  1.229e-039   -38.965   -38.910    0.055
K                  1.124e-002
    K+             1.104e-002  7.040e-003    -1.957    -2.152   -0.196
    KSO4-          1.949e-004  1.435e-004    -3.710    -3.843   -0.133
Mg                 1.291e-008
    MgOH+          9.338e-009  6.877e-009    -8.030    -8.163   -0.133
    Mg+2           3.153e-009  9.181e-010    -8.501    -9.037   -0.536
    MgSO4          4.143e-010  4.701e-010    -9.383    -9.328    0.055
    MgCO3          1.076e-012  1.221e-012   -11.968   -11.913    0.055
    MgHCO3+        9.103e-017  6.704e-017   -16.041   -16.174   -0.133
Na                 4.987e-001
    Na+            4.919e-001  3.481e-001    -0.308    -0.458   -0.150
    NaSO4-         6.823e-003  5.024e-003    -2.166    -2.299   -0.133
    NaCO3-         1.220e-005  8.981e-006    -4.914    -5.047   -0.133
    NaHCO3         1.082e-009  1.228e-009    -8.966    -8.911    0.055
O(0)               4.694e-015
    O2             2.347e-015  2.663e-015   -14.630   -14.575    0.055
S                  2.277e-002
    SO4-2          1.453e-002  2.879e-003    -1.838    -2.541   -0.703
    NaSO4-         6.823e-003  5.024e-003    -2.166    -2.299   -0.133
    CaSO4          1.220e-003  1.385e-003    -2.914    -2.859    0.055
    KSO4-          1.949e-004  1.435e-004    -3.710    -3.843   -0.133
    MgSO4          4.143e-010  4.701e-010    -9.383    -9.328    0.055
    HSO4-          7.998e-014  5.889e-014   -13.097   -13.230   -0.133
    AlSO4+         3.263e-035  2.403e-035   -34.486   -34.619   -0.133
    Al(SO4)2-      7.464e-036  5.497e-036   -35.127   -35.260   -0.133
    SO3-2          0.000e+000  0.000e+000   -41.159   -41.690   -0.532
    HSO3-          0.000e+000  0.000e+000   -47.014   -47.147   -0.133
    H2SO3          0.000e+000  0.000e+000   -58.038   -57.983    0.055
    HS-            0.000e+000  0.000e+000   -124.331  -124.535   -0.204
    S-2            0.000e+000  0.000e+000   -130.178  -130.859   -0.681
    H2S            0.000e+000  0.000e+000   -130.278  -130.223    0.055
    S2O3-2         0.000e+000  0.000e+000   -134.890  -135.422   -0.532
    HS2O3-         0.000e+000  0.000e+000   -146.375  -146.508   -0.133
Si                 9.552e-007
    H3SiO4-        6.142e-007  4.523e-007    -6.212    -6.345   -0.133
    H2SiO4-2       3.405e-007  1.001e-007    -6.468    -6.999   -0.532
    H4SiO4         5.425e-010  6.156e-010    -9.266    -9.211    0.055
    H4Si2O7-2      2.952e-012  8.680e-013   -11.530   -12.061   -0.532
    H5Si2O7-       1.974e-014  1.453e-014   -13.705   -13.838   -0.133
    H5Si3O10-3     1.278e-016  8.140e-018   -15.893   -17.089   -1.196
    H3Si3O9-3      1.033e-017  6.580e-019   -16.986   -18.182   -1.196
    H4Si4O12-4     5.218e-021  3.902e-023   -20.283   -22.409   -2.126
    H5Si4O12-3     8.169e-024  5.202e-025   -23.088   -24.284   -1.196

-----------------------------Saturation indices-----------------------------

Phase                SI log IAP   log KT

AFWILLIT           -10.25    49.74    59.99   Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ALBITE             -15.99   -12.45     3.54   Na1.000Al1.000Si3.000O8.000
ALUNITE            -38.13   -36.52     1.61   Al3.000S2.000K1.000H6.000O14.000
ANALCIM1           -10.19    -3.27     6.93   Si2.000Na1.000Al1.000H2.000O7.000
ANALCIM2           -129.11  -82.98    46.13   Si25.800Na10.200Al10.200H24.000O84.000
ANHYDRIT             -0.79    -5.17    -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
ANORTHHE           -16.54    10.16    26.70   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR           -16.21    10.16    26.37   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ARAGONIT             -0.14    -8.48    -8.34   C1.000Ca1.000O3.000
BEID-CA            -28.75   -23.21     5.55   Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-K             -28.74   -23.48     5.26   K0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG            -29.78   -24.26     5.51   Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-NA            -28.52   -22.92     5.60   Na0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BRUCITE              0.00    16.30    16.30   Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)             -70.56 -102.71   -32.15   C1.000
C(G)             -188.16 -102.71    85.45   C1.000
C2AH8                -9.43    51.21    60.64   Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4               -6.11    64.76    70.87   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1             -6.65    64.76    71.41   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13               -5.39    96.61   102.00   Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19               -5.42    96.56   101.98   Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)            -109.89   -13.04    96.85   Ca1.000
CA(G)             -135.12   -13.04   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2              0.00    22.71    22.71   Ca(OH)2
CAH10              -11.94    28.48    40.42   Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CALCITE              0.00    -8.48    -8.48   C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)              -9.98    22.72    32.70   Ca1.000O1.000
CH4               -130.30 -174.23   -43.93   C1.000H4.000
CHABAZ_a          -154.08 -154.18    -0.10
    Si28.600Na4.900Al7.400K0.900Ca0.800H72.000O108.000
```

```
CHABAZ_d          -146.94 -139.70      7.24
   Si27.900Na3.700Al8.100K2.000Ca1.200H72.000O108.000
CHALCEDO            -5.71    -9.20    -3.49   Si1.000O2.000
CL(G)             -36.81     4.63    41.44   Cl1.000
CL2(G)            -36.73     9.25    45.98   Cl2.000
CLINOC40           -68.77   478.06   546.83   Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
CLINOP_a          -158.34 -172.10   -13.76
   Si29.200Na1.700Al6.800K2.300Ca1.400H52.000O98.000
CLINOP_d          -157.67 -171.95   -14.28
   Si29.200Na0.400Al6.800K0.800Ca2.800H52.000O98.000
CLINOZOI           -17.01    26.60    43.61   Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CO(G)             -52.31   -66.95   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)            -13.05   -31.20   -18.15   C1.000O2.000
CSH(0.1)           -5.85    -6.92    -1.07   Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)           -5.22    -4.65     0.56   Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)           -4.61    -2.38     2.23   Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)           -4.02    -0.11     3.91   Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)           -3.44     2.16     5.60   Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)           -2.88     4.43     7.31   Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)           -2.34     6.70     9.04   Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)           -1.85     8.97    10.82   Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)         -1.71     9.72    11.44   Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)           -1.57    12.49    14.06   Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)           -1.00    13.51    14.51   Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)           -0.63    14.35    14.98   Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
CSH(1.2)           -0.39    15.05    15.44   Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)           -0.23    15.64    15.87   Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)           -0.13    16.14    16.27   Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)           -0.07    16.58    16.64   Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)           -0.02    16.96    16.99   Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)           -0.00    17.30    17.30   Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)            0.00    17.60    17.60   Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833            -1.71     9.72    11.44   Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
DOLOMITE           -6.29   -23.38   -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
EPISTILB          -30.32   -26.66     3.66   Si6.000Ca1.000Al2.000H10.000O21.000
ERIONI_a          -149.49 -147.62     1.87
   Si28.200Na3.400Al7.800K2.800Ca0.800H60.000O102.000
ERIONI_d          -144.76 -140.28     4.48
   Si27.800Na1.200Al8.200K3.000Ca2.000H60.000O102.000
ETTRINGI            0.00    58.24    58.24   Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FOSHAGIT           -2.60    63.27    65.87   Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
FRIEDEL_           -0.00    70.13    70.13   Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GEHL_HY            -8.30    42.02    50.32   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1           -7.14    42.02    49.16   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT          -14.20    42.08    56.28   Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE           -4.85     2.91     7.76   Al1.000H3.000O3.000
GROSSUL           -12.30    46.40    58.70   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1           -5.47    46.40    51.87   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM             -0.58    -5.18    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE           -5.03    17.83    22.86   Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)              -53.49   -17.88    35.61   H1.000
H2(G)             -35.76   -35.76     0.00   H2.000
H2O(G)             -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)            -129.20 -170.90   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)             -19.54   -13.25     6.29   Cl1.000H1.000
HEULANDI          -146.49 -142.93     3.56
   Si28.000Na1.000Al8.000K0.400Ca3.300H52.000O98.000
HILLEBRA           -0.47    36.23    36.70   Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR            -3.43    73.94    77.37   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1           -7.64    73.94    81.58   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL           -2.79    70.99    73.78   Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
ILLITE            -24.06   -15.09     8.97   Mg0.250Al2.300Si3.500K0.600H2.000O12.000
JENNITE             2.60   149.20   146.60   Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
K(CR)             -56.85    -7.36    49.49   K1.000
K(G)              -67.45    -7.36    60.09   K1.000
K-FELDSP          -13.91   -14.15    -0.23   Si3.000K1.000Al1.000O8.000
KAOLINIT          -21.65   -58.57   -36.92   Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE            -5.00    73.94    78.94   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONTI          -21.89    -8.26    13.63   Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LEUCITE           -11.11    -4.95     6.16   Si2.000K1.000Al1.000O6.000
LIME,             -9.98    22.72    32.70   Ca1.000O1.000
MG2SI2O6           -9.04    14.22    23.26   Mg2.000Si2.000O6.000
MICROCLI          -15.93   -14.15     1.78   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
MONOSULF           -5.10    68.73    73.83   Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA           -25.35   -22.79     2.56   Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-K            -25.13   -23.06     2.07   Mg0.330Al1.670Si4.000K0.330H2.000O12.000
MONT-MG           -26.31   -23.84     2.47   Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
MONT-NA           -25.01   -22.50     2.51   Mg0.330Al1.670Si4.000Na0.330H2.000O12.000
MORDENIT          -166.01 -189.33   -23.32
   Si30.000Na2.100Al6.000K0.900Ca1.500H44.000O94.000
MUSCOVIT          -22.92    -8.32    14.60   Al3.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
NA(CR)            -51.55    -5.66    45.89   Na1.000
NA(G)             -65.04    -5.66    59.38   Na1.000
O(G)              -46.40    35.75    82.15   O1.000
O2(G)             -11.58    71.51    83.09   O2.000
OKENITE            -6.01     4.31    10.32   Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
ORTHOCLA          -15.01   -14.15     0.86   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
PARAGONI          -25.49    -6.62    18.87   Na1.000Al3.000Si3.000H2.000O12.000
PERICLAS           -5.27    16.31    21.58   Mg1.000O1.000
PHILLI_a          -126.65 -115.66    10.99
   Si24.400Na3.200Al7.600K2.800Ca0.800H48.000O88.000
PHILLI_d          -127.57 -120.55     7.02
   Si24.600Na1.400Al7.400K1.200Ca2.400H48.000O88.000
PHLOGOPI           -1.56    34.77    36.33   Mg3.000Al1.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
PLOMBIER           -5.41    58.34    63.75   Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN             0.00    22.71    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1            0.16    22.71    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
PYROPHYL          -31.41   -30.95     0.46   Si4.000Al2.000H2.000O12.000
```

```
QUARTZ              -5.42     -9.20     -3.78    Si1.000O2.000
RIVERSID           -10.59     58.39     68.98    Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)              -99.30 -135.14    -35.84    S1.000
S(G)              -140.77 -135.14      5.63    S1.000
S2(G)             -212.58 -270.29    -57.71    S2.000
SAPON-CA            -6.35     19.88     26.23    Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-K             -6.34     19.60     25.94    Mg3.000Al0.330Si3.670K0.330H2.000O12.000
SAPON-MG            -7.37     18.82     26.19    Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SAPON-NA            -6.12     20.16     26.28    Mg3.000Al0.330Si3.670Na0.330H2.000O12.000
SCOLECIT           -12.46      0.95     13.41    Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000
SEP                -13.79    -51.00    -37.21    Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT           -20.34     10.00     30.35    Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)            -143.63    -80.70     62.93    Si1.000
SI(G)             -214.67    -80.70    133.97    Si1.000
SIL                -6.18     -9.20     -3.02    Si1.000H2.000O3.000
SIL(AM)1           -6.49     -9.20     -2.71    Si1.000O2.000
SILI(AM)           -6.56     -9.20     -2.64    Si1.000O2.000
SILICA            -24.61    -27.08     -2.47    Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)           -6.56     -9.20     -2.64    Si1.000O2.000
SIO2(QUA           -5.20     -9.20     -4.00    Si1.000O2.000
SO2(G)            -58.32    -63.64     -5.32    S1.000O2.000
STILBITE          -63.93    -47.41     16.52    Si13.000Ca2.000Al5.000Na1.000H28.000O50.000
TALC               -8.94     12.13     21.07    Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR           -7.14     58.37     65.51    Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,            -16.18     -3.37     12.81    Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLIT           -4.30     53.40     57.70    Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
WAIRAKIT          -26.25     -8.24     18.01    Si4.000Ca1.000Al2.000H4.000O14.000
XONOTLIT          -10.60     81.13     91.73    Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA          -30.72    -26.65      4.07    Si6.000Ca1.000Al2.000H8.000O20.000

------------------
End of simulation.
------------------

------------------------------------
Reading input data for simulation 2.
------------------------------------

-----------
End of run.
-----------
```

リスト9-2 人工海水とOPCペーストの反応における化学平衡計算（液固比=10，C-S-HにAl取り込み想定）

```
Input file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11. 報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥4章
¥PHREEQ-new080925¥0809228_THC実測値からAl量算出(SW_LS10_AFm).pqi
Output file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11. 報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥4章
¥PHREEQ-new080925¥0809228_THC実測値からAl量算出(SW_LS10_AFm).pqo
Database file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
  END
-------------------------------------
Reading input data for simulation 1.
-------------------------------------

DATABASE C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb
Title    SW-OPC浸漬（L/S=1000/100=10)
PHASES
CSH(0.1)
Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
  log_K -1.071
CSH(0.2)
Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
log_K 0.565
CSH(0.3)
Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
log_K 2.227
CSH(0.4)
Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
log_K 3.907
CSH(0.5)
Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
log_K 5.601
CSH(0.6)
Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
log_K 7.312
CSH(0.7)
Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
log_K 9.045
CSH(0.8)
Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
log_K 10.819
CSH(0.9)
Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
log_K 14.061
CSH(1.0)
Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
log_K 14.514
CSH(1.1)
Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
log_K 14.983
CSH(1.2)
Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
log_K 15.439
CSH(1.3)
Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
log_K 15.870
CSH(1.4)
Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
log_K 16.272
CSH(1.5)
Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
log_K 16.643
CSH(1.6)
Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
log_K 16.987
CSH(1.7)
Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
log_K 17.304
CSH(1.8)
Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
log_K 17.597
Ca(OH)2
Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
log_k 22.710
SiO2(am)
Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
log_K -2.639
CSH(0.833)
Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
log_K 11.436
SOLUTION 0    jinko-SW
                    units     mol/kgw
                pH          8.2
                pe          0.0
                density 1.000
                temp        25.0
                Ca    0.01035
```

```
                S    0.02933
                Mg    0.05379
                Na    0.4934
                K      0.01112
                Cl    0.5653
                C    0.5653        charge
SAVE SOLUTION 1
EQUILIBRIUM_PHASES 1
        CSH(0.1)    0.0    0.0
        CSH(0.2)    0.0    0.0
        CSH(0.3)    0.0    0.0
        CSH(0.4)    0.0    0.0
        CSH(0.5)    0.0    0.0
        CSH(0.6)    0.0    0.0
        CSH(0.7)    0.0    0.0
        CSH(0.8)    0.0    0.0
        CSH(0.9)    0.0    0.0
        CSH(1.0)    0.0    0.0
        CSH(1.1)    0.0    0.0
        CSH(1.2)    0.0    0.0
        CSH(1.3)    0.0    0.0
        CSH(1.4)    0.0    0.0
        CSH(1.5)    0.0    0.0
        CSH(1.6)    0.0    0.0
        CSH(1.7)    0.0    0.0
        CSH(1.8)    0.0    0.5507 #6.461
        SiO2(am)    0.0    0.0
        CSH(0.833) 0.0    0.0
        Ca(OH)2      0.0    0.3030 #2.92949
        ETTRINGI    0.0    0.0 #0.08184
        MONOSULF    0.0      0.0213
        FRIEDEL_    0.0 0.0
        HYDROGR    0.0    0.00579 #0.2161
        Brucite      0.0    0.04181 #0.4906
        SEPIOLIT      0.0    0.0
        CALCITE 0.0 0.0
        ARAGONIT 0.0 0.0
        GEHL_HY 0.0 0.0
        HYDROTAL 0.0 0.0
        GROSSUL 0.0 0.0
        C3ASH4    0.0 0.0
        GYPSUM 0.0 0.0
        END
-----
TITLE
-----

  SW-OPC浸漬（L/S=1000/100=10)
```

```
-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 0.            jinko-SW

-----------------------------Solution composition-----------------------------

                Elements              Molality          Moles

                C                    8.090e-003   8.090e-003   Charge balance
                Ca                   1.035e-002   1.035e-002
                Cl                   5.653e-001   5.653e-001
                K                    1.112e-002   1.112e-002
                Mg                   5.379e-002   5.379e-002
                Na                   4.934e-001   4.934e-001
                S                    2.933e-002   2.933e-002

----------------------------Description of solution----------------------------

                                        pH   =     8.200
                                        pe   =     0.000
                          Activity of water   =     0.980
                              Ionic strength   =   6.811e-001
                          Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                 Total alkalinity (eq/kg)    = -7.340e-003
                          Total CO2 (mol/kg)   =   8.090e-003
                         Temperature (deg C)   =   25.000
                     Electrical balance (eq)    = -8.727e-014
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)    =    -0.00
                                   Iterations   =      7
                                       Total H    = 1.110197e+002
                                       Total O    = 5.564777e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                        Log          Log        Log
    Species                  Molality   Activity   Molality   Activity       Gamma

    OH-                     2.553e-006  1.554e-006    -5.593     -5.809      -0.216
    H+                      8.361e-009  6.310e-009    -8.078     -8.200      -0.122
    H2O                     5.551e+001  9.804e-001     1.744     -0.009       0.000
C                   8.090e-003
    HCO3-                   5.662e-003  3.822e-003    -2.247     -2.418      -0.171
    MgHCO3+                 8.044e-004  6.015e-004    -3.095     -3.221      -0.126
    NaHCO3                  6.304e-004  7.374e-004    -3.200     -3.132       0.068
    MgCO3                   3.129e-004  3.661e-004    -3.505     -3.436       0.068
    NaCO3-                  2.410e-004  1.802e-004    -3.618     -3.744      -0.126
    CaHCO3+                 1.569e-004  1.059e-004    -3.805     -3.975      -0.171
```

CO3-2	1.362e-004	2.830e-005	-3.866	-4.548	-0.683
CaCO3	9.964e-005	1.166e-004	-4.002	-3.933	0.068
CO2	4.712e-005	5.512e-005	-4.327	-4.259	0.068
CH4	0.000e+000	0.000e+000	-45.520	-45.451	0.068
Ca	1.035e-002				
Ca+2	8.982e-003	2.248e-003	-2.047	-2.648	-0.602
CaSO4	1.112e-003	1.300e-003	-2.954	-2.886	0.068
CaHCO3+	1.569e-004	1.059e-004	-3.805	-3.975	-0.171
CaCO3	9.964e-005	1.166e-004	-4.002	-3.933	0.068
CaOH+	1.179e-007	8.813e-008	-6.929	-7.055	-0.126
Cl	5.653e-001				
Cl-	5.653e-001	3.522e-001	-0.248	-0.453	-0.206
ClO-	0.000e+000	0.000e+000	-41.871	-41.997	-0.126
ClOH	0.000e+000	0.000e+000	-42.845	-42.777	0.068
ClO2-	0.000e+000	0.000e+000	-75.421	-75.547	-0.126
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-81.855	-81.786	0.068
ClO3-	0.000e+000	0.000e+000	-97.395	-97.521	-0.126
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-122.552	-122.679	-0.126
H(0)	4.819e-020				
H2	2.409e-020	2.818e-020	-19.618	-19.550	0.068
K	1.112e-002				
K+	1.094e-002	6.814e-003	-1.961	-2.167	-0.206
KSO4-	1.832e-004	1.370e-004	-3.737	-3.863	-0.126
Mg	5.379e-002				
Mg+2	4.682e-002	1.354e-002	-1.330	-1.868	-0.539
MgSO4	5.844e-003	6.837e-003	-2.233	-2.165	0.068
MgHCO3+	8.044e-004	6.015e-004	-3.095	-3.221	-0.126
MgCO3	3.129e-004	3.661e-004	-3.505	-3.436	0.068
MgOH+	4.520e-006	3.380e-006	-5.345	-5.471	-0.126
Na	4.934e-001				
Na+	4.860e-001	3.436e-001	-0.313	-0.464	-0.151
NaSO4-	6.539e-003	4.890e-003	-2.184	-2.311	-0.126
NaHCO3	6.304e-004	7.374e-004	-3.200	-3.132	0.068
NaCO3-	2.410e-004	1.802e-004	-3.618	-3.744	-0.126
O(0)	0.000e+000				
O2	0.000e+000	0.000e+000	-53.365	-53.297	0.068
S	2.933e-002				
SO4-2	1.565e-002	2.840e-003	-1.805	-2.547	-0.741
NaSO4-	6.539e-003	4.890e-003	-2.184	-2.311	-0.126
MgSO4	5.844e-003	6.837e-003	-2.233	-2.165	0.068
CaSO4	1.112e-003	1.300e-003	-2.954	-2.886	0.068
KSO4-	1.832e-004	1.370e-004	-3.737	-3.863	-0.126
HSO4-	2.325e-009	1.739e-009	-8.634	-8.760	-0.126
SO3-2	1.478e-022	4.623e-023	-21.830	-22.335	-0.505
HSO3-	6.474e-024	4.841e-024	-23.189	-23.315	-0.126
H2SO3	1.806e-030	2.113e-030	-29.743	-29.675	0.068
HS-	0.000e+000	0.000e+000	-42.403	-42.619	-0.216
H2S	0.000e+000	0.000e+000	-43.899	-43.831	0.068
S2O3-2	0.000e+000	0.000e+000	-48.530	-49.035	-0.505
S-2	0.000e+000	0.000e+000	-52.706	-53.420	-0.714
HS2O3-	0.000e+000	0.000e+000	-55.519	-55.645	-0.126

----------Saturation indices----------

Phase	SI	log IAP	log KT	
ANHYDRIT	-0.81	-5.19	-4.38	Ca1.000S1.000O4.000
ARAGONIT	1.14	-7.20	-8.34	C1.000Ca1.000O3.000
BRUCITE	-1.79	14.51	16.30	Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)	-21.57	-53.72	-32.15	C1.000
C(G)	-139.17	-53.72	85.45	C1.000
CA(CR)	-99.50	-2.65	96.85	Ca1.000
CA(G)	-124.73	-2.65	122.08	Ca1.000
Ca(OH)2	-8.98	13.73	22.71	Ca(OH)2
CALCITE	1.29	-7.20	-8.48	C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)	-18.96	13.74	32.70	Ca1.000O1.000
CH4	-42.59	-86.52	-43.93	C1.000H4.000
CL(G)	-41.89	-0.45	41.44	Cl1.000
CL2(G)	-46.89	-0.91	45.98	Cl2.000
CO(G)	-22.69	-37.33	-14.64	C1.000O1.000
CO2(G)	-2.79	-20.94	-18.15	C1.000O2.000
DOLOMITE	3.48	-13.61	-17.09	Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
GYPSUM	-0.61	-5.21	-4.60	Ca1.000S1.000H4.000O6.000
H(G)	-43.81	-8.20	35.61	H1.000
H2(G)	-16.40	-16.40	0.00	H2.000
H2O(G)	-1.51	-0.01	1.50	H2.000O1.000
H2S(G)	-42.81	-84.51	-41.70	S1.000H2.000
HCL(G)	-14.94	-8.65	6.29	Cl1.000H1.000
K(CR)	-51.66	-2.17	49.49	K1.000
K(G)	-62.26	-2.17	60.09	K1.000
LIME,	-18.96	13.74	32.70	Ca1.000O1.000
NA(CR)	-46.35	-0.46	45.89	Na1.000
NA(G)	-59.84	-0.46	59.38	Na1.000
O(G)	-65.76	16.39	82.15	O1.000
O2(G)	-50.31	32.78	83.09	O2.000
PERICLAS	-7.06	14.52	21.58	Mg1.000O1.000
PORTLAN	-8.98	13.73	22.71	Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1	-8.82	13.73	22.55	Ca1.000H2.000O2.000
S(CR)	-32.27	-68.11	-35.84	S1.000
S(G)	-73.74	-68.11	5.63	S1.000
S2(G)	-78.51	-136.22	-57.71	S2.000
SO2(G)	-30.01	-35.33	-5.32	S1.000O2.000

Beginning of batch-reaction calculations.

Reaction step 1.

Using solution 0. jinko-SW
Using pure phase assemblage 1.

----------Phase assemblage----------

Phase	SI	log IAP	log KT	Moles in assemblage Initial	Final	Delta
ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	0.000e+000	0	0.000e+000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	4.181e-002	9.560e-002	5.379e-002
C3ASH4	-6.95	63.92	70.87	0.000e+000	0	0.000e+000
Ca(OH)2	0.00	22.71	22.71	3.030e-001	2.235e-001	-7.950e-002
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	0.000e+000	8.081e-003	8.081e-003
CSH(0.1)	-5.85	-6.92	-1.07	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.2)	-5.22	-4.65	0.56	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.3)	-4.61	-2.38	2.23	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.4)	-4.02	-0.11	3.91	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.5)	-3.44	2.16	5.60	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.6)	-2.88	4.43	7.31	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.7)	-2.34	6.70	9.04	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.8)	-1.85	8.97	10.82	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.833)	-1.71	9.72	11.44	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.9)	-1.57	12.49	14.06	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.0)	-1.00	13.51	14.51	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.1)	-0.63	14.35	14.98	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.2)	-0.39	15.05	15.44	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.3)	-0.23	15.64	15.87	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.4)	-0.13	16.14	16.27	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.5)	-0.07	16.58	16.64	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.6)	-0.02	16.96	16.99	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.7)	-0.00	17.30	17.30	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.8)	0.00	17.60	17.60	5.507e-001	5.507e-001	-6.585e-007
ETTRINGI	-0.00	58.24	58.24	0.000e+000	1.276e-002	1.276e-002
FRIEDEL_	-0.00	70.13	70.13	0.000e+000	1.433e-002	1.433e-002
GEHL_HY	-9.15	41.17	50.32	0.000e+000	0	0.000e+000
GROSSUL	-13.14	45.56	58.70	0.000e+000	0	0.000e+000
GYPSUM	-0.29	-4.89	-4.60	0.000e+000	0	0.000e+000
HYDROGR	-4.27	73.10	77.37	5.790e-003	0	-5.790e-003
HYDROTAL	-3.64	70.14	73.78	0.000e+000	0	0.000e+000
MONOSULF	-5.67	68.17	73.83	2.130e-002	0	-2.130e-002
SEPIOLIT	-20.34	10.00	30.35	0.000e+000	0	0.000e+000
SiO2(am)	-6.56	-9.20	-2.64	0.000e+000	0	0.000e+000

----------Solution composition----------

Elements	Molality	Moles
Al	9.163e-009	9.121e-009
C	9.507e-006	9.464e-006
Ca	5.070e-002	5.047e-002
Cl	5.391e-001	5.366e-001
K	1.117e-002	1.112e-002
Mg	3.378e-008	3.362e-008
Na	4.957e-001	4.934e-001
S	1.242e-002	1.236e-002
Si	3.678e-007	3.661e-007

----------Description of solution----------

pH = 12.359 Charge balance
pe = 5.520 Adjusted to redox equilibrium
Activity of water = 0.981
Ionic strength = 6.402e-001
Mass of water (kg) = 9.954e-001
Total alkalinity (eq/kg) = 4.429e-002
Total CO2 (mol/kg) = 9.507e-006
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = 8.262e-012
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = 0.00
Iterations = 18
Total H = 1.105487e+002
Total O = 5.534587e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	3.652e-002	2.240e-002	-1.437	-1.650	-0.212
H+	5.786e-013	4.378e-013	-12.238	-12.359	-0.121
H2O	5.551e+001	9.806e-001	1.744	-0.009	0.000
Al	9.163e-009				
Al(OH)4-	9.163e-009	6.815e-009	-8.038	-8.167	-0.129
Al(OH)3	2.626e-014	3.043e-014	-13.581	-13.517	0.064
Al(OH)2+	1.451e-020	1.079e-020	-19.838	-19.967	-0.129
AlOH+2	2.028e-027	6.206e-028	-26.693	-27.207	-0.514
Al+3	3.333e-034	2.708e-035	-33.477	-34.567	-1.090
AlSO4+	4.940e-035	3.674e-035	-34.306	-34.435	-0.129
Al(SO4)2-	5.085e-036	3.782e-036	-35.294	-35.422	-0.129
C	9.507e-006				
CaCO3	5.196e-006	6.021e-006	-5.284	-5.220	0.064
NaCO3-	2.789e-006	2.074e-006	-5.555	-5.683	-0.129
CO3-2	1.517e-006	3.214e-007	-5.819	-6.493	-0.674
HCO3-	4.440e-009	3.012e-009	-8.353	-8.521	-0.168
CaHCO3+	5.594e-010	3.795e-010	-9.252	-9.421	-0.168
NaHCO3	5.083e-010	5.890e-010	-9.294	-9.230	0.064
MgCO3	1.054e-012	1.221e-012	-11.977	-11.913	0.064

```
    CO2          2.601e-015  3.014e-015  -14.585  -14.521   0.064
    MgHCO3+      1.872e-016  1.392e-016  -15.728  -15.856  -0.129
    CH4          0.000e+000  0.000e+000  -133.206 -133.142  0.064
Ca               5.070e-002
    Ca+2         4.060e-002  1.022e-002  -1.391   -1.990   -0.599
    CaOH+        7.768e-003  5.778e-003  -2.110   -2.238   -0.129
    CaSO4        2.329e-003  2.698e-003  -2.633   -2.569   0.064
    CaCO3        5.196e-006  6.021e-006  -5.284   -5.220   0.064
    CaHCO3+      5.594e-010  3.795e-010  -9.252   -9.421   -0.168
Cl               5.391e-001
    Cl-          5.391e-001  3.380e-001  -0.268   -0.471   -0.203
    ClO-         2.958e-023  2.200e-023  -22.529  -22.658  -0.129
    ClOH         2.186e-028  2.534e-028  -27.660  -27.596  0.064
    ClO2-        1.895e-037  1.409e-037  -36.722  -36.851  -0.129
    ClO3-        4.582e-040  3.408e-040  -39.339  -39.468  -0.129
    ClO4-        0.000e+000  0.000e+000  -45.139  -45.268  -0.129
    ClHO2        0.000e+000  0.000e+000  -47.313  -47.249  0.064
H(0)             2.138e-039
    H2           1.069e-039  1.239e-039  -38.971  -38.907  0.064
K                1.117e-002
    K+           1.109e-002  6.951e-003  -1.955   -2.158   -0.203
    KSO4-        8.573e-005  6.377e-005  -4.067   -4.195   -0.129
Mg               3.378e-008
    MgOH+        1.924e-008  1.431e-008  -7.716   -7.844   -0.129
    Mg+2         1.374e-008  3.976e-009  -7.862   -8.401   -0.539
    MgSO4        7.906e-010  9.162e-010  -9.102   -9.038   0.064
    MgCO3        1.054e-012  1.221e-012  -11.977  -11.913  0.064
    MgHCO3+      1.872e-016  1.392e-016  -15.728  -15.856  -0.129
Na               4.957e-001
    Na+          4.926e-001  3.482e-001  -0.307   -0.458   -0.151
    NaSO4-       3.040e-003  2.261e-003  -2.517   -2.646   -0.129
    NaCO3-       2.789e-006  2.074e-006  -5.555   -5.683   -0.129
    NaHCO3       5.083e-010  5.890e-010  -9.294   -9.230   0.064
O(0)             4.508e-015
    O2           2.254e-015  2.612e-015  -14.647  -14.583  0.064
S                1.242e-002
    SO4-2        6.963e-003  1.296e-003  -2.157   -2.887   -0.730
    NaSO4-       3.040e-003  2.261e-003  -2.517   -2.646   -0.129
    CaSO4        2.329e-003  2.698e-003  -2.633   -2.569   0.064
    KSO4-        8.573e-005  6.377e-005  -4.067   -4.195   -0.129
    MgSO4        7.906e-010  9.162e-010  -9.102   -9.038   0.064
    HSO4-        7.401e-014  5.505e-014  -13.131  -13.259  -0.129
    AlSO4+       4.940e-035  3.674e-035  -34.306  -34.435  -0.129
    Al(SO4)2-    5.085e-036  3.782e-036  -35.294  -35.422  -0.129
    SO3-2        0.000e+000  0.000e+000  -41.519  -42.033  -0.514
    HSO3-        0.000e+000  0.000e+000  -47.043  -47.172  -0.129
    H2SO3        0.000e+000  0.000e+000  -57.754  -57.690  0.064
    HS-          0.000e+000  0.000e+000  -124.335 -124.547 -0.212
    H2S          0.000e+000  0.000e+000  -129.982 -129.918 0.064
    S-2          0.000e+000  0.000e+000  -130.485 -131.189 -0.705
    S2O3-2       0.000e+000  0.000e+000  -134.949 -135.463 -0.514
    HS2O3-       0.000e+000  0.000e+000  -146.103 -146.232 -0.129
Si               3.678e-007
    H3SiO4-      2.917e-007  2.170e-007  -6.535   -6.664   -0.129
    H2SiO4-2     7.557e-008  2.313e-008  -7.122   -7.636   -0.514
    H4SiO4       5.292e-010  6.133e-010  -9.276   -9.212   0.064
    H4Si2O7-2    6.539e-013  2.001e-013  -12.184  -12.699  -0.514
    H5Si2O7-     9.357e-015  6.959e-015  -14.029  -14.157  -0.129
    H5Si3O10-3   1.295e-017  9.020e-019  -16.888  -18.045  -1.157
    H3Si3O9-3    1.049e-018  7.306e-020  -17.979  -19.136  -1.157
    H4Si4O12-4   2.374e-022  2.083e-024  -21.624  -23.681  -2.057
    H5Si4O12-3   8.277e-025  5.766e-026  -24.082  -25.239  -1.157

-----------------------------Saturation indices-----------------------------

Phase            SI log IAP   log KT

AFWILLIT         -10.25   49.74   59.99   Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ALBITE           -16.73  -13.19    3.54   Na1.000Al1.000Si3.000O8.000
ALUNITE          -39.14  -37.53    1.61   Al3.000S2.000K1.000H6.000O14.000
ANALCIM1         -10.93   -4.01    6.93   Si2.000Na1.000Al1.000H2.000O7.000
ANALCIM2        -136.67  -90.54   46.13   Si25.800Na10.200Al10.200H24.000O84.000
ANHYDRIT          -0.50   -4.88   -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
ANORTHHE         -17.38    9.32   26.70   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR         -17.05    9.32   26.37   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ARAGONIT          -0.14   -8.48   -8.34   C1.000Ca1.000O3.000
BEID-CA          -29.74  -24.19    5.55   Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-K           -29.83  -24.57    5.26   K0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG          -30.76  -25.25    5.51   Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-NA          -29.61  -24.01    5.60   Na0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BRUCITE            0.00   16.30   16.30   Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)            -70.55 -102.70  -32.15   C1.000
C(G)            -188.15 -102.70   85.45   C1.000
C2AH8            -10.28   50.36   60.64   Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4            -6.95   63.92   70.87   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1          -7.49   63.92   71.41   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13            -6.24   95.76  102.00   Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19            -6.27   95.70  101.98   Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)          -109.88  -13.03   96.85   Ca1.000
CA(G)           -135.11  -13.03  122.08   Ca1.000
Ca(OH)2           0.00   22.71   22.71   Ca(OH)2
CAH10            -12.79   27.63   40.42   Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CALCITE            0.00   -8.48   -8.48   C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)           -9.98   22.72   32.70   Ca1.000O1.000
CH4             -130.28 -174.21  -43.93   C1.000H4.000
CHABAZ_a        -159.08 -159.18   -0.10
    Si28.600Na4.900Al7.400K0.900Ca0.800H72.000O108.000
CHABAZ_d        -152.21 -144.97    7.24
```

```
    Si27.900Na3.700Al8.100K2.000Ca1.200H72.000O108.000
CHALCEDO          -5.71    -9.20    -3.49   Si1.000O2.000
CL(G)            -36.39     5.05    41.44   Cl1.000
CL2(G)           -35.88    10.10    45.98   Cl2.000
CLINOC40         -75.52   471.31   546.83   Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
CLINOP_a        -162.51  -176.27   -13.76
    Si29.200Na1.700Al6.800K2.300Ca1.400H52.000O98.000
CLINOP_d        -160.94  -175.22   -14.28
    Si29.200Na0.400Al6.800K0.800Ca2.800H52.000O98.000
CLINOZOI         -18.28    25.33    43.61   Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CO(G)            -52.31   -66.95   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)           -13.05   -31.20   -18.15   C1.000O2.000
CSH(0.1)          -5.85    -6.92    -1.07   Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)          -5.22    -4.65     0.56   Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)          -4.61    -2.38     2.23   Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)          -4.02    -0.11     3.91   Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)          -3.44     2.16     5.60   Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)          -2.88     4.43     7.31   Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)          -2.34     6.70     9.04   Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)          -1.85     8.97    10.82   Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)        -1.71     9.72    11.44   Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)          -1.57    12.49    14.06   Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)          -1.00    13.51    14.51   Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)          -0.63    14.35    14.98   Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
CSH(1.2)          -0.39    15.05    15.44   Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)          -0.23    15.64    15.87   Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)          -0.13    16.14    16.27   Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)          -0.07    16.58    16.64   Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)          -0.02    16.96    16.99   Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)          -0.00    17.30    17.30   Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)           0.00    17.60    17.60   Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833           -1.71     9.72    11.44   Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
DOLOMITE          -6.29   -23.38   -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
EPISTILB         -31.16   -27.50     3.66   Si6.000Ca1.000Al2.000H10.000O21.000
ERIONI_a        -154.79  -152.92     1.87
    Si28.200Na3.400Al7.800K2.800Ca0.800H60.000O102.000
ERIONI_d        -149.60  -145.12     4.48
    Si27.800Na1.200Al8.200K3.000Ca2.000H60.000O102.000
ETTRINGI          -0.00    58.24    58.24   Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FOSHAGIT          -2.60    63.28    65.87   Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
FRIEDEL_          -0.00    70.13    70.13   Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GEHL_HY           -9.15    41.17    50.32   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1          -7.99    41.17    49.16   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT         -15.05    41.23    56.28   Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE          -5.27     2.48     7.76   Al1.000H3.000O3.000
GROSSUL          -13.14    45.56    58.70   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1          -6.31    45.56    51.87   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM            -0.29    -4.89    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE          -5.03    17.83    22.86   Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)             -53.49   -17.88    35.61   H1.000
H2(G)            -35.76   -35.76     0.00   H2.000
H2O(G)            -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)          -128.90  -170.60   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)           -19.12   -12.83     6.29   Cl1.000H1.000
HEULANDI        -150.34  -146.78     3.56
    Si28.000Na1.000Al8.000K0.400Ca3.300H52.000O98.000
HILLEBRA          -0.47    36.23    36.70   Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR           -4.27    73.10    77.37   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1          -8.49    73.10    81.58   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL          -3.64    70.14    73.78   Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
ILLITE           -25.22   -16.26     8.97   Mg0.250Al2.300Si3.500K0.600H2.000O12.000
JENNITE            2.60   149.20   146.60   Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
K(CR)            -57.17    -7.68    49.49   K1.000
K(G)             -67.77    -7.68    60.09   K1.000
K-FELDSP         -14.66   -14.89    -0.23   Si3.000K1.000Al1.000O8.000
KAOLINIT         -22.50   -59.42   -36.92   Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE           -5.84    73.10    78.94   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONTI         -22.74    -9.10    13.63   Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LEUCITE          -11.86    -5.70     6.16   Si2.000K1.000Al1.000O6.000
LIME,            -9.98    22.72    32.70   Ca1.000O1.000
MG2SI2O6          -9.03    14.23    23.26   Mg2.000Si2.000O6.000
MICROCLI         -16.67   -14.89     1.78   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
MONOSULF          -5.67    68.17    73.83   Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA          -26.05   -23.49     2.56   Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-K           -25.94   -23.87     2.07   Mg0.330Al1.670Si4.000K0.330H2.000O12.000
MONT-MG          -27.02   -24.55     2.47   Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
MONT-NA          -25.82   -23.31     2.51   Mg0.330Al1.670Si4.000Na0.330H2.000O12.000
MORDENIT        -169.51  -192.83   -23.32
    Si30.000Na2.100Al6.000K0.900Ca1.500H44.000O94.000
MUSCOVIT         -24.51    -9.91    14.60   Al3.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
NA(CR)           -51.87    -5.98    45.89   Na1.000
NA(G)            -65.36    -5.98    59.38   Na1.000
O(G)             -46.40    35.75    82.15   O1.000
O2(G)            -11.59    71.50    83.09   O2.000
OKENITE           -6.01     4.31    10.32   Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
ORTHOCLA         -15.75   -14.89     0.86   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
PARAGONI         -27.08    -8.21    18.87   Na1.000Al3.000Si3.000H2.000O12.000
PERICLAS          -5.27    16.31    21.58   Mg1.000O1.000
PHILLI_a        -131.80  -120.81    10.99
    Si24.400Na3.200Al7.600K2.800Ca0.800H48.000O88.000
PHILLI_d        -131.54  -124.52     7.02
    Si24.600Na1.400Al7.400K1.200Ca2.400H48.000O88.000
PHLOGOPI          -2.31    34.02    36.33   Mg3.000Al1.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
PLOMBIER          -5.42    58.33    63.75   Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN            0.00    22.71    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1           0.16    22.71    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
PYROPHYL         -32.26   -31.80     0.46   Si4.000Al2.000H2.000O12.000
QUARTZ            -5.42    -9.20    -3.78   Si1.000O2.000
```

```
RIVERSID          -10.59     58.40     68.98   Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)            -99.00 -134.84   -35.84   S1.000
S(G)            -140.47 -134.84     5.63   S1.000
S2(G)           -211.97 -269.68   -57.71   S2.000
SAPON-CA           -6.49     19.74     26.23   Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-K            -6.59     19.36     25.94   Mg3.000Al0.330Si3.670K0.330H2.000O12.000
SAPON-MG           -7.50     18.68     26.19   Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SAPON-NA           -6.36     19.92     26.28   Mg3.000Al0.330Si3.670Na0.330H2.000O12.000
SCOLECIT          -13.31      0.10     13.41   Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000
SEP               -13.79    -51.00    -37.21   Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT          -20.34     10.00     30.35   Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)           -143.62    -80.69     62.93   Si1.000
SI(G)            -214.66    -80.69    133.97   Si1.000
SIL                -6.18     -9.20     -3.02   Si1.000H2.000O3.000
SIL(AM)1           -6.49     -9.20     -2.71   Si1.000O2.000
SILI(AM)           -6.56     -9.20     -2.64   Si1.000O2.000
SILICA            -24.60    -27.07     -2.47   Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)           -6.56     -9.20     -2.64   Si1.000O2.000
SIO2(QUA           -5.20     -9.20     -4.00   Si1.000O2.000
SO2(G)            -58.02    -63.34     -5.32   S1.000O2.000
STILBITE          -66.36    -49.84     16.52   Si13.000Ca2.000Al5.000Na1.000H28.000O50.000
TALC               -8.93     12.14     21.07   Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR           -7.14     58.37     65.51   Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,            -17.02     -4.21     12.81   Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLIT           -4.29     53.41     57.70   Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
WAIRAKIT          -27.10     -9.09     18.01   Si4.000Ca1.000Al2.000H4.000O14.000
XONOTLIT          -10.60     81.13     91.73   Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA          -31.57    -27.50      4.07   Si6.000Ca1.000Al2.000H8.000O20.000

------------------
End of simulation.
------------------

------------------------------------
Reading input data for simulation 2.
------------------------------------

-----------
End of run.
-----------
```

リスト9-3 人工海水とOPCペーストの反応における化学平衡計算（液固比=100，C-S-HにAl取り込み想定）

```
Input file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11. 報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥4章
¥PHREEQ-new080925¥0809228_THC実測値からAl量算出(SW_LS100_AFm).pqi
Output file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11. 報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥4章
¥PHREEQ-new080925¥0809228_THC実測値からAl量算出(SW_LS100_AFm).pqo
Database file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
-----------------------------------
Reading input data for simulation 1.
-----------------------------------

DATABASE C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb
Title    SW-OPC浸漬（L/S=1000/10=100)
PHASES
CSH(0.1)
Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
log_K -1.071
CSH(0.2)
Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
log_K 0.565
CSH(0.3)
Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
log_K 2.227
CSH(0.4)
Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
log_K 3.907
CSH(0.5)
Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
log_K 5.601
CSH(0.6)
Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
log_K 7.312
CSH(0.7)
Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
log_K 9.045
CSH(0.8)
Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
log_K 10.819
CSH(0.9)
Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
log_K 14.061
CSH(1.0)
Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
log_K 14.514
CSH(1.1)
Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
log_K 14.983
CSH(1.2)
Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
log_K 15.439
CSH(1.3)
Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
log_K 15.870
CSH(1.4)
Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
log_K 16.272
CSH(1.5)
Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
log_K 16.643
CSH(1.6)
Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
log_K 16.987
CSH(1.7)
Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
  log_K 17.304
CSH(1.8)
Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
log_K 17.597
Ca(OH)2
Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
log_k 22.710
SiO2(am)
Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
log_K -2.639
CSH(0.833)
Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
log_K 11.436
SOLUTION 0    jinko-SW
                    units     mol/kgw
                pH          8.2
                pe          0.0
                density 1.000
                temp        25.0
                Ca    0.01035
```

```
                S    0.02933
                Mg    0.05379
                Na    0.4934
                K      0.01112
                Cl    0.5653
                C    0.5653        charge
SAVE SOLUTION 1
EQUILIBRIUM_PHASES 1
        CSH(0.1)    0.0    0.0
        CSH(0.2)    0.0    0.0
        CSH(0.3)    0.0    0.0
        CSH(0.4)    0.0    0.0
        CSH(0.5)    0.0    0.0
        CSH(0.6)    0.0    0.0
        CSH(0.7)    0.0    0.0
        CSH(0.8)    0.0    0.0
        CSH(0.9)    0.0    0.0
        CSH(1.0)    0.0    0.0
        CSH(1.1)    0.0    0.0
        CSH(1.2)    0.0    0.0
        CSH(1.3)    0.0    0.0
        CSH(1.4)    0.0    0.0
        CSH(1.5)    0.0    0.0
        CSH(1.6)    0.0    0.0
        CSH(1.7)    0.0    0.0
        CSH(1.8)    0.0    0.0551 #6.461
        SiO2(am)    0.0    0.0
        CSH(0.833) 0.0    0.0
        Ca(OH)2      0.0    0.0303 #2.92949
        ETTRINGI    0.0    0.0 #0.08184
        MONOSULF    0.0      0.00213
        FRIEDEL_    0.0 0.0
        HYDROGR    0.0    0.00058 #0.2161
        Brucite      0.0    0.00418 #0.4906
        SEPIOLIT      0.0    0.0
        CALCITE 0.0 0.0
        ARAGONIT 0.0 0.0
        GEHL_HY 0.0 0.0
        HYDROTAL 0.0 0.0
        GROSSUL 0.0 0.0
        C3ASH4    0.0 0.0
        GYPSUM 0.0 0.0
        END
-----
TITLE
-----

  SW-OPC浸漬（L/S=1000/10=100)
```

```
-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 0.            jinko-SW

-----------------------------Solution composition-----------------------------

                Elements              Molality          Moles

                C                    8.090e-003    8.090e-003    Charge balance
                Ca                   1.035e-002    1.035e-002
                Cl                   5.653e-001    5.653e-001
                K                    1.112e-002    1.112e-002
                Mg                   5.379e-002    5.379e-002
                Na                   4.934e-001    4.934e-001
                S                    2.933e-002    2.933e-002

----------------------------Description of solution----------------------------

                                                pH   =     8.200
                                                pe   =     0.000
                                Activity of water   =     0.980
                                      Ionic strength   =    6.811e-001
                                Mass of water (kg)   =    1.000e+000
                        Total alkalinity (eq/kg)    = -7.340e-003
                                Total CO2 (mol/kg)   =    8.090e-003
                                Temperature (deg C)   =    25.000
                        Electrical balance (eq)    = -8.727e-014
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)    =    -0.00
                                        Iterations   =      7
                                            Total H    = 1.110197e+002
                                            Total O    = 5.564777e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                                Log     Log       Log
    Species                  Molality      Activity   Molality   Activity       Gamma

    OH-                     2.553e-006   1.554e-006      -5.593      -5.809      -0.216
    H+                      8.361e-009   6.310e-009      -8.078      -8.200      -0.122
    H2O                     5.551e+001   9.804e-001       1.744      -0.009       0.000
C                   8.090e-003
    HCO3-                   5.662e-003   3.822e-003      -2.247      -2.418      -0.171
    MgHCO3+                 8.044e-004   6.015e-004      -3.095      -3.221      -0.126
    NaHCO3                  6.304e-004   7.374e-004      -3.200      -3.132       0.068
    MgCO3                   3.129e-004   3.661e-004      -3.505      -3.436       0.068
    NaCO3-                  2.410e-004   1.802e-004      -3.618      -3.744      -0.126
    CaHCO3+                 1.569e-004   1.059e-004      -3.805      -3.975      -0.171
```

```
    CO3-2          1.362e-004  2.830e-005   -3.866   -4.548   -0.683
    CaCO3          9.964e-005  1.166e-004   -4.002   -3.933    0.068
    CO2            4.712e-005  5.512e-005   -4.327   -4.259    0.068
    CH4            0.000e+000  0.000e+000   -45.520  -45.451   0.068
Ca                 1.035e-002
    Ca+2           8.982e-003  2.248e-003   -2.047   -2.648   -0.602
    CaSO4          1.112e-003  1.300e-003   -2.954   -2.886    0.068
    CaHCO3+        1.569e-004  1.059e-004   -3.805   -3.975   -0.171
    CaCO3          9.964e-005  1.166e-004   -4.002   -3.933    0.068
    CaOH+          1.179e-007  8.813e-008   -6.929   -7.055   -0.126
Cl                 5.653e-001
    Cl-            5.653e-001  3.522e-001   -0.248   -0.453   -0.206
    ClO-           0.000e+000  0.000e+000   -41.871  -41.997  -0.126
    ClOH           0.000e+000  0.000e+000   -42.845  -42.777   0.068
    ClO2-          0.000e+000  0.000e+000   -75.421  -75.547  -0.126
    ClHO2          0.000e+000  0.000e+000   -81.855  -81.786   0.068
    ClO3-          0.000e+000  0.000e+000   -97.395  -97.521  -0.126
    ClO4-          0.000e+000  0.000e+000   -122.552 -122.679 -0.126
H(0)               4.819e-020
    H2             2.409e-020  2.818e-020   -19.618  -19.550   0.068
K                  1.112e-002
    K+             1.094e-002  6.814e-003   -1.961   -2.167   -0.206
    KSO4-          1.832e-004  1.370e-004   -3.737   -3.863   -0.126
Mg                 5.379e-002
    Mg+2           4.682e-002  1.354e-002   -1.330   -1.868   -0.539
    MgSO4          5.844e-003  6.837e-003   -2.233   -2.165    0.068
    MgHCO3+        8.044e-004  6.015e-004   -3.095   -3.221   -0.126
    MgCO3          3.129e-004  3.661e-004   -3.505   -3.436    0.068
    MgOH+          4.520e-006  3.380e-006   -5.345   -5.471   -0.126
Na                 4.934e-001
    Na+            4.860e-001  3.436e-001   -0.313   -0.464   -0.151
    NaSO4-         6.539e-003  4.890e-003   -2.184   -2.311   -0.126
    NaHCO3         6.304e-004  7.374e-004   -3.200   -3.132    0.068
    NaCO3-         2.410e-004  1.802e-004   -3.618   -3.744   -0.126
O(0)               0.000e+000
    O2             0.000e+000  0.000e+000   -53.365  -53.297   0.068
S                  2.933e-002
    SO4-2          1.565e-002  2.840e-003   -1.805   -2.547   -0.741
    NaSO4-         6.539e-003  4.890e-003   -2.184   -2.311   -0.126
    MgSO4          5.844e-003  6.837e-003   -2.233   -2.165    0.068
    CaSO4          1.112e-003  1.300e-003   -2.954   -2.886    0.068
    KSO4-          1.832e-004  1.370e-004   -3.737   -3.863   -0.126
    HSO4-          2.325e-009  1.739e-009   -8.634   -8.760   -0.126
    SO3-2          1.478e-022  4.623e-023   -21.830  -22.335  -0.505
    HSO3-          6.474e-024  4.841e-024   -23.189  -23.315  -0.126
    H2SO3          1.806e-030  2.113e-030   -29.743  -29.675   0.068
    HS-            0.000e+000  0.000e+000   -42.403  -42.619  -0.216
    H2S            0.000e+000  0.000e+000   -43.899  -43.831   0.068
    S2O3-2         0.000e+000  0.000e+000   -48.530  -49.035  -0.505
    S-2            0.000e+000  0.000e+000   -52.706  -53.420  -0.714
    HS2O3-         0.000e+000  0.000e+000   -55.519  -55.645  -0.126

-----------------------------Saturation indices-----------------------------

Phase                SI log IAP   log KT

ANHYDRIT            -0.81    -5.19    -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
ARAGONIT             1.14    -7.20    -8.34   C1.000Ca1.000O3.000
BRUCITE             -1.79    14.51    16.30   Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)              -21.57   -53.72   -32.15   C1.000
C(G)               -139.17  -53.72    85.45   C1.000
CA(CR)              -99.50   -2.65    96.85   Ca1.000
CA(G)              -124.73   -2.65   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2             -8.98    13.73    22.71   Ca(OH)2
CALCITE              1.29    -7.20    -8.48   C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)             -18.96   13.74    32.70   Ca1.000O1.000
CH4                 -42.59   -86.52   -43.93   C1.000H4.000
CL(G)               -41.89   -0.45    41.44   Cl1.000
CL2(G)              -46.89   -0.91    45.98   Cl2.000
CO(G)               -22.69   -37.33   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)              -2.79    -20.94   -18.15   C1.000O2.000
DOLOMITE             3.48    -13.61   -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
GYPSUM              -0.61    -5.21    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
H(G)                -43.81   -8.20    35.61   H1.000
H2(G)               -16.40   -16.40    0.00   H2.000
H2O(G)              -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)              -42.81   -84.51   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)              -14.94   -8.65     6.29   Cl1.000H1.000
K(CR)               -51.66   -2.17    49.49   K1.000
K(G)                -62.26   -2.17    60.09   K1.000
LIME,               -18.96   13.74    32.70   Ca1.000O1.000
NA(CR)              -46.35   -0.46    45.89   Na1.000
NA(G)               -59.84   -0.46    59.38   Na1.000
O(G)                -65.76   16.39    82.15   O1.000
O2(G)               -50.31   32.78    83.09   O2.000
PERICLAS            -7.06    14.52    21.58   Mg1.000O1.000
PORTLAN             -8.98    13.73    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1            -8.82    13.73    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
S(CR)               -32.27   -68.11   -35.84   S1.000
S(G)                -73.74   -68.11    5.63   S1.000
S2(G)               -78.51 -136.22   -57.71   S2.000
SO2(G)              -30.01   -35.33   -5.32   S1.000O2.000

----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
----------------------------------------

Reaction step 1.
```

Using solution 0. jinko-SW
Using pure phase assemblage 1.

----------Phase assemblage----------

Phase	SI	log IAP	log KT	Moles in assemblage Initial	Final	Delta
ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	0.000e+000	0	0.000e+000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	4.180e-003	4.713e-002	4.295e-002
C3ASH4	-6.94	63.93	70.87	0.000e+000	0	0.000e+000
Ca(OH)2	-2.27	20.44	22.71	3.030e-002	0	-3.030e-002
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	0.000e+000	8.081e-003	8.081e-003
CSH(0.1)	-2.88	-3.96	-1.07	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.2)	-2.48	-1.91	0.56	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.3)	-2.10	0.13	2.23	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.4)	-1.73	2.18	3.91	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.5)	-1.38	4.22	5.60	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.6)	-1.05	6.26	7.31	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.7)	-0.74	8.31	9.04	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.8)	-0.47	10.35	10.82	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.833)	-0.41	11.02	11.44	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.9)	-0.29	13.77	14.06	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.0)	-0.08	14.44	14.51	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.1)	0.00	14.98	14.98	0.000e+000	2.433e-002	2.433e-002
CSH(1.2)	0.00	15.44	15.44	0.000e+000	1.019e-002	1.019e-002
CSH(1.3)	-0.05	15.82	15.87	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.4)	-0.12	16.15	16.27	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.5)	-0.21	16.44	16.64	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.6)	-0.30	16.69	16.99	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.7)	-0.39	16.91	17.30	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.8)	-0.50	17.10	17.60	5.510e-002	0	-5.510e-002
ETTRINGI	-2.31	55.94	58.24	0.000e+000	0	0.000e+000
FRIEDEL_	-3.07	67.06	70.13	0.000e+000	0	0.000e+000
GEHL_HY	-6.86	43.46	50.32	0.000e+000	0	0.000e+000
GROSSUL	-6.73	51.97	58.70	0.000e+000	0	0.000e+000
GYPSUM	0.00	-4.60	-4.60	0.000e+000	1.018e-002	1.018e-002
HYDROGR	-7.45	69.92	77.37	5.800e-004	0	-5.800e-004
HYDROTAL	-0.00	73.78	73.78	0.000e+000	2.710e-003	2.710e-003
MONOSULF	-8.55	65.28	73.83	2.130e-003	0	-2.130e-003
SEPIOLIT	-1.17	29.18	30.35	0.000e+000	0	0.000e+000
SiO2(am)	-3.36	-6.00	-2.64	0.000e+000	0	0.000e+000

----------Solution composition----------

Elements	Molality	Moles
Al	4.057e-008	4.057e-008
C	8.878e-006	8.877e-006
Ca	5.324e-002	5.323e-002
Cl	5.654e-001	5.653e-001
K	1.112e-002	1.112e-002
Mg	3.620e-006	3.619e-006
Na	4.935e-001	4.934e-001
S	2.128e-002	2.128e-002
Si	3.210e-005	3.209e-005

----------Description of solution----------

pH = 11.186 Charge balance
pe = 6.690 Adjusted to redox equilibrium
Activity of water = 0.981
Ionic strength = 6.560e-001
Mass of water (kg) = 9.998e-001
Total alkalinity (eq/kg) = 3.109e-003
Total CO2 (mol/kg) = 8.878e-006
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = -4.654e-014
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -0.00
Iterations = 39
Total H = 1.109988e+002
Total O = 5.558616e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	2.462e-003	1.505e-003	-2.609	-2.822	-0.214
H+	8.621e-012	6.516e-012	-11.064	-11.186	-0.122
H2O	5.551e+001	9.807e-001	1.744	-0.008	0.000
Al	4.057e-008				
Al(OH)4-	4.057e-008	3.024e-008	-7.392	-7.519	-0.128
Al(OH)3	1.727e-012	2.009e-012	-11.763	-11.697	0.066
Al(OH)2+	1.423e-017	1.060e-017	-16.847	-16.975	-0.128
AlOH+2	2.942e-023	9.076e-024	-22.531	-23.042	-0.511
Al+3	7.319e-029	5.893e-030	-28.136	-29.230	-1.094
AlSO4+	1.775e-029	1.323e-029	-28.751	-28.879	-0.128
Al(SO4)2-	3.022e-030	2.252e-030	-29.520	-29.647	-0.128
C	8.878e-006				
CaCO3	5.177e-006	6.021e-006	-5.286	-5.220	0.066
NaCO3-	2.336e-006	1.741e-006	-5.631	-5.759	-0.128
CO3-2	1.294e-006	2.721e-007	-5.888	-6.565	-0.677
HCO3-	5.605e-008	3.795e-008	-7.251	-7.421	-0.169
CaHCO3+	8.342e-009	5.649e-009	-8.079	-8.248	-0.169
NaHCO3	6.327e-009	7.359e-009	-8.199	-8.133	0.066
MgCO3	1.969e-010	2.290e-010	-9.706	-9.640	0.066

MgHCO3+	5.213e-013	3.885e-013	-12.283	-12.411	-0.128
CO2	4.858e-013	5.651e-013	-12.314	-12.248	0.066
CH4	0.000e+000	0.000e+000	-130.912	-130.847	0.066
Ca	5.324e-002				
Ca+2	4.808e-002	1.208e-002	-1.318	-1.918	-0.600
CaSO4	4.534e-003	5.273e-003	-2.344	-2.278	0.066
CaOH+	6.154e-004	4.587e-004	-3.211	-3.339	-0.128
CaCO3	5.177e-006	6.021e-006	-5.286	-5.220	0.066
CaHCO3+	8.342e-009	5.649e-009	-8.079	-8.248	-0.169
Cl	5.654e-001				
Cl-	5.654e-001	3.536e-001	-0.248	-0.451	-0.204
ClO-	3.049e-023	2.272e-023	-22.516	-22.644	-0.128
ClOH	3.349e-027	3.895e-027	-26.475	-26.410	0.066
ClO2-	1.928e-037	1.437e-037	-36.715	-36.843	-0.128
ClO3-	4.603e-040	3.431e-040	-39.337	-39.465	-0.128
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-45.143	-45.271	-0.128
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-46.133	-46.068	0.066
H(0)	2.158e-039				
H2	1.079e-039	1.255e-039	-38.967	-38.901	0.066
K	1.112e-002				
K+	1.098e-002	6.868e-003	-1.959	-2.163	-0.204
KSO4-	1.399e-004	1.042e-004	-3.854	-3.982	-0.128
Mg	3.620e-006				
Mg+2	3.045e-006	8.806e-007	-5.516	-6.055	-0.539
MgSO4	2.886e-007	3.357e-007	-6.540	-6.474	0.066
MgOH+	2.858e-007	2.130e-007	-6.544	-6.672	-0.128
MgCO3	1.969e-010	2.290e-010	-9.706	-9.640	0.066
MgHCO3+	5.213e-013	3.885e-013	-12.283	-12.411	-0.128
Na	4.935e-001				
Na+	4.885e-001	3.453e-001	-0.311	-0.462	-0.151
NaSO4-	4.977e-003	3.709e-003	-2.303	-2.431	-0.128
NaCO3-	2.336e-006	1.741e-006	-5.631	-5.759	-0.128
NaHCO3	6.327e-009	7.359e-009	-8.199	-8.133	0.066
O(0)	4.379e-015				
O2	2.189e-015	2.546e-015	-14.660	-14.594	0.066
S	2.128e-002				
SO4-2	1.163e-002	2.144e-003	-1.934	-2.669	-0.735
NaSO4-	4.977e-003	3.709e-003	-2.303	-2.431	-0.128
CaSO4	4.534e-003	5.273e-003	-2.344	-2.278	0.066
KSO4-	1.399e-004	1.042e-004	-3.854	-3.982	-0.128
MgSO4	2.886e-007	3.357e-007	-6.540	-6.474	0.066
HSO4-	1.818e-012	1.355e-012	-11.740	-11.868	-0.128
AlSO4+	1.775e-029	1.323e-029	-28.751	-28.879	-0.128
Al(SO4)2-	3.022e-030	2.252e-030	-29.520	-29.647	-0.128
SO3-2	0.000e+000	0.000e+000	-41.298	-41.809	-0.511
HSO3-	0.000e+000	0.000e+000	-45.647	-45.775	-0.128
H2SO3	0.000e+000	0.000e+000	-55.186	-55.121	0.066
HS-	0.000e+000	0.000e+000	-122.920	-123.134	-0.214
H2S	0.000e+000	0.000e+000	-127.397	-127.332	0.066
S-2	0.000e+000	0.000e+000	-130.240	-130.949	-0.708
S2O3-2	0.000e+000	0.000e+000	-132.147	-132.658	-0.511
HS2O3-	0.000e+000	0.000e+000	-142.126	-142.254	-0.128
Si	3.210e-005				
H3SiO4-	3.072e-005	2.290e-005	-4.513	-4.640	-0.128
H4SiO4	8.282e-007	9.632e-007	-6.082	-6.016	0.066
H2SiO4-2	5.315e-007	1.640e-007	-6.275	-6.785	-0.511
H4Si2O7-2	7.222e-009	2.228e-009	-8.141	-8.652	-0.511
H5Si2O7-	1.547e-009	1.153e-009	-8.810	-8.938	-0.128
H5Si3O10-3	1.494e-011	1.060e-012	-10.826	-11.975	-1.149
H3Si3O9-3	1.210e-012	8.583e-014	-11.917	-13.066	-1.149
H4Si4O12-4	2.849e-014	2.582e-016	-13.545	-15.588	-2.043
H5Si4O12-3	1.500e-015	1.064e-016	-14.824	-15.973	-1.149

----------Saturation indices----------

Phase	SI	log IAP	log KT	
AFWILLIT	-10.68	49.31	59.99	Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ALBITE	-6.50	-2.96	3.54	Na1.000Al1.000Si3.000O8.000
ALUNITE	-29.73	-28.12	1.61	Al3.000S2.000K1.000H6.000O14.000
ANALCIM1	-3.90	3.03	6.93	Si2.000Na1.000Al1.000H2.000O7.000
ANALCIM2	-47.65	-1.52	46.13	Si25.800Na10.200Al10.200H24.000O84.000
ANHYDRIT	-0.21	-4.59	-4.38	Ca1.000S1.000O4.000
ANORTHHE	-9.62	17.08	26.70	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR	-9.29	17.08	26.37	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	C1.000Ca1.000O3.000
BEID-CA	-14.14	-8.60	5.55	Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-K	-14.25	-8.99	5.26	K0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG	-14.79	-9.28	5.51	Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-NA	-14.03	-8.43	5.60	Na0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)	-68.26	-100.41	-32.15	C1.000
C(G)	-185.86	-100.41	85.45	C1.000
C2AH8	-11.18	49.45	60.64	Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4	-6.94	63.93	70.87	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1	-7.48	63.93	71.41	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13	-11.70	90.30	102.00	Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19	-11.72	90.25	101.98	Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)	-112.15	-15.30	96.85	Ca1.000
CA(G)	-137.38	-15.30	122.08	Ca1.000
Ca(OH)2	-2.27	20.44	22.71	Ca(OH)2
CAH10	-11.42	28.99	40.42	Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)	-12.25	20.45	32.70	Ca1.000O1.000
CH4	-127.99	-171.92	-43.93	C1.000H4.000
CHABAZ_a	-62.85	-62.95	-0.10	Si28.600Na4.900Al7.400K0.900Ca0.800H72.000O108.000
CHABAZ_d	-57.73	-50.49	7.24	

```
    Si27.900Na3.700Al8.100K2.000Ca1.200H72.000O108.000
CHALCEDO          -2.51    -6.00    -3.49   Si1.000O2.000
CL(G)            -35.20     6.24    41.44   Cl1.000
CL2(G)           -33.50    12.48    45.98   Cl2.000
CLINOC40          30.30   577.13   546.83   Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
          CLINOP_a          -64.70   -78.46   -13.76
Si29.200Na1.700Al6.800K2.300Ca1.400H52.000O98.000
CLINOP_d         -63.02   -77.30   -14.28
    Si29.200Na0.400Al6.800K0.800Ca2.800H52.000O98.000
CLINOZOI          -7.77    35.84    43.61   Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CO(G)            -50.03   -64.67   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)           -10.78   -28.93   -18.15   C1.000O2.000
CSH(0.1)          -2.88    -3.96    -1.07   Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)          -2.48    -1.91     0.56   Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)          -2.10     0.13     2.23   Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)          -1.73     2.18     3.91   Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)          -1.38     4.22     5.60   Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)          -1.05     6.26     7.31   Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)          -0.74     8.31     9.04   Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)          -0.47    10.35    10.82   Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)        -0.41    11.02    11.44   Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)          -0.29    13.77    14.06   Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)          -0.08    14.44    14.51   Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)           0.00    14.98    14.98   Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
CSH(1.2)           0.00    15.44    15.44   Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)          -0.05    15.82    15.87   Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)          -0.12    16.15    16.27   Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)          -0.21    16.44    16.64   Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)          -0.30    16.69    16.99   Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)          -0.39    16.91    17.30   Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)          -0.50    17.10    17.60   Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833           -0.41    11.02    11.44   Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
DOLOMITE          -4.01   -21.10   -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
EPISTILB         -10.62    -6.96     3.66   Si6.000Ca1.000Al2.000H10.000O21.000
ERIONI_a         -59.59   -57.72     1.87
    Si28.200Na3.400Al7.800K2.800Ca0.800H60.000O102.000
ERIONI_d         -55.32   -50.84     4.48
    Si27.800Na1.200Al8.200K3.000Ca2.000H60.000O102.000
ETTRINGI          -2.31    55.94    58.24   Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FOSHAGIT          -2.10    63.77    65.87   Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
FRIEDEL_          -3.07    67.06    70.13   Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GEHL_HY           -6.86    43.46    50.32   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1          -5.70    43.46    49.16   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT         -12.76    43.52    56.28   Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE          -3.45     4.30     7.76   Al1.000H3.000O3.000
GROSSUL           -6.73    51.97    58.70   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1           0.10    51.97    51.87   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM             0.00    -4.60    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE           0.01    22.87    22.86   Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)             -53.49   -17.88    35.61   H1.000
H2(G)            -35.75   -35.75     0.00   H2.000
H2O(G)            -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)          -126.31  -168.01   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)           -17.93   -11.64     6.29   Cl1.000H1.000
HEULANDI         -55.44   -51.88     3.56
    Si28.000Na1.000Al8.000K0.400Ca3.300H52.000O98.000
HILLEBRA          -1.82    34.88    36.70   Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR           -7.45    69.92    77.37   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1         -11.67    69.92    81.58   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL          -0.00    73.78    73.78   Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
ILLITE           -10.56    -1.59     8.97   Mg0.250Al2.300Si3.500K0.600H2.000O12.000
JENNITE            1.32   147.92   146.60   Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
K(CR)            -58.34    -8.85    49.49   K1.000
K(G)             -68.94    -8.85    60.09   K1.000
K-FELDSP          -4.43    -4.66    -0.23   Si3.000K1.000Al1.000O8.000
KAOLINIT         -12.46   -49.38   -36.92   Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE           -9.02    69.92    78.94   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONTI          -8.59     5.05    13.63   Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LEUCITE           -4.82     1.34     6.16   Si2.000K1.000Al1.000O6.000
LIME,            -12.25    20.45    32.70   Ca1.000O1.000
MG2SI2O6          -2.64    20.62    23.26   Mg2.000Si2.000O6.000
MICROCLI          -6.44    -4.66     1.78   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
MONOSULF          -8.55    65.28    73.83   Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA          -10.61    -8.04     2.56   Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-K           -10.51    -8.44     2.07   Mg0.330Al1.670Si4.000K0.330H2.000O12.000
MONT-MG          -11.19    -8.73     2.47   Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
MONT-NA          -10.38    -7.88     2.51   Mg0.330Al1.670Si4.000Na0.330H2.000O12.000
MORDENIT         -69.66   -92.98   -23.32
    Si30.000Na2.100Al6.000K0.900Ca1.500H44.000O94.000
MUSCOVIT         -10.64     3.96    14.60   Al3.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
NA(CR)           -53.04    -7.15    45.89   Na1.000
NA(G)            -66.53    -7.15    59.38   Na1.000
O(G)             -46.41    35.74    82.15   O1.000
O2(G)            -11.60    71.49    83.09   O2.000
OKENITE           -1.89     8.43    10.32   Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
ORTHOCLA          -5.52    -4.66     0.86   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
PARAGONI         -13.21     5.66    18.87   Na1.000Al3.000Si3.000H2.000O12.000
PERICLAS          -5.27    16.31    21.58   Mg1.000O1.000
PHILLI_a         -48.87   -37.88    10.99
    Si24.400Na3.200Al7.600K2.800Ca0.800H48.000O88.000
PHILLI_d         -47.97   -40.95     7.02
    Si24.600Na1.400Al7.400K1.200Ca2.400H48.000O88.000
PHLOGOPI           7.92    44.25    36.33   Mg3.000Al1.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
PLOMBIER           2.39    66.14    63.75   Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN           -2.27    20.44    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1          -2.12    20.44    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
PYROPHYL         -15.83   -15.37     0.46   Si4.000Al2.000H2.000O12.000
QUARTZ            -2.22    -6.00    -3.78   Si1.000O2.000
```

```
RIVERSID          -2.78    66.21    68.98   Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)           -96.42 -132.26   -35.84   S1.000
S(G)           -137.89 -132.26     5.63   S1.000
S2(G)          -206.81 -264.52   -57.71   S2.000
SAPON-CA          5.47    31.70    26.23   Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-K           5.36    31.30    25.94   Mg3.000Al0.330Si3.670K0.330H2.000O12.000
SAPON-MG          4.83    31.01    26.19   Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SAPON-NA          5.58    31.86    26.28   Mg3.000Al0.330Si3.670Na0.330H2.000O12.000
SCOLECIT         -2.36    11.05    13.41   Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000
SEP              -4.20   -41.41   -37.21   Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT         -1.17    29.18    30.35   Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)         -140.42   -77.49    62.93   Si1.000
SI(G)          -211.46   -77.49   133.97   Si1.000
SIL              -2.99    -6.01    -3.02   Si1.000H2.000O3.000
SIL(AM)1         -3.29    -6.00    -2.71   Si1.000O2.000
SILI(AM)         -3.36    -6.00    -2.64   Si1.000O2.000
SILICA          -21.41   -23.88    -2.47   Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)         -3.36    -6.00    -2.64   Si1.000O2.000
SIO2(QUA         -2.00    -6.00    -4.00   Si1.000O2.000
SO2(G)          -55.46   -60.78    -5.32   S1.000O2.000
STILBITE        -21.44    -4.92    16.52   Si13.000Ca2.000Al5.000Na1.000H28.000O50.000
TALC              3.85    24.92    21.07   Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR          0.67    66.18    65.51   Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,          -10.19     2.62    12.81   Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLIT         16.73    74.43    57.70   Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
WAIRAKIT        -12.95     5.06    18.01   Si4.000Ca1.000Al2.000H4.000O14.000
XONOTLIT         -5.06    86.67    91.73   Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA        -11.02    -6.95     4.07   Si6.000Ca1.000Al2.000H8.000O20.000

------------------
End of simulation.
------------------

------------------------------------
Reading input data for simulation 2.
------------------------------------

-----------
End of run.
-----------
```

リスト9-4 人工海水とOPCペーストの反応における化学平衡計算（液固比=500，C-S-HにAl取り込み想定）

```
Input file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11. 報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥4章
¥PHREEQ-new080925¥0809228_THC実測値からAl量算出(SW_LS500_AFm).pqi
Output file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11. 報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥4章
¥PHREEQ-new080925¥0809228_THC実測値からAl量算出(SW_LS500_AFm).pqo
Database file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
------------------------------------
Reading input data for simulation 1.
------------------------------------

DATABASE C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb
Title    SW-OPC浸漬（L/S=1000/2=500)
PHASES
CSH(0.1)
Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
log_K -1.071
CSH(0.2)
Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
log_K 0.565
CSH(0.3)
Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
log_K 2.227
CSH(0.4)
Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
log_K 3.907
CSH(0.5)
Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
log_K 5.601
CSH(0.6)
Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
log_K 7.312
CSH(0.7)
Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
log_K 9.045
CSH(0.8)
Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
log_K 10.819
CSH(0.9)
Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
log_K 14.061
CSH(1.0)
Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
log_K 14.514
CSH(1.1)
Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
log_K 14.983
CSH(1.2)
Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000
log_K 15.439
CSH(1.3)
Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
log_K 15.870
CSH(1.4)
Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
log_K 16.272
CSH(1.5)
Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
log_K 16.643
CSH(1.6)
Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
log_K 16.987
CSH(1.7)
Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
  log_K 17.304
CSH(1.8)
Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
log_K 17.597
Ca(OH)2
Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
log_k 22.710
SiO2(am)
Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
log_K -2.639
CSH(0.833)
Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
log_K 11.436
SOLUTION 0    jinko-SW
                    units     mol/kgw
                pH          8.2
                pe          0.0
                density 1.000
                temp        25.0
                Ca    0.01035
```

```
                S    0.02933
                Mg    0.05379
                Na    0.4934
                K      0.01112
                Cl    0.5653
                C    0.5653        charge
SAVE SOLUTION 1
EQUILIBRIUM_PHASES 1
        CSH(0.1)    0.0    0.0
        CSH(0.2)    0.0    0.0
        CSH(0.3)    0.0    0.0
        CSH(0.4)    0.0    0.0
        CSH(0.5)    0.0    0.0
        CSH(0.6)    0.0    0.0
        CSH(0.7)    0.0    0.0
        CSH(0.8)    0.0    0.0
        CSH(0.9)    0.0    0.0
        CSH(1.0)    0.0    0.0
        CSH(1.1)    0.0    0.0
        CSH(1.2)    0.0    0.0
        CSH(1.3)    0.0    0.0
        CSH(1.4)    0.0    0.0
        CSH(1.5)    0.0    0.0
        CSH(1.6)    0.0    0.0
        CSH(1.7)    0.0    0.0
        CSH(1.8)    0.0    0.0110 #6.461
        SiO2(am)    0.0    0.0
        CSH(0.833) 0.0    0.0
        Ca(OH)2      0.0    0.0061 #2.92949
        ETTRINGI    0.0    0.0 #0.08184
        MONOSULF    0.0      0.000426
        FRIEDEL_    0.0 0.0
        HYDROGR    0.0    0.000116 #0.2161
        Brucite      0.0    0.00084 #0.4906
        SEPIOLIT      0.0    0.0
        CALCITE 0.0 0.0
        ARAGONIT 0.0 0.0
        GEHL_HY 0.0 0.0
        HYDROTAL 0.0 0.0
        GROSSUL 0.0 0.0
        C3ASH4    0.0 0.0
        GYPSUM 0.0 0.0
        END
-----
TITLE
-----

  SW-OPC浸漬（L/S=1000/2=500)
```

```
-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 0.          jinko-SW

-----------------------------Solution composition-----------------------------

                Elements              Molality          Moles

                C                     8.090e-003    8.090e-003    Charge balance
                Ca                    1.035e-002    1.035e-002
                Cl                    5.653e-001    5.653e-001
                K                     1.112e-002    1.112e-002
                Mg                    5.379e-002    5.379e-002
                Na                    4.934e-001    4.934e-001
                S                     2.933e-002    2.933e-002

----------------------------Description of solution----------------------------

                                                pH   =     8.200
                                                pe   =     0.000
                                Activity of water   =     0.980
                                      Ionic strength   =    6.811e-001
                                Mass of water (kg)   =    1.000e+000
                        Total alkalinity (eq/kg)    = -7.340e-003
                                Total CO2 (mol/kg)   =    8.090e-003
                                Temperature (deg C)   =    25.000
                        Electrical balance (eq)    = -8.727e-014
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)    =    -0.00
                                        Iterations   =      7
                                            Total H    = 1.110197e+002
                                            Total O    = 5.564777e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                        Log        Log          Log
    Species                  Molality   Activity   Molality     Activity      Gamma

    OH-                    2.553e-006   1.554e-006    -5.593      -5.809      -0.216
    H+                     8.361e-009   6.310e-009    -8.078      -8.200      -0.122
    H2                     5.551e+001   9.804e-001     1.744      -0.009       0.000
C                   8.090e-003
    HCO3-                  5.662e-003   3.822e-003    -2.247      -2.418      -0.171
    MgHCO3+                8.044e-004   6.015e-004    -3.095      -3.221      -0.126
    NaHCO3                 6.304e-004   7.374e-004    -3.200      -3.132       0.068
    MgCO3                  3.129e-004   3.661e-004    -3.505      -3.436       0.068
    NaCO3-                 2.410e-004   1.802e-004    -3.618      -3.744      -0.126
    CaHCO3+                1.569e-004   1.059e-004    -3.805      -3.975      -0.171
```

```
    CO3-2          1.362e-004  2.830e-005   -3.866   -4.548   -0.683
    CaCO3          9.964e-005  1.166e-004   -4.002   -3.933    0.068
    CO2            4.712e-005  5.512e-005   -4.327   -4.259    0.068
    CH4            0.000e+000  0.000e+000  -45.520  -45.451    0.068
Ca                 1.035e-002
    Ca+2           8.982e-003  2.248e-003   -2.047   -2.648   -0.602
    CaSO4          1.112e-003  1.300e-003   -2.954   -2.886    0.068
    CaHCO3+        1.569e-004  1.059e-004   -3.805   -3.975   -0.171
    CaCO3          9.964e-005  1.166e-004   -4.002   -3.933    0.068
    CaOH+          1.179e-007  8.813e-008   -6.929   -7.055   -0.126
Cl                 5.653e-001
    Cl-            5.653e-001  3.522e-001   -0.248   -0.453   -0.206
    ClO-           0.000e+000  0.000e+000  -41.871  -41.997   -0.126
    ClOH           0.000e+000  0.000e+000  -42.845  -42.777    0.068
    ClO2-          0.000e+000  0.000e+000  -75.421  -75.547   -0.126
    ClHO2          0.000e+000  0.000e+000  -81.855  -81.786    0.068
    ClO3-          0.000e+000  0.000e+000  -97.395  -97.521   -0.126
    ClO4-          0.000e+000  0.000e+000 -122.552 -122.679   -0.126
H(0)               4.819e-020
    H2             2.409e-020  2.818e-020  -19.618  -19.550    0.068
K                  1.112e-002
    K+             1.094e-002  6.814e-003   -1.961   -2.167   -0.206
    KSO4-          1.832e-004  1.370e-004   -3.737   -3.863   -0.126
Mg                 5.379e-002
    Mg+2           4.682e-002  1.354e-002   -1.330   -1.868   -0.539
    MgSO4          5.844e-003  6.837e-003   -2.233   -2.165    0.068
    MgHCO3+        8.044e-004  6.015e-004   -3.095   -3.221   -0.126
    MgCO3          3.129e-004  3.661e-004   -3.505   -3.436    0.068
    MgOH+          4.520e-006  3.380e-006   -5.345   -5.471   -0.126
Na                 4.934e-001
    Na+            4.860e-001  3.436e-001   -0.313   -0.464   -0.151
    NaSO4-         6.539e-003  4.890e-003   -2.184   -2.311   -0.126
    NaHCO3         6.304e-004  7.374e-004   -3.200   -3.132    0.068
    NaCO3-         2.410e-004  1.802e-004   -3.618   -3.744   -0.126
O(0)               0.000e+000
    O2             0.000e+000  0.000e+000  -53.365  -53.297    0.068
S                  2.933e-002
    SO4-2          1.565e-002  2.840e-003   -1.805   -2.547   -0.741
    NaSO4-         6.539e-003  4.890e-003   -2.184   -2.311   -0.126
    MgSO4          5.844e-003  6.837e-003   -2.233   -2.165    0.068
    CaSO4          1.112e-003  1.300e-003   -2.954   -2.886    0.068
    KSO4-          1.832e-004  1.370e-004   -3.737   -3.863   -0.126
    HSO4-          2.325e-009  1.739e-009   -8.634   -8.760   -0.126
    SO3-2          1.478e-022  4.623e-023  -21.830  -22.335   -0.505
    HSO3-          6.474e-024  4.841e-024  -23.189  -23.315   -0.126
    H2SO3          1.806e-030  2.113e-030  -29.743  -29.675    0.068
    HS-            0.000e+000  0.000e+000  -42.403  -42.619   -0.216
    H2S            0.000e+000  0.000e+000  -43.899  -43.831    0.068
    S2O3-2         0.000e+000  0.000e+000  -48.530  -49.035   -0.505
    S-2            0.000e+000  0.000e+000  -52.706  -53.420   -0.714
    HS2O3-         0.000e+000  0.000e+000  -55.519  -55.645   -0.126

-----------------------------Saturation indices-----------------------------

Phase                SI log IAP   log KT

ANHYDRIT            -0.81    -5.19    -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
ARAGONIT             1.14    -7.20    -8.34   C1.000Ca1.000O3.000
BRUCITE             -1.79    14.51    16.30   Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)              -21.57   -53.72   -32.15   C1.000
C(G)               -139.17  -53.72    85.45   C1.000
CA(CR)              -99.50    -2.65    96.85   Ca1.000
CA(G)              -124.73    -2.65   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2             -8.98    13.73    22.71   Ca(OH)2
CALCITE              1.29    -7.20    -8.48   C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)             -18.96    13.74    32.70   Ca1.000O1.000
CH4                 -42.59   -86.52   -43.93   C1.000H4.000
CL(G)               -41.89    -0.45    41.44   Cl1.000
CL2(G)              -46.89    -0.91    45.98   Cl2.000
CO(G)               -22.69   -37.33   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)               -2.79   -20.94   -18.15   C1.000O2.000
DOLOMITE              3.48   -13.61   -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
GYPSUM               -0.61    -5.21    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
H(G)                -43.81    -8.20    35.61   H1.000
H2(G)               -16.40   -16.40     0.00   H2.000
H2O(G)               -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)              -42.81   -84.51   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)              -14.94    -8.65     6.29   Cl1.000H1.000
K(CR)               -51.66    -2.17    49.49   K1.000
K(G)                -62.26    -2.17    60.09   K1.000
LIME,               -18.96    13.74    32.70   Ca1.000O1.000
NA(CR)              -46.35    -0.46    45.89   Na1.000
NA(G)               -59.84    -0.46    59.38   Na1.000
O(G)                -65.76    16.39    82.15   O1.000
O2(G)               -50.31    32.78    83.09   O2.000
PERICLAS             -7.06    14.52    21.58   Mg1.000O1.000
PORTLAN              -8.98    13.73    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1             -8.82    13.73    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
S(CR)               -32.27   -68.11   -35.84   S1.000
S(G)                -73.74   -68.11     5.63   S1.000
S2(G)               -78.51  -136.22   -57.71   S2.000
SO2(G)              -30.01   -35.33    -5.32   S1.000O2.000

----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
----------------------------------------

Reaction step 1.
```

Using solution 0. jinko-SW
Using pure phase assemblage 1.

----------Phase assemblage----------

Phase	SI	log IAP	log KT	Moles in assemblage Initial	Final	Delta
ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	0.000e+000	0	0.000e+000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	8.400e-004	9.633e-003	8.793e-003
C3ASH4	-20.11	50.76	70.87	0.000e+000	0	0.000e+000
Ca(OH)2	-6.73	15.98	22.71	6.100e-003	0	-6.100e-003
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	0.000e+000	8.051e-003	8.051e-003
CSH(0.1)	-3.14	-4.21	-1.07	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.2)	-3.17	-2.61	0.56	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.3)	-3.24	-1.01	2.23	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.4)	-3.32	0.59	3.91	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.5)	-3.42	2.19	5.60	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.6)	-3.53	3.78	7.31	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.7)	-3.66	5.38	9.04	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.8)	-3.84	6.98	10.82	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.833)	-3.93	7.51	11.44	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.9)	-4.53	9.53	14.06	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.0)	-4.34	10.18	14.51	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.1)	-4.28	10.70	14.98	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.2)	-4.29	11.15	15.44	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.3)	-4.35	11.52	15.87	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.4)	-4.44	11.84	16.27	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.5)	-4.53	12.11	16.64	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.6)	-4.63	12.35	16.99	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.7)	-4.74	12.57	17.30	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.8)	-4.84	12.75	17.60	1.100e-002	0	-1.100e-002
ETTRINGI	-16.48	41.76	58.24	0.000e+000	0	0.000e+000
FRIEDEL_	-16.84	53.29	70.13	0.000e+000	0	0.000e+000
GEHL_HY	-15.58	34.74	50.32	0.000e+000	0	0.000e+000
GROSSUL	-19.51	39.19	58.70	0.000e+000	0	0.000e+000
GYPSUM	-0.27	-4.87	-4.60	0.000e+000	0	0.000e+000
HYDROGR	-20.82	56.55	77.37	1.160e-004	0	-1.160e-004
HYDROTAL	-0.00	73.78	73.78	0.000e+000	5.420e-004	5.420e-004
MONOSULF	-22.19	51.64	73.83	4.260e-004	0	-4.260e-004
SEPIOLIT	0.00	30.35	30.35	0.000e+000	1.019e-003	1.019e-003
SiO2(am)	-3.17	-5.80	-2.64	0.000e+000	0	0.000e+000

----------Solution composition----------

Elements	Molality	Moles
Al	3.832e-010	3.832e-010
C	3.922e-005	3.923e-005
Ca	2.145e-002	2.145e-002
Cl	5.652e-001	5.653e-001
K	1.112e-002	1.112e-002
Mg	3.875e-002	3.875e-002
Na	4.933e-001	4.934e-001
S	2.975e-002	2.976e-002
Si	1.743e-006	1.743e-006

----------Description of solution----------

pH = 9.160 Charge balance
pe = 8.713 Adjusted to redox equilibrium
Activity of water = 0.981
Ionic strength = 6.735e-001
Mass of water (kg) = 1.000e+000
Total alkalinity (eq/kg) = 3.698e-005
Total CO2 (mol/kg) = 3.922e-005
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = -8.682e-014
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -0.00
Iterations = 23
Total H = 1.110239e+002
Total O = 5.563109e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	2.327e-005	1.418e-005	-4.633	-4.848	-0.215
H+	9.157e-010	6.914e-010	-9.038	-9.160	-0.122
H2O	5.551e+001	9.805e-001	1.744	-0.009	0.000
Al	3.832e-010				
Al(OH)4-	3.815e-010	2.850e-010	-9.419	-9.545	-0.127
Al(OH)3	1.721e-012	2.009e-012	-11.764	-11.697	0.067
Al(OH)2+	1.507e-015	1.126e-015	-14.822	-14.949	-0.127
AlOH+2	3.283e-019	1.022e-019	-18.484	-18.990	-0.507
Al+3	8.837e-023	7.046e-024	-22.054	-23.152	-1.098
AlSO4+	2.881e-023	2.152e-023	-22.540	-22.667	-0.127
Al(SO4)2-	6.675e-024	4.987e-024	-23.176	-23.302	-0.127
C	3.922e-005				
HCO3-	1.511e-005	1.021e-005	-4.821	-4.991	-0.170
NaCO3-	5.886e-006	4.397e-006	-5.230	-5.357	-0.127
MgCO3	5.598e-006	6.537e-006	-5.252	-5.185	0.067
CaCO3	5.156e-006	6.021e-006	-5.288	-5.220	0.067
CO3-2	3.309e-006	6.897e-007	-5.480	-6.161	-0.681
NaHCO3	1.689e-006	1.972e-006	-5.772	-5.705	0.067
MgHCO3+	1.576e-006	1.177e-006	-5.803	-5.929	-0.127

```
    CaHCO3+          8.871e-007  5.994e-007    -6.052    -6.222    -0.170
    CO2              1.381e-008  1.613e-008    -7.860    -7.792     0.067
    CH4              0.000e+000  0.000e+000  -126.436  -126.368     0.067
Ca                 2.145e-002
    Ca+2             1.902e-002  4.764e-003    -1.721    -2.322    -0.601
    CaSO4            2.424e-003  2.831e-003    -2.615    -2.548     0.067
    CaCO3            5.156e-006  6.021e-006    -5.288    -5.220     0.067
    CaOH+            2.282e-006  1.705e-006    -5.642    -5.768    -0.127
    CaHCO3+          8.871e-007  5.994e-007    -6.052    -6.222    -0.170
Cl                 5.652e-001
    Cl-              5.652e-001  3.525e-001    -0.248    -0.453    -0.205
    ClO-             2.993e-023  2.236e-023   -22.524   -22.651    -0.127
    ClOH             3.482e-025  4.066e-025   -24.458   -24.391     0.067
    ClO2-            1.868e-037  1.395e-037   -36.729   -36.855    -0.127
    ClO3-            4.402e-040  3.288e-040   -39.356   -39.483    -0.127
    ClHO2            0.000e+000  0.000e+000   -44.122   -44.055     0.067
    ClO4-            0.000e+000  0.000e+000   -45.168   -45.295    -0.127
H(0)               2.177e-039
    H2               1.089e-039  1.271e-039   -38.963   -38.896     0.067
K                  1.112e-002
    K+               1.093e-002  6.817e-003    -1.961    -2.166    -0.205
    KSO4-            1.885e-004  1.408e-004    -3.725    -3.851    -0.127
Mg                 3.875e-002
    Mg+2             3.431e-002  9.918e-003    -1.465    -2.004    -0.539
    MgSO4            4.406e-003  5.145e-003    -2.356    -2.289     0.067
    MgOH+            3.026e-005  2.260e-005    -4.519    -4.646    -0.127
    MgCO3            5.598e-006  6.537e-006    -5.252    -5.185     0.067
    MgHCO3+          1.576e-006  1.177e-006    -5.803    -5.929    -0.127
Na                 4.933e-001
    Na+              4.866e-001  3.440e-001    -0.313    -0.463    -0.151
    NaSO4-           6.732e-003  5.029e-003    -2.172    -2.299    -0.127
    NaCO3-           5.886e-006  4.397e-006    -5.230    -5.357    -0.127
    NaHCO3           1.689e-006  1.972e-006    -5.772    -5.705     0.067
O(0)               4.248e-015
    O2               2.124e-015  2.480e-015   -14.673   -14.606     0.067
S                  2.975e-002
    SO4-2            1.600e-002  2.917e-003    -1.796    -2.535    -0.739
    NaSO4-           6.732e-003  5.029e-003    -2.172    -2.299    -0.127
    MgSO4            4.406e-003  5.145e-003    -2.356    -2.289     0.067
    CaSO4            2.424e-003  2.831e-003    -2.615    -2.548     0.067
    KSO4-            1.885e-004  1.408e-004    -3.725    -3.851    -0.127
    HSO4-            2.620e-010  1.957e-010    -9.582    -9.708    -0.127
    AlSO4+           2.881e-023  2.152e-023   -22.540   -22.667    -0.127
    Al(SO4)2-        6.675e-024  4.987e-024   -23.176   -23.302    -0.127
    SO3-2            0.000e+000  0.000e+000   -41.163   -41.669    -0.507
    HSO3-            0.000e+000  0.000e+000   -43.483   -43.610    -0.127
    H2SO3            0.000e+000  0.000e+000   -50.997   -50.930     0.067
    HS-              0.000e+000  0.000e+000  -120.736  -120.951    -0.215
    H2S              0.000e+000  0.000e+000  -123.191  -123.124     0.067
    S2O3-2           0.000e+000  0.000e+000  -127.809  -128.316    -0.507
    S-2              0.000e+000  0.000e+000  -130.080  -130.792    -0.712
    HS2O3-           0.000e+000  0.000e+000  -135.760  -135.886    -0.127
Si                 1.743e-006
    H4SiO4           1.291e-006  1.507e-006    -5.889    -5.822     0.067
    H3SiO4-          4.520e-007  3.376e-007    -6.345    -6.472    -0.127
    H2SiO4-2         7.318e-011  2.279e-011   -10.136   -10.642    -0.507
    H5Si2O7-         3.563e-011  2.662e-011   -10.448   -10.575    -0.127
    H4Si2O7-2        1.556e-012  4.847e-013   -11.808   -12.315    -0.507
    H5Si3O10-3       4.693e-017  3.400e-018   -16.329   -17.469    -1.140
    H3Si3O9-3        3.802e-018  2.754e-019   -17.420   -18.560    -1.140
    H5Si4O12-3       7.374e-021  5.343e-022   -20.132   -21.272    -1.140
    H4Si4O12-4       1.299e-021  1.222e-023   -20.886   -22.913    -2.027

-----------------------------Saturation indices-----------------------------

Phase                SI log IAP   log KT

AFWILLIT           -23.65    36.33    59.99   Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ALBITE              -7.95    -4.41     3.54   Na1.000Al1.000Si3.000O8.000
ALUNITE            -23.39   -21.78     1.61   Al3.000S2.000K1.000H6.000O14.000
ANALCIM1            -5.54     1.39     6.93   Si2.000Na1.000Al1.000H2.000O7.000
ANALCIM2           -63.31   -17.18    46.13   Si25.800Na10.200Al10.200H24.000O84.000
ANHYDRIT            -0.48    -4.86    -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
ANORTHHE           -13.69    13.01    26.70   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR           -13.36    13.01    26.37   Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ARAGONIT            -0.14    -8.48    -8.34   C1.000Ca1.000O3.000
BEID-CA            -14.16    -8.62     5.55   Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-K             -14.21    -8.95     5.26   K0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG            -14.08    -8.56     5.51   Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-NA            -13.99    -8.39     5.60   Na0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BRUCITE              0.00    16.30    16.30   Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)              -63.80   -95.95   -32.15   C1.000
C(G)              -181.40   -95.95    85.45   C1.000
C2AH8              -20.09    40.54    60.64   Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4             -20.11    50.76    70.87   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1           -20.65    50.76    71.41   Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13             -29.52    72.48   102.00   Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19             -29.55    72.43   101.98   Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)            -116.60   -19.75    96.85   Ca1.000
CA(G)             -141.83   -19.75   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2             -6.73    15.98    22.71   Ca(OH)2
CAH10              -15.88    24.54    40.42   Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CALCITE              0.00    -8.48    -8.48   C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)            -16.71    15.99    32.70   Ca1.000O1.000
CH4               -123.51  -167.44   -43.93   C1.000H4.000
CHABAZ_a           -72.61   -72.71    -0.10
    Si28.600Na4.900Al7.400K0.900Ca0.800H72.000O108.000
CHABAZ_d           -69.21   -61.97     7.24
```

```
    Si27.900Na3.700Al8.100K2.000Ca1.200H72.000O108.000
CHALCEDO          -2.31    -5.80    -3.49   Si1.000O2.000
CL(G)            -33.18     8.26    41.44   Cl1.000
CL2(G)           -29.46    16.52    45.98   Cl2.000
CLINOC40          34.97   581.80   546.83   Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
CLINOP_a         -73.37   -87.13   -13.76
    Si29.200Na1.700Al6.800K2.300Ca1.400H52.000O98.000
CLINOP_d         -72.25   -86.53   -14.28
    Si29.200Na0.400Al6.800K0.800Ca2.800H52.000O98.000
CLINOZOI         -16.10    27.51    43.61   Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CO(G)            -45.57   -60.21   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)            -6.32   -24.47   -18.15   C1.000O2.000
CSH(0.1)          -3.14    -4.21    -1.07   Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)          -3.17    -2.61     0.56   Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)          -3.24    -1.01     2.23   Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)          -3.32     0.59     3.91   Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)          -3.42     2.19     5.60   Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)          -3.53     3.78     7.31   Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)          -3.66     5.38     9.04   Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)          -3.84     6.98    10.82   Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)        -3.93     7.51    11.44   Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)          -4.53     9.53    14.06   Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)          -4.34    10.18    14.51   Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)          -4.28    10.70    14.98   Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
CSH(1.2)          -4.29    11.15    15.44   Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)          -4.35    11.52    15.87   Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)          -4.44    11.84    16.27   Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)          -4.53    12.11    16.64   Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)          -4.63    12.35    16.99   Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)          -4.74    12.57    17.30   Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)          -4.84    12.75    17.60   Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833           -3.93     7.51    11.44   Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
DOLOMITE           0.44   -16.65   -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
EPISTILB         -13.91   -10.25     3.66   Si6.000Ca1.000Al2.000H10.000O21.000
ERIONI_a         -70.24   -68.37     1.87
    Si28.200Na3.400Al7.800K2.800Ca0.800H60.000O102.000
ERIONI_d         -67.34   -62.86     4.48
    Si27.800Na1.200Al8.200K3.000Ca2.000H60.000O102.000
ETTRINGI         -16.48    41.76    58.24   Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FOSHAGIT         -19.34    46.53    65.87   Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
FRIEDEL_         -16.84    53.29    70.13   Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GEHL_HY          -15.58    34.74    50.32   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1         -14.42    34.74    49.16   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT         -21.47    34.81    56.28   Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE          -3.45     4.30     7.76   Al1.000H3.000O3.000
GROSSUL          -19.51    39.19    58.70   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1         -12.69    39.19    51.87   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM            -0.27    -4.87    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE          -8.32    14.54    22.86   Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)             -53.48   -17.87    35.61   H1.000
H2(G)            -35.75   -35.75     0.00   H2.000
H2O(G)            -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)          -122.10  -163.80   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)           -15.90    -9.61     6.29   Cl1.000H1.000
HEULANDI         -67.53   -63.97     3.56
    Si28.000Na1.000Al8.000K0.400Ca3.300H52.000O98.000
HILLEBRA         -10.54    26.17    36.70   Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR          -20.82    56.55    77.37   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1         -25.03    56.55    81.58   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL          -0.00    73.78    73.78   Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
ILLITE           -11.09    -2.13     8.97   Mg0.250Al2.300Si3.500K0.600H2.000O12.000
JENNITE          -37.61   108.99   146.60   Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
K(CR)            -60.37   -10.88    49.49   K1.000
K(G)             -70.97   -10.88    60.09   K1.000
K-FELDSP          -5.88    -6.11    -0.23   Si3.000K1.000Al1.000O8.000
KAOLINIT         -12.07   -48.99   -36.92   Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE          -22.39    56.55    78.94   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONTI         -12.26     1.37    13.63   Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LEUCITE           -6.46    -0.30     6.16   Si2.000K1.000Al1.000O6.000
LIME,            -16.71    15.99    32.70   Ca1.000O1.000
MG2SI2O6          -2.25    21.01    23.26   Mg2.000Si2.000O6.000
MICROCLI          -7.89    -6.11     1.78   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
MONOSULF         -22.19    51.64    73.83   Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA          -10.56    -8.00     2.56   Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-K           -10.40    -8.33     2.07   Mg0.330Al1.670Si4.000K0.330H2.000O12.000
MONT-MG          -10.42    -7.95     2.47   Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
MONT-NA          -10.27    -7.77     2.51   Mg0.330Al1.670Si4.000Na0.330H2.000O12.000
MORDENIT         -76.58   -99.90   -23.32
    Si30.000Na2.100Al6.000K0.900Ca1.500H44.000O94.000
MUSCOVIT         -12.09     2.51    14.60   Al3.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
NA(CR)           -55.07    -9.18    45.89   Na1.000
NA(G)            -68.56    -9.18    59.38   Na1.000
O(G)             -46.41    35.74    82.15   O1.000
O2(G)            -11.62    71.47    83.09   O2.000
OKENITE           -5.95     4.36    10.32   Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
ORTHOCLA          -6.97    -6.11     0.86   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
PARAGONI         -14.65     4.22    18.87   Na1.000Al3.000Si3.000H2.000O12.000
PERICLAS          -5.27    16.31    21.58   Mg1.000O1.000
PHILLI_a         -59.85   -48.86    10.99
    Si24.400Na3.200Al7.600K2.800Ca0.800H48.000O88.000
PHILLI_d         -59.15   -52.13     7.02
    Si24.600Na1.400Al7.400K1.200Ca2.400H48.000O88.000
PHLOGOPI           6.48    42.81    36.33   Mg3.000Al1.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
PLOMBIER         -18.72    45.03    63.75   Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN           -6.73    15.98    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1          -6.57    15.98    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
PYROPHYL         -15.05   -14.60     0.46   Si4.000Al2.000H2.000O12.000
QUARTZ            -2.02    -5.80    -3.78   Si1.000O2.000
```

```
RIVERSID          -23.89    45.10    68.98   Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)            -92.22 -128.06   -35.84   S1.000
S(G)            -133.69 -128.06     5.63   S1.000
S2(G)           -198.41 -256.12   -57.71   S2.000
SAPON-CA            5.45    31.68    26.23   Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-K             5.40    31.34    25.94   Mg3.000Al0.330Si3.670K0.330H2.000O12.000
SAPON-MG            5.54    31.73    26.19   Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SAPON-NA            5.62    31.91    26.28   Mg3.000Al0.330Si3.670Na0.330H2.000O12.000
SCOLECIT           -6.23     7.18    13.41   Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000
SEP                -3.62   -40.83   -37.21   Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT            0.00    30.35    30.35   Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)           -140.21   -77.28    62.93   Si1.000
SI(G)            -211.25   -77.28   133.97   Si1.000
SIL                -2.79    -5.81    -3.02   Si1.000H2.000O3.000
SIL(AM)1           -3.09    -5.80    -2.71   Si1.000O2.000
SILI(AM)           -3.17    -5.80    -2.64   Si1.000O2.000
SILICA            -21.21   -23.68    -2.47   Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)           -3.17    -5.80    -2.64   Si1.000O2.000
SIO2(QUA           -1.80    -5.80    -4.00   Si1.000O2.000
SO2(G)            -51.26   -56.58    -5.32   S1.000O2.000
STILBITE          -29.85   -13.33    16.52   Si13.000Ca2.000Al5.000Na1.000H28.000O50.000
TALC                4.63    25.70    21.07   Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR          -20.44    45.07    65.51   Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,             -9.99     2.82    12.81   Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLIT            9.38    67.08    57.70   Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
WAIRAKIT           -16.62     1.39    18.01   Si4.000Ca1.000Al2.000H4.000O14.000
XONOTLIT           -30.63    61.10    91.73   Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA           -14.31   -10.24     4.07   Si6.000Ca1.000Al2.000H8.000O20.000

------------------
End of simulation.
------------------

------------------------------------
Reading input data for simulation 2.
------------------------------------

-----------
End of run.
-----------
```

リスト9-5 人工海水とOPCペーストの反応における化学平衡計算（液固比=2.5，C-S-HにAl取り込み想定なし）

```
Input file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11. 報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥4章
¥PHREEQ-new080925¥080928_Al固溶なし(SW_LS2.5_AFm).pqi
Output file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥11. 報告書¥研究成果報告書-OPC海水モデル¥付録¥4章
¥PHREEQ-new080925¥080928_Al固溶なし(SW_LS2.5_AFm).pqo
Database file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
-------------------------------------
Reading input data for simulation 1.
-------------------------------------

DATABASE C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb
Title    SW-OPC浸漬（L/S=1000/400=2.5)
PHASES
CSH(0.1)
Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
log_K -1.071
CSH(0.2)
Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
log_K 0.565
CSH(0.3)
Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
log_K 2.227
CSH(0.4)
Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
log_K 3.907
CSH(0.5)
Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
log_K 5.601
CSH(0.6)
Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
log_K 7.312
CSH(0.7)
Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
log_K 9.045
CSH(0.8)
Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
log_K 10.819
CSH(0.9)
Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
log_K 14.061
CSH(1.0)
Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
log_K 14.514
CSH(1.1)
Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
log_K 14.983
CSH(1.2)
Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
log_K 15.439
CSH(1.3)
Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
log_K 15.870
CSH(1.4)
Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
log_K 16.272
CSH(1.5)
Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
log_K 16.643
CSH(1.6)
Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
log_K 16.987
CSH(1.7)
Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
log_K 17.304
CSH(1.8)
Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
 log_K 17.597
Ca(OH)2
Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
log_k 22.710
SiO2(am)
Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
log_K -2.639
CSH(0.833)
Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
 log_K 11.436
SOLUTION 0    jinko-SW
                    units     mol/kgw
                pH          8.2
                pe          0.0
                density 1.000
                temp        25.0
                Ca    0.01035
```

```
                S    0.02933
                Mg    0.05379
                Na    0.4934
                K     0.01112
                Cl    0.5653
                C    0.5653        charge
SAVE SOLUTION 1
EQUILIBRIUM_PHASES 1
        ARAGONIT 0.0 0.0
        CSH(0.1)    0.0    0.0
        CSH(0.2)    0.0    0.0
        CSH(0.3)    0.0    0.0
        CSH(0.4)    0.0    0.0
        CSH(0.5)    0.0    0.0
        CSH(0.6)    0.0    0.0
        CSH(0.7)    0.0    0.0
        CSH(0.8)    0.0    0.0
        CSH(0.9)    0.0    0.0
        CSH(1.0)    0.0    0.0
        CSH(1.1)    0.0    0.0
        CSH(1.2)    0.0    0.0
        CSH(1.3)    0.0    0.0
        CSH(1.4)    0.0    0.0
        CSH(1.5)    0.0    0.0
        CSH(1.6)    0.0    0.0
        CSH(1.7)    0.0    0.0
        CSH(1.8)    0.0    2.1443 #6.461
        SiO2(am)    0.0    0.0
        CSH(0.833) 0.0    0.0
        Ca(OH)2      0.0    0.972 #2.92949
        ETTRINGI    0.0    0.0 #0.08184
        MONOSULF    0.0      0.081
        FRIEDEL_    0.0 0.0
        HYDROGR    0.0    0.0937 #0.2161
        Brucite      0.0    0.1628 #0.4906
        SEPIOLIT      0.0    0.0
        CALCITE 0.0 0.0
        GEHL_HY 0.0 0.0
        HYDROTAL 0.0 0.0
        GROSSUL 0.0 0.0
        C3ASH4    0.0 0.0
        END
-----
TITLE
-----

   SW-OPC浸漬（L/S=1000/400=2.5)

-------------------------------------------
```

```
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 0.            jinko-SW

-----------------------------Solution composition-----------------------------

                Elements              Molality          Moles

                C                    8.090e-003   8.090e-003   Charge balance
                Ca                   1.035e-002   1.035e-002
                Cl                   5.653e-001   5.653e-001
                K                    1.112e-002   1.112e-002
                Mg                   5.379e-002   5.379e-002
                Na                   4.934e-001   4.934e-001
                S                    2.933e-002   2.933e-002

----------------------------Description of solution----------------------------

                                                pH   =      8.200
                                                pe   =      0.000
                                Activity of water   =      0.980
                                      Ionic strength   =    6.811e-001
                                   Mass of water (kg)   =    1.000e+000
                        Total alkalinity (eq/kg)    = -7.340e-003
                                   Total CO2 (mol/kg)   =    8.090e-003
                                 Temperature (deg C)   =    25.000
                             Electrical balance (eq)    = -8.727e-014
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)    =    -0.00
                                            Iterations   =      7
                                                Total H    = 1.110197e+002
                                                Total O    = 5.564777e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                                Log        Log        Log
    Species                  Molality      Activity   Molality   Activity       Gamma

    OH-                    2.553e-006   1.554e-006      -5.593      -5.809      -0.216
    H+                     8.361e-009   6.310e-009      -8.078      -8.200      -0.122
    H2O                    5.551e+001   9.804e-001       1.744      -0.009       0.000
C                   8.090e-003
    HCO3                   5.662e-003   3.822e-003      -2.247      -2.418      -0.171
    MgHCO                  8.044e-004   6.015e-004      -3.095      -3.221      -0.126
    NaHCO3                 6.304e-004   7.374e-004      -3.200      -3.132       0.068
    MgCO3                  3.129e-004   3.661e-004      -3.505      -3.436       0.068
    NaCO3-                 2.410e-004   1.802e-004      -3.618      -3.744      -0.126
    CaHCO3+                1.569e-004   1.059e-004      -3.805      -3.975      -0.171
    CO3-2                  1.362e-004   2.830e-005      -3.866      -4.548      -0.683
```

```
    CaCO3          9.964e-005  1.166e-004   -4.002   -3.933    0.068
    CO2            4.712e-005  5.512e-005   -4.327   -4.259    0.068
    CH4            0.000e+000  0.000e+000  -45.520  -45.451    0.068
Ca             1.035e-002
    Ca+2           8.982e-003  2.248e-003   -2.047   -2.648   -0.602
    CaSO4          1.112e-003  1.300e-003   -2.954   -2.886    0.068
    CaHCO3+        1.569e-004  1.059e-004   -3.805   -3.975   -0.171
    CaCO3          9.964e-005  1.166e-004   -4.002   -3.933    0.068
    CaOH+          1.179e-007  8.813e-008   -6.929   -7.055   -0.126
Cl             5.653e-001
    Cl-            5.653e-001  3.522e-001   -0.248   -0.453   -0.206
    ClO-           0.000e+000  0.000e+000  -41.871  -41.997   -0.126
    ClOH           0.000e+000  0.000e+000  -42.845  -42.777    0.068
    ClO2-          0.000e+000  0.000e+000  -75.421  -75.547   -0.126
    ClHO2          0.000e+000  0.000e+000  -81.855  -81.786    0.068
    ClO3-          0.000e+000  0.000e+000  -97.395  -97.521   -0.126
    ClO4-          0.000e+000  0.000e+000 -122.552 -122.679   -0.126
H(0)           4.819e-020
    H2             2.409e-020  2.818e-020  -19.618  -19.550    0.068
K              1.112e-002
    K+             1.094e-002  6.814e-003   -1.961   -2.167   -0.206
    KSO4-          1.832e-004  1.370e-004   -3.737   -3.863   -0.126
Mg             5.379e-002
    Mg+2           4.682e-002  1.354e-002   -1.330   -1.868   -0.539
    MgSO4          5.844e-003  6.837e-003   -2.233   -2.165    0.068
    MgHCO3+        8.044e-004  6.015e-004   -3.095   -3.221   -0.126
    MgCO3          3.129e-004  3.661e-004   -3.505   -3.436    0.068
    MgOH+          4.520e-006  3.380e-006   -5.345   -5.471   -0.126
Na             4.934e-001
    Na+            4.860e-001  3.436e-001   -0.313   -0.464   -0.151
    NaSO4-         6.539e-003  4.890e-003   -2.184   -2.311   -0.126
    NaHCO3         6.304e-004  7.374e-004   -3.200   -3.132    0.068
    NaCO3-         2.410e-004  1.802e-004   -3.618   -3.744   -0.126
O(0)           0.000e+000
    O2             0.000e+000  0.000e+000  -53.365  -53.297    0.068
S              2.933e-002
    SO4-2          1.565e-002  2.840e-003   -1.805   -2.547   -0.741
    NaSO4-         6.539e-003  4.890e-003   -2.184   -2.311   -0.126
    MgSO4          5.844e-003  6.837e-003   -2.233   -2.165    0.068
    CaSO4          1.112e-003  1.300e-003   -2.954   -2.886    0.068
    KSO4-          1.832e-004  1.370e-004   -3.737   -3.863   -0.126
    HSO4-          2.325e-009  1.739e-009   -8.634   -8.760   -0.126
    SO3-2          1.478e-022  4.623e-023  -21.830  -22.335   -0.505
    HSO3-          6.474e-024  4.841e-024  -23.189  -23.315   -0.126
    H2SO3          1.806e-030  2.113e-030  -29.743  -29.675    0.068
    HS-            0.000e+000  0.000e+000  -42.403  -42.619   -0.216
    H2S            0.000e+000  0.000e+000  -43.899  -43.831    0.068
    S2O3-2         0.000e+000  0.000e+000  -48.530  -49.035   -0.505
    S-2            0.000e+000  0.000e+000  -52.706  -53.420   -0.714
    HS2O3-         0.000e+000  0.000e+000  -55.519  -55.645   -0.126

-----------------------------Saturation indices-----------------------------

Phase                SI log IAP   log KT

ANHYDRIT           -0.81    -5.19    -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
ARAGONIT            1.14    -7.20    -8.34   C1.000Ca1.000O3.000
BRUCITE            -1.79    14.51    16.30   Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)             -21.57   -53.72   -32.15   C1.000
C(G)             -139.17   -53.72    85.45   C1.000
CA(CR)             -99.50    -2.65    96.85   Ca1.000
CA(G)             -124.73    -2.65   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2            -8.98    13.73    22.71   Ca(OH)2
CALCITE             1.29    -7.20    -8.48   C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)            -18.96    13.74    32.70   Ca1.000O1.000
CH4                -42.59   -86.52   -43.93   C1.000H4.000
CL(G)              -41.89    -0.45    41.44   Cl1.000
CL2(G)             -46.89    -0.91    45.98   Cl2.000
CO(G)              -22.69   -37.33   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)              -2.79   -20.94   -18.15   C1.000O2.000
DOLOMITE             3.48   -13.61   -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
GYPSUM              -0.61    -5.21    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
H(G)               -43.81    -8.20    35.61   H1.000
H2(G)              -16.40   -16.40     0.00   H2.000
H2O(G)              -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)             -42.81   -84.51   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)             -14.94    -8.65     6.29   Cl1.000H1.000
K(CR)              -51.66    -2.17    49.49   K1.000
K(G)               -62.26    -2.17    60.09   K1.000
LIME,              -18.96    13.74    32.70   Ca1.000O1.000
NA(CR)             -46.35    -0.46    45.89   Na1.000
NA(G)              -59.84    -0.46    59.38   Na1.000
O(G)               -65.76    16.39    82.15   O1.000
O2(G)              -50.31    32.78    83.09   O2.000
PERICLAS            -7.06    14.52    21.58   Mg1.000O1.000
PORTLAN             -8.98    13.73    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1            -8.82    13.73    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
S(CR)              -32.27   -68.11   -35.84   S1.000
S(G)               -73.74   -68.11     5.63   S1.000
S2(G)              -78.51  -136.22   -57.71   S2.000
SO2(G)             -30.01   -35.33    -5.32   S1.000O2.000

-----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
-----------------------------------------

Reaction step 1.
```

Using solution 0. jinko-SW
Using pure phase assemblage 1.

----------Phase assemblage----------

Phase	SI	log IAP	log KT	Moles in assemblage Initial	Final	Delta
ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	0.000e+000	0	0.000e+000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	1.628e-001	2.166e-001	5.379e-002
C3ASH4	-5.03	65.84	70.87	0.000e+000	0	0.000e+000
Ca(OH)2	0.00	22.71	22.71	9.720e-001	8.329e-001	-1.391e-001
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	0.000e+000	7.997e-003	7.997e-003
CSH(0.1)	-5.85	-6.92	-1.07	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.2)	-5.22	-4.65	0.56	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.3)	-4.61	-2.38	2.23	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.4)	-4.02	-0.11	3.91	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.5)	-3.44	2.16	5.60	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.6)	-2.88	4.43	7.31	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.7)	-2.34	6.70	9.04	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.8)	-1.85	8.97	10.82	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.833)	-1.71	9.72	11.44	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(0.9)	-1.57	12.49	14.06	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.0)	-1.00	13.51	14.51	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.1)	-0.63	14.35	14.98	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.2)	-0.39	15.05	15.44	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.3)	-0.23	15.64	15.87	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.4)	-0.13	16.14	16.27	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.5)	-0.07	16.58	16.64	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.6)	-0.02	16.96	16.99	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.7)	-0.00	17.30	17.30	0.000e+000	0	0.000e+000
CSH(1.8)	0.00	17.60	17.60	2.144e+000	2.144e+000	-5.361e-006
ETTRINGI	-0.00	58.24	58.24	0.000e+000	2.184e-002	2.184e-002
FRIEDEL_	0.00	70.13	70.13	0.000e+000	1.529e-001	1.529e-001
GEHL_HY	-7.23	43.09	50.32	0.000e+000	0	0.000e+000
GROSSUL	-11.22	47.48	58.70	0.000e+000	0	0.000e+000
HYDROGR	-2.35	75.02	77.37	9.370e-002	0	-9.370e-002
HYDROTAL	-1.71	72.07	73.78	0.000e+000	0	0.000e+000
MONOSULF	-4.39	69.45	73.83	8.100e-002	0	-8.100e-002
SEPIOLIT	-20.34	10.01	30.35	0.000e+000	0	0.000e+000
SiO2(am)	-6.56	-9.20	-2.64	0.000e+000	0	0.000e+000

----------Solution composition----------

Elements	Molality	Moles
Al	3.896e-007	3.848e-007
C	9.393e-005	9.277e-005
Ca	4.137e-003	4.085e-003
Cl	2.628e-001	2.596e-001
K	1.126e-002	1.112e-002
Mg	5.074e-009	5.011e-009
Na	4.996e-001	4.934e-001
S	4.539e-002	4.482e-002
Si	3.018e-006	2.981e-006

----------Description of solution----------

pH = 13.019 Charge balance
pe = 4.856 Adjusted to redox equilibrium
Activity of water = 0.983
Ionic strength = 5.338e-001
Mass of water (kg) = 9.876e-001
Total alkalinity (eq/kg) = 1.653e-001
Total CO2 (mol/kg) = 9.393e-005
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = -8.524e-013
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -0.00
Iterations = 20
Total H = 1.098040e+002
Total O = 5.516321e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	1.636e-001	1.027e-001	-0.786	-0.988	-0.202
H+	1.256e-013	9.577e-014	-12.901	-13.019	-0.118
H2O	5.551e+001	9.835e-001	1.744	-0.007	0.000
Al	3.896e-007				
Al(OH)4-	3.896e-007	2.865e-007	-6.409	-6.543	-0.133
Al(OH)3	2.467e-013	2.790e-013	-12.608	-12.554	0.053
Al(OH)2+	2.935e-020	2.158e-020	-19.532	-19.666	-0.133
AlOH+2	9.255e-028	2.707e-028	-27.034	-27.567	-0.534
Al+3	2.960e-035	2.577e-036	-34.529	-35.589	-1.060
AlSO4+	2.224e-035	1.636e-035	-34.653	-34.786	-0.133
Al(SO4)2-	1.071e-035	7.876e-036	-34.970	-35.104	-0.133
C	9.393e-005				
NaCO3-	5.851e-005	4.303e-005	-4.233	-4.366	-0.133
CO3-2	3.007e-005	6.755e-006	-4.522	-5.170	-0.648
CaCO3	5.325e-006	6.021e-006	-5.274	-5.220	0.053
HCO3-	2.012e-008	1.385e-008	-7.696	-7.859	-0.162
NaHCO3	2.364e-009	2.673e-009	-8.626	-8.573	0.053
CaHCO3+	1.206e-010	8.303e-011	-9.919	-10.081	-0.162
MgCO3	1.080e-012	1.221e-012	-11.967	-11.913	0.053
CO2	2.673e-015	3.023e-015	-14.573	-14.520	0.053
MgHCO3+	4.141e-017	3.046e-017	-16.383	-16.516	-0.133

CH4	0.000e+000	0.000e+000	-133.166	-133.113	0.053
Ca	4.137e-003				
Ca+2	1.886e-003	4.864e-004	-2.724	-3.313	-0.589
CaOH+	1.714e-003	1.260e-003	-2.766	-2.900	-0.133
CaSO4	5.311e-004	6.006e-004	-3.275	-3.221	0.053
CaCO3	5.325e-006	6.021e-006	-5.274	-5.220	0.053
CaHCO3+	1.206e-010	8.303e-011	-9.919	-10.081	-0.162
Cl	2.628e-001				
Cl-	2.628e-001	1.680e-001	-0.580	-0.775	-0.194
ClO-	1.466e-023	1.078e-023	-22.834	-22.967	-0.133
ClOH	2.401e-029	2.715e-029	-28.620	-28.566	0.053
ClO2-	9.251e-038	6.803e-038	-37.034	-37.167	-0.133
ClO3-	2.205e-040	1.621e-040	-39.657	-39.790	-0.133
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-45.463	-45.597	-0.133
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-48.278	-48.225	0.053
H(0)	2.230e-039				
H2	1.115e-039	1.261e-039	-38.953	-38.899	0.053
K	1.126e-002				
K+	1.085e-002	6.939e-003	-1.964	-2.159	-0.194
KSO4-	4.049e-004	2.978e-004	-3.393	-3.526	-0.133
Mg	5.074e-009				
MgOH+	4.244e-009	3.121e-009	-8.372	-8.506	-0.133
Mg+2	6.484e-010	1.892e-010	-9.188	-9.723	-0.535
MgSO4	1.803e-010	2.039e-010	-9.744	-9.691	0.053
MgCO3	1.080e-012	1.221e-012	-11.967	-11.913	0.053
MgHCO3+	4.141e-017	3.046e-017	-16.383	-16.516	-0.133
Na	4.996e-001				
Na+	4.853e-001	3.437e-001	-0.314	-0.464	-0.150
NaSO4-	1.420e-002	1.044e-002	-1.848	-1.981	-0.133
NaCO3-	5.851e-005	4.303e-005	-4.233	-4.366	-0.133
NaHCO3	2.364e-009	2.673e-009	-8.626	-8.573	0.053
O(0)	4.487e-015				
O2	2.244e-015	2.537e-015	-14.649	-14.596	0.053
S	4.539e-002				
SO4-2	3.025e-002	6.062e-003	-1.519	-2.217	-0.698
NaSO4-	1.420e-002	1.044e-002	-1.848	-1.981	-0.133
CaSO4	5.311e-004	6.006e-004	-3.275	-3.221	0.053
KSO4-	4.049e-004	2.978e-004	-3.393	-3.526	-0.133
MgSO4	1.803e-010	2.039e-010	-9.744	-9.691	0.053
HSO4-	7.660e-014	5.633e-014	-13.116	-13.249	-0.133
AlSO4+	2.224e-035	1.636e-035	-34.653	-34.786	-0.133
Al(SO4)2-	1.071e-035	7.876e-036	-34.970	-35.104	-0.133
SO3-2	0.000e+000	0.000e+000	-40.823	-41.357	-0.534
HSO3-	0.000e+000	0.000e+000	-47.022	-47.155	-0.133
H2SO3	0.000e+000	0.000e+000	-58.387	-58.334	0.053
HS-	0.000e+000	0.000e+000	-124.310	-124.512	-0.202
S-2	0.000e+000	0.000e+000	-129.817	-130.494	-0.677
H2S	0.000e+000	0.000e+000	-130.596	-130.543	0.053
S2O3-2	0.000e+000	0.000e+000	-134.885	-135.419	-0.534
HS2O3-	0.000e+000	0.000e+000	-146.714	-146.847	-0.133
Si	3.018e-006				
H2SiO4-2	1.661e-006	4.860e-007	-5.780	-6.313	-0.534
H3SiO4-	1.356e-006	9.974e-007	-5.868	-6.001	-0.133
H4SiO4	5.454e-010	6.167e-010	-9.263	-9.210	0.053
H4Si2O7-2	1.441e-011	4.216e-012	-10.841	-11.375	-0.534
H5Si2O7-	4.362e-014	3.208e-014	-13.360	-13.494	-0.133
H5Si3O10-3	1.384e-015	8.711e-017	-14.859	-16.060	-1.201
H3Si3O9-3	1.118e-016	7.035e-018	-15.952	-17.153	-1.201
H4Si4O12-4	1.255e-019	9.191e-022	-18.901	-21.037	-2.135
H5Si4O12-3	8.845e-023	5.567e-024	-22.053	-23.254	-1.201

----------Saturation indices----------

Phase	SI	log IAP	log KT	
AFWILLIT	-10.25	49.74	59.99	Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ALBITE	-15.12	-11.58	3.54	Na1.000Al1.000Si3.000O8.000
ALUNITE	-36.90	-35.29	1.61	Al3.000S2.000K1.000H6.000O14.000
ANALCIM1	-9.32	-2.39	6.93	Si2.000Na1.000Al1.000H2.000O7.000
ANALCIM2	-120.18	-74.05	46.13	Si25.800Na10.200Al10.200H24.000O84.000
ANHYDRIT	-1.15	-5.53	-4.38	Ca1.000S1.000O4.000
ANORTHHE	-15.46	11.24	26.70	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR	-15.13	11.24	26.37	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	C1.000Ca1.000O3.000
BEID-CA	-27.50	-21.95	5.55	Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-K	-27.38	-22.12	5.26	K0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG	-28.52	-23.01	5.51	Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-NA	-27.16	-21.56	5.60	Na0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)	-70.53	-102.68	-32.15	C1.000
C(G)	-188.13	-102.68	85.45	C1.000
C2AH8	-8.35	52.29	60.64	Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4	-5.03	65.84	70.87	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1	-5.57	65.84	71.41	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13	-4.31	97.69	102.00	Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19	-4.33	97.64	101.98	Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)	-109.87	-13.02	96.85	Ca1.000
CA(G)	-135.10	-13.02	122.08	Ca1.000
Ca(OH)2	0.00	22.71	22.71	Ca(OH)2
CAH10	-10.86	29.56	40.42	Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)	-9.98	22.72	32.70	Ca1.000O1.000
CH4	-130.25	-174.18	-43.93	C1.000H4.000
CHABAZ_a	-148.13	-148.23	-0.10	
Si28.600Na4.900Al7.400K0.900Ca0.800H72.000O108.000				
CHABAZ_d	-140.64	-133.40	7.24	
Si27.900Na3.700Al8.100K2.000Ca1.200H72.000O108.000				
CHALCEDO	-5.71	-9.20	-3.49	Si1.000O2.000

```
CL(G)          -37.36    4.08   41.44   Cl1.000
CL2(G)         -37.82    8.16   45.98   Cl2.000
CLINOC40        -60.16  486.67  546.83   Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
CLINOP_a       -153.32 -167.08  -13.76
   Si29.200Na1.700Al6.800K2.300Ca1.400H52.000O98.000
CLINOP_d       -153.60 -167.88  -14.28
   Si29.200Na0.400Al6.800K0.800Ca2.800H52.000O98.000
CLINOZOI        -15.40   28.21   43.61   Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CO(G)          -52.30  -66.94  -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)         -13.05  -31.20  -18.15   C1.000O2.000
CSH(0.1)        -5.85   -6.92   -1.07   Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)        -5.22   -4.65    0.56   Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)        -4.61   -2.38    2.23   Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)        -4.02   -0.11    3.91   Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)        -3.44    2.16    5.60   Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)        -2.88    4.43    7.31   Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)        -2.34    6.70    9.04   Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)        -1.85    8.97   10.82   Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)      -1.71    9.72   11.44   Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)        -1.57   12.49   14.06   Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)        -1.00   13.51   14.51   Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)        -0.63   14.35   14.98   Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
CSH(1.2)        -0.39   15.05   15.44   Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)        -0.23   15.64   15.87   Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)        -0.13   16.14   16.27   Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)        -0.07   16.58   16.64   Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)        -0.02   16.96   16.99   Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)        -0.00   17.30   17.30   Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)         0.00   17.60   17.60   Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833         -1.71    9.72   11.44   Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
DOLOMITE        -6.29  -23.38  -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
EPISTILB       -29.24  -25.58    3.66   Si6.000Ca1.000Al2.000H10.000O21.000
ERIONI_a       -143.19 -141.32    1.87
   Si28.200Na3.400Al7.800K2.800Ca0.800H60.000O102.000
ERIONI_d       -138.92 -134.44    4.48
   Si27.800Na1.200Al8.200K3.000Ca2.000H60.000O102.000
ETTRINGI        -0.00   58.24   58.24   Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FOSHAGIT        -2.60   63.27   65.87   Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
FRIEDEL_         0.00   70.13   70.13   Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GEHL_HY         -7.23   43.09   50.32   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1        -6.07   43.09   49.16   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT       -13.13   43.15   56.28   Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE        -4.31    3.45    7.76   Al1.000H3.000O3.000
GROSSUL        -11.22   47.48   58.70   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1        -4.39   47.48   51.87   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM          -0.94   -5.54   -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE        -5.03   17.83   22.86   Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)           -53.48  -17.87   35.61   H1.000
H2(G)          -35.75  -35.75    0.00   H2.000
H2O(G)          -1.51   -0.01    1.50   H2.000O1.000
H2S(G)        -129.52 -171.22  -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)         -20.08  -13.79    6.29   Cl1.000H1.000
HEULANDI       -141.71 -138.15    3.56
   Si28.000Na1.000Al8.000K0.400Ca3.300H52.000O98.000
HILLEBRA        -0.47   36.23   36.70   Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR         -2.35   75.02   77.37   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1        -6.56   75.02   81.58   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL        -1.71   72.07   73.78   Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
ILLITE         -22.62  -13.65    8.97   Mg0.250Al2.300Si3.500K0.600H2.000O12.000
JENNITE         2.60  149.20  146.60   Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
K(CR)          -56.50   -7.01   49.49   K1.000
K(G)           -67.10   -7.01   60.09   K1.000
K-FELDSP       -13.04  -13.27   -0.23   Si3.000K1.000Al1.000O8.000
KAOLINIT       -20.57  -57.49  -36.92   Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE         -3.92   75.02   78.94   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONTI       -20.81   -7.18   13.63   Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LEUCITE        -10.24   -4.08    6.16   Si2.000K1.000Al1.000O6.000
LIME,          -9.98   22.72   32.70   Ca1.000O1.000
MG2SI2O6        -9.04   14.22   23.26   Mg2.000Si2.000O6.000
MICROCLI       -15.05  -13.27    1.78   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
MONOSULF        -4.39   69.45   73.83   Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA        -24.45  -21.89    2.56   Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-K         -24.12  -22.05    2.07   Mg0.330Al1.670Si4.000K0.330H2.000O12.000
MONT-MG        -25.41  -22.94    2.47   Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
MONT-NA        -24.00  -21.49    2.51   Mg0.330Al1.670Si4.000Na0.330H2.000O12.000
MORDENIT       -161.76 -185.08  -23.32
   Si30.000Na2.100Al6.000K0.900Ca1.500H44.000O94.000
MUSCOVIT       -20.97   -6.37   14.60   Al3.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
NA(CR)         -51.21   -5.32   45.89   Na1.000
NA(G)          -64.70   -5.32   59.38   Na1.000
O(G)           -46.41   35.74   82.15   O1.000
O2(G)          -11.61   71.48   83.09   O2.000
OKENITE         -6.00    4.31   10.32   Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
ORTHOCLA       -14.13  -13.27    0.86   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
PARAGONI       -23.54   -4.67   18.87   Na1.000Al3.000Si3.000H2.000O12.000
PERICLAS        -5.27   16.31   21.58   Mg1.000O1.000
PHILLI_a       -120.53 -109.54   10.99
   Si24.400Na3.200Al7.600K2.800Ca0.800H48.000O88.000
PHILLI_d       -122.70 -115.68    7.02
   Si24.600Na1.400Al7.400K1.200Ca2.400H48.000O88.000
PHLOGOPI        -0.69   35.64   36.33   Mg3.000Al1.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
PLOMBIER        -5.41   58.34   63.75   Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN          0.00   22.71   22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1         0.16   22.71   22.55   Ca1.000H2.000O2.000
PYROPHYL       -30.34  -29.88    0.46   Si4.000Al2.000H2.000O12.000
QUARTZ          -5.42   -9.20   -3.78   Si1.000O2.000
RIVERSID       -10.59   58.39   68.98   Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)          -99.63 -135.47  -35.84   S1.000
```

```
S(G)            -141.10 -135.47    5.63   S1.000
S2(G)           -213.24 -270.95  -57.71   S2.000
SAPON-CA          -6.17   20.06   26.23   Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-K           -6.05   19.89   25.94   Mg3.000Al0.330Si3.670K0.330H2.000O12.000
SAPON-MG          -7.19   19.00   26.19   Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SAPON-NA          -5.83   20.45   26.28   Mg3.000Al0.330Si3.670Na0.330H2.000O12.000
SCOLECIT         -11.39    2.02   13.41   Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000
SEP              -13.79  -51.00  -37.21   Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT         -20.34   10.01   30.35   Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)          -143.61  -80.68   62.93   Si1.000
SI(G)           -214.65  -80.68  133.97   Si1.000
SIL               -6.18   -9.20   -3.02   Si1.000H2.000O3.000
SIL(AM)1          -6.49   -9.20   -2.71   Si1.000O2.000
SILI(AM)          -6.56   -9.20   -2.64   Si1.000O2.000
SILICA           -24.60  -27.07   -2.47   Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)          -6.56   -9.20   -2.64   Si1.000O2.000
SIO2(QUA          -5.20   -9.20   -4.00   Si1.000O2.000
SO2(G)           -58.67  -63.99   -5.32   S1.000O2.000
STILBITE         -60.89  -44.37   16.52   Si13.000Ca2.000Al5.000Na1.000H28.000O50.000
TALC              -8.94   12.13   21.07   Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR          -7.14   58.37   65.51   Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,           -15.10   -2.29   12.81   Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLIT          -4.30   53.40   57.70   Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
WAIRAKIT         -25.17   -7.17   18.01   Si4.000Ca1.000Al2.000H4.000O14.000
XONOTLIT         -10.60   81.12   91.73   Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA         -29.64  -25.57    4.07   Si6.000Ca1.000Al2.000H8.000O20.000

------------------
End of simulation.
------------------

-------------------------------------
Reading input data for simulation 2.
-------------------------------------

-----------
End of run.
-----------
```

リスト9-6 人工海水とOPCペーストの反応における化学平衡計算（液固比=10，C-S-HにAl取り込み想定なし）

```
Input file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥3. 海水系OPCに関する検討¥2. PHREEQによる解析¥2.
計算結果¥OPC-模擬海水¥080326_Calc500-sepeo.pqi
Output file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥3. 海水系OPCに関する検討¥2. PHREEQによる解析¥2.
計算結果¥OPC-模擬海水¥080326_Calc500-sepeo.pqo
Database file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
-------------------------------------
Reading input data for simulation 1.
-------------------------------------

DATABASE C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb
Title OPC-模擬海水バッチ式試験（Ref 模擬海水-L/S=10）-Calc.No500
PHASES
CSH(0.1)
Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
log_K -1.071
CSH(0.2)
Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
log_K 0.565
CSH(0.3)
Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
log_K 2.227
CSH(0.4)
Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
log_K 3.907
CSH(0.5)
Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
log_K 5.601
CSH(0.6)
Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
log_K 7.312
CSH(0.7)
Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
log_K 9.045
CSH(0.8)
Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
log_K 10.819
CSH(0.9)
Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
log_K 14.061
CSH(1.0)
Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
log_K 14.514
CSH(1.1)
Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
log_K 14.983
CSH(1.2)
Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
log_K 15.439
CSH(1.3)
Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
log_K 15.870
CSH(1.4)
Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
log_K 16.272
CSH(1.5)
Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
log_K 16.643
CSH(1.6)
Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
log_K 16.987
CSH(1.7)
Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
log_K 17.304
CSH(1.8)
Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
log_K 17.597
Ca(OH)2
Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
log_k 22.710
SiO2(am)
Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
log_K -2.639
CSH(0.833)
Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
 log_K 11.436
SOLUTION 1    IEW/Pure Water
                    units     mol/kgw
                pH          8.2
                pe          0.0
                density 1.000
                temp        25.0
```

```
                    Ca    0.01035
                    S    0.02933
                    Mg    0.05379
                    Na    0.4934
                    K      0.01112
                    Cl    0.5653
                    C    0.5653        charge
EQUILIBRIUM_PHASES 1
          CSH(0.1) 0.0 0.0
          CSH(0.2) 0.0 0.0
          CSH(0.3) 0.0 0.0
          CSH(0.4) 0.0 0.0
          CSH(0.5) 0.0 0.0
          CSH(0.6) 0.0 0.0
          CSH(0.7) 0.0 0.0
          CSH(0.8) 0.0 0.0
          CSH(0.9) 0.0 0.0
          CSH(1.0) 0.0 0.0
          CSH(1.1) 0.0 0.0
          CSH(1.2) 0.0 0.0
          CSH(1.3) 0.0 0.0
          CSH(1.4) 0.0 0.0
          CSH(1.5) 0.0 0.0
          CSH(1.6) 0.0 0.0
          CSH(1.7) 0.0 0.0
          CSH(1.8) 0.0 0.536
          CSH(0.833) 0.0 0.0
          Ca(OH)2 0.0 0.243
          ETTRINGI 0.0 0.0
          MONOSULF 0.0 0.02037
          HYDROGR 0.0 0.0234
          Brucite 0.0 0.0407
          FRIEDEL_ 0.0 0.0
          SEPIOLIT 0.0 0.0
          CALCITE 0.0 0.0
          ARAGONIT 0.0 0.0
          GEHL_HY 0.0 0.0
          HYDROTAL 0.0 0.0
          C3ASH4 0.0 0.0
          GYPSUM 0.0 0.0
          END
-----
TITLE
-----

 OPC-模擬海水バッチ式試験（Ref 模擬海水-L/S=10）-Calc.No500

-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------

Initial solution 1.          IEW/Pure Water

-----------------------------Solution composition-----------------------------

                Elements              Molality          Moles

                C                   8.090e-003   8.090e-003   Charge balance
                Ca                  1.035e-002   1.035e-002
                Cl                  5.653e-001   5.653e-001
                K                   1.112e-002   1.112e-002
                Mg                  5.379e-002   5.379e-002
                Na                  4.934e-001   4.934e-001
                S                   2.933e-002   2.933e-002

---------------------------Description of solution---------------------------

                                        pH   =     8.200
                                        pe   =     0.000
                          Activity of water   =     0.980
                               Ionic strength   =   6.811e-001
                            Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                  Total alkalinity (eq/kg)   = -7.340e-003
                          Total CO2 (mol/kg)   =   8.090e-003
                        Temperature (deg C)   =   25.000
                     Electrical balance (eq)   = -8.727e-014
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =   -0.00
                                   Iterations   =     7
                                       Total H   = 1.110197e+002
                                       Total O   = 5.564777e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                    Log       Log       Log
Species                Molality   Activity  Molality  Activity    Gamma

   OH-                2.553e-006  1.554e-006   -5.593    -5.809    -0.216
   H+                 8.361e-009  6.310e-009   -8.078    -8.200    -0.122
   H2O                5.551e+001  9.804e-001    1.744    -0.009     0.000
C                 8.090e-003
   HCO3-              5.662e-003  3.822e-003   -2.247    -2.418    -0.171
   MgHCO3+            8.044e-004  6.015e-004   -3.095    -3.221    -0.126
   NaHCO3             6.304e-004  7.374e-004   -3.200    -3.132     0.068
   MgCO3              3.129e-004  3.661e-004   -3.505    -3.436     0.068
   NaCO3-             2.410e-004  1.802e-004   -3.618    -3.744    -0.126
   CaHCO3+            1.569e-004  1.059e-004   -3.805    -3.975    -0.171
   CO3-2              1.362e-004  2.830e-005   -3.866    -4.548    -0.683
   CaCO3              9.964e-005  1.166e-004   -4.002    -3.933     0.068
```

```
    CO2          4.712e-005  5.512e-005   -4.327   -4.259    0.068
    CH4          0.000e+000  0.000e+000   -45.520  -45.451   0.068
Ca               1.035e-002
    Ca+2         8.982e-003  2.248e-003   -2.047   -2.648   -0.602
    CaSO4        1.112e-003  1.300e-003   -2.954   -2.886    0.068
    CaHCO3+      1.569e-004  1.059e-004   -3.805   -3.975   -0.171
    CaCO3        9.964e-005  1.166e-004   -4.002   -3.933    0.068
    CaOH+        1.179e-007  8.813e-008   -6.929   -7.055   -0.126
Cl               5.653e-001
    Cl-          5.653e-001  3.522e-001   -0.248   -0.453   -0.206
    ClO-         0.000e+000  0.000e+000   -41.871  -41.997  -0.126
    ClOH         0.000e+000  0.000e+000   -42.845  -42.777   0.068
    ClO2-        0.000e+000  0.000e+000   -75.421  -75.547  -0.126
    ClHO2        0.000e+000  0.000e+000   -81.855  -81.786   0.068
    ClO3-        0.000e+000  0.000e+000   -97.395  -97.521  -0.126
    ClO4-        0.000e+000  0.000e+000   -122.552 -122.679 -0.126
H(0)             4.819e-020
    H2           2.409e-020  2.818e-020   -19.618  -19.550   0.068
K                1.112e-002
    K+           1.094e-002  6.814e-003   -1.961   -2.167   -0.206
    KSO4-        1.832e-004  1.370e-004   -3.737   -3.863   -0.126
Mg               5.379e-002
    Mg+2         4.682e-002  1.354e-002   -1.330   -1.868   -0.539
    MgSO4        5.844e-003  6.837e-003   -2.233   -2.165    0.068
    MgHCO3+      8.044e-004  6.015e-004   -3.095   -3.221   -0.126
    MgCO3        3.129e-004  3.661e-004   -3.505   -3.436    0.068
    MgOH+        4.520e-006  3.380e-006   -5.345   -5.471   -0.126
Na               4.934e-001
    Na+          4.860e-001  3.436e-001   -0.313   -0.464   -0.151
    NaSO4-       6.539e-003  4.890e-003   -2.184   -2.311   -0.126
    NaHCO3       6.304e-004  7.374e-004   -3.200   -3.132    0.068
    NaCO3-       2.410e-004  1.802e-004   -3.618   -3.744   -0.126
O(0)             0.000e+000
    O2           0.000e+000  0.000e+000   -53.365  -53.297   0.068
S                2.933e-002
    SO4-2        1.565e-002  2.840e-003   -1.805   -2.547   -0.741
    NaSO4-       6.539e-003  4.890e-003   -2.184   -2.311   -0.126
    MgSO4        5.844e-003  6.837e-003   -2.233   -2.165    0.068
    CaSO4        1.112e-003  1.300e-003   -2.954   -2.886    0.068
    KSO4-        1.832e-004  1.370e-004   -3.737   -3.863   -0.126
    HSO4-        2.325e-009  1.739e-009   -8.634   -8.760   -0.126
    SO3-2        1.478e-022  4.623e-023   -21.830  -22.335  -0.505
    HSO3-        6.474e-024  4.841e-024   -23.189  -23.315  -0.126
    H2SO3        1.806e-030  2.113e-030   -29.743  -29.675   0.068
    HS-          0.000e+000  0.000e+000   -42.403  -42.619  -0.216
    H2S          0.000e+000  0.000e+000   -43.899  -43.831   0.068
    S2O3-2       0.000e+000  0.000e+000   -48.530  -49.035  -0.505
    S-2          0.000e+000  0.000e+000   -52.706  -53.420  -0.714
    HS2O3-       0.000e+000  0.000e+000   -55.519  -55.645  -0.126
```

```
-----------------------------Saturation indices-------------------------------

Phase                SI log IAP   log KT

ANHYDRIT            -0.81    -5.19    -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
ARAGONIT             1.14    -7.20    -8.34   C1.000Ca1.000O3.000
BRUCITE             -1.79    14.51    16.30   Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)              -21.57   -53.72   -32.15   C1.000
C(G)               -139.17  -53.72    85.45   C1.000
CA(CR)              -99.50   -2.65    96.85   Ca1.000
CA(G)              -124.73   -2.65   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2             -8.98    13.73    22.71   Ca(OH)2
CALCITE              1.29    -7.20    -8.48   C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)            -18.96    13.74    32.70   Ca1.000O1.000
CH4                -42.59   -86.52   -43.93   C1.000H4.000
CL(G)              -41.89    -0.45    41.44   Cl1.000
CL2(G)             -46.89    -0.91    45.98   Cl2.000
CO(G)              -22.69   -37.33   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)              -2.79   -20.94   -18.15   C1.000O2.000
DOLOMITE             3.48   -13.61   -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
GYPSUM              -0.61    -5.21    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
H(G)               -43.81    -8.20    35.61   H1.000
H2(G)              -16.40   -16.40     0.00   H2.000
H2O(G)              -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)             -42.81   -84.51   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)             -14.94    -8.65     6.29   Cl1.000H1.000
K(CR)              -51.66    -2.17    49.49   K1.000
K(G)               -62.26    -2.17    60.09   K1.000
LIME,              -18.96    13.74    32.70   Ca1.000O1.000
NA(CR)             -46.35    -0.46    45.89   Na1.000
NA(G)              -59.84    -0.46    59.38   Na1.000
O(G)               -65.76    16.39    82.15   O1.000
O2(G)              -50.31    32.78    83.09   O2.000
PERICLAS            -7.06    14.52    21.58   Mg1.000O1.000
PORTLAN             -8.98    13.73    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1            -8.82    13.73    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
S(CR)              -32.27   -68.11   -35.84   S1.000
S(G)               -73.74   -68.11     5.63   S1.000
S2(G)              -78.51  -136.22   -57.71   S2.000
SO2(G)             -30.01   -35.33    -5.32   S1.000O2.000

-----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
-----------------------------------------

Reaction step 1.

Using solution 1.          IEW/Pure Water
```

Using pure phase assemblage 1.

----------Phase assemblage----------

Phase	SI	log IAP	log KT	Moles in assemblage Initial	Final	Delta
ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	0.000e+000		0.000e+000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	4.070e-002	9.449e-002	5.379e-002
C3ASH4	-6.75	64.12	70.87	0.000e+000		0.000e+000
Ca(OH)2	0.00	22.71	22.71	2.430e-001	1.609e-001	-8.210e-002
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	0.000e+000	8.079e-003	8.079e-003
CSH(0.1)	-5.85	-6.92	-1.07	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.2)	-5.22	-4.65	0.56	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.3)	-4.61	-2.38	2.23	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.4)	-4.02	-0.11	3.91	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.5)	-3.44	2.16	5.60	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.6)	-2.88	4.43	7.31	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.7)	-2.34	6.70	9.04	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.8)	-1.85	8.97	10.82	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.833)	-1.71	9.72	11.44	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.9)	-1.57	12.49	14.06	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.0)	-1.00	13.51	14.51	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.1)	-0.63	14.35	14.98	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.2)	-0.39	15.05	15.44	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.3)	-0.23	15.64	15.87	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.4)	-0.13	16.14	16.27	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.5)	-0.07	16.58	16.64	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.6)	-0.02	16.96	16.99	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.7)	-0.00	17.30	17.30	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.8)	0.00	17.60	17.60	5.360e-001	5.360e-001	-8.159e-007
ETTRINGI	0.00	58.24	58.24	0.000e+000	1.195e-002	1.195e-002
FRIEDEL_	0.00	70.13	70.13	0.000e+000	3.182e-002	3.182e-002
GEHL_HY	-8.95	41.37	50.32	0.000e+000		0.000e+000
GYPSUM	-0.36	-4.96	-4.60	0.000e+000		0.000e+000
HYDROGR	-4.07	73.30	77.37	2.340e-002		-2.340e-002
HYDROTAL	-3.44	70.34	73.78	0.000e+000		0.000e+000
MONOSULF	-5.53	68.30	73.83	2.037e-002		-2.037e-002
SEPIOLIT	-20.34	10.00	30.35	0.000e+000		0.000e+000

----------Solution composition----------

Elements	Molality	Moles
Al	1.372e-008	1.364e-008
C	1.128e-005	1.121e-005
Ca	3.728e-002	3.707e-002
Cl	5.045e-001	5.017e-001
K	1.118e-002	1.112e-002
Mg	2.674e-008	2.659e-008
Na	4.962e-001	4.934e-001
S	1.392e-002	1.385e-002
Si	4.562e-007	4.536e-007

----------Description of solution----------

pH = 12.432 Charge balance
pe = 5.440 Adjusted to redox equilibrium
Activity of water = 0.981
Ionic strength = 6.044e-001
Mass of water (kg) = 9.944e-001
Total alkalinity (eq/kg) = 4.956e-002
Total CO2 (mol/kg) = 1.128e-005
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = -1.771e-010
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = -0.00
Iterations = 42
Total H = 1.104448e+002
Total O = 5.530245e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	4.298e-002	2.656e-002	-1.367	-1.576	-0.209
H+	4.872e-013	3.695e-013	-12.312	-12.432	-0.120
H2O	5.551e+001	9.813e-001	1.744	-0.008	0.000
Al	1.372e-008				
Al(OH)4-	1.372e-008	1.016e-008	-7.863	-7.993	-0.130
Al(OH)3	3.329e-014	3.826e-014	-13.478	-13.417	0.060
Al(OH)2+	1.545e-020	1.145e-020	-19.811	-19.941	-0.130
AlOH+2	1.846e-027	5.552e-028	-26.734	-27.256	-0.522
Al+3	2.461e-034	2.043e-035	-33.609	-34.690	-1.081
AlSO4+	4.490e-035	3.325e-035	-34.348	-34.478	-0.130
Al(SO4)2-	5.542e-036	4.105e-036	-35.256	-35.387	-0.130
C	1.128e-005				
CaCO3	5.239e-006	6.021e-006	-5.281	-5.220	0.060
NaCO3-	3.937e-006	2.916e-006	-5.405	-5.535	-0.130
CO3-2	2.093e-006	4.518e-007	-5.679	-6.345	-0.666
HCO3-	5.243e-009	3.574e-009	-8.280	-8.447	-0.166
NaHCO3	6.080e-010	6.988e-010	-9.216	-9.156	0.060
CaHCO3+	4.700e-010	3.203e-010	-9.328	-9.494	-0.166
MgCO3	1.063e-012	1.221e-012	-11.974	-11.913	0.060
CO2	2.624e-015	3.016e-015	-14.581	-14.521	0.060
MgHCO3+	1.587e-016	1.175e-016	-15.799	-15.930	-0.130
CH4	0.000e+000	0.000e+000	-133.152	-133.092	0.060
Ca	3.728e-002				

Ca+2	2.869e-002	7.272e-003	-1.542	-2.138	-0.596
CaOH+	6.580e-003	4.873e-003	-2.182	-2.312	-0.130
CaSO4	2.003e-003	2.302e-003	-2.698	-2.638	0.060
CaCO3	5.239e-006	6.021e-006	-5.281	-5.220	0.060
CaHCO3+	4.700e-010	3.203e-010	-9.328	-9.494	-0.166
Cl	5.045e-001				
Cl-	5.045e-001	3.183e-001	-0.297	-0.497	-0.200
ClO-	2.719e-023	2.014e-023	-22.566	-22.696	-0.130
ClOH	1.703e-028	1.957e-028	-27.769	-27.708	0.060
ClO2-	1.693e-037	1.254e-037	-36.771	-36.902	-0.130
ClO3-	3.979e-040	2.947e-040	-39.400	-39.531	-0.130
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-45.213	-45.343	-0.130
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-47.434	-47.373	0.060
H(0)	2.219e-039				
H2	1.110e-039	1.275e-039	-38.955	-38.894	0.060
K	1.118e-002				
K+	1.108e-002	6.989e-003	-1.956	-2.156	-0.200
KSO4-	1.038e-004	7.690e-005	-3.984	-4.114	-0.130
Mg	2.674e-008				
MgOH+	1.630e-008	1.207e-008	-7.788	-7.918	-0.130
Mg+2	9.762e-009	2.828e-009	-8.010	-8.548	-0.538
MgSO4	6.801e-010	7.817e-010	-9.167	-9.107	0.060
MgCO3	1.063e-012	1.221e-012	-11.974	-11.913	0.060
MgHCO3+	1.587e-016	1.175e-016	-15.799	-15.930	-0.130
Na	4.962e-001				
Na+	4.925e-001	3.482e-001	-0.308	-0.458	-0.151
NaSO4-	3.662e-003	2.712e-003	-2.436	-2.567	-0.130
NaCO3-	3.937e-006	2.916e-006	-5.405	-5.535	-0.130
NaHCO3	6.080e-010	6.988e-010	-9.216	-9.156	0.060
O(0)	4.296e-015				
O2	2.148e-015	2.468e-015	-14.668	-14.608	0.060
S	1.392e-002				
SO4-2	8.156e-003	1.554e-003	-2.089	-2.809	-0.720
NaSO4-	3.662e-003	2.712e-003	-2.436	-2.567	-0.130
CaSO4	2.003e-003	2.302e-003	-2.698	-2.638	0.060
KSO4-	1.038e-004	7.690e-005	-3.984	-4.114	-0.130
MgSO4	6.801e-010	7.817e-010	-9.167	-9.107	0.060
HSO4-	7.524e-014	5.572e-014	-13.124	-13.254	-0.130
AlSO4+	4.490e-035	3.325e-035	-34.348	-34.478	-0.130
Al(SO4)2-	5.542e-036	4.105e-036	-35.256	-35.387	-0.130
SO3-2	0.000e+000	0.000e+000	-41.420	-41.942	-0.522
HSO3-	0.000e+000	0.000e+000	-47.024	-47.154	-0.130
H2SO3	0.000e+000	0.000e+000	-57.807	-57.746	0.060
HS-	0.000e+000	0.000e+000	-124.284	-124.493	-0.209
H2S	0.000e+000	0.000e+000	-129.998	-129.937	0.060
S-2	0.000e+000	0.000e+000	-130.366	-131.061	-0.696
S2O3-2	0.000e+000	0.000e+000	-134.882	-135.403	-0.522
HS2O3-	0.000e+000	0.000e+000	-146.115	-146.246	-0.130
Si	4.562e-007				
H3SiO4-	3.476e-007	2.574e-007	-6.459	-6.589	-0.130
H2SiO4-2	1.081e-007	3.251e-008	-6.966	-7.488	-0.522
H4SiO4	5.343e-010	6.141e-010	-9.272	-9.212	0.060
H4Si2O7-2	9.356e-013	2.815e-013	-12.029	-12.551	-0.522
H5Si2O7-	1.116e-014	8.262e-015	-13.953	-14.083	-0.130
H5Si3O10-3	2.244e-017	1.504e-018	-16.649	-17.823	-1.174
H3Si3O9-3	1.816e-018	1.217e-019	-17.741	-18.915	-1.174
H4Si4O12-4	5.023e-022	4.114e-024	-21.299	-23.386	-2.087
H5Si4O12-3	1.434e-024	9.614e-026	-23.843	-25.017	-1.174

----------Saturation indices----------

Phase	SI	log IAP	log KT	
AFWILLIT	-10.25	49.74	59.99	Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ALBITE	-16.56	-13.02	3.54	Na1.000Al1.000Si3.000O8.000
ALUNITE	-38.91	-37.30	1.61	Al3.000S2.000K1.000H6.000O14.000
ANALCIM1	-10.76	-3.83	6.93	Si2.000Na1.000Al1.000H2.000O7.000
ANALCIM2	-134.90	-88.77	46.13	Si25.800Na10.200Al10.200H24.000O84.000
ANHYDRIT	-0.57	-4.95	-4.38	Ca1.000S1.000O4.000
ANORTHHE	-17.18	9.52	26.70	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR	-16.85	9.52	26.37	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	C1.000Ca1.000O3.000
BEID-CA	-29.51	-23.96	5.55	Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-K	-29.58	-24.32	5.26	K0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG	-30.53	-25.02	5.51	Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-NA	-29.36	-23.76	5.60	Na0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)	-70.52	-102.67	-32.15	C1.000
C(G)	-188.12	-102.67	85.45	C1.000
C2AH8	-10.08	50.56	60.64	Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4	-6.75	64.12	70.87	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1	-7.29	64.12	71.41	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13	-6.04	95.96	102.00	Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19	-6.07	95.91	101.98	Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)	-109.87	-13.02	96.85	Ca1.000
CA(G)	-135.10	-13.02	122.08	Ca1.000
Ca(OH)2	0.00	22.71	22.71	Ca(OH)2
CAH10	-12.59	27.83	40.42	Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)	-9.98	22.72	32.70	Ca1.000O1.000
CH4	-130.23	-174.16	-43.93	C1.000H4.000
CHABAZ_a	-157.91	-158.01	-0.10	
Si28.600Na4.900Al7.400K0.900Ca0.800H72.000O108.000				
CHABAZ_d	-150.97	-143.73	7.24	
Si27.900Na3.700Al8.100K2.000Ca1.200H72.000O108.000				
CHALCEDO	-5.71	-9.20	-3.49	Si1.000O2.000
CL(G)	-36.50	4.94	41.44	Cl1.000
CL2(G)	-36.09	9.89	45.98	Cl2.000

```
CLINOC40          -73.94   472.89   546.83   Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
CLINOP_a         -161.53 -175.29   -13.76
   Si29.200Na1.700Al6.800K2.300Ca1.400H52.000O98.000
CLINOP_d         -160.17 -174.45   -14.28
   Si29.200Na0.400Al6.800K0.800Ca2.800H52.000O98.000
CLINOZOI          -17.98    25.63    43.61   Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CO(G)             -52.30   -66.94   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)            -13.05   -31.20   -18.15   C1.000O2.000
CSH(0.1)           -5.85    -6.92    -1.07   Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)           -5.22    -4.65     0.56   Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)           -4.61    -2.38     2.23   Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)           -4.02    -0.11     3.91   Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)           -3.44     2.16     5.60   Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)           -2.88     4.43     7.31   Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)           -2.34     6.70     9.04   Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)           -1.85     8.97    10.82   Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)         -1.71     9.72    11.44   Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)           -1.57    12.49    14.06   Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)           -1.00    13.51    14.51   Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)           -0.63    14.35    14.98   Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
CSH(1.2)           -0.39    15.05    15.44   Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)           -0.23    15.64    15.87   Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)           -0.13    16.14    16.27   Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)           -0.07    16.58    16.64   Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)           -0.02    16.96    16.99   Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)           -0.00    17.30    17.30   Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)            0.00    17.60    17.60   Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833            -1.71     9.72    11.44   Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
DOLOMITE           -6.29   -23.38   -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
EPISTILB          -30.96   -27.30     3.66   Si6.000Ca1.000Al2.000H10.000O21.000
ERIONI_a         -153.55 -151.68     1.87
   Si28.200Na3.400Al7.800K2.800Ca0.800H60.000O102.000
ERIONI_d         -148.46 -143.98     4.48
   Si27.800Na1.200Al8.200K3.000Ca2.000H60.000O102.000
ETTRINGI            0.00    58.24    58.24   Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FOSHAGIT           -2.60    63.27    65.87   Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
FRIEDEL_            0.00    70.13    70.13   Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GEHL_HY            -8.95    41.37    50.32   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1           -7.79    41.37    49.16   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT          -14.85    41.43    56.28   Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE           -5.17     2.58     7.76   Al1.000H3.000O3.000
GROSSUL           -12.94    45.76    58.70   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1           -6.11    45.76    51.87   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM             -0.36    -4.96    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE           -5.03    17.83    22.86   Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)              -53.48   -17.87    35.61   H1.000
H2(G)             -35.74   -35.74     0.00   H2.000
H2O(G)             -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)           -128.92 -170.62   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)            -19.22   -12.93     6.29   Cl1.000H1.000
HEULANDI         -149.43 -145.87     3.56
   Si28.000Na1.000Al8.000K0.400Ca3.300H52.000O98.000
HILLEBRA           -0.47    36.23    36.70   Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR            -4.07    73.30    77.37   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1           -8.29    73.30    81.58   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL           -3.44    70.34    73.78   Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
ILLITE            -24.95   -15.98     8.97   Mg0.250Al2.300Si3.500K0.600H2.000O12.000
JENNITE             2.60   149.20   146.60   Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
K(CR)             -57.09    -7.60    49.49   K1.000
K(G)              -67.69    -7.60    60.09   K1.000
K-FELDSP          -14.48   -14.72    -0.23   Si3.000K1.000Al1.000O8.000
KAOLINIT          -22.30   -59.22   -36.92   Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE            -5.64    73.30    78.94   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONTI          -22.54    -8.91    13.63   Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LEUCITE           -11.68    -5.52     6.16   Si2.000K1.000Al1.000O6.000
LIME,              -9.98    22.72    32.70   Ca1.000O1.000
MG2SI2O6           -9.03    14.23    23.26   Mg2.000Si2.000O6.000
MICROCLI          -16.50   -14.72     1.78   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
MONOSULF           -5.53    68.30    73.83   Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA           -25.89   -23.33     2.56   Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-K            -25.75   -23.68     2.07   Mg0.330Al1.670Si4.000K0.330H2.000O12.000
MONT-MG           -26.85   -24.38     2.47   Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
MONT-NA           -25.63   -23.12     2.51   Mg0.330Al1.670Si4.000Na0.330H2.000O12.000
MORDENIT          -168.69 -192.01   -23.32
   Si30.000Na2.100Al6.000K0.900Ca1.500H44.000O94.000
MUSCOVIT          -24.14    -9.54    14.60   Al3.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
NA(CR)            -51.79    -5.90    45.89   Na1.000
NA(G)             -65.28    -5.90    59.38   Na1.000
O(G)              -46.41    35.74    82.15   O1.000
O2(G)             -11.62    71.47    83.09   O2.000
OKENITE            -6.01     4.31    10.32   Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
ORTHOCLA          -15.58   -14.72     0.86   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
PARAGONI          -26.71    -7.84    18.87   Na1.000Al3.000Si3.000H2.000O12.000
PERICLAS           -5.27    16.31    21.58   Mg1.000O1.000
PHILLI_a         -130.59 -119.60    10.99
   Si24.400Na3.200Al7.600K2.800Ca0.800H48.000O88.000
PHILLI_d         -130.61 -123.59     7.02
   Si24.600Na1.400Al7.400K1.200Ca2.400H48.000O88.000
PHLOGOPI           -2.13    34.20    36.33   Mg3.000Al1.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
PLOMBIER           -5.42    58.33    63.75   Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN             0.00    22.71    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1            0.16    22.71    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
PYROPHYL          -32.06   -31.60     0.46   Si4.000Al2.000H2.000O12.000
QUARTZ             -5.42    -9.20    -3.78   Si1.000O2.000
RIVERSID          -10.59    58.39    68.98   Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)             -99.03 -134.87   -35.84   S1.000
S(G)             -140.50 -134.87     5.63   S1.000
S2(G)            -212.04 -269.75   -57.71   S2.000
```

```
SAPON-CA          -6.45    19.77    26.23   Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-K           -6.53    19.42    25.94   Mg3.000Al0.330Si3.670K0.330H2.000O12.000
SAPON-MG          -7.47    18.72    26.19   Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SAPON-NA          -6.31    19.98    26.28   Mg3.000Al0.330Si3.670Na0.330H2.000O12.000
SCOLECIT         -13.11     0.30    13.41   Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000
SEP              -13.79   -51.00   -37.21   Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT         -20.34    10.00    30.35   Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)          -143.60   -80.67    62.93   Si1.000
SI(G)           -214.64   -80.67   133.97   Si1.000
SIL               -6.18    -9.20    -3.02   Si1.000H2.000O3.000
SIL(AM)1          -6.49    -9.20    -2.71   Si1.000O2.000
SILI(AM)          -6.56    -9.20    -2.64   Si1.000O2.000
SILICA           -24.60   -27.07    -2.47   Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)          -6.56    -9.20    -2.64   Si1.000O2.000
SIO2(QUA          -5.20    -9.20    -4.00   Si1.000O2.000
SO2(G)           -58.08   -63.40    -5.32   S1.000O2.000
STILBITE         -65.79   -49.27    16.52   Si13.000Ca2.000Al5.000Na1.000H28.000O50.000
TALC              -8.94    12.13    21.07   Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR          -7.14    58.37    65.51   Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,           -16.82    -4.01    12.81   Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLIT          -4.29    53.41    57.70   Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
WAIRAKIT         -26.90    -8.89    18.01   Si4.000Ca1.000Al2.000H4.000O14.000
XONOTLIT         -10.60    81.13    91.73   Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA         -31.37   -27.30     4.07   Si6.000Ca1.000Al2.000H8.000O20.000

------------------
End of simulation.
------------------

------------------------------------
Reading input data for simulation 2.
------------------------------------

-----------
End of run.
-----------
```

リスト9-7 人工海水とOPCペーストの反応における化学平衡計算（液固比=100，C-S-HにAl取り込み想定なし）

```
Input file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥3. 海水系OPCに関する検討¥2. PHREEQによる解析¥2.
計算結果¥OPC-模擬海水¥080326_Calc501-sepio.pqi
Output file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥3. 海水系OPCに関する検討¥2. PHREEQによる解析¥2.
計算結果¥OPC-模擬海水¥080326_Calc501-sepio.pqo
Database file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
  END
-----------------------------------
Reading input data for simulation 1.
-----------------------------------

DATABASE C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb
Title OPC-模擬海水バッチ式試験（Ref 模擬海水-L/S=100）-Calc.No501
PHASES
CSH(0.1)
Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
log_K -1.071
CSH(0.2)
Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
log_K 0.565
CSH(0.3)
Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
log_K 2.227
CSH(0.4)
Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
log_K 3.907
CSH(0.5)
Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
log_K 5.601
CSH(0.6)
Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
log_K 7.312
CSH(0.7)
Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
log_K 9.045
CSH(0.8)
Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
log_K 10.819
CSH(0.9)
Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
log_K 14.061
CSH(1.0)
Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
log_K 14.514
CSH(1.1)
Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
log_K 14.983
CSH(1.2)
Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
log_K 15.439
CSH(1.3)
Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
log_K 15.870
CSH(1.4)
Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
log_K 16.272
CSH(1.5)
Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
log_K 16.643
CSH(1.6)
 Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
log_K 16.987
CSH(1.7)
Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
log_K 17.304
CSH(1.8)
Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
log_K 17.597
Ca(OH)2
Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
log_k 22.710
SiO2(am)
Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
log_K -2.639
CSH(0.833)
Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
log_K 11.436
SOLUTION 1    IEW/Pure Water
                    units      mol/kgw
                pH          8.2
                pe          0.0
                density 1.000
                temp        25.0
                Ca    0.01035
                S    0.02933
```

```
                    Mg    0.05379
                    Na    0.4934
                    K     0.01112
                    Cl    0.5653
                    C     0.5653      charge
EQUILIBRIUM_PHASES 1
          CSH(0.1) 0.0 0.0
          CSH(0.2) 0.0 0.0
          CSH(0.3) 0.0 0.0
          CSH(0.4) 0.0 0.0
          CSH(0.5) 0.0 0.0
          CSH(0.6) 0.0 0.0
          CSH(0.7) 0.0 0.0
          CSH(0.8) 0.0 0.0
          CSH(0.9) 0.0 0.0
          CSH(1.0) 0.0 0.0
          CSH(1.1) 0.0 0.0
          CSH(1.2) 0.0 0.0
          CSH(1.3) 0.0 0.0
          CSH(1.4) 0.0 0.0
          CSH(1.5) 0.0 0.0
          CSH(1.6) 0.0 0.0
          CSH(1.7) 0.0 0.0
          CSH(1.8) 0.0 0.0536
          CSH(0.833) 0.0 0.0
          Ca(OH)2 0.0 0.0243
          ETTRINGI 0.0 0.0
          MONOSULF 0.0 0.002037
          HYDROGR 0.0 0.00234
          Brucite 0.0 0.00407
          FRIEDEL_ 0.0 0.0
          SEPIOLIT 0.0 0.0
          CALCITE 0.0 0.0
          ARAGONIT 0.0 0.0
          GEHL_HY 0.0 0.0
          HYDROTAL 0.0 0.0
          C3ASH4 0.0 0.0
          GYPSUM 0.0 0.0
          END
-----
TITLE
-----

 OPC-模擬海水バッチ式試験（Ref 模擬海水-L/S=100）-Calc.No501

-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------
```

```
Initial solution 1.          IEW/Pure Water

-----------------------------Solution composition-----------------------------

                Elements              Molality          Moles

                C                    8.090e-003    8.090e-003    Charge balance
                Ca                   1.035e-002    1.035e-002
                Cl                   5.653e-001    5.653e-001
                K                    1.112e-002    1.112e-002
                Mg                   5.379e-002    5.379e-002
                Na                   4.934e-001    4.934e-001
                S                    2.933e-002    2.933e-002

----------------------------Description of solution----------------------------

                                                pH   =     8.200
                                                pe   =     0.000
                                  Activity of water   =     0.980
                                     Ionic strength   =   6.811e-001
                                  Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                        Total alkalinity (eq/kg)   = -7.340e-003
                                 Total CO2 (mol/kg)   =   8.090e-003
                                Temperature (deg C)   =    25.000
                              Electrical balance (eq)   = -8.727e-014
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)   =   -0.00
                                            Iterations   =      7
                                                Total H   = 1.110197e+002
                                                Total O   = 5.564777e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                    Log          Log          Log
Species                Molality    Activity    Molality    Activity       Gamma

    OH-                2.553e-006   1.554e-006    -5.593      -5.809      -0.216
    H+                 8.361e-009   6.310e-009    -8.078      -8.200      -0.122
    H2O                5.551e+001   9.804e-001     1.744      -0.009       0.000
C                   8.090e-003
    HCO3-              5.662e-003   3.822e-003    -2.247      -2.418      -0.171
    MgHCO3+            8.044e-004   6.015e-004    -3.095      -3.221      -0.126
    NaHCO3             6.304e-004   7.374e-004    -3.200      -3.132       0.068
    MgCO3              3.129e-004   3.661e-004    -3.505      -3.436       0.068
    NaCO3-             2.410e-004   1.802e-004    -3.618      -3.744      -0.126
    CaHCO3+            1.569e-004   1.059e-004    -3.805      -3.975      -0.171
    CO3-2              1.362e-004   2.830e-005    -3.866      -4.548      -0.683
    CaCO3              9.964e-005   1.166e-004    -4.002      -3.933       0.068
    CO2                4.712e-005   5.512e-005    -4.327      -4.259       0.068
    CH4                0.000e+000   0.000e+000    -45.520     -45.451      0.068
```

```
Ca                  1.035e-002
    Ca+2            8.982e-003  2.248e-003   -2.047   -2.648   -0.602
    CaSO4           1.112e-003  1.300e-003   -2.954   -2.886    0.068
    CaHCO3+         1.569e-004  1.059e-004   -3.805   -3.975   -0.171
    CaCO3           9.964e-005  1.166e-004   -4.002   -3.933    0.068
    CaOH+           1.179e-007  8.813e-008   -6.929   -7.055   -0.126
Cl                  5.653e-001
    Cl-             5.653e-001  3.522e-001   -0.248   -0.453   -0.206
    ClO-            0.000e+000  0.000e+000   -41.871  -41.997   -0.126
    ClOH            0.000e+000  0.000e+000   -42.845  -42.777    0.068
    ClO2-           0.000e+000  0.000e+000   -75.421  -75.547   -0.126
    ClHO2           0.000e+000  0.000e+000   -81.855  -81.786    0.068
    ClO3-           0.000e+000  0.000e+000   -97.395  -97.521   -0.126
    ClO4-           0.000e+000  0.000e+000  -122.552 -122.679   -0.126
H(0)                4.819e-020
    H2              2.409e-020  2.818e-020   -19.618  -19.550    0.068
K                   1.112e-002
    K+              1.094e-002  6.814e-003   -1.961   -2.167   -0.206
    KSO4-           1.832e-004  1.370e-004   -3.737   -3.863   -0.126
Mg                  5.379e-002
    Mg+2            4.682e-002  1.354e-002   -1.330   -1.868   -0.539
    MgSO4           5.844e-003  6.837e-003   -2.233   -2.165    0.068
    MgHCO3+         8.044e-004  6.015e-004   -3.095   -3.221   -0.126
    MgCO3           3.129e-004  3.661e-004   -3.505   -3.436    0.068
    MgOH+           4.520e-006  3.380e-006   -5.345   -5.471   -0.126
Na                  4.934e-001
    Na+             4.860e-001  3.436e-001   -0.313   -0.464   -0.151
    NaSO4-          6.539e-003  4.890e-003   -2.184   -2.311   -0.126
    NaHCO3          6.304e-004  7.374e-004   -3.200   -3.132    0.068
    NaCO3-          2.410e-004  1.802e-004   -3.618   -3.744   -0.126
O(0)                0.000e+000
    O2              0.000e+000  0.000e+000   -53.365  -53.297    0.068
S                   2.933e-002
    SO4-2           1.565e-002  2.840e-003   -1.805   -2.547   -0.741
    NaSO4-          6.539e-003  4.890e-003   -2.184   -2.311   -0.126
    MgSO4           5.844e-003  6.837e-003   -2.233   -2.165    0.068
    CaSO4           1.112e-003  1.300e-003   -2.954   -2.886    0.068
    KSO4-           1.832e-004  1.370e-004   -3.737   -3.863   -0.126
    HSO4-           2.325e-009  1.739e-009   -8.634   -8.760   -0.126
    SO3-2           1.478e-022  4.623e-023   -21.830  -22.335   -0.505
    HSO3-           6.474e-024  4.841e-024   -23.189  -23.315   -0.126
    H2SO3           1.806e-030  2.113e-030   -29.743  -29.675    0.068
    HS-             0.000e+000  0.000e+000   -42.403  -42.619   -0.216
    H2S             0.000e+000  0.000e+000   -43.899  -43.831    0.068
    S2O3-2          0.000e+000  0.000e+000   -48.530  -49.035   -0.505
    S-2             0.000e+000  0.000e+000   -52.706  -53.420   -0.714
    HS2O3-          0.000e+000  0.000e+000   -55.519  -55.645   -0.126

-----------------------------Saturation indices-----------------------------
```

```
Phase                 SI log IAP   log KT

ANHYDRIT            -0.81    -5.19    -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
ARAGONIT             1.14    -7.20    -8.34   C1.000Ca1.000O3.000
BRUCITE             -1.79    14.51    16.30   Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)              -21.57   -53.72   -32.15   C1.000
C(G)               -139.17  -53.72    85.45   C1.000
CA(CR)              -99.50    -2.65    96.85   Ca1.000
CA(G)              -124.73    -2.65   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2             -8.98    13.73    22.71   Ca(OH)2
CALCITE              1.29    -7.20    -8.48   C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)             -18.96    13.74    32.70   Ca1.000O1.000
CH4                 -42.59   -86.52   -43.93   C1.000H4.000
CL(G)               -41.89    -0.45    41.44   Cl1.000
CL2(G)              -46.89    -0.91    45.98   Cl2.000
CO(G)               -22.69   -37.33   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)               -2.79   -20.94   -18.15   C1.000O2.000
DOLOMITE              3.48   -13.61   -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
GYPSUM               -0.61    -5.21    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
H(G)                -43.81    -8.20    35.61   H1.000
H2(G)               -16.40   -16.40     0.00   H2.000
H2O(G)               -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)              -42.81   -84.51   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)              -14.94    -8.65     6.29   Cl1.000H1.000
K(CR)               -51.66    -2.17    49.49   K1.000
K(G)                -62.26    -2.17    60.09   K1.000
LIME,               -18.96    13.74    32.70   Ca1.000O1.000
NA(CR)              -46.35    -0.46    45.89   Na1.000
NA(G)               -59.84    -0.46    59.38   Na1.000
O(G)                -65.76    16.39    82.15   O1.000
O2(G)               -50.31    32.78    83.09   O2.000
PERICLAS             -7.06    14.52    21.58   Mg1.000O1.000
PORTLAN              -8.98    13.73    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1             -8.82    13.73    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
S(CR)               -32.27   -68.11   -35.84   S1.000
S(G)                -73.74   -68.11     5.63   S1.000
S2(G)               -78.51  -136.22   -57.71   S2.000
SO2(G)              -30.01   -35.33    -5.32   S1.000O2.000

-----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
-----------------------------------------

Reaction step 1.

Using solution 1.          IEW/Pure Water
Using pure phase assemblage 1.
```

----------Phase assemblage----------

Phase	SI	log IAP	log KT	Moles in assemblage Initial	Final	Delta
ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	0.000e+000		0.000e+000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	4.070e-003	4.008e-002	3.601e-002
C3ASH4	-7.27	63.60	70.87	0.000e+000		0.000e+000
Ca(OH)2	-2.45	20.26	22.71	2.430e-002		-2.430e-002
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	0.000e+000	8.081e-003	8.081e-003
CSH(0.1)	-2.71	-3.78	-1.07	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.2)	-2.32	-1.75	0.56	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.3)	-1.95	0.27	2.23	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.4)	-1.61	2.30	3.91	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.5)	-1.28	4.32	5.60	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.6)	-0.96	6.35	7.31	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.7)	-0.67	8.38	9.04	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.8)	-0.42	10.40	10.82	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.833)	-0.36	11.07	11.44	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.9)	-0.25	13.81	14.06	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.0)	-0.06	14.45	14.51	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.1)	-0.00	14.98	14.98	0.000e+000	3.230e-002	3.230e-002
CSH(1.2)	-0.01	15.42	15.44	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.3)	-0.07	15.80	15.87	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.4)	-0.16	16.12	16.27	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.5)	-0.26	16.39	16.64	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.6)	-0.36	16.63	16.99	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.7)	-0.46	16.85	17.30	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.8)	-0.56	17.03	17.60	5.360e-002		-5.360e-002
ETTRINGI	-2.84	55.41	58.24	0.000e+000		0.000e+000
FRIEDEL_	-3.60	66.53	70.13	0.000e+000		0.000e+000
GEHL_HY	-7.02	43.30	50.32	0.000e+000		0.000e+000
GYPSUM	0.00	-4.60	-4.60	0.000e+000	1.005e-002	1.005e-002
HYDROGR	-7.98	69.39	77.37	2.340e-003		-2.340e-003
HYDROTAL	0.00	73.78	73.78	0.000e+000	4.377e-003	4.377e-003
MONOSULF	-9.08	64.75	73.83	2.037e-003		-2.037e-003
SEPIOLIT	-0.00	30.35	30.35	0.000e+000	6.659e-005	6.659e-005

----------Solution composition----------

Elements	Molality	Moles
Al	3.314e-008	3.313e-008
C	8.904e-006	8.902e-006
Ca	5.300e-002	5.299e-002
Cl	5.654e-001	5.653e-001
K	1.112e-002	1.112e-002
Mg	5.349e-006	5.347e-006
Na	4.935e-001	4.934e-001
S	2.132e-002	2.132e-002
Si	4.116e-005	4.115e-005

----------Description of solution----------

pH = 11.098 Charge balance
pe = 6.774 Adjusted to redox equilibrium
Activity of water = 0.981
Ionic strength = 6.556e-001
Mass of water (kg) = 9.997e-001
Total alkalinity (eq/kg) = 2.553e-003
Total CO2 (mol/kg) = 8.904e-006
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = 7.639e-012
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = 0.00
Iterations = 59
Total H = 1.109873e+002
Total O = 5.558031e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	2.010e-003	1.229e-003	-2.697	-2.910	-0.214
H+	1.055e-011	7.978e-012	-10.977	-11.098	-0.122
H2O	5.551e+001	9.807e-001	1.744	-0.008	0.000
Al	3.314e-008				
Al(OH)4-	3.314e-008	2.470e-008	-7.480	-7.607	-0.128
Al(OH)3	1.728e-012	2.009e-012	-11.763	-11.697	0.066
Al(OH)2+	1.742e-017	1.298e-017	-16.759	-16.887	-0.128
AlOH+2	4.410e-023	1.360e-023	-22.356	-22.866	-0.511
Al+3	1.343e-028	1.081e-029	-27.872	-28.966	-1.094
AlSO4+	3.265e-029	2.433e-029	-28.486	-28.614	-0.128
Al(SO4)2-	5.574e-030	4.154e-030	-29.254	-29.382	-0.128
C	8.904e-006				
CaCO3	5.178e-006	6.021e-006	-5.286	-5.220	0.066
NaCO3-	2.342e-006	1.746e-006	-5.630	-5.758	-0.128
CO3-2	1.297e-006	2.727e-007	-5.887	-6.564	-0.677
HCO3-	6.879e-008	4.658e-008	-7.162	-7.332	-0.169
CaHCO3+	1.021e-008	6.916e-009	-7.991	-8.160	-0.169
NaHCO3	7.767e-009	9.033e-009	-8.110	-8.044	0.066
MgCO3	2.959e-010	3.441e-010	-9.529	-9.463	0.066
MgHCO3+	9.591e-013	7.148e-013	-12.018	-12.146	-0.128
CO2	7.302e-013	8.491e-013	-12.137	-12.071	0.066
CH4	0.000e+000	0.000e+000	-130.709	-130.644	0.066
Ca	5.300e-002				
Ca+2	4.796e-002	1.205e-002	-1.319	-1.919	-0.600
CaSO4	4.534e-003	5.273e-003	-2.344	-2.278	0.066

CaOH+	5.014e-004	3.737e-004	-3.300	-3.427	-0.128
CaCO3	5.178e-006	6.021e-006	-5.286	-5.220	0.066
CaHCO3+	1.021e-008	6.916e-009	-7.991	-8.160	-0.169
Cl	5.654e-001				
Cl-	5.654e-001	3.537e-001	-0.248	-0.451	-0.204
ClO-	3.004e-023	2.239e-023	-22.522	-22.650	-0.128
ClOH	4.039e-027	4.698e-027	-26.394	-26.328	0.066
ClO2-	1.871e-037	1.395e-037	-36.728	-36.856	-0.128
ClO3-	4.401e-040	3.280e-040	-39.356	-39.484	-0.128
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-45.169	-45.297	-0.128
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-46.058	-45.993	0.066
H(0)	2.191e-039				
H2	1.095e-039	1.274e-039	-38.960	-38.895	0.066
K	1.112e-002				
K+	1.098e-002	6.869e-003	-1.959	-2.163	-0.204
KSO4-	1.402e-004	1.045e-004	-3.853	-3.981	-0.128
Mg	5.349e-006				
Mg+2	4.565e-006	1.320e-006	-5.341	-5.879	-0.539
MgSO4	4.337e-007	5.044e-007	-6.363	-6.297	0.066
MgOH+	3.499e-007	2.607e-007	-6.456	-6.584	-0.128
MgCO3	2.959e-010	3.441e-010	-9.529	-9.463	0.066
MgHCO3+	9.591e-013	7.148e-013	-12.018	-12.146	-0.128
Na	4.935e-001				
Na+	4.885e-001	3.453e-001	-0.311	-0.462	-0.151
NaSO4-	4.990e-003	3.719e-003	-2.302	-2.430	-0.128
NaCO3-	2.342e-006	1.746e-006	-5.630	-5.758	-0.128
NaHCO3	7.767e-009	9.033e-009	-8.110	-8.044	0.066
O(0)	4.249e-015				
O2	2.125e-015	2.471e-015	-14.673	-14.607	0.066
S	2.132e-002				
SO4-2	1.166e-002	2.149e-003	-1.933	-2.668	-0.734
NaSO4-	4.990e-003	3.719e-003	-2.302	-2.430	-0.128
CaSO4	4.534e-003	5.273e-003	-2.344	-2.278	0.066
KSO4-	1.402e-004	1.045e-004	-3.853	-3.981	-0.128
MgSO4	4.337e-007	5.044e-007	-6.363	-6.297	0.066
HSO4-	2.232e-012	1.663e-012	-11.651	-11.779	-0.128
AlSO4+	3.265e-029	2.433e-029	-28.486	-28.614	-0.128
Al(SO4)2-	5.574e-030	4.154e-030	-29.254	-29.382	-0.128
SO3-2	0.000e+000	0.000e+000	-41.290	-41.801	-0.511
HSO3-	0.000e+000	0.000e+000	-45.552	-45.679	-0.128
H2SO3	0.000e+000	0.000e+000	-55.003	-54.937	0.066
HS-	0.000e+000	0.000e+000	-122.805	-123.019	-0.214
H2S	0.000e+000	0.000e+000	-127.194	-127.129	0.066
S-2	0.000e+000	0.000e+000	-130.213	-130.921	-0.708
S2O3-2	0.000e+000	0.000e+000	-131.943	-132.454	-0.511
HS2O3-	0.000e+000	0.000e+000	-141.834	-141.962	-0.128
Si	4.116e-005				
H3SiO4-	3.928e-005	2.927e-005	-4.406	-4.534	-0.128
H4SiO4	1.296e-006	1.508e-006	-5.887	-5.822	0.066
H2SiO4-2	5.551e-007	1.712e-007	-6.256	-6.766	-0.511
H4Si2O7-2	1.181e-008	3.642e-009	-7.928	-8.439	-0.511
H5Si2O7-	3.097e-009	2.308e-009	-8.509	-8.637	-0.128
H5Si3O10-3	3.123e-011	2.214e-012	-10.505	-11.655	-1.149
H3Si3O9-3	2.530e-012	1.794e-013	-11.597	-12.746	-1.149
H4Si4O12-4	7.619e-014	6.897e-016	-13.118	-15.161	-2.043
H5Si4O12-3	4.907e-015	3.479e-016	-14.309	-15.458	-1.149

----------Saturation indices----------

Phase	SI	log IAP	log KT	
AFWILLIT	-10.82	49.17	59.99	Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ALBITE	-6.01	-2.47	3.54	Na1.000Al1.000Si3.000O8.000
ALUNITE	-29.47	-27.86	1.61	Al3.000S2.000K1.000H6.000O14.000
ANALCIM1	-3.60	3.33	6.93	Si2.000Na1.000Al1.000H2.000O7.000
ANALCIM2	-43.53	2.60	46.13	Si25.800Na10.200Al10.200H24.000O84.000
ANHYDRIT	-0.21	-4.59	-4.38	Ca1.000S1.000O4.000
ANORTHHE	-9.41	17.29	26.70	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR	-9.08	17.29	26.37	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	C1.000Ca1.000O3.000
BEID-CA	-13.46	-7.91	5.55	Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-K	-13.57	-8.31	5.26	K0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG	-14.08	-8.57	5.51	Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-NA	-13.35	-7.75	5.60	Na0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)	-68.07	-100.22	-32.15	C1.000
C(G)	-185.67	-100.22	85.45	C1.000
C2AH8	-11.54	49.10	60.64	Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4	-7.27	63.60	70.87	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1	-7.81	63.60	71.41	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13	-12.40	89.60	102.00	Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19	-12.43	89.54	101.98	Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)	-112.32	-15.47	96.85	Ca1.000
CA(G)	-137.55	-15.47	122.08	Ca1.000
Ca(OH)2	-2.45	20.26	22.71	Ca(OH)2
CAH10	-11.60	28.82	40.42	Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)	-12.43	20.27	32.70	Ca1.000O1.000
CH4	-127.78	-171.71	-43.93	C1.000H4.000
CHABAZ_a	-57.93	-58.03	-0.10	
Si28.600Na4.900Al7.400K0.900Ca0.800H72.000O108.000				
CHABAZ_d	-53.02	-45.78	7.24	
Si27.900Na3.700Al8.100K2.000Ca1.200H72.000O108.000				
CHALCEDO	-2.31	-5.80	-3.49	Si1.000O2.000
CL(G)	-35.12	6.32	41.44	Cl1.000
CL2(G)	-33.33	12.65	45.98	Cl2.000
CLINOC40	34.97	581.80	546.83	Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
CLINOP_a	-59.62	-73.38	-13.76	

```
    Si29.200Na1.700Al6.800K2.300Ca1.400H52.000O98.000
CLINOP_d          -57.94   -72.22   -14.28
    Si29.200Na0.400Al6.800K0.800Ca2.800H52.000O98.000
CLINOZOI           -7.54    36.07    43.61   Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CO(G)             -49.85   -64.49   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)            -10.60   -28.75   -18.15   C1.000O2.000
CSH(0.1)           -2.71    -3.78    -1.07   Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)           -2.32    -1.75     0.56   Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)           -1.95     0.27     2.23   Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)           -1.61     2.30     3.91   Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)           -1.28     4.32     5.60   Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)           -0.96     6.35     7.31   Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)           -0.67     8.38     9.04   Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)           -0.42    10.40    10.82   Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)         -0.36    11.07    11.44   Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)           -0.25    13.81    14.06   Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)           -0.06    14.45    14.51   Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)           -0.00    14.98    14.98   Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
CSH(1.2)           -0.01    15.42    15.44   Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)           -0.07    15.80    15.87   Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)           -0.16    16.12    16.27   Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)           -0.26    16.39    16.64   Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)           -0.36    16.63    16.99   Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)           -0.46    16.85    17.30   Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)           -0.56    17.03    17.60   Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833            -0.36    11.07    11.44   Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
DOLOMITE           -3.84   -20.93   -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
EPISTILB           -9.63    -5.97     3.66   Si6.000Ca1.000Al2.000H10.000O21.000
ERIONI_a          -54.79   -52.92     1.87
    Si28.200Na3.400Al7.800K2.800Ca0.800H60.000O102.000
ERIONI_d          -50.63   -46.15     4.48
    Si27.800Na1.200Al8.200K3.000Ca2.000H60.000O102.000
ETTRINGI           -2.84    55.41    58.24   Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FOSHAGIT           -2.22    63.65    65.87   Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
FRIEDEL_           -3.60    66.53    70.13   Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GEHL_HY            -7.02    43.30    50.32   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1           -5.86    43.30    49.16   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT          -12.92    43.36    56.28   Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE           -3.45     4.30     7.76   Al1.000H3.000O3.000
GROSSUL            -6.68    52.02    58.70   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1            0.15    52.02    51.87   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM              0.00    -4.60    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE            0.24    23.10    22.86   Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)              -53.48   -17.87    35.61   H1.000
H2(G)             -35.74   -35.74     0.00   H2.000
H2O(G)             -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)           -126.11  -167.81   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)             -17.84   -11.55     6.29   Cl1.000H1.000
HEULANDI           -50.70   -47.14     3.56
    Si28.000Na1.000Al8.000K0.400Ca3.300H52.000O98.000
HILLEBRA           -1.98    34.72    36.70   Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR            -7.98    69.39    77.37   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1          -12.20    69.39    81.58   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL            0.00    73.78    73.78   Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
ILLITE            -9.93    -0.96     8.97   Mg0.250Al2.300Si3.500K0.600H2.000O12.000
JENNITE            0.90   147.50   146.60   Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
K(CR)            -58.43    -8.94    49.49   K1.000
K(G)             -69.03    -8.94    60.09   K1.000
K-FELDSP           -3.93    -4.17    -0.23   Si3.000K1.000Al1.000O8.000
KAOLINIT          -12.08   -49.00   -36.92   Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE            -9.55    69.39    78.94   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONTI           -7.99     5.65    13.63   Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LEUCITE            -4.52     1.64     6.16   Si2.000K1.000Al1.000O6.000
LIME,             -12.43    20.27    32.70   Ca1.000O1.000
MG2SI2O6           -2.25    21.01    23.26   Mg2.000Si2.000O6.000
MICROCLI           -5.95    -4.17     1.78   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
MONOSULF           -9.08    64.75    73.83   Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA            -9.86    -7.29     2.56   Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-K             -9.76    -7.69     2.07   Mg0.330Al1.670Si4.000K0.330H2.000O12.000
MONT-MG           -10.42    -7.95     2.47   Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
MONT-NA            -9.64    -7.13     2.51   Mg0.330Al1.670Si4.000Na0.330H2.000O12.000
MORDENIT          -64.35   -87.67   -23.32
    Si30.000Na2.100Al6.000K0.900Ca1.500H44.000O94.000
MUSCOVIT          -10.14     4.46    14.60   Al3.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
NA(CR)            -53.13    -7.24    45.89   Na1.000
NA(G)             -66.62    -7.24    59.38   Na1.000
O(G)              -46.41    35.74    82.15   O1.000
O2(G)             -11.62    71.47    83.09   O2.000
OKENITE            -1.67     8.64    10.32   Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
ORTHOCLA           -5.03    -4.17     0.86   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
PARAGONI          -12.71     6.16    18.87   Na1.000Al3.000Si3.000H2.000O12.000
PERICLAS           -5.27    16.31    21.58   Mg1.000O1.000
PHILLI_a          -44.79   -33.80    10.99
    Si24.400Na3.200Al7.600K2.800Ca0.800H48.000O88.000
PHILLI_d          -43.84   -36.82     7.02
    Si24.600Na1.400Al7.400K1.200Ca2.400H48.000O88.000
PHLOGOPI           8.42    44.75    36.33   Mg3.000Al1.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
PLOMBIER           2.68    66.43    63.75   Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN           -2.45    20.26    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1          -2.29    20.26    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
PYROPHYL          -15.06   -14.60     0.46   Si4.000Al2.000H2.000O12.000
QUARTZ            -2.02    -5.80    -3.78   Si1.000O2.000
RIVERSID          -2.49    66.49    68.98   Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)            -96.22  -132.06   -35.84   S1.000
S(G)            -137.69  -132.06     5.63   S1.000
S2(G)           -206.42  -264.13   -57.71   S2.000
SAPON-CA           6.15    32.38    26.23   Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-K            6.04    31.98    25.94   Mg3.000Al0.330Si3.670K0.330H2.000O12.000
```

```
SAPON-MG          5.54    31.73    26.19   Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SAPON-NA          6.26    32.55    26.28   Mg3.000Al0.330Si3.670Na0.330H2.000O12.000
SCOLECIT         -1.95    11.46    13.41   Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000
SEP              -3.62   -40.83   -37.21   Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT         -0.00    30.35    30.35   Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)         -140.21   -77.28    62.93   Si1.000
SI(G)          -211.25   -77.28   133.97   Si1.000
SIL              -2.79    -5.81    -3.02   Si1.000H2.000O3.000
SIL(AM)1         -3.09    -5.80    -2.71   Si1.000O2.000
SILI(AM)         -3.17    -5.80    -2.64   Si1.000O2.000
SILICA          -21.21   -23.68    -2.47   Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)         -3.17    -5.80    -2.64   Si1.000O2.000
SIO2(QUA         -1.80    -5.80    -4.00   Si1.000O2.000
SO2(G)          -55.27   -60.59    -5.32   S1.000O2.000
STILBITE        -19.35    -2.83    16.52   Si13.000Ca2.000Al5.000Na1.000H28.000O50.000
TALC              4.63    25.70    21.07   Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR          0.95    66.47    65.51   Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,           -9.99     2.82    12.81   Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLIT         17.93    75.63    57.70   Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
WAIRAKIT        -12.34     5.66    18.01   Si4.000Ca1.000Al2.000H4.000O14.000
XONOTLIT         -4.95    86.77    91.73   Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA        -10.03    -5.96     4.07   Si6.000Ca1.000Al2.000H8.000O20.000

------------------
End of simulation.
------------------

-------------------------------------
Reading input data for simulation 2.
-------------------------------------

-----------
End of run.
-----------
```

リスト9-8 人工海水とOPCペーストの反応における化学平衡計算（液固比=500，C-S-HにAl取り込み想定なし）

```
Input file: C:¥Documents and Settings¥t171x053¥デスクトップ¥080326_Calc502-sepio.pqi
Output file: C:¥Documents and Settings¥t171x053¥デスクトップ¥080326_Calc502-sepio.pqo
Database file: C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb

------------------
Reading data base.
------------------

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
END
-----------------------------------
Reading input data for simulation 1.
-----------------------------------

DATABASE C:¥Masuda¥研究業務資料¥6. PHREEQC¥2. プログラム¥熱力学データベース
¥050700c0(new).tdb
Title OPC-模擬海水バッチ式試験（Ref 模擬海水-L/S=500）-Calc.No502
PHASES
CSH(0.1)
Ca 0.100 Si 1.000 O 2.100 : 0.110 H2O = 0.100 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.790 H2O - 0.200 H+
log_K -1.071
CSH(0.2)
Ca 0.200 Si 1.000 O 2.200 : 0.220 H2O = 0.200 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.580 H2O - 0.400 H+
log_K 0.565
CSH(0.3)
Ca 0.300 Si 1.000 O 2.300 : 0.330 H2O = 0.300 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.370 H2O - 0.600 H+
log_K 2.227
CSH(0.4)
Ca 0.400 Si 1.000 O 2.400 : 0.440 H2O = 0.400 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -1.160 H2O - 0.800 H+
log_K 3.907
CSH(0.5)
Ca 0.500 Si 1.000 O 2.500 : 0.550 H2O = 0.500 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.950 H2O - 1.000 H+
log_K 5.601
CSH(0.6)
Ca 0.600 Si 1.000 O 2.600 : 0.661 H2O = 0.600 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.739 H2O - 1.200 H+
log_K 7.312
CSH(0.7)
Ca 0.700 Si 1.000 O 2.700 : 0.771 H2O = 0.700 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.529 H2O - 1.400 H+
log_K 9.045
CSH(0.8)
Ca 0.800 Si 1.000 O 2.800 : 0.881 H2O = 0.800 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.319 H2O - 1.600 H+
log_K 10.819
CSH(0.9)
Ca 1.000 Si 1.111 O 3.222 : 1.093 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.111 H4SiO4 -0.129 H2O - 2.000 H+
log_K 14.061
CSH(1.0)
Ca 1.000 Si 1.000 O 3.000 : 1.084 H2O = 1.000 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 + 0.084 H2O - 2.000 H+
log_K 14.514
CSH(1.1)
Ca 1.000 Si 0.909 O 2.818 : 1.076 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.909 H4SiO4 + 0.258 H2O - 2.000 H+
log_K 14.983
CSH(1.2)
Ca 1.000 Si 0.833 O 2.666 : 1.070 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.833 H4SiO4 + 0.404 H2O - 2.000 H+
log_K 15.439
CSH(1.3)
Ca 1.000 Si 0.769 O 2.538 : 1.065 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.769 H4SiO4 + 0.527 H2O - 2.000 H+
log_K 15.870
CSH(1.4)
Ca 1.000 Si 0.714 O 2.428 : 1.060 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.714 H4SiO4 + 0.632 H2O - 2.000 H+
log_K 16.272
CSH(1.5)
Ca 1.000 Si 0.667 O 2.334 : 1.056 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.667 H4SiO4 + 0.722 H2O - 2.000 H+
log_K 16.643
CSH(1.6)
Ca 1.000 Si 0.625 O 2.250 : 1.053 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.625 H4SiO4 + 0.803 H2O - 2.000 H+
log_K 16.987
CSH(1.7)
Ca 1.000 Si 0.588 O 2.176 : 1.049 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.588 H4SiO4 + 0.873 H2O - 2.000 H+
log_K 17.304
CSH(1.8)
Ca 1.000 Si 0.556 O 2.112 : 1.047 H2O = 1.000 Ca+2 + 0.556 H4SiO4 + 0.935 H2O - 2.000 H+
log_K 17.597
Ca(OH)2
Ca(OH)2 = Ca+2 + 2H2O - 2 H+
log_k 22.710
SiO2(am)
  Si 1.000 O 2.000 = 1.000 H4SiO4 - 2.000 H2O
log_K -2.639
CSH(0.833)
Ca 0.833 Si 1.000 O 2.833 : 0.917 H2O = 0.833 Ca+2 + 1.000 H4SiO4 -0.250 H2O - 1.666 H+
log_K 11.436
SOLUTION 1    IEW/Pure Water
                    units      mol/kgw
                pH          8.2
                pe          0.0
                density 1.000
                temp        25.0
                Ca    0.01035
                S    0.02933
```

```
                    Mg    0.05379
                    Na    0.4934
                    K     0.01112
                    Cl    0.5653
                    C     0.5653      charge
EQUILIBRIUM_PHASES 1
          CSH(0.1) 0.0 0.0
          CSH(0.2) 0.0 0.0
          CSH(0.3) 0.0 0.0
          CSH(0.4) 0.0 0.0
          CSH(0.5) 0.0 0.0
          CSH(0.6) 0.0 0.0
          CSH(0.7) 0.0 0.0
          CSH(0.8) 0.0 0.0
          CSH(0.9) 0.0 0.0
          CSH(1.0) 0.0 0.0
          CSH(1.1) 0.0 0.0
          CSH(1.2) 0.0 0.0
          CSH(1.3) 0.0 0.0
          CSH(1.4) 0.0 0.0
          CSH(1.5) 0.0 0.0
          CSH(1.6) 0.0 0.0
          CSH(1.7) 0.0 0.0
          CSH(1.8) 0.0 0.0107
          CSH(0.833) 0.0 0.0
          Ca(OH)2 0.0 0.00486
          ETTRINGI 0.0 0.0
          MONOSULF 0.0 0.000407
          HYDROGR 0.0 0.000469
          Brucite 0.0 0.000814
          FRIEDEL_ 0.0 0.0
          SEPIOLIT 0.0 0.0
          CALCITE 0.0 0.0
          ARAGONIT 0.0 0.0
          GEHL_HY 0.0 0.0
          HYDROTAL 0.0 0.0
          C3ASH4 0.0 0.0
          GYPSUM 0.0 0.0
          END
-----
TITLE
-----

 OPC-模擬海水バッチ式試験（Ref 模擬海水-L/S=500）-Calc.No502

-------------------------------------------
Beginning of initial solution calculations.
-------------------------------------------
```

```
Initial solution 1.          IEW/Pure Water

-----------------------------Solution composition-----------------------------

              Elements              Molality          Moles

              C                    8.090e-003    8.090e-003    Charge balance
              Ca                   1.035e-002    1.035e-002
              Cl                   5.653e-001    5.653e-001
              K                    1.112e-002    1.112e-002
              Mg                   5.379e-002    5.379e-002
              Na                   4.934e-001    4.934e-001
              S                    2.933e-002    2.933e-002

----------------------------Description of solution----------------------------

                                          pH   =     8.200
                                          pe   =     0.000
                              Activity of water   =     0.980
                                 Ionic strength   =   6.811e-001
                              Mass of water (kg)   =   1.000e+000
                     Total alkalinity (eq/kg)    = -7.340e-003
                            Total CO2 (mol/kg)    =   8.090e-003
                           Temperature (deg C)    =    25.000
                         Electrical balance (eq)    = -8.727e-014
 Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|)    =    -0.00
                                       Iterations    =      7
                                           Total H    = 1.110197e+002
                                           Total O    = 5.564777e+001

----------------------------Distribution of species----------------------------

                                  Log          Log          Log
Species                Molality   Activity     Molality     Activity     Gamma

    OH-                2.553e-006   1.554e-006    -5.593     -5.809     -0.216
    H+                 8.361e-009   6.310e-009    -8.078     -8.200     -0.122
    H2O                5.551e+001   9.804e-001     1.744     -0.009      0.000
C                  8.090e-003
    HCO3-              5.662e-003   3.822e-003    -2.247     -2.418     -0.171
    MgHCO3+            8.044e-004   6.015e-004    -3.095     -3.221     -0.126
    NaHCO3             6.304e-004   7.374e-004    -3.200     -3.132      0.068
    MgCO3              3.129e-004   3.661e-004    -3.505     -3.436      0.068
    NaCO3-             2.410e-004   1.802e-004    -3.618     -3.744     -0.126
    CaHCO3+            1.569e-004   1.059e-004    -3.805     -3.975     -0.171
    CO3-2              1.362e-004   2.830e-005    -3.866     -4.548     -0.683
    CaCO3              9.964e-005   1.166e-004    -4.002     -3.933      0.068
    CO2                4.712e-005   5.512e-005    -4.327     -4.259      0.068
    CH4                0.000e+000   0.000e+000    -45.520    -45.451     0.068
```

```
Ca                  1.035e-002
    Ca+2            8.982e-003  2.248e-003   -2.047   -2.648   -0.602
    CaSO4           1.112e-003  1.300e-003   -2.954   -2.886    0.068
    CaHCO3+         1.569e-004  1.059e-004   -3.805   -3.975   -0.171
    CaCO3           9.964e-005  1.166e-004   -4.002   -3.933    0.068
    CaOH+           1.179e-007  8.813e-008   -6.929   -7.055   -0.126
Cl                  5.653e-001
    Cl-             5.653e-001  3.522e-001   -0.248   -0.453   -0.206
    ClO-            0.000e+000  0.000e+000  -41.871  -41.997   -0.126
    ClOH            0.000e+000  0.000e+000  -42.845  -42.777    0.068
    ClO2-           0.000e+000  0.000e+000  -75.421  -75.547   -0.126
    ClHO2           0.000e+000  0.000e+000  -81.855  -81.786    0.068
    ClO3-           0.000e+000  0.000e+000  -97.395  -97.521   -0.126
    ClO4-           0.000e+000  0.000e+000 -122.552 -122.679   -0.126
H(0)                4.819e-020
    H2              2.409e-020  2.818e-020  -19.618  -19.550    0.068
K                   1.112e-002
    K+              1.094e-002  6.814e-003   -1.961   -2.167   -0.206
    KSO4-           1.832e-004  1.370e-004   -3.737   -3.863   -0.126
Mg                  5.379e-002
    Mg+2            4.682e-002  1.354e-002   -1.330   -1.868   -0.539
    MgSO4           5.844e-003  6.837e-003   -2.233   -2.165    0.068
    MgHCO3+         8.044e-004  6.015e-004   -3.095   -3.221   -0.126
    MgCO3           3.129e-004  3.661e-004   -3.505   -3.436    0.068
    MgOH+           4.520e-006  3.380e-006   -5.345   -5.471   -0.126
Na                  4.934e-001
    Na+             4.860e-001  3.436e-001   -0.313   -0.464   -0.151
    NaSO4-          6.539e-003  4.890e-003   -2.184   -2.311   -0.126
    NaHCO3          6.304e-004  7.374e-004   -3.200   -3.132    0.068
    NaCO3-          2.410e-004  1.802e-004   -3.618   -3.744   -0.126
O(0)                0.000e+000
    O2              0.000e+000  0.000e+000  -53.365  -53.297    0.068
S                   2.933e-002
    SO4-2           1.565e-002  2.840e-003   -1.805   -2.547   -0.741
    NaSO4-          6.539e-003  4.890e-003   -2.184   -2.311   -0.126
    MgSO4           5.844e-003  6.837e-003   -2.233   -2.165    0.068
    CaSO4           1.112e-003  1.300e-003   -2.954   -2.886    0.068
    KSO4-           1.832e-004  1.370e-004   -3.737   -3.863   -0.126
    HSO4-           2.325e-009  1.739e-009   -8.634   -8.760   -0.126
    SO3-2           1.478e-022  4.623e-023  -21.830  -22.335   -0.505
    HSO3-           6.474e-024  4.841e-024  -23.189  -23.315   -0.126
    H2SO3           1.806e-030  2.113e-030  -29.743  -29.675    0.068
    HS-             0.000e+000  0.000e+000  -42.403  -42.619   -0.216
    H2S             0.000e+000  0.000e+000  -43.899  -43.831    0.068
    S2O3-2          0.000e+000  0.000e+000  -48.530  -49.035   -0.505
    S-2             0.000e+000  0.000e+000  -52.706  -53.420   -0.714
    HS2O3-          0.000e+000  0.000e+000  -55.519  -55.645   -0.126

-----------------------------Saturation indices-----------------------------
```

```
Phase              SI log IAP   log KT

ANHYDRIT           -0.81    -5.19    -4.38   Ca1.000S1.000O4.000
ARAGONIT            1.14    -7.20    -8.34   C1.000Ca1.000O3.000
BRUCITE            -1.79    14.51    16.30   Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)             -21.57   -53.72   -32.15   C1.000
C(G)              -139.17  -53.72    85.45   C1.000
CA(CR)             -99.50    -2.65    96.85   Ca1.000
CA(G)             -124.73    -2.65   122.08   Ca1.000
Ca(OH)2            -8.98    13.73    22.71   Ca(OH)2
CALCITE             1.29    -7.20    -8.48   C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)            -18.96    13.74    32.70   Ca1.000O1.000
CH4                -42.59   -86.52   -43.93   C1.000H4.000
CL(G)              -41.89    -0.45    41.44   Cl1.000
CL2(G)             -46.89    -0.91    45.98   Cl2.000
CO(G)              -22.69   -37.33   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)              -2.79   -20.94   -18.15   C1.000O2.000
DOLOMITE             3.48   -13.61   -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
GYPSUM              -0.61    -5.21    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
H(G)               -43.81    -8.20    35.61   H1.000
H2(G)              -16.40   -16.40     0.00   H2.000
H2O(G)              -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)             -42.81   -84.51   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)             -14.94    -8.65     6.29   Cl1.000H1.000
K(CR)              -51.66    -2.17    49.49   K1.000
K(G)               -62.26    -2.17    60.09   K1.000
LIME,              -18.96    13.74    32.70   Ca1.000O1.000
NA(CR)             -46.35    -0.46    45.89   Na1.000
NA(G)              -59.84    -0.46    59.38   Na1.000
O(G)               -65.76    16.39    82.15   O1.000
O2(G)              -50.31    32.78    83.09   O2.000
PERICLAS            -7.06    14.52    21.58   Mg1.000O1.000
PORTLAN             -8.98    13.73    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1            -8.82    13.73    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
S(CR)              -32.27   -68.11   -35.84   S1.000
S(G)               -73.74   -68.11     5.63   S1.000
S2(G)              -78.51  -136.22   -57.71   S2.000
SO2(G)             -30.01   -35.33    -5.32   S1.000O2.000

-----------------------------------------
Beginning of batch-reaction calculations.
-----------------------------------------

Reaction step 1.

Using solution 1.          IEW/Pure Water
Using pure phase assemblage 1.
```

----------Phase assemblage----------

Phase	SI	log IAP	log KT	Moles in assemblage Initial	Final	Delta
ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	0.000e+000		0.000e+000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	8.140e-004	7.845e-003	7.031e-003
C3ASH4	-20.16	50.71	70.87	0.000e+000		0.000e+000
Ca(OH)2	-6.75	15.96	22.71	4.860e-003		-4.860e-003
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	0.000e+000	8.050e-003	8.050e-003
CSH(0.1)	-3.14	-4.21	-1.07	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.2)	-3.18	-2.61	0.56	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.3)	-3.24	-1.02	2.23	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.4)	-3.33	0.58	3.91	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.5)	-3.42	2.18	5.60	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.6)	-3.54	3.77	7.31	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.7)	-3.68	5.37	9.04	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.8)	-3.85	6.97	10.82	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.833)	-3.94	7.49	11.44	0.000e+000		0.000e+000
CSH(0.9)	-4.55	9.51	14.06	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.0)	-4.36	10.16	14.51	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.1)	-4.30	10.69	14.98	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.2)	-4.31	11.13	15.44	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.3)	-4.37	11.50	15.87	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.4)	-4.45	11.82	16.27	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.5)	-4.55	12.09	16.64	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.6)	-4.65	12.34	16.99	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.7)	-4.75	12.55	17.30	0.000e+000		0.000e+000
CSH(1.8)	-4.86	12.74	17.60	1.070e-002		-1.070e-002
ETTRINGI	-16.57	41.67	58.24	0.000e+000		0.000e+000
FRIEDEL_	-16.90	53.23	70.13	0.000e+000		0.000e+000
GEHL_HY	-15.62	34.70	50.32	0.000e+000		0.000e+000
GYPSUM	-0.28	-4.89	-4.60	0.000e+000		0.000e+000
HYDROGR	-20.87	56.50	77.37	4.690e-004		-4.690e-004
HYDROTAL	0.00	73.78	73.78	0.000e+000	8.760e-004	8.760e-004
MONOSULF	-22.25	51.58	73.83	4.070e-004		-4.070e-004
SEPIOLIT	-0.00	30.35	30.35	0.000e+000	9.912e-004	9.912e-004

----------Solution composition----------

Elements	Molality	Moles
Al	3.806e-010	3.806e-010
C	4.034e-005	4.035e-005
Ca	2.089e-002	2.090e-002
Cl	5.653e-001	5.653e-001
K	1.112e-002	1.112e-002
Mg	3.929e-002	3.929e-002
Na	4.934e-001	4.934e-001
S	2.973e-002	2.974e-002
Si	1.740e-006	1.740e-006

----------Description of solution----------

pH = 9.157 Charge balance
pe = 8.717 Adjusted to redox equilibrium
Activity of water = 0.981
Ionic strength = 6.735e-001
Mass of water (kg) = 1.000e+000
Total alkalinity (eq/kg) = 3.630e-005
Total CO2 (mol/kg) = 4.034e-005
Temperature (deg C) = 25.000
Electrical balance (eq) = 2.191e-012
Percent error, 100*(Cat-|An|)/(Cat+|An|) = 0.00
Iterations = 23
Total H = 1.110218e+002
Total O = 5.562997e+001

----------Distribution of species----------

Species	Molality	Log Activity	Log Molality	Log Activity	Gamma
OH-	2.311e-005	1.408e-005	-4.636	-4.851	-0.215
H+	9.221e-010	6.962e-010	-9.035	-9.157	-0.122
H2O	5.551e+001	9.805e-001	1.744	-0.009	0.000
Al	3.806e-010				
Al(OH)4-	3.788e-010	2.830e-010	-9.422	-9.548	-0.127
Al(OH)3	1.721e-012	2.009e-012	-11.764	-11.697	0.067
Al(OH)2+	1.517e-015	1.133e-015	-14.819	-14.946	-0.127
AlOH+2	3.329e-019	1.037e-019	-18.478	-18.984	-0.507
Al+3	9.022e-023	7.194e-024	-22.045	-23.143	-1.098
AlSO4+	2.940e-023	2.196e-023	-22.532	-22.658	-0.127
Al(SO4)2-	6.808e-024	5.086e-024	-23.167	-23.294	-0.127
C	4.034e-005				
HCO3-	1.562e-005	1.055e-005	-4.806	-4.977	-0.170
NaCO3-	6.043e-006	4.514e-006	-5.219	-5.345	-0.127
MgCO3	5.827e-006	6.804e-006	-5.235	-5.167	0.067
CaCO3	5.156e-006	6.021e-006	-5.288	-5.220	0.067
CO3-2	3.397e-006	7.080e-007	-5.469	-6.150	-0.681
NaHCO3	1.746e-006	2.038e-006	-5.758	-5.691	0.067
MgHCO3+	1.651e-006	1.234e-006	-5.782	-5.909	-0.127
CaHCO3+	8.933e-007	6.036e-007	-6.049	-6.219	-0.170
CO2	1.438e-008	1.679e-008	-7.842	-7.775	0.067
CH4	0.000e+000	0.000e+000	-126.426	-126.359	0.067
Ca	2.089e-002				
Ca+2	1.853e-002	4.641e-003	-1.732	-2.333	-0.601
CaSO4	2.360e-003	2.756e-003	-2.627	-2.560	0.067

CaCO3	5.156e-006	6.021e-006	-5.288	-5.220	0.067
CaOH+	2.208e-006	1.649e-006	-5.656	-5.783	-0.127
CaHCO3+	8.933e-007	6.036e-007	-6.049	-6.219	-0.170
Cl	5.653e-001				
Cl-	5.653e-001	3.526e-001	-0.248	-0.453	-0.205
ClO-	3.007e-023	2.246e-023	-22.522	-22.649	-0.127
ClOH	3.522e-025	4.113e-025	-24.453	-24.386	0.067
ClO2-	1.885e-037	1.408e-037	-36.725	-36.851	-0.127
ClO3-	4.462e-040	3.333e-040	-39.350	-39.477	-0.127
ClHO2	0.000e+000	0.000e+000	-44.115	-44.048	0.067
ClO4-	0.000e+000	0.000e+000	-45.160	-45.287	-0.127
H(0)	2.167e-039				
H2	1.084e-039	1.265e-039	-38.965	-38.898	0.067
K	1.112e-002				
K+	1.093e-002	6.818e-003	-1.961	-2.166	-0.205
KSO4-	1.884e-004	1.407e-004	-3.725	-3.852	-0.127
Mg	3.929e-002				
Mg+2	3.478e-002	1.006e-002	-1.459	-1.998	-0.539
MgSO4	4.465e-003	5.214e-003	-2.350	-2.283	0.067
MgOH+	3.047e-005	2.276e-005	-4.516	-4.643	-0.127
MgCO3	5.827e-006	6.804e-006	-5.235	-5.167	0.067
MgHCO3+	1.651e-006	1.234e-006	-5.782	-5.909	-0.127
Na	4.934e-001				
Na+	4.866e-001	3.440e-001	-0.313	-0.463	-0.151
NaSO4-	6.728e-003	5.026e-003	-2.172	-2.299	-0.127
NaCO3-	6.043e-006	4.514e-006	-5.219	-5.345	-0.127
NaHCO3	1.746e-006	2.038e-006	-5.758	-5.691	0.067
O(0)	4.286e-015				
O2	2.143e-015	2.503e-015	-14.669	-14.602	0.067
S	2.973e-002				
SO4-2	1.599e-002	2.915e-003	-1.796	-2.535	-0.739
NaSO4-	6.728e-003	5.026e-003	-2.172	-2.299	-0.127
MgSO4	4.465e-003	5.214e-003	-2.350	-2.283	0.067
CaSO4	2.360e-003	2.756e-003	-2.627	-2.560	0.067
KSO4-	1.884e-004	1.407e-004	-3.725	-3.852	-0.127
HSO4-	2.636e-010	1.969e-010	-9.579	-9.706	-0.127
AlSO4+	2.940e-023	2.196e-023	-22.532	-22.658	-0.127
Al(SO4)2-	6.808e-024	5.086e-024	-23.167	-23.294	-0.127
SO3-2	0.000e+000	0.000e+000	-41.165	-41.672	-0.507
HSO3-	0.000e+000	0.000e+000	-43.482	-43.609	-0.127
H2SO3	0.000e+000	0.000e+000	-50.993	-50.926	0.067
HS-	0.000e+000	0.000e+000	-120.741	-120.956	-0.215
H2S	0.000e+000	0.000e+000	-123.193	-123.126	0.067
S2O3-2	0.000e+000	0.000e+000	-127.812	-128.318	-0.507
S-2	0.000e+000	0.000e+000	-130.088	-130.800	-0.712
HS2O3-	0.000e+000	0.000e+000	-135.759	-135.886	-0.127
Si	1.740e-006				
H4SiO4	1.291e-006	1.507e-006	-5.889	-5.822	0.067
H3SiO4-	4.489e-007	3.353e-007	-6.348	-6.475	-0.127
H2SiO4-2	7.217e-011	2.248e-011	-10.142	-10.648	-0.507
H5Si2O7-	3.539e-011	2.644e-011	-10.451	-10.578	-0.127
H4Si2O7-2	1.535e-012	4.780e-013	-11.814	-12.321	-0.507
H5Si3O10-3	4.596e-017	3.330e-018	-16.338	-17.478	-1.140
H3Si3O9-3	3.724e-018	2.698e-019	-17.429	-18.569	-1.140
H5Si4O12-3	7.223e-021	5.233e-022	-20.141	-21.281	-1.140
H4Si4O12-4	1.264e-021	1.188e-023	-20.898	-22.925	-2.027

----------Saturation indices----------

Phase	SI	log IAP	log KT	
AFWILLIT	-23.71	36.28	59.99	Si2.000Ca3.000H6.000O10.000
ALBITE	-7.95	-4.41	3.54	Na1.000Al1.000Si3.000O8.000
ALUNITE	-23.38	-21.77	1.61	Al3.000S2.000K1.000H6.000O14.000
ANALCIM1	-5.54	1.39	6.93	Si2.000Na1.000Al1.000H2.000O7.000
ANALCIM2	-63.34	-17.21	46.13	Si25.800Na10.200Al10.200H24.000O84.000
ANHYDRIT	-0.49	-4.87	-4.38	Ca1.000S1.000O4.000
ANORTHHE	-13.71	12.99	26.70	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ANORTHTR	-13.38	12.99	26.37	Al2.000Si2.000Ca1.000O8.000
ARAGONIT	-0.14	-8.48	-8.34	C1.000Ca1.000O3.000
BEID-CA	-14.17	-8.62	5.55	Ca0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-K	-14.21	-8.95	5.26	K0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-MG	-14.08	-8.56	5.51	Mg0.165Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BEID-NA	-13.99	-8.39	5.60	Na0.330Al2.330Si3.670H2.000O12.000
BRUCITE	0.00	16.30	16.30	Mg1.000H2.000O2.000
C(CR)	-63.78	-95.93	-32.15	C1.000
C(G)	-181.38	-95.93	85.45	C1.000
C2AH8	-20.13	40.51	60.64	Al2.000Ca2.000H16.000O13.000
C3ASH4	-20.16	50.71	70.87	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C3ASH4_1	-20.70	50.71	71.41	Al2.000Ca3.000Si1.000H8.000O12.000
C4AH13	-29.59	72.41	102.00	Al2.000Ca4.000H26.000O20.000
C4AH19	-29.62	72.36	101.98	Al2.000Ca4.000H38.000O26.000
CA(CR)	-116.62	-19.77	96.85	Ca1.000
CA(G)	-141.85	-19.77	122.08	Ca1.000
Ca(OH)2	-6.75	15.96	22.71	Ca(OH)2
CAH10	-15.90	24.52	40.42	Al2.000Ca1.000H20.000O14.000
CALCITE	0.00	-8.48	-8.48	C1.000Ca1.000O3.000
CAO(CR)	-16.73	15.97	32.70	Ca1.000O1.000
CH4	-123.50	-167.43	-43.93	C1.000H4.000
CHABAZ_a	-72.64	-72.74	-0.10	
Si28.600Na4.900Al7.400K0.900Ca0.800H72.000O108.000				
CHABAZ_d	-69.25	-62.01	7.24	
Si27.900Na3.700Al8.100K2.000Ca1.200H72.000O108.000				
CHALCEDO	-2.31	-5.80	-3.49	Si1.000O2.000
CL(G)	-33.18	8.26	41.44	Cl1.000
CL2(G)	-29.45	16.53	45.98	Cl2.000
CLINOC40	34.97	581.80	546.83	Mg40.000Al16.000Si24.000H64.000O144.000
CLINOP_a	-73.41	-87.17	-13.76	

```
  Si29.200Na1.700Al6.800K2.300Ca1.400H52.000O98.000
CLINOP_d          -72.30   -86.58   -14.28
  Si29.200Na0.400Al6.800K0.800Ca2.800H52.000O98.000
CLINOZOI          -16.14    27.47    43.61   Al3.000Si3.000Ca2.000H1.000O13.000
CO(G)             -45.56   -60.20   -14.64   C1.000O1.000
CO2(G)             -6.31   -24.46   -18.15   C1.000O2.000
CSH(0.1)           -3.14    -4.21    -1.07   Ca0.100Si1.000O2.100:0.110H2O
CSH(0.2)           -3.18    -2.61     0.56   Ca0.200Si1.000O2.200:0.220H2O
CSH(0.3)           -3.24    -1.02     2.23   Ca0.300Si1.000O2.300:0.330H2O
CSH(0.4)           -3.33     0.58     3.91   Ca0.400Si1.000O2.400:0.440H2O
CSH(0.5)           -3.42     2.18     5.60   Ca0.500Si1.000O2.500:0.550H2O
CSH(0.6)           -3.54     3.77     7.31   Ca0.600Si1.000O2.600:0.661H2O
CSH(0.7)           -3.68     5.37     9.04   Ca0.700Si1.000O2.700:0.771H2O
CSH(0.8)           -3.85     6.97    10.82   Ca0.800Si1.000O2.800:0.881H2O
CSH(0.833)         -3.94     7.49    11.44   Ca0.833Si1.000O2.833:0.917H2O
CSH(0.9)           -4.55     9.51    14.06   Ca1.000Si1.111O3.222:1.093H2O
CSH(1.0)           -4.36    10.16    14.51   Ca1.000Si1.000O3.000:1.084H2O
CSH(1.1)           -4.30    10.69    14.98   Ca1.000Si0.909O2.818:1.076H2O
CSH(1.2)           -4.31    11.13    15.44   Ca1.000Si0.833O2.666:1.070H2O
CSH(1.3)           -4.37    11.50    15.87   Ca1.000Si0.769O2.538:1.065H2O
CSH(1.4)           -4.45    11.82    16.27   Ca1.000Si0.714O2.428:1.060H2O
CSH(1.5)           -4.55    12.09    16.64   Ca1.000Si0.667O2.334:1.056H2O
CSH(1.6)           -4.65    12.34    16.99   Ca1.000Si0.625O2.250:1.053H2O
CSH(1.7)           -4.75    12.55    17.30   Ca1.000Si0.588O2.176:1.049H2O
CSH(1.8)           -4.86    12.74    17.60   Ca1.000Si0.556O2.112:1.047H2O
CSH_833            -3.94     7.49    11.44   Si1.000Ca0.833H1.834O3.750
DOLOMITE            0.46   -16.63   -17.09   Ca1.000Mg1.000C2.000O6.000
EPISTILB          -13.93   -10.27     3.66   Si6.000Ca1.000Al2.000H10.000O21.000
ERIONI_a          -70.27   -68.40     1.87
  Si28.200Na3.400Al7.800K2.800Ca0.800H60.000O102.000
ERIONI_d          -67.38   -62.90     4.48
  Si27.800Na1.200Al8.200K3.000Ca2.000H60.000O102.000
ETTRINGI          -16.57    41.67    58.24   Al2.000Ca6.000S3.000H64.000O50.000
FOSHAGIT          -19.41    46.46    65.87   Si3.000Ca4.000H3.000O11.500
FRIEDEL_          -16.90    53.23    70.13   Al2.000Ca4.000Cl2.000H20.000O16.000
GEHL_HY           -15.62    34.70    50.32   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHL_HY1          -14.46    34.70    49.16   Al2.000Ca2.000Si1.000H16.000O15.000
GEHLENIT          -21.51    34.77    56.28   Al2.000Ca2.000Si1.000O7.000
GIBBSITE           -3.45     4.30     7.76   Al1.000H3.000O3.000
GROSSUL           -19.56    39.14    58.70   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GROSSUL1          -12.74    39.14    51.87   Al2.000Si3.000Ca3.000O12.000
GYPSUM             -0.28    -4.89    -4.60   Ca1.000S1.000H4.000O6.000
GYROLITE           -8.35    14.51    22.86   Si3.000Ca2.000H5.000O10.500
H(G)              -53.48   -17.87    35.61   H1.000
H2(G)             -35.75   -35.75     0.00   H2.000
H2O(G)             -1.51    -0.01     1.50   H2.000O1.000
H2S(G)            -122.11 -163.81   -41.70   S1.000H2.000
HCL(G)            -15.90    -9.61     6.29   Cl1.000H1.000
HEULANDI          -67.59   -64.03     3.56
  Si28.000Na1.000Al8.000K0.400Ca3.300H52.000O98.000
HILLEBRA          -10.57    26.13    36.70   Si1.000Ca2.000H2.340O5.170
HYDROGR           -20.87    56.50    77.37   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROGR1          -25.08    56.50    81.58   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
HYDROTAL            0.00    73.78    73.78   Al2.000Mg4.000H20.000O17.000
ILLITE            -11.10    -2.13     8.97   Mg0.250Al2.300Si3.500K0.600H2.000O12.000
JENNITE           -37.77   108.83   146.60   Si6.000Ca9.000H22.000O32.000
K(CR)             -60.37   -10.88    49.49   K1.000
K(G)              -70.97   -10.88    60.09   K1.000
K-FELDSP           -5.88    -6.11    -0.23   Si3.000K1.000Al1.000O8.000
KAOLINIT          -12.07   -48.99   -36.92   Si2.000Al2.000H4.000O9.000
KATOITE           -22.44    56.50    78.94   Al2.000Ca3.000H12.000O12.000
LAUMONTI          -12.28     1.35    13.63   Si4.000Ca1.000Al2.000H8.000O16.000
LEUCITE            -6.47    -0.31     6.16   Si2.000K1.000Al1.000O6.000
LIME,             -16.73    15.97    32.70   Ca1.000O1.000
MG2SI2O6           -2.25    21.01    23.26   Mg2.000Si2.000O6.000
MICROCLI           -7.89    -6.11     1.78   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
MONOSULF          -22.25    51.58    73.83   Al2.000Ca4.000S1.000H24.000O22.000
MONT-CA           -10.57    -8.00     2.56   Mg0.330Al1.670Si4.000Ca0.165H2.000O12.000
MONT-K            -10.40    -8.33     2.07 Mg0.330Al1.670Si4.000K0.330H2.000O12.000
MONT-MG           -10.42    -7.95     2.47   Mg0.495Al1.670Si4.000H2.000O12.000
MONT-NA           -10.28    -7.77     2.51   Mg0.330Al1.670Si4.000Na0.330H2.000O12.000
MORDENIT          -76.62   -99.94   -23.32
  Si30.000Na2.100Al6.000K0.900Ca1.500H44.000O94.000
MUSCOVIT          -12.09     2.51    14.60   Al3.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
NA(CR)            -55.07    -9.18    45.89   Na1.000
NA(G)             -68.56    -9.18    59.38   Na1.000
O(G)              -46.41    35.74    82.15   O1.000
O2(G)             -11.61    71.48    83.09   O2.000
OKENITE            -5.97     4.35    10.32   Si2.000Ca1.000H4.000O7.000
ORTHOCLA           -6.97    -6.11     0.86   Al1.000Si3.000K1.000O8.000
PARAGONI          -14.66     4.21    18.87   Na1.000Al3.000Si3.000H2.000O12.000
PERICLAS           -5.27    16.31    21.58   Mg1.000O1.000
PHILLI_a          -59.88   -48.89    10.99
  Si24.400Na3.200Al7.600K2.800Ca0.800H48.000O88.000
PHILLI_d          -59.20   -52.18     7.02
  Si24.600Na1.400Al7.400K1.200Ca2.400H48.000O88.000
PHLOGOPI            6.48    42.81    36.33   Mg3.000Al1.000Si3.000K1.000H2.000O12.000
PLOMBIER          -18.81    44.94    63.75   Si6.000Ca5.000H21.000O27.500
PORTLAN            -6.75    15.96    22.71   Ca1.000H2.000O2.000
PORTLAN1           -6.59    15.96    22.55   Ca1.000H2.000O2.000
PYROPHYL          -15.05   -14.60     0.46   Si4.000Al2.000H2.000O12.000
QUARTZ             -2.02    -5.80    -3.78   Si1.000O2.000
RIVERSID          -23.97    45.01    68.98   Si6.000Ca5.000H6.000O20.000
S(CR)             -92.22 -128.06   -35.84   S1.000
S(G)             -133.69 -128.06     5.63   S1.000
S2(G)            -198.41 -256.12   -57.71   S2.000
SAPON-CA            5.44    31.67    26.23   Mg3.000Al0.330Si3.670Ca0.165H2.000O12.000
SAPON-K             5.40    31.34    25.94   Mg3.000Al0.330Si3.670K0.330H2.000O12.000
```

```
SAPON-MG          5.54    31.73    26.19   Mg3.165Al0.330Si3.670H2.000O12.000
SAPON-NA          5.62    31.91    26.28   Mg3.000Al0.330Si3.670Na0.330H2.000O12.000
SCOLECIT         -6.25     7.16    13.41   Si3.000Ca1.000Al2.000H6.000O13.000
SEP              -3.62   -40.83   -37.21   Mg2.000Si3.000H7.000O11.500
SEPIOLIT         -0.00    30.35    30.35   Mg4.000Si6.000H14.000O23.000
SI(CR)         -140.21   -77.28    62.93   Si1.000
SI(G)          -211.25   -77.28   133.97   Si1.000
SIL              -2.79    -5.81    -3.02   Si1.000H2.000O3.000
SIL(AM)1         -3.09    -5.80    -2.71   Si1.000O2.000
SILI(AM)         -3.17    -5.80    -2.64   Si1.000O2.000
SILICA          -21.21   -23.68    -2.47   Si1.000H1.000O2.000
SiO2(am)         -3.17    -5.80    -2.64   Si1.000O2.000
SIO2(QUA         -1.80    -5.80    -4.00   Si1.000O2.000
SO2(G)          -51.26   -56.58    -5.32   S1.000O2.000
STILBITE        -29.89   -13.37    16.52   Si13.000Ca2.000Al5.000Na1.000H28.000O50.000
TALC              4.63    25.70    21.07   Mg3.000Si4.000H2.000O12.000
TOBERMOR        -20.53    44.99    65.51   Si6.000Ca5.000H11.000O22.500
TOPAZ,           -9.99     2.82    12.81   Al2.000Si1.000H2.000O6.000
TREMOLIT          9.34    67.04    57.70   Mg5.000Si8.000Ca2.000H2.000O24.000
WAIRAKIT        -16.64     1.37    18.01   Si4.000Ca1.000Al2.000H4.000O14.000
XONOTLIT        -30.73    61.00    91.73   Si6.000Ca6.000H2.000O19.000
YUGAWARA        -14.33   -10.26     4.07   Si6.000Ca1.000Al2.000H8.000O20.000

------------------
End of simulation.
------------------

-------------------------------------
Reading input data for simulation 2.
-------------------------------------

-----------
End of run.
-----------
```

国際単位系（SI）

表１．SI 基本単位

基本量	SI 基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd

表２．基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

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

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

表３．固有の名称と記号で表されるSI組立単位

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

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

表４．単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

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

表５．SI 接頭語

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

表６．SIに属さないが、SIと併用される単位

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

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

名称	記号	SI 単位で表される数値
電子ボルト	eV	$1eV=1.602\ 176\ 53(14)\times10^{-19}J$
ダルトン	Da	$1Da=1.660\ 538\ 86(28)\times10^{-27}kg$
統一原子質量単位	u	1u=1 Da
天文単位	ua	$1ua=1.495\ 978\ 706\ 91(6)\times10^{11}m$

表８．SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

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

表９．固有の名称をもつCGS組立単位

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

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

表10．SIに属さないその他の単位の例

名称	記号	SI 単位で表される数値
キュリー	Ci	$1\ Ci=3.7\times10^{10}Bq$
レントゲン	R	$1\ R = 2.58\times10^{-4}C/kg$
ラド	rad	$1\ rad=1cGy=10^{-2}Gy$
レム	rem	$1\ rem=1\ cSv=10^{-2}Sv$
ガンマ	γ	1 γ =1 nT=10-9T
フェルミ		1フェルミ=1 fm=10-15m
メートル系カラット		1メートル系カラット = 200 mg = 2×10-4kg
トル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
カロリー	cal	1cal=4.1858J（「15℃」カロリー），4.1868J（「IT」カロリー）4.184J（「熱化学」カロリー）
ミクロン	μ	1 μ =1μm=10^{-6}m

（第8版，2006年改訂）

この印刷物は再生紙を使用しています