

J A E R I - M
92-210

溶融塩系の核分裂燃焼に伴う
化学反応性の解析

1993年1月

小川 徹

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

JAERI-Mレポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。

入手の問合せは、日本原子力研究所技術情報部情報資料課(〒319-11 茨城県那珂郡東海村)あて、お申しこみください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター(〒319-11 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内)で複写による実費領布をおこなっております。

JAERI-M reports are issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Information Division Department of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokaimura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-11, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1993

編集兼発行 日本原子力研究所
印 刷 ニッセイエプロ株式会社

溶融塩系の核分裂燃焼に伴う化学反応性の解析

日本原子力研究所東海研究所燃料・材料工学部

小川 徹

(1992年12月7日受理)

$\text{LiF}-\text{BeF}_2-\text{ThF}_4-\text{UF}_4$ 溶融塩、(TRU) Cl_3-NaCl 溶融塩 (TRU : 超ウラン元素) の核分裂燃焼に伴う化学反応性について、自由エネルギー最小化法を用いた熱力学的解析を行った。フッ化物溶融塩についての解析結果は米国における溶融塩実験炉 (MSRE) の運転経験、特に、一次系内の FP 分布測定結果、ハステロイ N 合金の腐食反応に関する知見を良く再現した。しかし、従来看過されてきた問題として、一次系内での U-Pd 合金粒子の沈殿形成の可能性を見出した。TRU 塩化物溶融塩系についての解析結果は、(1) PdTe 粒子が蓄積して Te 源として作用し続け、構造材合金と Te との反応をもたらす可能性、(2) Np-Pu-Pd 合金粒子の沈殿形成の可能性、(3) フッ化物溶融塩系にはない原子価調整の困難性、(4) 溶融塩から蒸発した ZrCl_4 が排気系内で凝縮する可能性、を示すものであった。また、溶融塩に基づいた核的システムの成立性検討には、Ni-Cr-Fe-Te 系、Pd-Ag-Te 系、(U, Np, Pu)-Zr-Pd 系などの多元合金系の振舞いについての理解が不可欠であることを示した。

Analysis of Chemical Reactivity of Burnup Molten Salts

Toru OGAWA

Department of Fuels and Materials Research

Tokai Research Establishment

Japan Atomic Energy Research Institute

Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received December 7, 1992)

Reactivity of $\text{LiF}-\text{BeF}_2-\text{ThF}_4-\text{UF}_4$ and $(\text{TRU})\text{Cl}_3-\text{NaCl}$ (TRU: transuranium elements) molten salts with burnup has been thermodynamically analyzed with a free-energy minimization method. The results on the fluoride salts reproduced the operational experience of an experimental molten salt reactor (MSRE), particularly the distribution of fission products in the primary system and the corrosion of Hastelloy N. A possibility of U-Pd alloy segregation, which has been neglected, was newly identified. The results on the TRU chloride system indicate possibilities of (1) accumulation of PdTe which acts as a chemical potential source to cause the structural alloy corrosion, (2) segregation of Np-Pu-Pd alloys, (3) difficulty in valence control unlike that in the fluoride salts and (4) condensation of ZrCl_4 vapor in the off-gas system. It was shown that the understanding of alloy systems Ni-Cr-Fe-Te, Pd-Ag-Te, U(Np)-Zr-Te etc. is important in feasibility studies of nuclear systems based on the molten salts.

Keywords: Molten Salt Reactor, Transmutation, Actinide burning, Fluoride, Chloride, Transuranium elements, Thorium.

目 次

1. 緒 言	1
2. 解 析	3
2.1 解析条件	3
2.1.1 フッ化物溶融塩	3
2.1.2 TRU 塩化物溶融塩	4
2.1.3 構造材合金	4
2.2 解析方法	5
2.2.1 フッ化物溶融塩	5
2.2.2 TRU 塩化物溶融塩	6
3. 結果と考察	9
3.1 フッ化物溶融塩	9
3.1.1 フッ化物溶融塩系の解析結果	9
3.1.2 フッ化物溶融塩系の考察	11
3.2 TRU 塩化物溶融塩	12
3.2.1 TRU 塩化物溶融塩系の解析結果	12
3.2.2 TRU 塩化物溶融塩系の考察	14
4. 結 語	16
謝 辞	17
参考文献	18
付録 1 ChemSage 入力データ例	21
付録 2 ChemSage 解析結果出力例	64
付録 3 Ni-Te 及び Pd - Te 合金の熱力学的性質	91

Contents

1. Introduction	1
2. Analysis	3
2.1 Conditions	3
2.1.1 Fluoride Salts	3
2.1.2 TRU Chloride Salts	4
2.1.3 Structural Alloys	4
2.2 Method	5
2.2.1 Fluoride Salts	5
2.2.2 TRU Chloride Salts	6
3. Results and Discussions	9
3.1 Fluoride Salts	9
3.1.1 Results	9
3.1.2 Discussions	11
3.2 TRU Chloride Salts	12
3.2.1 Results	12
3.2.2 Discussions	14
4. Conclusion	16
Acknowledgements	17
References	18
Appendix 1 Examples of ChemSage Inputs	21
Appendix 2 Examples of ChemSage Outputs	64
Appendix 3 Thermodynamic Properties of Ni-Te and Pd-Te Alloys	91

1. 緒言

フッ化物溶融塩の優れた特性を利用した溶融塩炉の概念が現れてから久しいにもかかわらず、その可能性と限界とが十分に議論されたとは言い難いようである。特に、溶融塩による構造材の腐食の問題を含んだ、核分裂燃焼に伴う系の高温化学的挙動については、詳細な熱力学的検討は行われていない。今日、超ウラン元素（T R U）の加速器消滅において溶融塩炉を用いた体系の提案がなされるなど、改めて溶融塩体系が注目されていることからも、この問題に関わる解析が必要である。

本研究では、(1)過去に米国オークリッジ国立研究所（O R N L）での実験炉（M S R E）運転経験の存在する Th-U フッ化物溶融塩系と、(2)現在 T R U 廃棄物の加速器消滅の概念検討でとりあげられている T R U 塩化物溶融塩系との、それについて核分裂燃焼に伴う系の化学反応性と、構造材との両立性の問題を熱力学的に解析した。

ここで行った作業は以下の通りである。

① LiF - BeF₂ - ThF₄ - UF₄ 塩を用いた M S R E の経験が、熱力学的解析によって正しく再現できるかどうかを検討した。M S R E では構造材として Ni 基固体合金のハスティロイ N を用いたが、合金表面でおそらく核分裂生成物のテルル (Te) によると考えられる粒界割れが発見された⁽¹⁾。その後、この対策として、1 ~ 2 % の Nb 添加が有効であることなどを発見した⁽²⁾が、実際の系での実証試験までにはいたっていない。溶融塩炉では主に合金中の Cr のフッ化を防ぐ目的で、塩中の UF₄ と UF₃ との濃度比を介して、フッ素の化学ポテンシャルを制御している。この特定の化学ポテンシャルの付近で、核分裂生成物 (F P) の化学形と、構造材中の Ni, Cr の関与する反応とを調べた。

② 消滅処理ターゲット塩⁽³⁾として熱・核的な検討の対象とされている (T R U) C l₃-N a C l 系では、構造材との反応の問題がどのような様相を示すかを予測した。消滅処理システムは基本的に高速中性子体系であるので、フッ化物は適当ではなく、また、重金属含有量もできるだけ大きくすることが必要である。同系は従来のフッ化物溶融塩系とは、塩化物とフッ化物との違いに加えて、核分裂密度が顕著に高く、定常的な F P 濃度も高くなるという点でも、苛酷な化学環境を形成する。

溶融塩系の高温化学では、温度、組成等の条件が規定されれば、系のあるまいについて概念的な見通しを得ることはそれほど困難ではないと考えられる。しかし、溶融塩炉の高温化学を正確に扱うには、溶融塩のバルクにおける平衡と同時に、自由液面及び構造材との界面における局所平衡とを理解しなければならない。ある局所の平衡は、別の局所の平衡の関数もある。1 次系のなかで溶融塩が接触する界面の全領域には、組成の不均一と温度分布とが存在する。それら局所の複合した全体の挙動を正確に理解し、制御するのは、大きなシステムにおいては必ずしも単純な課題ではないであろう。これに対し、固体燃料の特長は、被覆管という防護壁が 1 つ余計に存在することよりも、むしろ、系を個々の燃料要素内に小さく限ることで、F P、アクチノイド、被覆材成分を

含む多元系の高温化学的な条件をも限定してしまうところにある^{*}。また、ある場合には、温度を十分低く保つことで固体燃料中の物質移動を抑制し、反応速度を制限することにある。溶融塩炉を始めとする流体（液体、気体）燃料に基づく核システムは、高温化学体系としての大きさ、そして、界面の拡がりと多様さの点で従来の核システムと大きく異なっている。

T R U 塩化物を高濃度で含む系では塩素の化学ポテンシャルを十分低い値に制御することは困難である。この点が、フッ化物溶融塩系と大きく異なるところであり、系の化学環境は苛酷なものとなる。また、今回の解析の結果、溶融塩系の核分裂燃焼に伴うもう一つの、これまで看過されてきた問題として、アクチノイド-P d 合金粒子析出物形成の可能性を見出した。溶融塩系の概念的な成立性を検討する上で重要なのは、溶融塩そのものの高温化学に加えて、N i - C r - T e 系、P d - A g - T e 系、U (N p) - Z r - P d 系といった多成分合金系の振舞いであることも分った。これらの結論を導くにいたった解析の前提、過程、結果を以下に述べる。

* 被覆粒子燃料はその極限にある一概念である。

2. 解析

2.1 解析条件

2.1.1 フッ化物溶融塩

フッ化物溶融塩としては、溶融塩増殖炉(MSBR)用として提案されたLiF-B₂F₃-ThF₄-UF₄(71.7-16-12-0.3mol%)を想定した⁽³⁾。実験炉(MSRE)で実際に用いられたのは、LiF-B₂F₃-ZrF₄-UF₄(65-29.1-5-0.9mol%)である。ここでは、予備解析を行い、ThをZrで置換しても、系の全体的なふるまいにはほとんど影響しないことを確認した²。

MSBRでは一次系には約49m³(160t)の塩が装荷され、5.5m³/日(18t/日)が化学精製系に排出され、排出されただけの塩は新たに供給される。一次系塩の排出速度は毎秒約1×10⁻⁴%である。一方、出力は2250MWtであり、一次系塩中のU原子は毎秒約1×10⁻⁶%が燃焼する。したがって、以下の解析では、FPの定常的な一次系内存在量として、Uの燃焼率換算で1at%を採用した。塩中にはUF₄がもともと0.3mol%しか存在しないので、定常的なFPインベントリーは微量である。

FP収率には²³³Uの熱中性子核分裂収率⁽⁴⁾を用いた。Thからの²³³Uの生成は考慮していない。解析上重要なのはUの絶対量の僅かな変化よりも、むしろUF₄とUF₃とのモル比だからである。

また、CsやSrについて希ガス先行核種の自由液面からの放出によって、実効的なインベントリーは核分裂収率からの期待値よりかなり小さくなり得る。しかし、これらアルカリ金属、アルカリ土類金属FPの絶対量は、UF₄/UF₃比が正確に制御されている限り、系の平衡に特に影響するものではないので、その蒸発損失の効果は無視することとした。

MSBRの熱交換器入口/出口温度は978/839Kである。解析温度としては1000Kを採用した。ちなみに、熱交換器配管の伝熱面積当りの塩の流速は約=2.5kg/m²·s~40mol/e/m²·sである。また、炉容器設計圧力5.2atmに対し、解析は1atmを仮定した。

MSREの運転では一次系内の適当な箇所にBe棒を置き、UF₄を部分的に還元してUF₄/UF₃比を適切な値(~100)に調整した。Be棒近傍では若干UF₃が必要量より過剰気味であり、そこから離れた箇所で系の塩全体との混合により適当な水準になる。フッ化物溶融塩炉ではこのUF₄/UF₃比の制御が正確に行われることが極めて重要になるが、このように、系内の場所による組成のゆらぎを完璧に避けることは不可能である。

酸素混入はアクチノイド酸化物析出をもたらし、また、合金の急速な局部腐食を起こすので、MSBRでは燃料塩中の酸素量を30ppm以下に制限している。ここでは、酸素、水分の制御が十分行われると仮定して、酸素含有量は0とした。なお、酸素の効果は、Grimesら⁽¹⁾及び大道ら⁽¹⁰⁾によって詳しく検討されている。

2. 1. 2 TRU 塩化物溶融塩

TRU 塩化物溶融塩系としては、 $\text{NaCl} - (\text{TRU})\text{Cl}_3$ (64 - 36 mol%) を想定した。一次系のTRU装荷量5 tに対して、250 kg/年 (685 g/日) の消滅速度が要求される⁽⁵⁾。このとき、一次系TRUは毎秒 $1.6 \times 10^{-7}\%$ が燃焼する。塩精製系の日処理量として20 kg TRUを仮定する。すなわち、一次系TRUは毎秒 $4.6 \times 10^{-6}\%$ が再処理系に排出されるとする。したがって、定常状態ではFPの一次系内存在量はTRUの燃焼率換算で約3 at%である。しかし、フッ化物溶融塩の場合とは異なり、この定常状態到達には長時間が必要である。以下の解析では、0.1 ~ 1 at%を仮定した。1 at%という数値は上記のフッ化物溶融塩系の場合と等しいが、核分裂性物質(全アクチノイド)の含有割合がこの場合は約100倍高いのに応じて、FP濃度も高くなる。

FP収率は ^{239}Pu の高速核分裂の値⁽⁴⁾を用いた。 ^{239}Pu のFP収率は、 ^{237}Np と ^{241}Am とのそれのはば中間になっているからである。

塩の融点は約730 Kと推定されている。平衡解析では控え目の値として、構造材表面で800 Kを仮定した。圧力は1 atmとした。

また、フッ化物溶融塩系同様、酸素、水分の不純物混入は完全に制御されたと仮定する**。

2. 1. 3 構造材合金

ハステロイNは重量組成として17%Mo、7%Cr、5%Feを含んだNi基固溶体型合金であり、基本的にFCC構造のγ相からなる⁽⁸⁾。Moは固溶強化のために、Crは耐酸化性向上のために加えられている。0.06%程度含まれる炭素は、Mo及びCrを多く含んだ炭化物(M₂C)を粒界に析出し、結晶粒径を安定化させる。一方、炭化物の組成及び安定性は、合金融解時に耐火物から混入するSi不純物量によって左右される。低Siでは炭化物はM₂Cとなるが、粒界での安定性はM₂Cより劣り、マトリックスに再溶解しやすいようである。粒界での微量析出物形成等に伴う局所組成の不均一は、粒界腐食を検討する上で重要な問題であるが、ここでは扱わなかった。なお、MSBRについて新たに提案された、改良ハステロイNでは(Ti + Hf)を約2%、Nbを約1%添加し、その代りFeを0.1%に減らしている⁽¹⁾。また、Si含有量の低減化を図っている。ここでは、MSREの経験の再現に重点を置いたので、Ti、Nbの添加効果は検討していない。

* ただし、自由液面直上でのZrF₄の蒸気圧は～ 10^{-3} atmにも達しえるので、必要がなければZrF₄の添加は避けた方が良いであろう。

** 経験上、塩化物系では酸素、水分制御は極めて困難であると指摘されているが、この問題についてはここでは未検討である。

2. 2 解析方法

平衡解析には自由エネルギー最小化法コード ChemSage⁽⁵⁾を用いた。同コードは構成要素（元素）最大15個について、溶体相最大20個を含む系を対象とし、化学種300個までを含んだ平衡を扱うことができる。

熱力学データはSGTE純物質データベース⁽⁷⁾に原研でアクチノイド、FP化学種関連データを追加したデータベース⁽⁸⁾から採った。原研で開発したファイルセレクタ⁽⁹⁾を介して、同データベースからChemSage用データファイルを自動作成した。一つの系についても、扱う条件によって多様な入力ファイルが必要である。なお、幾つかの入力、出力例を付録1～2に示した。

2. 2. 1 フッ化物溶融塩

溶融塩のバルクにおける平衡の概要をつかむためには、燃料溶融塩にFPのみを加え、構造材成分は含まない系を構成した。FPのうち明らかに系の平衡に関与しない希ガスを除外し、その他のFPについてはそれぞれの熱力学的性質に応じたグループ化を行った。現状のChemSageでは一度に取扱える元素数は最大15個までであるからである。考慮した構成元素とグループをTable 1に示す。例えば、Csによってアルカリ金属(Cs、Rb)を代表させ、熱力学的性質はCsのものを、核分裂収率はCsとRbとの和を用いた。

構造材界面での平衡を検討するには、Ni、Crを含む系を構成した。かわりに系からMo、Ruを除外した。溶融塩バルクの検討から、ここで関心のある酸化ポテンシャル領域では、MoとRuとは金属状態で存在し、ほとんど反応に関与しないことが明らかになったからである。溶融塩バルク中のMoフッ化物としては、MoF₅とMoF₆との存在を考慮に入れた。

平衡計算では気相を含めたが、気相容積は0として、比較的蒸気圧の高い化学種（例えばBeF₂、Te₂）の自由液面からの蒸発損失を考慮しない計算を行った。この場合、気相に関する出力としては平衡蒸気圧のみが得られる。

考慮した化学種をTable 2に示す。溶融塩相はハロゲン化物で構成される理想溶体とした。但し、系の平衡に最も重要な影響を持つU、Crのフッ化物の自由エネルギー・データについては、LiF-BeF₂系中の標準生成自由エネルギーとしてGrimesら⁽¹⁾によって与えられた値を用いることによって、溶融塩中での相互作用を近似的に取込むように配慮した。

テルル及びテルル化物の溶融塩中への溶解度は不明であり、これらの凝縮相は単体として扱った。Keiser⁽²⁾はハステロイN容器内に満たしたLiF-BeF₂-ThF₄中にCr₃Te₄を添加し、923Kで最大15ppm程度のTeの溶解を認めてている。しかし、このときCrは105ppm溶解している。MSREでのFP分布測定では、Teは溶融塩相に溶解しない貴金属FPと同様の分布を示している⁽¹⁾。

貴金属FP合金(Mo-Tc-Ru-Rh-Pd)相は元素単体の単なる集合で置き

換え、溶体としての扱いは行わなかった。したがって、金属状態にあるときのこれらの元素単体の活量は1と置かれている。この妥当性については、解析結果とともに議論する。

構造材合金については、予備的に、SGTE溶体データベース⁽⁷⁾中のNi-Cr-Fe-N(窒素)合金系モデルを用いてNi-Cr-Fe合金の振舞を調べた。その結果、Crの活量はほぼそのモル分率に等しいことを見出した(Fig. 1)。Grimesら⁽¹⁾は、同合金中のCrの活量を0.05としている。したがって、ここでは構造材を、初期濃度5%Cr(初期活量0.05)のNi-Cr理想溶体として扱った。これによって、反応にともなう表面Cr量減損の効果を考慮に入れることができる。

2. 2. 2 TRU塩化物溶融塩

考慮した化学種をTable 3に示す。溶融塩相はハロゲン化物で構成される理想溶体とした。NaCl-PuCl₃系は単純な共晶系を構成する⁽⁹⁾。したがって、NaClとアクチノイド三塩化物との間には正の相互作用があると考えられるが、活量係数が1から大きくずれることはないであろう。

AgによってFPのAg, Cd, In, Sn, Sbを代表させるのはやや無理があるので、構造材元素を含まない溶融塩バルクについての計算では、Ag, Cd, Inの3元素とその化学種を考慮に入れ、Inの収率にSnとSbの収率を含めた計算も行い、大きな影響はないことを確認した。

アクチノイドの燃焼以外の、中性子捕獲による核変換は考慮しなかった。その代わり、NaCl-(Np_{0.5}, Am_{0.5})Cl₃とNaCl-PuCl₃との2つの系について計算を行った。

Table 1 Grouping of elements and fission yields

Group	Elements	Total yield (%)	
		U-233	Pu-239
Cs	Cs, Rb	23.07	21.84
Ba	Sr, Ba	17.78	9.42
Zr	Zr, Nb	32.6	18.16
Mo	Mo, Tc	26.3	28.07
Ru	Ru, Rh	8.42	30.94
Pd	Pd	0.72	11.07
Ag	Ag, Cd, In, Sn, Sb	0.61	3.76
Te	Te	3.01	3.49
Nd	Y and rare earths	54.2	45.61
I	I, Br	2.55	2.25
Li	Li		
Be	Be		
Th	Th		
U	U		
F	F		
Na	Na		
Pu	Pu		
Am	Am		
Np	Np		
Cl	Cl		
Ni	Ni		
Cr	Cr		

Table 2 Phases and species considered for the fluoride salt system

Phase	Species
Gas	Te_2 , Te , F_2 , F , BeF_2 , LiF , Li_2F_2 , Li_3F_3 , ZrF_4 , ZrF_3 , MoF_4 , MoF_3 , BaF_2 , I , I_2 , LiI , FI etc.
Liquid	LiF , BeF_2 , Li_2BeF_4 , ThF_4 , UF_4 , UF_3 , NiF_2 , CrF_2 , CrF_3 , CrF_4 , BaF , CsF , PdF_2 , ZrF_2 , ZrF_3 , NdF_3 , MoF_5 , MoF_6 , RuF_5 , LiI , AgI , BaI_2 , CsI , NiI_2 , CrI_2 , CrI_3 , MoI_2 etc.
Invariant stoichiometric phases	Mo , Ru , Pd , Te , PdTe , PdTe_2 , Ag_2Te , $\text{Ag}_{1.64}\text{Te}$, Li_2Te , Cs_2Te , $\text{NiTe}_{1.1}$, Cr_2Te_3 , Cr_7Te_8 , UPd_3 , URu_3 etc.
Alloy	Ni , Cr

Table 3 Phases and species considered for the chloride salt system

Phase	Species
Gas	Te_2 , Te , Cl_2 , Cl , NaCl , Na_2Cl_2 , ZrCl_4 , ZrCl_3 , ZrCl_2 , NiCl_2 , NiCl , BaCl_2 , I , I_2 , Na , Cs , ZrI_2 , ZrI_3 , ZrI_4 , MoCl_4 , ClI etc.
Liquid	PuCl_3 , NpCl_4 , NpCl_3 , AmCl_3 , NaCl , CsCl , AgCl , BaCl_2 , NdCl_3 , CrCl_2 , CrCl_3 , NiCl_2 , ZrCl_2 , ZrCl_3 , ZrCl_4 , MoCl_4 , RuCl_3 , CsI , NaI , AgI etc.
Invariant stoichiometric phases	Mo , Ru , Pd , Te , PdTe , PdTe_2 , Ag_2Te , $\text{Ag}_{1.64}\text{Te}$, Li_2Te , Cs_2Te , $\text{NiTe}_{1.1}$, Cr_2Te_3 , Cr_7Te_8 , UPd_3 , URu_3 etc.
Alloy	Ni , Cr

3. 結果と考察

解析結果を Table 4～7にまとめた。

3.1 フッ化物溶融塩

3.1.1 フッ化物溶融塩系の解析結果

フッ化物溶融塩炉では、ハステロイN中のCrの溶出を防ぐために、 $UF_4/UF_3 \sim 100$ としている。ここでは、 UF_4/UF_3 比を $17 \sim 5, 4 \times 10^6$ の間で変化させて、系の平衡を調べた。これは、平衡フッ素分圧では、 $p(F_2) = 10^{-37} \sim 10^{-25}$ atmの範囲に相当している。

Table 4にはFPの主な化学形の変化を、構造材を含まない場合の溶融塩バルクについて示した。1つの元素について2つ以上の化学種が示されている場合は、相対量の順になっている。また、生成量が微量である場合は()で囲った。アルカリ金属(Cs, Rb)、アルカリ土類(Sr, Ba)、希土類(Y, La, Ce, Nd等)、Zr及びヨウ素は溶融塩相に溶解している。ここで行ったモデリングでは、ヨウ素はヨウ化物(CsI, AgI等)として溶解していると理解される。Moは溶融塩炉の運転条件より相当高い酸化ボテンシャルとならない限り、溶融塩中には溶解せず金属として析出する。Ruは計算された全領域で金属析出物として存在する。これらの挙動は、単にハロゲン化物の生成の自由エネルギーの比較からも推定されることである。

複雑な挙動を示すのは、Ag, Pd, TeそしてUである。比較的高い酸化ボテンシャルでは、Agは溶融塩中に溶解し、Pdはテルルの一部と結合しPdTeとして析出する。しかし、溶融塩炉のフッ素ボテンシャルに対応する領域では、Pdはウランの一部と反応して UPd_3 を形成して析出する。これとともに、Agの大半は Ag_2Te として析出する。Teは常に、PdあるいはAgとの反応に十分以上の余剰量存在する。

Table 5には構造材合金との界面での平衡を予測した結果を示す。FPのうち、溶融塩バルクと化学形が顕著に異なるのは、TeとPdである。Teは酸化ボテンシャルに依存して、合金成分のNiあるいはCrと優先的に結合する。PdTeがNiの存在下では不安定となる結果、比較的高い酸化ボテンシャルにおいてもPdは UPd_3 を形成する。

Crの溶出は $UF_4/UF_3 \sim 100$ の条件下で抑制され、合金表面のCrの濃度がやや低下したところで、溶融塩中のCrイオンとの間の平衡が達成される(付録2例1参照)。系の平衡は合金表面の組成を決定するだけであり、Cr減損過程そのものは合金中の金属原子の拡散によって律速される。この意味では、 $UF_4/UF_3 \sim 100$ の条件はそれほど厳密なものとは考えられない。

また、 $UF_4/UF_3 \sim 50$ 以下で、NiTe_{1.1}はCr₇Te₈に取って替わられる。

Table 4 Predominant chemical forms of fission products in the fluoride salts in the absence of structural materials. (MS: Molten salt phase)

T=1000K									
P(F ₂)	UF ₄ /UF ₃	CS	Ba	Zr	Nd	Ag	Mo	Ru	Pd
1.0 ⁻²⁶	5.43x10 ⁶	MS	MS	MS	MS	MS	Mo+MS	Ru	PdTe
1.0 ⁻³⁰	5.43x10 ⁴	MS	MS	MS	MS	MS	Mo	Ru	PdTe
1.0 ⁻³¹	1.72x10 ⁴	MS	MS	MS	MS	MS	Mo	Ru	PdTe
1.0 ⁻³²	5.43x10 ³	MS	MS	MS	MS	MS+Ag ₂ Te	Mo	Ru	PdTe
1.0 ⁻³³	1.72x10 ³	MS	MS	MS	MS	Ag ₂ Te+MS	Mo	Ru	Te+Ag ₂ Te
1.0 ⁻³⁴	543	MS	MS	MS	MS	Ag ₂ Te+MS	Mo	Ru	UPd ₃
1.0 ⁻³⁵	172	MS	MS	MS	MS	Ag ₂ Te+MS	Mo	Ru	UPd ₃
1.0 ⁻³⁶	54	MS	MS	MS	MS	Ag ₂ Te+MS	Mo	Ru	Te+Ag ₂ Te
1.0 ⁻³⁷	17	MS	MS	MS	MS	Ag ₂ Te+MS	Mo	Ru	Te+Ag ₂ Te

Table 5 Predominant chemical forms of fission products and structural elements at the interface of the fluoride salts and alloys. (MS: Molten salt phase)

T=1000K									
P(F ₂)	UF ₄ /UF ₃	Ag	Pd	Te	Ni	Cr			
1.0 ⁻³¹	1.72x10 ⁴	MS	UPd ₃	NiTe _{1.1}	Ni+NiTe _{1.1} +MS	MS			
1.0 ⁻³²	5.43x10 ³	MS	UPd ₃	NiTe _{1.1}	Ni+NiTe _{1.1} +MS	MS			
1.0 ⁻³³	1.72x10 ³	MS	UPd ₃	NiTe _{1.1}	Ni+NiTe _{1.1} +MS	MS			
1.0 ⁻³⁴	543	MS	UPd ₃	NiTe _{1.1}	Ni+NiTe _{1.1} +MS	MS			
1.0 ⁻³⁵	172	Ag ₂ Te+MS	UPd ₃	NiTe _{1.1} +Ag ₂ Te	Ni+NiTe _{1.1} + (MS)	Cr+(MS)			
1.0 ⁻³⁶	54	Ag ₂ Te+MS	UPd ₃	NiTe _{1.1} +Ag ₂ Te	Ni+NiTe _{1.1} + (MS)	Cr+(MS)			
1.0 ⁻³⁷	17	Ag ₂ Te+MS	UPd ₃	Cr ₇ Te ₆ +Ag ₂ Te	Ni	Cr+Cr ₇ Te ₆			

3. 1. 2 フッ化物溶融塩系の考察

上記の解析結果は、Grimesら⁽¹⁾によって報告されているMSREの系内でのFP分布状態の測定結果と良く一致する。Grimesらは測定結果に簡単な熱力学的考察を加えており、その内容も大筋で上記解析結果と一致する。しかし、彼等によって扱われていないのは、この系におけるTe、Ag、Pd、U及び構造材合金元素の間での反応である。

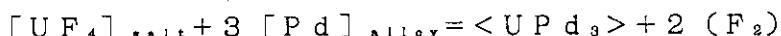
Uの核分裂では、この化学系内においてTeを固定し得る元素(Pd, Ag等)の収率はTeの収率の半分程しかなく、常に余剰のTeが存在する。この余剰Teは自由液面から一部蒸発するにしても、ある量は合金のNiと反応するであろう。

Keiser⁽²⁾は実験により、過剰のCrテルル化物を添加し、かつ、UF₄/UF₃<60に制御すれば、ハステロイNの粒界腐食が著しく抑制されることを見出した。

Table 5の解析結果では、UF₄/UF₃<50では、合金表面でNiTe_{1.1}が不安定となり、Cr₇Te₈が替わって安定になることが示されている。したがって、この酸化ボテンシャルの領域で既に過剰のCrテルル化物が系内に存在すれば、合金とTeとの反応は抑制される可能性が高い。

しかし、これまで認識されていないが、UF₄/UF₃を低めに抑えることには、一つの危険性がある。Pdの核分裂収率は1%弱に過ぎず、MSBRの定常状態でもU量の一万分の一程度しか存在しない。しかし、低いUF₄/UF₃比のもとでは、Pdがフッ化ウランの一部を還元し、UPd₃が析出し得る。これが、炉の運転・維持にどのような影響を与えるかについては慎重な検討が必要であろう。

上記解析では、金属状態のPdの化学活量を1とした。しかし、条件によっては、Pdは他のFPのMo, Tc, Ru, Rhと合金を形成するであろう。これらFPの核分裂収率から考えて、Pdの活量は0.01程度になっていることも考えられる。その効果を検討するために、次の反応を考える。



Pd活量、a(Pd)=0.01、UF₄のモル分率、N(UF₄)=0.003のとき、1000Kでは、

$$\begin{aligned} p(F_2) &= \exp \left[\{ \Delta G_f^\circ (UF_4) - \Delta G_f^\circ (UPd_3) + \right. \\ &\quad \left. + RT \ln N(UF_4) + 3RT \ln a(Pd) \} / 2RT \right] \\ &= \exp [(-1623390 + 531780 - 48297 - 114862) / 2RT] \\ &= 1.7 \times 10^{-33} \text{ atm} \end{aligned}$$

より低い平衡フッ素分圧に相当する条件においてUPd₃が生成し得る。Table 5からは、この平衡フッ素分圧はUF₄/UF₃比で約1700以下に相当する。a(Pd)=1、かつ、Teの存在しないとき、この限界はp(F₂)=1.7×10⁻³⁰ atmまで上昇する。

これと競合し得る反応として、次のZrPd₃生成反応が考えられる。



Pd活量、a(Pd) = 0.01、ZrF₄のモル分率、N(ZrF₄) ~ 10⁻⁵のとき、1000Kでは、

$$\begin{aligned} p(F_2) &= \exp [\{ \Delta G_f^\circ (ZrF_4) - \Delta G_f^\circ (ZrPd_3) + \\ &\quad + RT \ln N(ZrF_4) + 3RT \ln a(Pd) \} / 2RT] \\ &= \exp [(-1600000 (\pm 20000) + 291200 - 95718 - 114862) / 2RT] \\ &= \sim 10^{-40} \text{ atm} \end{aligned}$$

にまで、平衡フッ素分圧が低下しなければ、この反応は起き得ない。したがって、この反応は溶融塩炉条件下ではあり得ないとして良いであろう。なお、ここで、ZrPd₃の生成の自由エネルギーはStolenら⁽¹⁰⁾による。Stolenらの値はZrC/Pd反応からの先の評価値⁽¹⁴⁾と良く一致している。

MSREの経験では、貴金属FPの微細析出物は、一次系内に比較的ルーズな沈殿物として堆積しているようである⁽¹⁵⁾。U-Pd合金はPd含有粒子表面反応層としてこれら沈殿物に含まれることになるであろう。MSREの分析結果にこの問題が認められていないのは、もっぱら炉の運転実績が浅く、Pdの炉内インベントリ自体が小さかったことによる可能性がある。

3.2 TRU塩化物溶融塩

3.2.1 TRU塩化物溶融塩系の解析結果

TRU塩化物溶融塩系の挙動も、大筋においては上記フッ化物溶融塩系と異なる。大きな違いは、(1)アクチノイドが主に3価陽イオンであること、(2)定常時のFP濃度が桁違いに大きくなること(2.1.2参照)、(3)²³³UとTRUとの核分裂収率の違いを反映して、Pdの収率が10倍程度大きくなること(Table 1)である。

溶融塩バルクの結果をTable 6に示す。溶融塩バルクではTeはPdT_e及びAg₂Teとして存在する。両者の相対量は系の酸化ポテンシャルに依存する。Crの溶出を抑制するような、比較的低い酸化ポテンシャル下ではAg₂Teの方が多い。

Table 7には、構造材合金界面での化学形の予測結果を示した。構造材との界面ではPdT_eは不安定であり、分解してNiTe_{1.1}を生成する。溶融塩中でアクチノイドは主に3価陽イオンとして存在し、4価陽イオンは極微量しか存在しない。(N_{0.5}Am_{0.5})Cl₃-NaCl系、PuCl₃-NaCl系とともに、全く原子価調整を行わなければ、溶融塩バルクでp(Cl₂) ~ 10⁻¹² atm、構造材表面近傍でp(Cl₂) ~ 10⁻¹⁸ atm程度に達し、構造材合金は速やかに溶解してしまう。また、

Table 6 Predominant chemical forms of fission products in the TRU chloride salts in the absence of structural materials. (MS: Molten salt phase. G: Gas)

T=800K									
P(Cl ₂)	NpCl ₄ /NpCl ₃	Cs	Ba	Zr	Nd	Ag	Mo	Ru	Pd
10 ⁻¹⁶	7.2x10 ⁻⁷	MS	MS+G	MS	MS	MS+Ag ₂ Te	Mo	Ru	Pd+PdTe
10 ⁻¹⁸	7.2x10 ⁻⁸	MS	MS+G	MS	MS+Ag ₂ Te	Ag ₂ Te+MS	Mo	Ru	Pd+PdTe
10 ⁻²⁰	7.2x10 ⁻⁹	MS	MS+G	MS	Ag ₂ Te+MS	Ag ₂ Te+PdTe	Mo	Ru	Pd+PdTe
10 ⁻²²	7.2x10 ⁻¹⁰	MS	MS+G	MS	Ag ₂ Te+MS	Ag ₂ Te+PdTe	Mo	Ru	Pd+PdTe
10 ⁻²⁴	7.2x10 ⁻¹¹	MS	MS+G	MS	Ag ₂ Te	Ag ₂ Te+PdTe	Mo	Ru	Pd+PdTe
10 ⁻²⁶	7.2x10 ⁻¹²	MS	MS+G+Zr	MS	Ag ₂ Te	Ag ₂ Te+PdTe	Mo	Ru	Pd+PdTe

Table 7 Predominant chemical forms of fission products and structural elements at the interface of the TRU chloride salts and alloys. (MS: Molten salt phase. G: Gas)

T=800K									
P(Cl ₂)	NpCl ₄ /NpCl ₃	Zr	Ag	Pd	Te	Ni	Cr	Cr	Cr
10 ⁻¹⁶	7.2x10 ⁻⁷	MS+G	MS	Pd	NiTe _{1.1}	Ni+NiTe _{1.1} +MS	MS	MS	MS
10 ⁻¹⁸	7.2x10 ⁻⁸	MS+G	MS	Pd	NiTe _{1.1}	Ni+NiTe _{1.1} +MS	MS	MS	MS
10 ⁻²⁰	7.2x10 ⁻⁹	MS+G	Ag ₂ Te+MS	Pd	NiTe _{1.1} +Ag ₂ Te	Ni+NiTe _{1.1} +MS	MS+(Cr)	MS+(Cr)	MS+(Cr)
10 ⁻²²	7.2x10 ⁻¹⁰	MS+G	Ag ₂ Te+MS	Pd	Ag ₂ Te+NiTe _{1.1}	Ni+NiTe _{1.1}	Cr+(MS)	Cr+(MS)	Cr+(MS)
10 ⁻²⁴	7.2x10 ⁻¹¹	MS+G	Ag ₂ Te	Pd	Ag ₂ Te+NiTe _{1.1}	Ni+NiTe _{1.1}	Cr+(MS)	Cr+(MS)	Cr+(MS)
10 ⁻²⁶	7.2x10 ⁻¹²	MS+G+Zr	Ag ₂ Te	Pd	Ag ₂ Te+NiTe _{1.1}	Ni+NiTe _{1.1}	Cr	Cr	Cr

この高酸化ポテンシャル状態は、既に極く低い燃焼率の水準で実現される (Fig. 2)。

原子価調整を行うには、適当な強度の還元材を用いて $p(C_{12})$ を下げる必要がある。ここでは、一次系に Zr 金属棒を挿入して、 NpC_{14}/NpC_1 比を調整することを想定した。これより強い還元材の使用はアクチノイド金属をプレートアウトさせる恐れがある。 Zr は ZrC_{14} を生成し、一部溶融塩相に取込まれるが、ほとんどは ZrC_{14} 蒸気 (蒸気圧 $0.01 \sim 0.1 \text{ atm}$) として排気されると予測される。これによって系の余剰塩素が除去され、 $p(C_{12})$ が低下する。解析によれば、 $NpC_{14}/NpC_1 \leq 10^{-9}$ 程度に設定することができれば、構造材合金の溶解は防ぐことができる。ただし、これは解析上の可能性であって、実行上の困難は以下に述べる。

3.2.2 TRU 塩化物溶融塩系の考察

TRU 塩化物溶融塩系では Pd が Te に比べて十分過剰にあり、 Pd の一部は一次系内に $Pd - Te$ 合金粒子の沈殿を形成するであろう。 $Pd - Te$ 粒子の形成は、除去されがたい形で Te の一次系内蓄積が存在することを意味する。すなわち、沈殿中の $Pd - Te$ 合金は Te の化学ポテンシャル源 (chemical potential source) として作用し続けることになる。

上記フッ化物系と異なり、 Pd が Te に比べて過剰に存在することから、 $Pd - Te$ 合金および $Ni - Te$ 合金中の Te 活量について、本来はより詳細な解析が必要である。

$Pd - Te$ 合金中の Te 活量については、Predelら⁽¹⁷⁾、Ibser⁽¹⁸⁾、Mallikら⁽¹⁹⁾による測定があるが、Ibser及びMallikらの Te 活量測定値は、標準的な熱力学表にある $PdTe$ の生成の自由エネルギー、 $\Delta G_f^\circ(PdTe)$ 、に比較して小さ過ぎる。一方、Predelの測定値は大き過ぎる。したがって、現状では $Pd - Te$ 合金については詳細な解析は不可能である。ただし、PredelらとIbserとは $Pd_{0.8}Te_{0.4}$ 附近に液体合金の混合熱 (あるいは混合の剩余自由エネルギー) の最小値を見出しているという点では一致しており、液相中に $Pd_0.8Te_0.2$ に相当する会合の存在を示唆している。ここでは、 $Pd_{0.8}Te_{0.4}$ に混合熱の最小値が出現し、また、 $Pd_{0.5}Te_{0.5}$ の混合の自由エネルギーが Barin 热力学表⁽²⁰⁾ の $\Delta G_f^\circ(PdTe)$ と一致するものとして、仮想的な液体合金中の Te 活量を算出した。Fig. 3 には 800 K での Te 活量値を示した (付録 3 参照)。

一方、 $Ni - Te$ 合金系については、既存の測定間には比較的良い整合性がある。Fig. 4 には $NiTe_{1.1}$ の生成の自由エネルギーの温度依存性について、Barin の熱力学表⁽²⁰⁾ のデータと、Geiderikhら⁽²¹⁾ の EMF 測定データに基づくモデル (付録 3 参照) による計算結果とを比較した。また、Fig. 3 には、800 K での Te 活量を $Ni - Te$ 合金の組成の関数として示した。ここで対象としている Te 含有量 ($\sim Pd_{0.75}Te_{0.25}$) 附近では、 $Pd - Te$ 合金上の Te 活量は、 β_2 相 $Ni - Te$ 合金 ($\sim Ni_{0.6}Te_{0.4}$) を Ni 金属上に形成する程度に高くなる可能性があることが指摘できる。

フッ化物溶融塩系で UPd_3 生成が予測されたように、 $Np - Pd$ 合金生成の可能性もある。これを検討するのに必要な $Np - Pd$ 系の熱力学データは存在しない。しかし、

U Pd₃の生成の自由エネルギー ($\Delta G_f^\circ = -532 \text{ kJ/mol}$)⁽⁷⁾、PuPd₃の生成熱の予測値⁽¹¹⁾ (-234 kJ/mol) から考えて、NpPd₃の ΔG_f° は -200 kJ/mol より正ではないであろう。NpCl₃の生成の自由エネルギーは -723 kJ/mol であるから、 $p(Cl_2) < 10^{-19} \text{ atm}$ では、以下の反応によるNpPd₃の生成は十分可能である。ここで、Pdが仮にFP合金相中に取込まれているとして、そのPd活量 ($a(Pd)$) は、フッ化物溶融塩系よりも1桁程度高くなることにも注意が必要である。



すなわち、Crの溶出を抑えるのに必要な程度に酸化ボテンシャルを下げると、Np-Pu-Pd合金相が一次系内に形成され、沈積する可能性がある。この系ではPdの核分裂収率が大きいので、上記のフッ化物溶融塩系について予測される以上に、このアクチノイド合金相析出は深刻な問題となり得る。これと競合するのはZrPd₃生成反応であるが、その優先関係の議論にはNp-Pd、Pu-Pd系についての正確なデータが必要である。

なお、NpCl₄/NpCl₃比は原子価調整を行わないとして約10⁻⁶、Crの溶出がないレベルに調整するとして約10⁻⁹と極めて小さい。原子価状態を正確に監視し、調整し続けることは容易ではないであろう。

原子価調整剤としてここではZrを想定した。Zrを用いると、 $p(Cl_2) \sim 10^{-29} \text{ atm}$ 付近を下限として酸化ボテンシャルが調整できるという点で、金属Np析出の恐れがないからである(付録2、例4参照)。しかし、Zr塩化物は常温で固体であり、蒸発除去ののち排気系配管の低温部を閉塞する恐れがある。また、空気中水分により容易に加水分解して、塩化水素を発生するという点でも扱いにくい。ただし、Zr金属による原子価調整を行うと否とに関わらず、FPに起因する多量のZrCl₄の排気系における処理は厄介な問題となることが予想される。溶融塩体系の排気系では希ガスの崩壊生成物、(例えば、¹³⁷Xe ($T_{1/2} = 3.8$ 分) \rightarrow ¹³⁷Cs ($T_{1/2} = 30.7$ 年、沸点944K))も扱わなければならない。システム寿命中に生成する¹³⁷Csの相当量が排気系にプレートアウトすることになるので、この部分は技術的には難しい問題があるであろう。

Zrと同じく4族遷移金属のTiの原子価調整剤としての使用も検討した(付録2、例5参照)。Tiは中性子吸収断面積が小さく、四塩化物が常温で液体であり、Zrよりは使いやすいことが予想されたからである。しかし、NpCl₄/NpCl₃比の監視を正確に行いつつTi添加量が精密に制御されるのでない限り、酸化ボテンシャルが低くなりすぎて金属Npのプレートアウトが起こることが分った。また、Cr溶解抑制に適当な酸化ボテンシャルの範囲では、Ti塩化物は蒸気圧が十分高くなく(約10⁻⁵atm)、溶融塩中に蓄積してしまうことも問題になる。

以上を総合して、TRU塩化物溶融塩系の原子価調整は極めて困難であると考えられる。

4. 結語

$\text{LiF}-\text{BeF}_2-\text{ThF}_4-\text{UF}_4$ (71.7-16-12-0.3 mol%) 溶融塩系の核分裂燃焼に伴う一次系内の高温化学について、自由エネルギー最小化法による予測を行った。解析結果はMSRE運転後の一次系分析結果を良く再現するものであった。特に、Te, Ag, Pd, U及び構造材合金元素(Ni, Cr)の間の反応を捉え、合金表面でのテルル化物形成条件を確認した。

従来看過してきた問題として、一次系内でのU-Pd合金粒子の沈殿形成の可能性を見出した。その生成条件、制御、あるいは生成した場合の実際上の問題については、慎重な検討が必要であろう。

上記解析を参考にして、TRU塩化物溶融塩系の核分裂燃焼に伴う化学反応性について調べた。(1)系内にPdTe粒子が蓄積してTeの化学ボテンシャル源として作用し、構造材合金のTeとの反応をもたらす可能性、(2)Np-Pu-Pd合金粒子沈殿形成の可能性、(3)上記フッ化物溶融塩系にはない原子価調整の困難性、(4)溶融塩から蒸発したZrCl₄が排気系内で凝縮する可能性、を示す結果を得た。

溶融塩炉システムの概念的な成立性を検討する上で重要なのは、溶融塩そのものの高温化学に加えて、Ni-Cr-Fe-Te系、Pd-Ag-Te系、U(Np)-Zr-Pd系といった多成分合金系の振舞いであることも分った。これらの系は他の原子炉系においても重要である。例えば、Ni-Cr-Fe-Te系の熱力学は高速炉燃料被覆管の内面腐食反応⁽¹²⁾に関係しており、各所で研究が続けられている。

アクチノイド-Pd系の熱力学的性質にはまだ不確かな点が多い。従来、核燃料一般の燃焼率が低く、Pdインベントリーがごく小さかったために、この系の工学上の重要性は低かった。が、高温ガス炉用被覆燃料粒子のSiC層のPd腐食⁽¹³⁾、高速炉用金属燃料の照射下物質移動、溶融塩電解プロセス、そして、今回解析した溶融塩炉の挙動の理解において、U-Pd系、アクチノイド-Pd系一般についてのより詳細、正確なデータが求められている。

なお、ここでは溶融塩を種々のハロゲン化物からなる理想溶体として扱ったが、イオン性融体に関するより厳密なモデル化(例えば、参考文献15)が望まれる。ハロゲン化物とその他の化合物との安定度の差が顕著であるために、本解析の目的としたような系の振舞いに関する概念的な見通しが、モデル選択によって大きく影響されるとは考えにくい。しかし、各反応の起こり得る酸化ボテンシャル範囲の確定、個々の化学種の蒸気圧の正確な算出などが必要な場合には、溶融塩モデルとしてより物理的な実体のあるものが必要になる。また、より高度なモデル化に見合うだけの実験データが必要である。

謝辞

S G T E データベースのインストールは情報システムセンター、横川三津夫氏にお願いした。また、アクチノイド、F P 関連データ拡充については、燃料照射研究室、湊和生、芹沢弘幸氏の協力を得た。S G T E データベース（原研拡張版）の所内公開とその運用については、別に所内報告を作成する予定である。

また、草稿については、プルトニウム燃料研究室大道敏彦室長から詳細なコメントをいただいた。御指摘により、酸素混入の問題、M o の化学形の検討など、欠けていた項目を補うことができた。また、その結果、M o F₅、M o F₆凝縮相をデータベースに付加することができた。

参考文献

1. W.R. Grimes et al., "Fuel and Coolant Chemistry"; H.E. McCoy, "Materials for Salt-Containing Vessels and Piping", in M.W. Rosenthal et al. eds., ORNL-4812 (1972).
2. J.R. Keiser, ORNL/TM-6002 (1977).
3. R.C. Robertson, ORNL-4541 (1971).
4. B.F. Rider, NEDO-12154-3(B) (1980).
5. 滝塚貴和、「加速器による消滅処理の研究」、名古屋産業科学研究所第3回消滅処理技術研究会(1992)。
6. G. Eriksson and K. Hack, Metal. Trans. 21B(1990)1013-1023.
7. I. Ansara and B. Sundman, "The Scientific Group Thermodata Europe", in P. S. Glaeser ed., "Computer Handling and Dissemination of Data", North Holland (1987).
8. 小川 徹、横川三津夫、湊和生、芹沢弘幸、原研所内報告(予定)。
9. E.M. Levin et al., "Phase Diagrams for Ceramists", The American Ceramic Society (1964).
10. S. Stolen et al., J. Nucl. Mater. 173(1990)48-58.
11. P. Chiotti et al., "The Chemical Thermodynamics of Actinide Elements and Compounds, Part 5: The Actinide Binary Alloys", IAEA (1981).
12. R. Viswanathan et al., J. Nucl. Mater. 167(1989)94-104.
13. M. Yoneyama et al., JAERI-M 92-118 (1992).
14. T. Ogawa and K. Ikawa, High Temp. Sci. 22(1986)179-193.
15. M. Hillert et al., Metal. Trans. A, 16A(1985)261-266.
16. 大道敏彦、古川和男、JAERI-M5393 (1973).
17. B. Predel et al., Z. Metallkde. 69(1978)293-295.
18. H. Ipser, Z. Metallkde. 73(1982)151-158.
19. C. Mallika and O.M. Sreedharan, J. Nucl. Mater. 167(1989)181-188.
20. I. Barin, "Thermochemical data of pure substances", VCH Publishers, New York (1989).
21. V.A. Geiderikh et al., Russian J. Phys. Chem. 54(1980)615-617.
22. B. Saha et al., High Temp.- High Press. 20(1988)47-58.

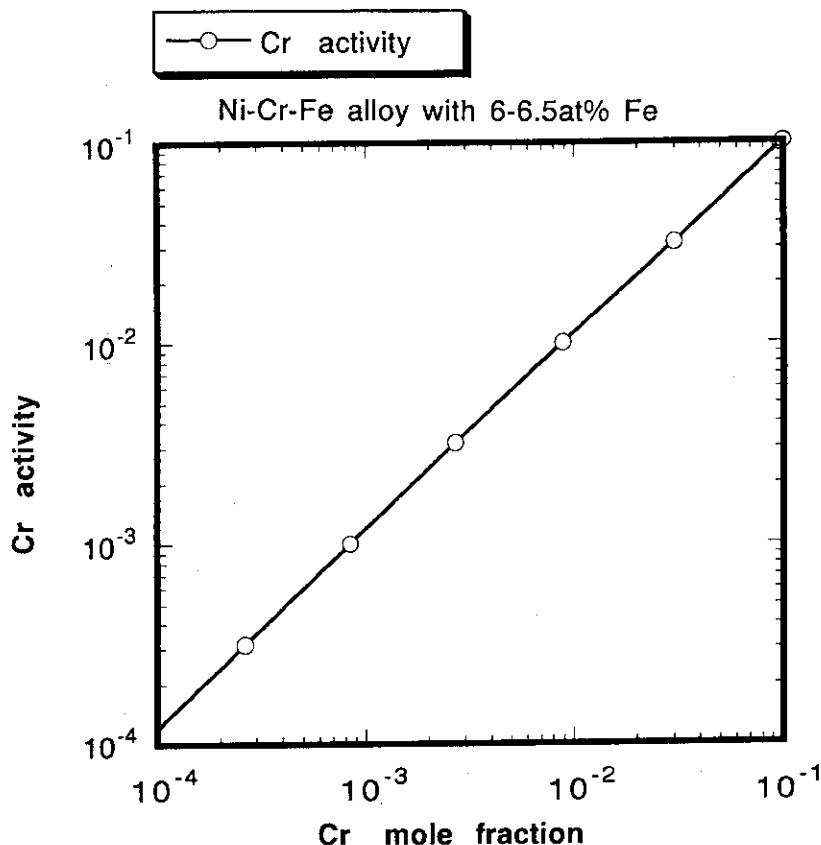
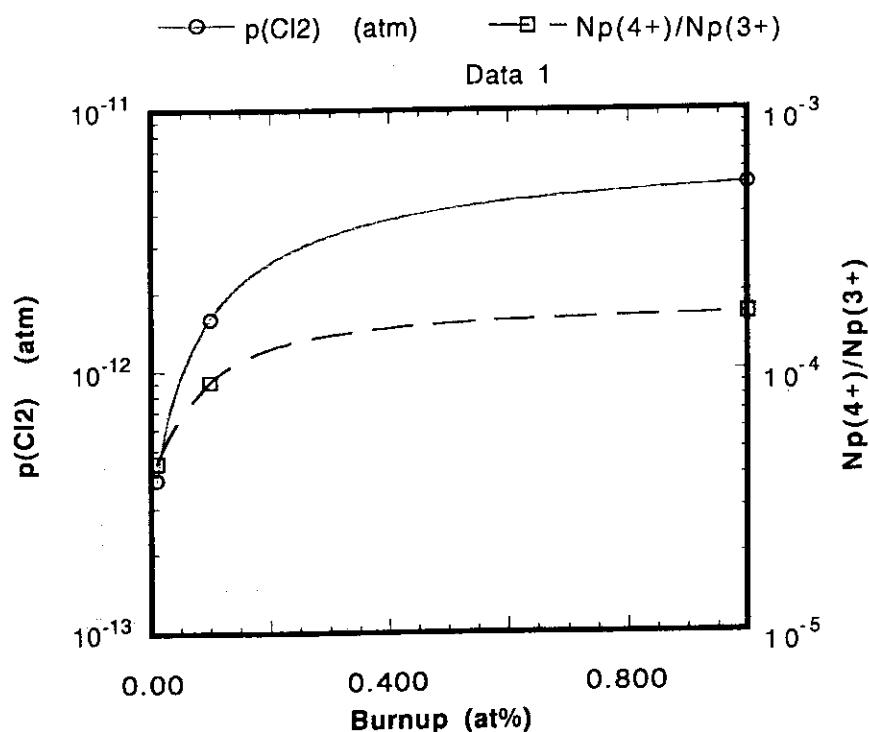


Fig. 1 Thermodynamic activity of Cr in Ni-Cr-Fe alloys.

Fig. 2 Change of $p(\text{Cl}_2)$ and $\text{Np}^{4+}/\text{Np}^{3+}$ ratio with burnup without provision of valence control for the $(\text{Np}, \text{Am}) \text{Cl}_3 + \text{NaCl}$ molten salt.

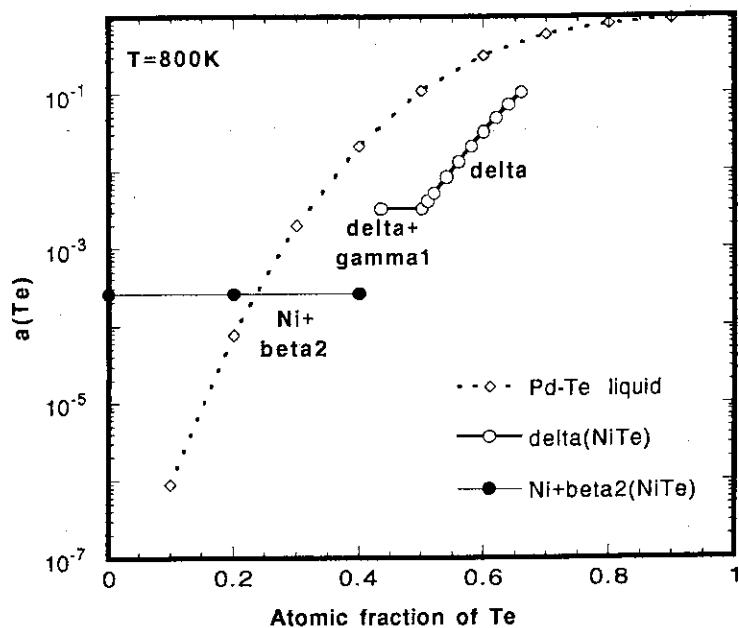


Fig. 3 Thermodynamic activity of Te in Ni-Te solid alloys and hypothetical Pd-Te liquid alloys.

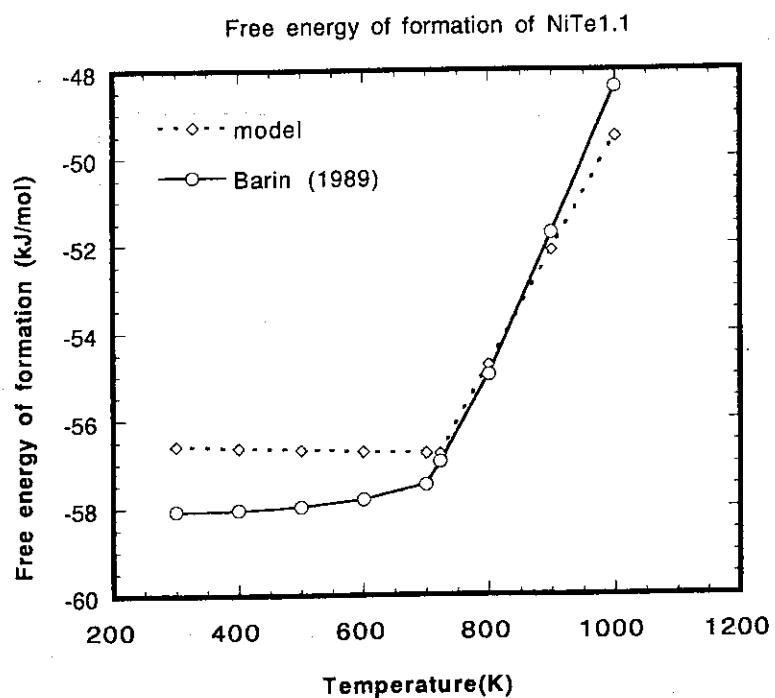


Fig. 4 Comparison of free energies of formation of \$\text{NiTe}_{1.1}\$ tabulated by Barin⁽²⁰⁾ and that calculated with the present model (see Appendix 3).

付録 1 ChemSage 入力データ例

次の2つの入力例を示す。これらの入力ファイルは、SGTEデータベース（原研拡張ファイル含む）に原研で開発したファイルセレクターを用いることによって、自動作成した。SGTE純物質データベースは、気相、凝縮相、水相の純物質について、生成熱 ΔH_f° 、標準エントロピー S° 、低圧比熱 C_p のデータを含んでいる。ファイルセレクターでは、系を構成する元素の組を指定すると、それらの元素から構成される全化学種のリストを出力する。そのリストから明らかに不要なものを除外するように指定すると、残った全化学種について以下のようなChemSage入力ファイルを自動作成する。

例1

フッ化物溶融塩系で、構造材との界面の平衡を解析するための入力。考慮している溶体相は、気相、液相（溶融塩相）、Ni-Cr合金の3つの理想溶体であり、これらに含まれない化学種はそれぞれ単独の定比凝縮相として扱っている。各相について、化学種のストイキオメトリー・マトリックス、Gibbs自由エネルギー係数（A～F）が示されている。

ここで、Gibbs自由エネルギーは

$$G^\circ = A + B T + C T \ln T + D T^2 + E T^3 + F / T$$

として与えられている。リスト中 T_{MAX}/K は絶対温度での係数A～Fの厳密な適用温度上限である。したがって、例えば、800KでのTeの凝縮相（TE1）については、 $T_{MAX}/K = 1261$ で指定される行の係数が用いられる。このリストにあるデータを用いて、

$$\begin{aligned} \Delta G_f^\circ (PdTe) &= G^\circ (PdTe) - G^\circ (Pd) - G^\circ (Te) \\ &= -124634 + 37993 + 49755 \\ &= -36886 \text{ J/mol} \end{aligned}$$

と計算される。

なお、リスト中で化学種名に（*）の印があるのは、SGTEデータベースに原研で付加したデータであることを示す。

例2

(N_{0.5}Am_{0.5})Cl₃-NaCl溶融塩系で、構造材との界面の平衡を解析するための入力。考慮している相、入力形式は例1とほぼ同様である。

例 1

FLIBE UF3,UF4 FROM ORNL-4812(1972)

*** SYSTEM DATA FOR THE GAS PHASE ***

	MOL.WT. STOICHIOMETRY MATRIX											
BA1F1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0						
BA1F2(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0						
BA1I1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0						
BA1I2(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0						
BE1F1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0						
BE1F2(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0						
BE1F3L11(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0						
BE1I1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0						
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0						
BE1I2(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0						
F1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0						
F10M02(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	10.0	0.0	0.0	-0.0	0.0	0.0	0.0	2.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0						
F15M03(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	15.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0						
F1I1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0						
F1I11(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0						

JAERI-M 92-210

F1M01(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
F1ZR1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
F2(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
F2L12(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
F2M01(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
F2ZR1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
F3L13(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0	3.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
F3M01(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
F3ZR1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
F4M01(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
F4ZR1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
F5I11(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	5.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0							
F6M01(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	6.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
F7I11(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	7.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0							
I1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0							
I1L11(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0							
I1M01(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0

JAERI-M 92-210

0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0								
I1ZR1(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0								
I2(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0								
I2L12(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0								
I2M01(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0								
I2ZR1(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0								
I3M01(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
0.0	0.0	0.0	0.0	3.0	0.0								
I3ZR1(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	3.0	0.0								
I4M01(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
0.0	0.0	0.0	0.0	4.0	0.0								
I4ZR1(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	4.0	0.0								
ND1TE1(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	1.0								
TE1(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0								
TE2(G)(*)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0								

GIBBS ENERGY/J.MOL-1

D*T*T	TMAX/K	A	B*T	C*T*LOG(T)
D*T*T	E*T**3	F/T		
BA1F1(G) 01 -7.18497400D-04	1400.00	-3.33849200D+05	1.02608000D+00	-3.66660600D+
	6.23276200D-08	1.02700400D+05		
	3400.00	-3.36370800D+05	2.66857000D+01	-4.03438000D+
01 1.50393900D-03	-1.78726500D-07	3.86789900D+05		
	6000.00	-2.49338300D+05	-2.96632100D+02	-3.55221700D-

01 -6.750464000D-03 1.436855000D-07 -3.556502000D+07
 BA1F2(G) 1400.00 -8.220244000D+05 8.476111000D+01 -5.728314000D+
 01 -6.496494000D-04 8.239687000D-08 1.708327000D+05
 6000.00 -8.225914000D+05 9.108116000D+01 -5.820779000D+
 01 1.051041000D-06 -3.098112000D-11 2.376303000D+05
 BA111(G) 3000.00 -5.377806000D+04 -2.653165000D+01 -3.759081000D+
 01 -1.478887000D-04 -1.600715000D-08 2.072054000D+04
 6000.00 -3.01434000D+04 -9.390588000D+01 -2.965672000D+
 01 -1.062321000D-03 -1.267473000D-08 -1.180288000D+07
 BA112(G) 6000.00 -3.204913000D+05 4.211835000D+01 -5.819650000D+
 01 -6.397815000D-07 1.303274000D-11 3.257808000D+04
 BE1F1(G) 800.00 -1.772309000D+05 -4.949321000D+01 -2.234807000D+
 01 -1.266330000D-02 2.053270000D-06 -4.761475000D+04
 3400.00 -1.847504000D+05 4.494447000D+01 -3.652042000D+
 01 -4.158581000D-04 1.251727000D-08 7.245119000D+05
 6000.00 -1.944731000D+05 7.978719000D+01 -4.081450000D+
 01 4.545476000D-04 -2.153964000D-08 4.987348000D+06
 BE1F2(G) 800.00 -8.104191000D+05 5.622678000D+01 -4.072403000D+
 01 -1.695346000D-02 2.672299000D-06 1.350524000D+05
 2800.00 -8.209732000D+05 1.856646000D+02 -6.006424000D+
 01 -7.222334000D-04 4.193274000D-08 1.245748000D+06
 6000.00 -8.238348000D+05 2.021804000D+02 -6.223491000D+
 01 -1.742141000D-05 4.627894000D-10 1.929861000D+06
 BE1F3L11(G) 600.00 -9.043920000D+05 -2.080132000D+01 -2.976944000D+
 01 -7.999551000D-02 1.641174000D-05 3.379730000D+05
 1200.00 -9.279492000D+05 3.631965000D+02 -9.009154000D+
 01 -1.038469000D-02 1.162629000D-06 2.088880000D+06
 6000.00 -9.414486000D+05 4.862773000D+02 -1.075681000D+
 02 -8.850182000D-05 2.650823000D-09 4.096052000D+06
 BE111(G) 1350.00 1.584201000D+05 2.770074000D+00 -3.547235000D+
 01 -1.645636000D-03 1.812477000D-07 1.280419000D+05
 6000.00 1.548424000D+05 2.963869000D+01 -3.919817000D+
 01 3.042137000D-04 -3.105020000D-08 8.412871000D+05

BE112(G)	1150.00	-8.22393100D+04	8.91677900D+01	-5.61540800D+
01	-4.73128600D-03	6.69272400D-07	1.63487300D+05	
	6000.00	-8.58085000D+04	1.30839500D+02	-6.23148200D+
01	-7.79956300D-06	2.55377300D-10	5.63807100D+05	
F1(G)	1200.00	7.20518100D+04	-1.16404400D+00	-2.36931900D+
01	2.04381400D-03	-2.71012200D-07	-5.72306300D+03	
	3600.00	7.37933100D+04	-2.03625800D+01	-2.08820800D+
01	2.06946400D-05	-8.47922400D-10	-2.14411100D+05	
	6000.00	7.42203800D+04	-2.17829000D+01	-2.07088600D+
01	-1.15611700D-05	3.14725100D-10	-4.17897900D+05	
F10M02(G)	950.00	-2.78241800D+06	1.05713500D+03	-2.30382600D+
02	-4.52358300D-02	7.32295300D-06	1.82677600D+06	
	6000.00	-2.80875000D+06	1.40051400D+03	-2.82120800D+
02	-1.11697300D-04	3.80438100D-09	4.36992400D+06	
F15M03(G)	950.00	-4.19508500D+06	1.73207400D+03	-3.53888400D+
02	-6.78544600D-02	1.09850200D-05	2.76262800D+06	
	6000.00	-4.23458700D+06	2.24716100D+03	-4.31498300D+
02	-1.67140200D-04	5.69795600D-09	6.57885000D+06	
F111(G)	1000.00	-1.06079900D+05	-1.28911300D+00	-3.46472800D+
01	-2.80646000D-03	3.82262600D-07	1.13511700D+05	
	3500.00	-1.07467400D+05	1.68174000D+01	-3.73755800D+
01	-4.32361800D-04	6.06043200D-10	2.48506600D+05	
	6000.00	-1.07678100D+05	1.74802700D+01	-3.74565000D+
01	-4.16098600D-04	-9.90777600D-11	3.64200400D+05	
F1L11(G)	800.00	-3.50120800D+05	-8.82396500D+00	-2.77244700D+
01	-9.27002700D-03	1.60670400D-06	4.90820800D+04	
	3400.00	-3.54630300D+05	5.28884300D+01	-3.71229900D+
01	-3.68281700D-04	4.27132500D-09	4.67974100D+05	
	6000.00	-3.55619100D+05	5.66888000D+01	-3.75979200D+
01	-2.58606600D-04	-6.98400000D-10	8.94777700D+05	
F1M01(G)	1150.00	2.71638800D+05	-1.56186200D+01	-3.39974500D+
01	-2.80819300D-03	3.80017000D-07	1.24293100D+05	
	3150.00	2.55048200D+05	1.20733400D+02	-5.30341600D+
01	7.19673200D-03	-6.47392900D-07	2.88691800D+06	

	4550.00	6.41124500D+05	-1.37229900D+03	1.32595500D+
02	-3.26618900D-02	9.64709200D-07	-1.48415500D+08	
	6000.00	-4.03774300D+04	4.54495600D+02	-8.32602200D+
01	-2.28314400D-03	1.63242200D-07	2.54904900D+08	
F1ZR1(G)	1000.00	7.17745000D+04	-1.23678100D+01	-3.41405900D+
01	-2.38864600D-03	-1.91020500D-07	9.94599400D+04	
	2400.00	6.91071900D+04	-3.49481700D+00	-3.49736300D+
01	-3.87940400D-03	2.42853300D-07	7.05108600D+05	
	6000.00	5.70924300D+04	7.68602400D+01	-4.57436700D+
01	9.98658100D-05	-1.46691000D-08	3.06582600D+06	
F2(G)	800.00	-9.33408600D+03	-1.16285800D+01	-2.76652200D+
01	-9.46458100D-03	1.61451400D-06	4.91864600D+04	
	3400.00	-1.38833400D+04	5.04950900D+01	-3.71239200D+
01	-5.16257200D-04	4.12057600D-09	4.73262700D+05	
	6000.00	-1.43490300D+04	5.28447600D+01	-3.74265900D+
01	-4.32253100D-04	-7.99380800D-11	6.04916400D+05	
F2L12(G)	600.00	-9.65848600D+05	1.67479700D+02	-6.08052200D+
01	-2.56839000D-02	5.72262700D-06	4.41150500D+05	
	3100.00	-9.74291700D+05	3.05717500D+02	-8.25586500D+
01	-1.92638300D-04	1.11917800D-08	1.07134400D+06	
	6000.00	-9.74773400D+05	3.09409200D+02	-8.30553000D+
01	-1.29367600D-05	3.52034600D-10	1.10762400D+06	
F2M01(G)	6000.00	-1.82808800D+05	1.47455400D+02	-6.22238900D+
01	-2.87048900D-05	1.04507700D-09	2.23125800D+05	
F2ZR1(G)	800.00	-5.75391500D+05	6.06123200D+01	-5.03125900D+
01	-7.70609100D-03	1.42555800D-06	2.43885300D+05	
	2000.00	-5.78257300D+05	1.10168200D+02	-5.80948300D+
01	8.80292400D-04	-2.58787300D-07	4.08065500D+05	
	4000.00	-5.78457300D+05	7.41816600D+01	-5.26179800D+
01	-2.83131200D-03	9.16923600D-08	2.32316600D+06	
	6000.00	-5.73836900D+05	8.32004100D+01	-5.41116600D+
01	-1.99679200D-03	4.58210000D-08	-3.90534500D+06	
F3L13(G)	600.00	-1.55361700D+06	3.63463900D+02	-9.74399000D+
01				

-4.03762200D-02 8.90912700D-06 6.33076800D+05
 2000.00 -1.56658400D+06 5.77093500D+02 -1.31081300D+
 02
 -8.61583500D-04 7.02451100D-08 1.58990900D+06
 6000.00 -1.56843300D+06 5.90977500D+02 -1.32985500D+
 02
 -7.58203500D-06 2.42423600D-10 1.92629200D+06
 F3M01(G) 1750.00 -6.33380700D+05 2.17931600D+02 -7.54241600D+
 01
 -5.22112500D-03 3.87851200D-07 4.99592900D+05
 6000.00 -6.28018600D+05 2.15427700D+02 -7.57477300D+
 01
 -3.22334900D-03 1.11235500D-07 -1.92861600D+06
 F3ZR1(G) 800.00 -1.12807100D+06 1.34534200D+02 -6.34127000D+
 01
 -2.19283400D-02 3.65486300D-06 2.97712500D+05
 2400.00 -1.14169400D+06 3.05247300D+02 -8.90104200D+
 01
 2.12651800D-05 3.89879000D-08 1.69378700D+06
 6000.00 -1.13644000D+06 2.92862100D+02 -8.76798700D+
 01
 2.36165900D-04 -4.78419100D-09 -7.46592900D+05
 F4M01(G) 950.00 -9.78945100D+05 2.79037100D+02 -8.84810300D+
 01
 -1.68614900D-02 2.71904400D-06 5.26833300D+05
 3550.00 -9.92784200D+05 4.39306600D+02 -1.12224800D+
 02
 2.02208200D-03 -1.75443500D-07 2.12369700D+06
 6000.00 -8.41134600D+05 -7.22978500D+01 -4.98701300D+
 01
 -9.30748100D-03 2.08100600D-07 -6.66628300D+07
 F4ZR1(G) 600.00 -1.70308200D+06 2.52671600D+02 -8.24122600D+
 01
 -2.90976200D-02 6.41058400D-06 3.97228900D+05
 2600.00 -1.71273700D+06 4.09905500D+02 -1.07127200D+
 02
 -3.56664900D-04 2.38048500D-08 1.12124900D+06
 6000.00 -1.71276200D+06 4.16723100D+02 -1.08068500D+
 02
 -2.48027500D-06 6.62501400D-11 1.33605500D-06
 F511(G) 600.00 -8.77566500D+05 3.63175500D+02 -1.00015600D+
 02
 -3.77566300D-02 8.38033900D-06 6.73893800D+05
 2200.00 -8.89698000D+05 5.63356000D+02 -1.31550800D+
 02
 -6.16826100D-04 4.70065900D-08 1.56807100D+06
 6000.00 -8.91297600D+05 5.74430200D+02 -1.33052400D+
 02
 4.74538600D-06 -1.64305600D-10 1.89827600D+06
 F6M01(G) 950.00 -1.60490100D+06 5.43899400D+02 -1.29910600D+

02	-2.42491400D-02	3.92389500D-06	9.77830600D+05		
		6000.00	-1.61904500D+06	7.28135000D+02	-1.57666200D+
02	-6.05318300D-05	2.06921700D-09	2.34691200D+06		
	F7I1(G)	400.00	-1.00339100D+06	4.12932900D+02	-1.05627200D+
02	-8.33843900D-02	1.32065900D-05	6.14472700D+05		
		800.00	-1.02175400D+06	7.56701700D+02	-1.60442600D+
02	-1.97746400D-02	3.35716400D-06	1.68513300D+06		
		3400.00	-1.03276100D+06	9.01085900D+02	-1.82256300D+
02	-1.87850300D-04	9.64802300D-09	2.75054000D+06		
		6000.00	-1.03348600D+06	9.05360800D+02	-1.82816500D+
02	-1.55579000D-05	4.51724700D-10	2.90277500D+06		
	I1(G)	900.00	1.00565700D+05	-4.14566200D+01	-2.07861000D+
01	0.0	0.0	0.0		
		2400.00	1.00490800D+05	-3.99797400D+01	-2.10229200D+
01	2.88921900D-04	-5.92256900D-08	4.27177700D+03		
		6000.00	9.63916900D+04	-3.75710100D+01	-2.10008200D+
01	-4.33096200D-04	1.55655900D-08	2.47761800D+06		
	I1L1(G)	1400.00	-1.02689600D+05	1.38859300D+01	-3.64597000D+
01	-1.02446400D-03	8.43591600D-08	1.08916600D+05		
		3700.00	-1.03302100D+05	2.05687300D+01	-3.74349100D+
01	-3.48288600D-04	-2.68901300D-10	1.84515800D+05		
		6000.00	-1.03263500D+05	2.03377500D+01	-3.74050800D+
01	-3.56160800D-04	7.93090700D-11	1.83201900D+05		
	I1M01(G)	1750.00	4.87285100D+05	-2.62722500D+01	-3.76565600D+
01	-1.27670900D-05	-4.50792700D-08	3.23024400D+04		
		3350.00	4.81270900D+05	4.20534200D+01	-4.74248400D+
01	5.46933300D-03	-5.62675900D-07	1.72800100D+05		
		4750.00	8.96576300D+05	-1.52347900D+03	1.46543500D+
02	-3.50594100D-02	1.03399400D-06	-1.67814100D+08		
		6000.00	5.23214400D+04	7.19255600D+02	-1.18186600D+
02	1.92029700D-03	6.31438900D-08	3.38170400D+08		
	I1ZR1(G)	1400.00	5.79794900D+05	-2.46621400D+01	-3.73674200D+
01	-4.85427400D-04	3.87409600D-09	3.28255700D+04		

	1700.00	1.80464400D+08	-1.27976000D+06	1.74138900D+	
05	-7.46697400D+01	5.97878200D-03	-3.47046100D+10		
	6000.00	5.05815300D+05	3.58837400D+02	-8.31637000D+	
01	3.22799700D-06	-1.10199600D-10	1.53759600D+05		
	12(G)	3000.00	5.10371500D+04	-9.54079200D+00	-3.74028600D+
01	-2.85202200D-04	2.95369300D-10	3.08486300D+04		
	6000.00	5.10355800D+04	-9.43940900D+00	-3.74170800D+	
01	-2.79428200D-04	-3.85918100D-11	2.01275400D+04		
	12L12(G)	1200.00	-3.88305000D+05	2.21668400D+02	-8.18900900D+
01	-9.83767000D-04	1.39866900D-07	2.82302800D+05		
	3600.00	-3.88963200D+05	2.29913600D+02	-8.31189400D+	
01	-7.17394900D-06	4.02603300D-10	3.47069100D+05		
	6000.00	-3.89514700D+05	2.31426500D+02	-8.32988600D+	
01	2.07377700D-05	-5.12211600D-10	6.72306000D+05		
	12M01(G)	950.00	2.33957800D+05	1.79238600D+02	-7.76018400D+
01	5.43437900D-03	-1.72073700D-07	1.66016300D+05		
	3550.00	2.43975300D+05	1.02340000D+02	-6.71510900D+	
01	1.69389600D-03	-1.29976500D-07	-1.44567700D+06		
	6000.00	2.91979900D+05	-8.16595600D+01	-4.42270100D+	
01	-3.39152500D-03	8.65879300D-08	-2.15662600D+07		
	12ZR1(G)	6000.00	-8.42773800D+04	4.55568500D+01	-5.81935700D+
01	-2.28973500D-06	9.02697600D-11	4.23519000D+04		
	13M01(G)	1550.00	1.58372800D+05	1.40859900D+02	-8.10886100D+
01	-1.53484600D-03	-4.06315700D-08	2.27960300D+04		
	6000.00	1.66386600D+05	1.02962700D+02	-7.62034300D+	
01	-3.14086000D-03	1.08590700D-07	-2.44875000D+06		
	13ZR1(G)	6000.00	-2.47224700D+05	1.60217800D+02	-8.31268600D+
01	-5.30568600D-06	2.20860800D-10	1.02565500D+05		
	14M01(G)	2950.00	9.12412500D+04	2.77087400D+02	-1.08742900D+
02	5.63907900D-04	-7.19578600D-08	1.59000900D+05		
	6000.00	1.95102700D+05	-8.28024700D+01	-6.48786000D+	
01	-7.10719800D-03	1.48785100D-07	-4.39225900D+07		
	14ZR1(G)	6000.00	-3.95575800D+05	2.78873800D+02	-1.08036700D+
02	-1.12588900D-05	4.01921800D-10	1.53461500D+05		

ND1TE1(G)	2000.00	2.26585900D+05 -3.31400800D+01 -3.73840300D+
01	-9.41399900D-06 0.0	5.02080000D+04
TE1(G)	500.00	1.90366900D+05 -4.33812300D+01 -2.07861000D+
01	0.0 0.0	0.0
	1300.00	1.90270100D+05 -4.02841500D+01 -2.13197800D+
01	9.72552000D-04 -2.92586300D-07	0.0
TE2(G)(*)	700.00	1.51872400D+05 -1.00290600D+01 -3.71229900D+
01	1.46272400D-03 -2.34906600D-06	3.59025400D+04
	1200.00	1.44468000D+05 3.97813100D+01 -4.31171900D+
01	-3.50724900D-03 6.73833000D-07	1.03230500D+06
	1900.00	1.392718000D+05 1.05551300D+02 -5.28609800D+
01	3.78464800D-03 -2.89433000D-07	1.43726900D+06
	3000.00	1.51499400D+05 2.86879300D+01 -4.26033800D+
01	-7.77604600D-06 -2.84333200D-08	-1.26876900D+06

MIXING MODEL: IDEAL

*** SYSTEM DATA FOR THE LIQ PHASE ***

MOL.WT. STOICHIOMETRY MATRIX												
A6111	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	1.0	0.0	1.0	0.0							
BA1F2	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
BA1I2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0							
BE1F2	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
BE1F3LI1	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
BE1F4LI2	0.0	0.0	0.0	0.0	4.0	2.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
BE1I2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

JAERI-M 92-210

0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0									
CS1F1		0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
CS1II		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0									
F1L1I		0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
F2PD1		0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
F2ZR1		0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
F3ND1		0.0	0.0	0.0	0.0	3.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0									
F3U1		0.0	0.0	1.0	0.0	3.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
F3ZR1		0.0	0.0	0.0	0.0	3.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
F4TH1		0.0	0.0	1.0	4.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
F4U1		0.0	0.0	1.0	0.0	4.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
F4ZR1		0.0	0.0	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
F5M01(*)		0.0	0.0	0.0	5.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
F6M01(*)		0.0	0.0	0.0	6.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
F5RU1		0.0	0.0	0.0	5.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
I1L1I		0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0									
I2		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0									
I2PD1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

JAERI-M 92-210

0.0	1.0	0.0	0.0	2.0	0.0									
I2ZR1			0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	
	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0								
I3ND1			0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0	1.0								
I3ZR1			0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	
	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0	0.0								
I4TH1			0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	0.0	0.0	0.0	0.0	4.0	0.0								
I4ZR1			0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	
	0.0	0.0	0.0	0.0	4.0	0.0								
I2M01(*)			0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0								
I3M01(*)			0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0	0.0								
I4M01(*)			0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	4.0	0.0								

GIBBS ENERGY/J.MOL-1

D*T*T	TMAX/K	A	B*T	C*T*LOG(T)
E*T**3	F/T			
AG111 01 -5.04172000D-02	420.15	-7.366513000D+04	7.767763000D+01	-2.435088000D+
0.0	0.0	0.0		
	831.00	-7.211544000D+04	2.469102000D+02	-5.648399000D+
0.0	0.0	0.0		
	2200.00	-6.443992000D+04	2.517374000D+02	-5.857599000D+
0.0	0.0	0.0		
BA1F2 01 -1.53525500D-02	600.00	-1.231369000D+06	3.694668000D+02	-6.80113200D+
2.40402800D-06	1.63596900D+05			
	900.00	-1.27055000D+06	9.713872000D+02	-1.61544200D+
02 8.54885000D-02	-1.83425000D-05	3.28408400D+06		
	1240.00	-3.96032700D+06	2.925103000D+04	-4.26491800D+
03 2.86265000D+00	-3.70230800D-04	3.33217800D+08		

JAERI-M 92-210

	1480.00	-1.49422600D+06	3.10383800D+03	-4.44968300D+
02	1.18198000D-01	0.0	0.0	
	1641.00	-1.25122900D+06	6.52261200D+02	-1.07654300D+
02	0.0	0.0	0.0	
	3500.00	-1.21502300D+06	5.72245100D+02	-9.98260200D+
01	0.0	0.0	0.0	
BA112	984.00	-6.27763100D+05	3.22248500D+02	-7.19066200D+
01	-9.53255200D-03	-1.00673300D-07	6.99003900D+03	
	2800.00	-6.32205000D+05	6.00272200D+02	-1.12968000D+
02	0.0	0.0	0.0	
BE1F2	500.00	-1.00075600D+06	-8.84522700D+02	1.52821500D+
02	-4.11372900D-01	1.37363500D-04	-1.44909700D+06	
	825.00	-1.04126200D+06	2.61511500D+02	-4.55352900D+
01	-1.84887800D-02	3.13046800D-07	-7.20986900D+04	
	2000.00	-1.04798500D+06	3.52771700D+02	-5.86274600D+
01	-1.45732200D-02	-1.69657600D-08	1.15463500D+06	
BE1F3L11	650.00	-1.67362200D+06	3.12143300D+02	-5.43380100D+
01	-6.28373600D-02	2.04551500D-08	-9.19459000D+02	
	2000.00	-1.68791600D+06	9.71137000D+02	-1.58992000D+
02	0.0	0.0	0.0	
BE1F4L12	732.20	-2.30752600D+06	5.27236600D+02	-9.16588700D+
01	-7.32907100D-02	-3.28717800D-07	1.19466800D+04	
	2500.00	-2.32676900D+06	1.42596800D+03	-2.32086500D+
02	0.0	0.0	0.0	
BE112	400.00	-2.41660400D+05	4.69211700D+02	-8.73732300D+
01	5.49256400D-03	-2.45732600D-06	6.34716900D+05	
	753.00	-2.36376300D+05	3.68921400D+02	-7.11765100D+
01	-1.67054300D-02	3.36659200D-06	3.12398300D+05	
	2000.00	-2.39498300D+05	6.39777600D+02	-1.12968000D+
02	0.0	0.0	0.0	
CS1F1	976.00	-5.69252500D+05	2.26982100D+02	-4.62436500D+
01	-9.48065100D-03	1.41988900D-07	-6.40739800D+03	
	3000.00	-5.65929400D+05	4.05903300D+02	-7.40567800D+
01	0.0	0.0	0.0	

CS111	894.15	-3.44837100D+05	8.07021200D+01	-2.95390300D+
01	-2.16731100D-02	0.0	-4.03756000D+05	
	1600.00	-2.96389300D+05	-2.77743200D+02	1.79493600D+
01	-4.28859900D-02	0.0	0.0	
F1L11	700.00	-6.34621500D+05	3.05645000D+02	-5.03063200D+
01	1.22894700D-03	-2.30170200D-06	3.99408800D+05	
	1121.30	-6.33813500D+05	2.78759300D+02	-4.57524600D+
01	-6.03303300D-03	-4.40324000D-07	4.33813800D+05	
	3000.00	-6.17791100D+05	3.86917700D+02	-6.41825600D+
01	0.0	0.0	0.0	
F2PD1	1100.00	-4.87357800D+05	3.18136700D+02	-5.98311900D+
01	-1.02508000D-02	0.0	0.0	
F2ZR1	800.00	-9.79927600D+05	2.85669200D+02	-5.16138200D+
01	-2.74114800D-02	3.86789800D-06	-1.87817700D+03	
	1175.00	-9.64245700D+05	1.29996200D+02	-2.94273200D+
01	-3.96392000D-02	4.76166900D-06	-1.93909500D+06	
	3000.00	-9.74024200D+05	5.98732400D+02	-1.00416000D+
02	0.0	0.0	0.0	
F3ND1	1650.00	-1.68659100D+06	3.86190200D+02	-7.49772600D+
01	-1.83050000D-02	0.0	-1.01462000D+06	
	1873.00	-1.76513600D+06	1.20856500D+03	-1.84472500D+
02	2.21751900D-03	0.0	5.96220000D+06	
F3U1	1000.00	-1.44934400D+06	4.88518000D+02	-9.86140000D+
01	-7.74390000D-04	6.18090000D-09	7.09894000D+05	
F3ZRI	500.00	-1.62908500D+06	5.08697700D+03	-8.54623800D+
02	1.28580600D+00	-4.04125300D-04	9.76712900D+06	
	800.00	-1.44322600D+06	6.69701700D+02	-1.11549600D+
02	7.33601300D-03	-2.48264600D-06	1.38484100D+06	
	1200.00	-1.41362100D+06	3.05283900D+02	-5.70572100D+
01	-3.86580600D-02	5.01828800D-06	-1.72142300D+06	
	1500.00	-1.43660200D+06	6.04633500D+02	-1.01616800D+
02	-4.27583600D-03	3.47634600D-07	5.27727700D+03	
F4TH1	1383.00	-2.14823700D+06	6.19111800D+02	-1.11922000D+
02				

-1.224656000D-02	0.0	3.77606000D+05				
	2055.00	-2.136711000D+06	8.890608000D+02	-1.52716000D+		
02	0.0	0.0	0.0			
F4U1	1000.00	-1.907740000D+06	5.87404000D+02	-1.17176000D+		
02						
-1.032500000D-03	8.241200000D-09	9.465250000D+05				
F4ZR1	700.00	-1.946154000D+06	5.61849900D+02	-9.55123600D+		
01						
-3.873545000D-02	7.046549000D-06	5.00322700D+05				
	1205.00	-1.943294000D+06	5.946208000D+02	-1.02537300D+		
02						
-1.933259000D-02	1.278002000D-06	-2.790519000D+05				
F5M01(*)	318.82	-1.451437000D+06	9.509863000D+02	-1.50599900D+		
02						
-2.028999000D-01	0.0	0.0				
	540.00	-1.426319000D+06	8.365703000D+02	-1.55639900D+		
02						
0.0	0.0	0.0				
F6M01(*)	307.00	-1.628613000D+06	5.81894000D+02	-1.17899900D+		
02						
-8.704996000D-02	0.0	0.0				
F5RUI	374.00	-9.415582000D+05	9.318020000D+02	-1.63176000D+		
02						
0.0	0.0	0.0				
	600.00	-9.297719000D+05	1.011831000D+03	-1.82004000D+		
02						
0.0	0.0	0.0				
I1L11	400.00	-2.952886000D+05	4.395334000D+02	-8.04009700D+		
01						
3.902940000D-02	-1.230486000D-05	6.048453000D+05				
	742.00	-2.950481000D+05	4.254458000D+02	-7.79604500D+		
01						
3.574433000D-02	-1.256874000D-05	6.401143000D+05				
	2500.00	-2.771209000D+05	3.243506000D+02	-6.31783900D+		
01						
0.0	0.0	0.0				
I2	386.75	1.350869000D+04	-3.974688000D+02	5.06464700D+		
01						
-1.234531000D-01	0.0	-1.398711000D+06				
	6000.00	-1.052902000D+04	3.899524000D+02	-8.06717200D+		
01						
0.0	0.0	0.0				
I2PD1	1000.00	-8.495313000D+04	3.130076000D+02	-6.81992000D+		
01						
-1.150600000D-02	0.0	0.0				
I2ZR1	500.00	-3.759004000D+05	2.533300000D+03	-4.38324000D+		
02						
5.834231000D-01	-1.828798000D-04	4.170339000D+06				
	700.00	-3.444726000D+05	1.402112000D+03	-2.38388000D+		

02	1.608074000D-01	-3.442504000D-05	4.170339000D+06
	2000.00	-2.426398000D+05	6.856642000D+01 -3.647180000D+
01	-4.355815000D-02	0.0	1.443239000D+03
I3ND1	847.00	-6.573247000D+05	4.044824000D+02 -9.085553000D+
01	-1.790752000D-02	0.0	3.096160000D+04
	1060.00	-6.530724000D+05	5.632288000D+02 -1.173905000D+
02	0.0	0.0	0.0
	1200.00	-6.523068000D+05	8.296855000D+02 -1.557452000D+
02	0.0.	0.0	0.0
I3ZR1	600.00	-4.369021000D+05	6.492705000D+02 -1.291392000D+
02	3.152224000D-02	-8.376785000D-06	4.885949000D+05
	1500.00	-4.294567000D+05	5.039280000D+02 -1.055552000D+
02	-1.431614000D-03	1.503318000D-07	4.621542000D+04
I4TH1	839.00	-7.057296000D+05	6.103474000D+02 -1.297040000D+
02	-6.485198000D-03	0.0	3.075240000D+05
	1126.00	-6.909298000D+05	8.975459000D+02 -1.757280000D+
02	0.0	0.0	0.0
I4ZR1	772.00	-5.290194000D+05	6.087463000D+02 -1.288697000D+
02	-6.136984000D-03	2.341004000D-07	2.046421000D+05
I2M01(*)	1500.00	-1.341093000D+05	3.828364000D+02 -7.899994000D+
01	-6.249994000D-03	0.0	0.0
I3M01(*)	1000.00	-2.097155000D+05	5.058293000D+02 -1.039000000D+
02	-8.299995000D-03	0.0	0.0
I4M01(*)	700.00	-2.169061000D+05	6.529097000D+02 -1.371999000D+
02	0.0	0.0	0.0

MIXING MODEL: IDEAL

*** SYSTEM DATA FOR THE STOICHIOMETRIC CONDENSED PHASES ***

MOL.WT. STOICHIOMETRY MATRIX

AG1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0					

JAERI-M 92-210

AG1.64TE1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	1.640	1.0	0.0	0.0							
AG2TE1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	2.0	1.0	0.0	0.0							
BA1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
BA1TE1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0							
BE1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
CS1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
L11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
LI2TE1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0							
M01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
ND1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0							
ND1TE1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	1.0							
ND2TE3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	3.0	0.0	2.0							
PD1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
PD1TE1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	1.0	0.0	1.0	0.0	0.0							
PD1TE2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	1.0	0.0	2.0	0.0	0.0							
RU1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
TE1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0							

JAERI-M 92-210

TH1		0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
U1		0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
ZR1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0		
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
PD3U1(*)		0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	3.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
RU3U1(*)		0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
CS2TE1(*)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0									

GIBBS ENERGY/J.MOL-1

		TMAX/K	A	B*T	C*T*LOG(T)
D*T*T		E*T**3	F/T		
AG1		1235.08	-7.209508000D+03	1.182005000D+02	-2.384633000D+
01		-1.790584000D-03	-3.985872000D-07	-1.20111100D+04	
		3000.00	-3.58737100D+03	1.809648000D+02	-3.34720000D+
01	0.0	0.0	0.0		
AG1.64TE1		418.00	-4.88121400D+04	1.710057000D+02	-4.001158000D+
01	-6.19022700D-02	0.0	0.0		
		569.00	-6.20853900D+04	5.53301000D+02	-1.03319700D+
02	1.35854500D-02	0.0	0.0		
		625.00	-5.26425000D+04	3.90115700D+02	-7.89939300D+
01	0.0	0.0	0.0		
		697.00	-5.23286600D+04	3.86381100D+02	-7.84918100D+
01	0.0	0.0	0.0		
		800.00	-4.85083800D+04	3.45017100D+02	-7.30107700D+
01	0.0	0.0	0.0		
AG2TE1		421.00	-5.45961000D+04	2.07068800D+02	-4.91954700D+
01	-5.48103900D-02	0.0	-1.38072000D+05		
		800.00	-5.50705700D+04	4.23514900D+02	-8.90271500D+
01					

3.59824000D-03	0.0	0.0			
BA1	1000.00	-1.677804000D+04	2.322732000D+02	-4.289059000D+	
01	-1.82964100D-03	-4.93666700D-10	5.705909000D+05		
	3000.00	-8.650059000D+03	2.475279000D+02	-4.691853000D+	
01	2.87708500D-03	-5.09161200D-08	3.555709000D+05		
	4000.00	-6.852852000D+03	1.977785000D+02	-4.038568000D+	
01	1.52577900D-03	-5.31425200D-08	8.634604000D+05		
BA1TE1	1500.00	-2.825455000D+05	1.887476000D+02	-4.267679000D+	
01	-4.183996000D-03	0.0	0.0		
BE1	900.00	-8.512910000D+03	1.371216000D+02	-2.114526000D+	
01	-2.93775300D-03	-1.205759000D-07	2.893424000D+05		
	1556.00	-3.412180000D+03	8.750826000D+01	-1.409372000D+	
01	-6.796405000D-03	1.854049000D-07	-3.558345000D+05		
	3000.00	1.963897000D+03	1.613339000D+02	-2.580428000D+	
01	-1.009597000D-03	0.0	2.130116000D+05		
CS1	301.54	-1.744762000D+04	2.470362000D+02	-4.961888000D+	
01	1.102157000D-02	-1.892102000D-06	5.267133000D+05		
	1000.00	-6.193102000D+03	1.073687000D+02	-2.990785000D+	
01	-4.387842000D-04	-2.017580000D-09	-1.007080000D+05		
L11	453.70	8.246496000D+03	-2.517388000D+02	4.096696000D+	
01	-1.133937000D-01	3.166540000D-05	-6.609464000D+05		
	1800.00	-6.611945000D+03	1.693573000D+02	-3.038420000D+	
01	0.0	0.0	0.0		
L12TE1	1100.00	-3.769669000D+05	3.899609000D+02	-6.90360000D+	
01	-8.368000000D-03	0.0	0.0		
M01	1000.00	-8.451012000D+03	1.439339000D+02	-2.543344000D+	
01	-1.696719000D-03	9.785327000D-08	1.076909000D+05		
	2100.00	8.905708000D+02	7.970993000D+01	-1.695842000D+	
01	-3.464268000D-03	-1.903810000D-07	-1.497587000D+06		
	2500.00	-1.076897000D+06	5.800473000D+03	-7.616260000D+	
02	2.255114000D-01	-1.341160000D-05	2.913318000D+08		
	2892.00	7.311315000D+05	-2.874795000D+03	3.508777000D+	
02	-7.924348000D-02	2.265733000D-06	-2.606318000D+08		
	3000.00	-3.859576000D+03	2.678074000D+02	-4.184000000D+	

01	0.0	0.0	0.0		
ND1	900.00	-8.40291000D+03	1.11101900D+02	-2.70857400D+	
01	5.56126900D-04	-2.69230500D-06	3.48870200D+04		
	1128.00	-6.98410500D+03	8.36628900D+01	-2.27536300D+	
01	-4.20401600D-03	-1.80199300D-06	0.0		
	1289.00	-1.80303100D+04	2.39677400D+02	-4.45595900D+	
01	0.0	0.0	0.0		
	1800.00	-1.63353300D+04	2.68626200D+02	-4.87854300D+	
01	0.0	0.0	0.0		
ND1TE1	2000.00	-3.15940100D+05	2.28276900D+02	-4.83670300D+	
01	-3.05432000D-03	0.0	0.0		
ND2TE3	1600.00	-8.33915400D+05	6.11922100D+02	-1.28574300D+	
02	-6.98727700D-03	0.0	0.0		
PD1	800.00	-8.11713700D+03	1.37685600D+02	-2.60407900D+	
01	-9.97026000D-04	-3.40085300D-07	3.67355200D+04		
	1500.00	-1.15342500D+04	1.68619100D+02	-3.03708000D+	
01	1.02746500D-03	-4.32000000D-07	4.98603100D+05		
	1825.00	-1.14075700D+05	9.28840600D+02	-1.34542800D+	
02	4.80333600D-02	-4.40661600D-06	1.94121400D+07		
	3300.00	5.10693100D+02	1.95317600D+02	-3.47271900D+	
01	0.0	0.0	0.0		
PD1TE1	1000.00	-5.23768100D+04	2.32011200D+02	-4.74465500D+	
01	-6.46427600D-03	0.0	0.0		
PD1TE2	1018.00	-7.63416900D+04	3.52445600D+02	-7.06259300D+	
01	-1.00416000D-02	0.0	0.0		
RU1	1800.00	-7.33175800D+03	1.30601400D+02	-2.36203500D+	
01	-8.40000600D-04	-4.27411600D-07	2.86269300D+04		
	2523.00	-3.05930000D+04	2.09298600D+02	-3.28297600D+	
01	-8.21591400D-04	-2.19252700D-07	8.28333600D+06		
	4500.00	-1.02075000D+04	2.69630600D+02	-4.18400000D+	
01	0.0	0.0	0.0		
TE1	722.72	-6.67707800D+03	8.50189700D+01	-1.91003300D+	
01	-1.10505100D-02	0.0	0.0		

01		1261.00	3.17344900D+03	1.85555300D+02	-3.76559900D+
01	0.0	0.0	0.0		
TH1		1633.00	-7.93693800D+03	1.17428900D+02	-2.51123700D+
01	-4.19655100D-03	3.66100000D-08	1.17152000D+04		
01		2023.00	5.97927700D+03	4.22184600D+01	-1.56900000D+
01	-5.98311800D-03	0.0	0.0		
01		5100.00	-1.70931300D+04	2.72432400D+02	-4.60239900D+
01	0.0	0.0	0.0		
U1		942.00	-8.40772300D+03	1.30946900D+02	-2.69181800D+
01	1.25155900D-03	-4.42604200D-06	3.85681100D+04		
01		1049.00	-1.43273900D+04	2.44160300D+02	-4.29278300D+
01	0.0	0.0	0.0		
01		1408.00	-4.69838700D+03	2.02677700D+02	-3.82835800D+
01	0.0	0.0	0.0		
01		4500.00	-1.01662200D+04	2.81788600D+02	-4.86599100D+
01	0.0	0.0	0.0		
ZR1		1135.00	-7.19948800D+03	1.13735700D+02	-2.22935900D+
01	-5.48940500D-03	-5.77629000D-08	9.18596900D+03		
01		2125.00	2.59865600D+00	1.10440100D+02	-2.32482300D+
01	-2.31925400D-03	0.0	0.0		
01		6000.00	9.66995700D+03	1.79292100D+02	-3.34720000D+
01	0.0	0.0	0.0		
PD3U1(*)		1973.00	-5.53930200D+05	4.88018800D+02	-9.86871300D+
01	-5.70569600D-03	0.0	0.0		
RU3U1(*)		2123.00	-1.85782800D+05	5.41614700D+02	-1.01223900D+
02	-9.23014100D-03	0.0	2.35906800D+05		
CS2TE1(*)		1083.00	-3.84343500D+05	2.97704100D+02	-7.10131400D+
01	-1.20522900D-02	0.0	0.0		

例 2

NPNAACLRCR

*** SYSTEM DATA FOR THE GAS PHASE ***

	MOL.WT. STOICHIOMETRY MATRIX											
AM1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0						
BA1CL1(G)	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0						
BA1CL2(G)	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0						
BA1I1(G)	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0						
BA1I2(G)	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0						
CL1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0						
CL1I1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0						
CL1NA1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	1.0	1.0	0.0	0.0						
CL1NI1(G)	0.0	0.0	0.0	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0						
CL1ZR1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0						
CL2(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0						
CL2NA2(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	2.0	2.0	0.0	0.0						
CL2NI1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	2.0	1.0	0.0						
CL2PD1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0						

JAERI-M 92-210

CL2ZR1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0							
CL3RUI(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	3.0	0.0	0.0							
CL3ZR1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	3.0	0.0	0.0							
CL4M01(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0							
CL4RUI(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0							
CL4ZR1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0							
CL5M01(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	5.0	0.0	0.0							
CL6M01(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	6.0	0.0	0.0							
CS1(G)	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
I1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
I1M01(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
I1ZR1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
I2(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
I2M01(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
I2ZR1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
I3M01(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
I3ZR1(G)	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0

JAERI-M 92-210

0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
14M01(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
14ZR1(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
NA1(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0									
NA2(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
0.0	0.0	2.0	0.0	0.0	0.0									
TE1(G)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									
TE2(G)(*)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0									

GIBBS ENERGY/J.MOL-1

		TMAX/K	A	B*T	C*T*log(T)
D*T*T		E*T**3	F/T		
AM1(G)		2200.00	2.77793500D+05	-5.34835100D+01	-2.10555600D+01
01	2.45579800D-04	-3.52257800D-08	6.29859000D+03		
		4000.00	2.62157100D+05	5.51210200D+01	-3.56945300D+01
01	5.93688300D-03	-4.32737100D-07	2.76834300D+06		
		6000.00	8.15954000D+05	-1.67385300D+03	1.72949800D+02
02	-2.91854800D-02	6.81573100D-07	-2.74323700D+08		
BA1CL1(G)		1700.00	-1.53824800D+05	-6.19083300D+00	-3.75802600D+01
01	-5.05895700D-05	-4.30110300D-08	5.32968400D+04		
		3400.00	-1.44872900D+05	-4.63136400D+01	-3.25951100D+01
01	-7.62741100D-04	-8.94008800D-08	-2.48912400D+06		
		6000.00	-1.14265600D+05	-1.94482500D+02	-1.36708400D+01
01	-5.65132500D-03	1.37862100D-07	-1.08399500D+07		
BA1CL2(G)		6000.00	-5.16676900D+05	6.49870100D+01	-5.81701500D+01
01	-7.20254500D-06	2.55182100D-10	8.94894400D+04		
BA111(G)		3000.00	-5.37780600D+04	-2.65316500D+01	-3.75908100D+01
01	-1.47888700D-04	-1.60071500D-08	2.07205400D+04		
		6000.00	-3.01434000D+04	-9.39058800D+01	-2.96567200D+01

01
 -1.06232100D-03 -1.267473000-08 -1.18028800D+07
 BAI12(G) 6000.00 -3.20491300D+05 4.21183500D+01 -5.81965000D+
 01
 -6.39781500D-07 1.30327400D-11 3.25780800D+04
 CL1(G) 800.00 1.14010900D+05 -1.13871900D+01 -2.27532500D+
 01
 -1.25034600D-03 5.24589800D-07 6.13941300D+04
 3200.00 1.15172400D+05 -1.35346000D+01 -2.27555100D+
 01
 5.36514000D-04 -2.72964000D-08 -1.72539800D+05
 6000.00 1.18332900D+05 -2.87477600D+01 -2.08024300D+
 01
 -1.30032400D-06 1.00597300D-10 -1.16829800D+06
 CL111(G) 2800.00 5.81600400D+03 3.13787200D+00 -3.72509000D+
 01
 -2.94281400D-04 5.15842300D-09 8.31261900D+04
 4400.00 4.26478500D+03 9.21410800D+00 -3.80123400D+
 01
 -1.11779700D-04 -3.83645800D-09 7.20235800D+05
 6000.00 9.12275400D+03 -4.23015800D+00 -3.64141800D+
 01
 -3.51564700D-04 3.09115300D-09 -2.11354700D+06
 CL1NA1(G) 6000.00 -1.93115700D+05 2.15370900D+01 -3.73465000D+
 01
 -3.65545500D-04 7.96807700D-10 7.90392500D+04
 CL1N11(G) 950.00 1.71473200D+05 -3.19256000D+01 -3.20431800D+
 01
 -8.63453000D-03 1.47149000D-06 4.28671900D+04
 2550.00 1.65669500D+05 5.27058400D+01 -4.49203800D+
 01
 2.93387500D-03 -3.74044700D-07 4.44831400D+05
 4350.00 2.15133900D+05 -2.15945200D+02 -9.84382500D+
 00
 -8.06352900D-03 2.67535500D-07 -1.26281600D+07
 6000.00 4.37910500D+04 2.95761500D+02 -7.12312900D+
 01
 1.78637300D-03 -3.07566500D-08 7.78214600D+07
 CL1ZR1(G) 1000.00 1.94093900D+05 -1.05696200D+01 -3.62033100D+
 01
 -3.35472900D-04 -4.70595400D-07 7.32973800D+04
 2400.00 1.92415600D+05 -1.47774900D+01 -3.50627400D+
 01
 -3.55137900D-03 2.40405600D-07 5.85780900D+05
 6000.00 1.79955900D+05 6.69452100D+01 -4.59737900D+
 01
 3.89927800D-04 -1.45519500D-08 2.89679200D+06
 CL2(G) 1200.00 -1.15624300D+04 1.85350200D+01 -3.57305600D+
 01
 -1.55489900D-03 1.85511600D-07 1.16424200D+05

	3600.00	-1.292676000D+04	3.43229500D+01	-3.80509200D+	
01	1.298856000D-04	-3.684004000D-08	2.589519000D+05		
	6000.00	-3.915836000D+04	8.30439300D+01	-4.33018800D+	
01	3.45152700D-05	4.10775100D-09	1.810245000D+07		
	CL2NA2(G)	3000.00	-5.921238000D+05	2.32903500D+02	-8.30268900D+
01	-4.82522000D-05	3.17900200D-09	1.893758000D+05		
	6000.00	-5.921991000D+05	2.33725100D+02	-8.31406600D+	
01	-1.99347700D-07	-1.32910300D-11	1.806261000D+05		
	CL2N1I(G)	1850.00	-8.98042500D+04	7.63320800D+01	-5.74044800D+
01	-2.21751900D-03	0.0	6.08772000D+05		
	CL2PD1(G)	1600.00	1.015548000D+05	1.06301400D+02	-6.23416000D+
01	0.0	0.0	2.09200000D+05		
	CL2ZR1(G)	1000.00	-2.056534000D+05	1.19293900D+02	-6.11031300D+
01	-9.47717600D-04	1.18769800D-07	1.743556000D+05		
	2200.00	-2.012909000D+05	9.24751600D+01	-5.76597000D+	
01	-1.26750000D-03	-7.66090100D-08	-6.404658000D+05		
	4100.00	-2.13119900D+05	1.19465000D+02	-6.04797100D+	
01	-2.02706500D-03	5.96045600D-08	4.69402900D+06		
	6000.00	-2.01372200D+05	9.98527100D+01	-5.84002700D+	
01	-1.97357100D-03	4.51084000D-08	-4.164126000D+06		
	CL3RU1(G)	1500.00	3.77494500D+04	-1.239354000D+01	-5.69023900D+
01	-3.82836000D-03	0.0	1.50623700D+05		
	CL3ZR1(G)	1000.00	-5.48442100D+05	1.65434600D+02	-7.41111800D+
01	-1.12938700D-02	1.64479900D-06	1.750209000D+05		
	3500.00	-5.598976000D+05	2.86257100D+02	-9.17049000D+	
01	1.10890600D-03	-3.97207900D-08	1.622743000D+06		
	6000.00	-5.501936000D+05	2.492366000D+02	-8.71150500D+	
01	1.51025600D-04	-2.46130700D-09	-2.188859000D+06		
	CL4M01(G)	1000.00	-4.189803000D+05	3.38131300D+02	-1.05166900D+
02	-2.55920600D-03	4.14421600D-07	3.71422000D+05		
	3200.00	-4.19746700D+05	3.54629200D+02	-1.07767300D+	
02	1.60560300D-04	-5.12005700D-08	3.487364000D+05		
	6000.00	-4.230003000D+05	3.423240000D+02	-1.05795800D+	
02	-1.02438100D-03	2.71141900D-08	4.447508000D+06		

JAERI-M 92-210

CL4RU1(G)	1500.00	-1.253783000D+05	2.731360000D+02	-9.581357000D+
01	0.0	0.0	5.230000000D+05	
CL4ZR1(G)	1000.00	-9.039639000D+05	3.417935000D+02	-1.050895000D+
02	-2.629434000D-03	4.257358000D-07	3.639243000D+05	
	6000.00	-9.054563000D+05	3.615496000D+02	-1.080727000D+
02	-2.614791000D-06	9.238267000D-11	5.064941000D+05	
CL5M01(G)	800.00	-4.894649000D+05	4.667546000D+02	-1.278233000D+
02	-5.213682000D-03	9.826326000D-07	4.852645000D+05	
	2400.00	-4.904961000D+05	4.915576000D+02	-1.318450000D+
02	-1.350258000D-04	-7.879515000D-08	4.762647000D+05	
	6000.00	-4.958084000D+05	4.905005000D+02	-1.312002000D+
02	-1.414633000D-03	4.511578000D-08	3.974779000D+06	
CL6M01(G)	1000.00	-4.893248000D+05	6.252419000D+02	-1.548632000D+
02	-2.728135000D-03	4.412641000D-07	5.386837000D+05	
	6000.00	-4.908632000D+05	6.457102000D+02	-1.579556000D+
02	-2.759034000D-06	8.065286000D-11	6.831028000D+05	
CS1(G)	1100.00	7.045344000D+04	-3.626843000D+01	-2.07861000D+
01	0.0	0.0	0.0	
	1800.00	7.030888000D+04	-3.365146000D+01	-2.11961400D+
01	4.224291000D-04	-7.097174000D-08	8.705547000D+03	
	3200.00	3.646658000D+04	1.739322000D+02	-4.88624100D+
01	1.071215000D-02	-8.052804000D-07	7.943721000D+06	
	4400.00	8.199925000D+04	1.068370000D+02	-4.23814100D+
01	1.242711000D-02	-9.907844000D-07	-2.307957000D+07	
	6000.00	3.320965000D+06	-9.162563000D+03	1.062753000D+
03	-1.554697000D-01	3.800668000D-06	-1.806287000D+09	
I1(G)	900.00	1.005657000D+05	-4.145662000D+01	-2.07861000D+
01	0.0	0.0	0.0	
	2400.00	1.004908000D+05	-3.997974000D+01	-2.10229200D+
01	2.889219000D-04	-5.922569000D-08	4.271777000D+03	
	6000.00	9.639169000D+04	-3.757101000D+01	-2.10008200D+
01	-4.330962000D-04	1.556559000D-08	2.477618000D+06	
I1M01(G)	1750.00	4.872851000D+05	-2.627225000D+01	-3.765656000D+
01				

-1.27670900D-05	-4.50792700D-08	3.23024400D+04				
	3350.00	4.81270900D+05	4.20534200D+01	-4.74248400D+		
01	5.46933300D-03	-5.62675900D-07	1.72800100D+05			
	4750.00	8.96576300D+05	-1.52347900D+03	1.46543500D+		
02	-3.50594100D-02	1.03399400D-06	-1.67814100D+08			
	6000.00	5.23214400D+04	7.19255600D+02	-1.18186600D+		
02	1.92029700D-03	6.31438900D-08	3.38170400D+08			
01	11ZR1(G)	1400.00	5.79794900D+05	-2.46621400D+01	-3.73674200D+	
	-4.85427400D-04	3.87409600D-09	3.28255700D+04			
	1700.00	1.80464400D+08	-1.27976000D+06	1.74138900D+		
05	-7.46697400D+01	5.97878200D-03	-3.47046100D+10			
	6000.00	5.05815300D+05	3.58837400D+02	-8.31637000D+		
01	3.22799700D-06	-1.10199600D-10	1.53759600D+05			
01	12(G)	3000.00	5.10371500D+04	-9.54079200D+00	-3.74028600D+	
	-2.85202200D-04	2.95369300D-10	3.08486300D+04			
	6000.00	5.10355800D+04	-9.43940900D+00	-3.74170800D+		
01	-2.79428200D-04	-3.85918100D-11	2.01275400D+04			
01	12M01(G)	950.00	2.33957800D+05	1.79238600D+02	-7.76018400D+	
	5.43437900D-03	-1.72073700D-07	1.66016300D+05			
	3550.00	2.43975300D+05	1.02340000D+02	-6.71510900D+		
01	1.69389600D-03	-1.29976500D-07	-1.44567700D+06			
	6000.00	2.91979900D+05	-8.16595600D+01	-4.42270100D+		
01	-3.39152500D-03	8.65879300D-08	-2.15662600D+07			
01	12ZR1(G)	6000.00	-8.42773800D+04	4.55568500D+01	-5.81935700D+	
	-2.28973500D-06	9.02697600D-11	4.23519000D+04			
01	13M01(G)	1550.00	1.58372800D+05	1.40859900D+02	-8.10886100D+	
	-1.53484600D-03	-4.06315700D-08	2.27960300D+04			
	6000.00	1.66386600D+05	1.02962700D+02	-7.62034300D+		
01	-3.14086000D-03	1.08590700D-07	-2.44875000D+06			
01	13ZR1(G)	6000.00	-2.47224700D+05	1.60217800D+02	-8.31268600D+	
	-5.30568600D-06	2.20860800D-10	1.02565500D+05			
02	14M01(G)	2950.00	9.12412500D+04	2.77087400D+02	-1.08742900D+	
	5.63907900D-04	-7.19578600D-08	1.59000900D+05			
	6000.00	1.95102700D+05	-8.28024700D+01	-6.48786000D+		

01	-7.10719800D-03	1.48785100D-07	-4.39225900D+07
	14ZR1(G)	6000.00	-3.95575800D+05
02	-1.12588900D-05	4.01921800D-10	1.53461500D+05
	NA1(G)	1700.00	1.01561500D+05
01	0.0	0.0	0.0
		2600.00	1.01491900D+05
01	1.57328600D-04	-2.02009000D-08	4.68089100D+03
		4300.00	4.45898200D+04
01	7.63958300D-03	-3.69078700D-07	2.00566100D+07
		6000.00	-2.82802800D+05
02	2.84154300D-02	-1.01994700D-06	1.81568400D+08
	NA2(G)	3000.00	1.26185200D+05
01	-8.06593600D-04	3.90971000D-11	1.73956600D+04
		6000.00	1.26139200D+05
01	-8.01522500D-04	-1.37270700D-10	3.19563400D+04
	TE1(G)	500.00	1.90366900D+05
01	0.0	0.0	0.0
		1300.00	1.90270100D+05
01	9.72552000D-04	-2.92586300D-07	0.0
	TE2(G)(*)	700.00	1.51872400D+05
01	1.46272400D-03	-2.34906600D-06	3.59025400D+04
		1200.00	1.44468000D+05
01	-3.50724900D-03	6.73833000D-07	1.03230500D+06
		1900.00	1.39271800D+05
01	3.78464800D-03	-2.89433000D-07	1.43726900D+06
		3000.00	1.51499400D+05
01	-7.77604600D-06	-2.84333200D-08	-1.26876900D+06

MIXING MODEL: IDEAL

*** SYSTEM DATA FOR THE LIQ PHASE ***

MOL.WT. STOICHIOMETRY MATRIX

JAERI-M 92-210

CL3NP1(*)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
1.0	0.0	0.0	3.0	0.0	0.0							
CL4NP1(*)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
1.0	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0							
AM1CL3(*)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	1.0	0.0	3.0	0.0	0.0							
CL1CSI(*)	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0							
AG1CL1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0							
AG1II	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	1.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
BA1CL2	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0							
BA1I2	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
CL1NA1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	1.0	1.0	0.0	0.0							
CL2CR1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	1.0							
CL2NI1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	2.0	1.0	0.0							
CL2PD1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0							
CL2M01(*)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0							
CL3M01(*)	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	3.0	0.0	0.0							
CL2ZR1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0							
CL3CR1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	3.0	0.0	1.0							
CL3RUI	0.0	0.0	0.0	3.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	3.0	0.0	0.0							

JAERI-M 92-210

CL3ZR1		0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	3.0	0.0	0.0							
CL4M01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0							
CL4TE1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0							
CL4ZR1		0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	4.0	0.0	0.0							
CL5M01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	5.0	0.0	0.0							
CL6M01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	6.0	0.0	0.0							
CR1I2		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0							
CR1I3		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0							
CS1I1		0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
I1NA1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0
	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0							
I2		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
I2N11		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0							
I2PD1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	2.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
I2ZR1		0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
I3ZR1		0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
I4ZR1		0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
I2M01(*)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0

JAERI-M 92-210

0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
I3M01(*)		0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
I4M01(*)		0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

GIBBS ENERGY/J.MOL-1

	TMAX/K	A	B*T	C*T*LOG(T)
D*T*T	E*T**3	F/T		
CL3NP1(*)	1000.00	-9.27960900D+05	4.81665500D+02	-9.45579100D+
01 -1.65267800D-02	0.0	0.0		
CL4NP1(*)	811.00	-1.01840100D+06	5.43349400D+02	-1.09620900D+
02 -1.82003800D-02	0.0	0.0		
	1000.00	-9.93935300D+05	9.41224400D+02	-1.75727900D+
02 0.0	0.0	0.0		
AM1CL3(*)	298.10	-9.77799800D+05	-1.64799900D+02	0.0
0.0	0.0	0.0		
CL1CS1(*)	743.00	-4.57488800D+05	2.12533700D+02	-4.58564900D+
01 -1.10469400D-02	-5.27999600D-10	0.0		
	918.00	-4.59296500D+05	3.00553000D+02	-5.97721900D+
01 -2.41799900D-03	-1.01583300D-08	0.0		
	1597.40	-4.57529500D+05	4.16687700D+02	-7.74039300D+
01 0.0	0.0	0.0		
AG1CL1	728.15	-1.49605100D+05	3.28347700D+02	-6.22579200D+
01 -2.09199900D-03	0.0	5.64840000D+05		
	1300.00	-1.31209500D+05	2.78360600D+02	-5.85759900D+
01 0.0	0.0	0.0		
AG111	420.15	-7.36651300D+04	7.76776300D+01	-2.43508800D+
01 -5.04172000D-02	0.0	0.0		
	831.00	-7.21154400D+04	2.46910200D+02	-5.64839900D+
01 0.0	0.0	0.0		
	2200.00	-6.44399200D+04	2.51737400D+02	-5.85759900D+
01 0.0	0.0	0.0		
BA1CL2	900.00	-8.83367100D+05	4.12603800D+02	-8.00428800D+

01					
	4.37240300D-03	-3.06579100D-06	1.74692800D+05		
		1198.00	-6.71493800D+05	-1.68002900D+03	2.20062900D+
02					
	-1.81350800D-01	1.80230600D-05	-2.74851000D+07		
		1235.00	-9.14180200D+05	7.49772000D+02	-1.23846400D+
02					
	0.0	0.0	0.0		
		3000.00	-8.79586900D+05	6.14534400D+02	-1.08784000D+
02					
	0.0	0.0	0.0		
	BA112	984.00	-6.27763100D+05	3.22248500D+02	-7.19066200D+
01					
	-9.53255200D-03	-1.00673300D-07	6.99003900D+03		
		2800.00	-6.32205000D+05	6.00272200D+02	-1.12968000D+
02					
	0.0	0.0	0.0		
	CL1NA1	1073.80	-4.28612100D+05	3.02933800D+02	-5.61384000D+
01					
	6.33913700D-03	-3.61770900D-06	1.67944900D+05		
		1500.00	-4.37259100D+05	7.53980700D+02	-1.24625000D+
02					
	4.01582400D-02	-4.65638600D-06	0.0		
		2500.00	-4.09662800D+05	3.63509500D+02	-6.69440000D+
01					
	0.0	0.0	0.0		
	CL2CR1	1088.15	-4.15541500D+05	3.20597200D+02	-6.40152000D+
01					
	-1.20080800D-02	0.0	0.0		
		1650.00	-4.05073400D+05	5.29029300D+02	-9.70687900D+
01					
	0.0	0.0	0.0		
	CL2N11	1282.00	-3.29520100D+05	3.99443800D+02	-7.32199900D+
01					
	-6.61071800D-03	0.0	2.48948000D+05		
		1400.00	-2.75853400D+05	5.43878400D+02	-1.00416000D+
02					
	0.0	0.0	0.0		
	CL2PD1	952.00	-1.94688600D+05	3.64849100D+02	-6.90360000D+
01					
	-1.04600000D-02	0.0	0.0		
		1550.00	-1.90698100D+05	5.22877200D+02	-9.41400000D+
01					
	0.0	0.0	0.0		
	CL2M01(*)	800.00	-2.05573300D+05	3.41151900D+02	-6.77809800D+
01					
	-1.42249900D-02	0.0	0.0		
		600.00	-3.06156300D+05	5.81428000D+02	-1.07950000D+
02					
	-2.21749800D-02	0.0	0.0		

CL2ZR1	700.00	-4.55281400D+05	3.97832800D+02	-7.50526000D+
01	-4.04236800D-03	-6.62459600D-07	2.32274800D+05	
	1000.00	-4.50402300D+05	3.38534200D+02	-6.61783300D+
01	-1.17852800D-02	7.35826300D-07	-2.93319300D+05	
	2000.00	-4.38721400D+05	4.86986600D+02	-9.10020000D+
01	0.0	0.0	0.0	
CL3CR1	1218.00	-5.82005400D+05	4.21710000D+02	-7.94959900D+
01	-2.06061900D-02	0.0	0.0	
CL3RUI	590.00	-2.87436900D+05	6.43013400D+02	-1.15060000D+
02	0.0	0.0	0.0	
CL3ZRI	1000.00	-7.46493100D+05	5.26183100D+02	-9.92026700D+
01	-6.79544000D-03	1.40122100D-08	3.13611700D+05	
	1500.00	-7.29426500D+05	3.79099400D+02	-7.84542100D+
01	-1.88503700D-02	1.48078700D-06	-2.40600900D+06	
	1800.00	-9.52139300D+05	1.92321100D+03	-2.87850800D+
02	6.87974700D-02	-5.41332700D-06	4.20617400D+07	
	2000.00	-9.88391800D+05	2.00954100D+03	-2.96239500D+
02	6.26177200D-02	-4.25575400D-06	5.52309000D+07	
CL4M01	590.00	-4.68313300D+05	-4.91261200D+02	6.14842800D+
01	-3.23149100D-01	9.19963900D-05	-2.11394500D+06	
	1500.00	-5.06718400D+05	7.35707500D+02	-1.46440000D+
02	0.0	0.0	0.0	
CL4TE1	497.15	-3.65132400D+05	7.26720900D+02	-1.38490400D+
02	0.0	0.0	0.0	
	700.00	-3.91815900D+05	1.34931200D+03	-2.30120000D+
02	0.0	0.0	0.0	
CL4ZR1	710.00	-1.02103300D+06	6.60719200D+02	-1.24349300D+
02	-7.99254700D-03	2.50370400D-07	4.08634500D+05	
CL5M01	467.00	-5.36593000D+05	-4.33591300D+01	-1.55800000D+
01	-1.95785800D-01	2.68259900D-05	-1.67232800D+06	
	1500.00	-5.62481800D+05	9.03149400D+02	-1.75728000D+
02	0.0	0.0	0.0	
CL6M01	500.00	-6.16457700D+05	1.76459300D+03	-3.14840100D+
02	2.36726500D-01	-9.95965700D-05	2.28864800D+06	

JAERI-M 92-210

	800.00	-6.65928800D+05	1.95270800D+03	-3.22423100D+
02	5.86379200D-02	-7.91884500D-06	8.30795900D+06	
	1300.00	-6.23450800D+05	1.51760300D+03	-2.59427500D+
02	1.56073400D-02	-1.98519600D-06	2.88993000D+06	
	1500.00	-6.14040100D+05	1.36756500D+03	-2.36796400D+
02	-2.50481400D-03	4.26995100D-07	2.88993000D+06	
CR112	1068.00	-1.77863500D+05	2.98618400D+02	-6.69440000D+
01	-1.12967900D-02	0.0	0.0	
CR113	900.00	-2.37381800D+05	5.12833300D+02	-1.05436800D+
02	-1.04600000D-02	0.0	0.0	
CS111	894.15	-3.44837100D+05	8.07021200D+01	-2.95390300D+
01	-2.16731100D-02	0.0	-4.03756000D+05	
	1600.00	-2.96389300D+05	-2.77743200D+02	1.79493600D+
01	-4.28859900D-02	0.0	0.0	
I1NA1	933.00	-3.03685100D+05	2.42843700D+02	-5.04406300D+
01	-4.85678400D-03	-1.13364800D-07	5.21205000D+04	
	3000.00	-2.89009800D+05	3.21095000D+02	-6.48519900D+
01	0.0	0.0	0.0	
I2	386.75	1.35086900D+04	-3.97468800D+02	5.06464700D+
01	-1.23453100D-01	0.0	-1.39871100D+06	
	6000.00	-1.05290200D+04	3.89952400D+02	-8.06717200D+
01	0.0	0.0	0.0	
I2N11	1070.00	-9.89668100D+04	2.94622100D+02	-6.58980000D+
01	-1.21336000D-02	0.0	0.0	
I2PD1	1000.00	-8.49531300D+04	3.13007600D+02	-6.81992000D+
01	-1.15060000D-02	0.0	0.0	
I2ZR1	500.00	-3.75900400D+05	2.53330000D+03	-4.38324000D+
02	5.83423100D-01	-1.82879800D-04	4.17033900D+06	
	700.00	-3.44472600D+05	1.40211200D+03	-2.38388000D+
02	1.60807400D-01	-3.44250400D-05	4.17033900D+06	
	2000.00	-2.42639800D+05	6.85664200D+01	-3.64718000D+
01	-4.35581500D-02	0.0	1.44323900D+03	
I3ZR1	600.00	-4.36902100D+05	6.49270500D+02	-1.29139200D+
02				

3.15222400D-02	-8.37678500D-06	4.88594900D+05										
	1500.00	-4.29456700D+05	5.03928000D+02	-1.05555200D+								
02	-1.43161400D-03	1.50331800D-07	4.62154200D+04									
14ZRI	772.00	-5.29019400D+05	6.08746300D+02	-1.28869700D+								
02	-6.13698400D-03	2.34100400D-07	2.04642100D+05									
12M01(*)	1500.00	-1.34109300D+05	3.82836400D+02	-7.89999400D+								
01	-6.24999400D-03	0.0	0.0									
13M01(*)	1000.00	-2.09715500D+05	5.05829300D+02	-1.03900000D+								
02	-8.29999500D-03	0.0	0.0									
14M01(*)	700.00	-2.16906100D+05	6.52909700D+02	-1.37199900D+								
02	0.0	0.0	0.0									

MIXING MODEL: IDEAL

*** SYSTEM DATA FOR THE ALLOY PHASE ***

MOL.WT. STOICHIOMETRY MATRIX

CR1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0						
N11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0							

GIBBS ENERGY/J.MOL-1

		TMAX/K	A	B*T	C*T*log(T)
D*T*T		E*T**3	F/T		
CR1	700.00	-6.01054700D+03	9.41091000D+01	-1.64300500D+	
01	-1.40324400D-02	2.55559400D-06	0.0		
	1300.00	-4.99726800D+03	1.25336300D+02	-2.24518400D+	
01	-4.39414100D-04	-1.28478000D-06	-4.20858100D+05		
	2130.00	7.57343000D+03	1.67973500D+00	-4.73365000D+	
00	-1.13493500D-02	-4.35002500D-08	-2.05927000D+06		
	3500.00	4.78363300D+03	2.43303300D+02	-3.93295900D+	
01	0.0	0.0	0.0		
N11	450.00	-1.05304400D+04	1.92072900D+02	-3.36472200D+	

01 1.23764400D-02 -7.25763500D-06 1.80977400D+05
 600.00 2.00867800D+04 -3.33376500D+02 4.93235000D+
 01 -8.38239200D-02 1.24752900D-05 -1.88107200D+06
 631.00 -4.27607000D+07 6.73669800D+05 -1.05023000D+
 05 1.14610600D+02 -2.34620500D-02 3.26404200D+09
 640.00 -1.12639900D+07 3.15442200D+05 -5.29405700D+
 04 8.29138800D+01 -2.16560300D-02 0.0
 800.00 1.17208800D+06 -1.59220100D+04 2.41305000D+
 03 -2.24088700D+00 3.84116300D-04 -1.06810100D+08
 1100.00 2.06053300D+04 -1.59362600D+02 1.83455800D+
 01 -3.33345500D-02 3.63670500D-06 -3.23337400D+06
 1400.00 1.01390100D+05 -8.56589400D+02 1.16131900D+
 02 -8.50410500D-02 8.64700100D-06 -1.55794000D+07
 1728.00 -1.48933200D+04 2.19878200D+02 -3.61915900D+
 01 0.0 0.0 0.0
 3200.00 -9.35037100D+03 2.68134800D+02 -4.30952000D+
 01 0.0 0.0 0.0

MIXING MODEL: IDEAL

*** SYSTEM DATA FOR THE STOICHIOMETRIC CONDENSED PHASES ***

MOL.WT. STOICHIOMETRY MATRIX

CS1		0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
AG1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
AG1.64TE1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.640	1.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
AG2TE1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.0	1.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
AM1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0							

JAERI-M 92-210

BA1		0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
BA1TE1		0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
M01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
NA1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0							
NA1TE1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	
	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0							
NA1TE3		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	3.0	0.0	
	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0							
NA2TE1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	
	0.0	0.0	2.0	0.0	0.0	0.0							
N11TE1.1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.100	0.0	
	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0							
NP1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
PD1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
PD1TE1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	1.0	
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
PD1TE2		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	2.0	
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
RU1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
TE1		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
ZR1		0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0								
CS2TE1(*)		0.0	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	
	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0							
CR7TE8(*)		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	7.0	0.0	0.0	8.0	0.0	0.0							

GIBBS ENERGY/J.MOL-1

	TMAX/K	A	B*T	C*T*LOG(T)
D*T*T	E*T**3	F/T		
CS1	301.54	-1.74476200D+04	2.47036200D+02	-4.96188800D+
01	1.10215700D-02 -1.89210200D-06	5.26713300D+05		
	1000.00	-6.19310200D+03	1.07368700D+02	-2.99078500D+
01	-4.38784200D-04 -2.01758000D-09	-1.00708000D+05		
AG1	1235.08	-7.20950800D+03	1.18200500D+02	-2.38463300D+
01	-1.79058400D-03 -3.98587200D-07	-1.20111100D+04		
	3000.00	-3.58737100D+03	1.80964800D+02	-3.34720000D+
01	0.0	0.0	0.0	
AG1.64TE1	418.00	-4.88121400D+04	1.71005700D+02	-4.00115800D+
01	-6.19022700D-02 0.0	0.0		
	569.00	-6.20853900D+04	5.53301000D+02	-1.03319700D+
02	1.35854500D-02 0.0	0.0		
	625.00	-5.26425000D+04	3.90115700D+02	-7.89939300D+
01	0.0	0.0	0.0	
	697.00	-5.23286600D+04	3.86381100D+02	-7.84918100D+
01	0.0	0.0	0.0	
	800.00	-4.85083800D+04	3.45017100D+02	-7.30107700D+
01	0.0	0.0	0.0	
AG2TE1	421.00	-5.45961000D+04	2.07068800D+02	-4.91954700D+
01	-5.48103900D-02 0.0	-1.38072000D+05		
	800.00	-5.50705700D+04	4.23514900D+02	-8.90271500D+
01	3.59824000D-03 0.0	0.0		
AM1	923.00	-7.15030900D+03	9.75115400D+01	-2.21500900D+
01	-6.03207200D-03 -1.89660700D-07	0.0		
	1350.00	-4.86643000D+03	9.07106800D+01	-2.17358700D+
01	-4.10868600D-03 -5.14631800D-07	0.0		
	1449.00	-1.33047600D+04	2.20305600D+02	-3.97479900D+
01	0.0	0.0		
	2500.00	-1.94310800D+03	2.27691500D+02	-4.18400000D+
01				

0.0	0.0	0.0			
BA1	1000.00	-1.67780400D+04	2.32273200D+02	-4.28905900D+	
01	-1.82964100D-03	-4.93666700D-10	5.70590900D+05		
	3000.00	-8.65005900D+03	2.47527900D+02	-4.69185300D+	
01	2.87708500D-03	-5.09161200D-08	3.55570900D+05		
	4000.00	-6.85285200D+03	1.97778500D+02	-4.03856800D+	
01	1.52577900D-03	-5.31425200D-08	8.63460400D+06		
BA1TE1	1500.00	-2.82545500D+05	1.88747600D+02	-4.26767900D+	
01	-4.18399600D-03	0.0	0.0		
M01	1000.00	-8.45101200D+03	1.43933900D+02	-2.54334400D+	
01	-1.69671900D-03	9.78532700D-08	1.07690900D+05		
	2100.00	8.90570800D+02	7.97099300D+01	-1.69584200D+	
01	-3.46426800D-03	-1.90381000D-07	-1.49758700D+06		
	2500.00	-1.07689700D+06	5.80047300D+03	-7.61626000D+	
02	2.25511400D-01	-1.34116000D-05	2.91331800D+08		
	2892.00	7.31131500D+05	-2.87479500D+03	3.50877700D+	
02	-7.92434800D-02	2.26573300D-06	-2.60631800D+08		
	3000.00	-3.85957600D+03	2.67807400D+02	-4.18400000D+	
01	0.0	0.0	0.0		
NA1	371.00	2.44651100D+04	-7.08744900D+02	1.16337800D+	
02	-2.68543600D-01	8.63681600D-05	-1.35250300D+06		
	1200.00	-8.00764100D+03	1.87863000D+02	-3.74696400D+	
01	9.57008500D-03	-1.76864600D-06	0.0		
NA1TE1	650.00	-1.87988800D+05	2.35538800D+02	-4.68607900D+	
01	-8.99559600D-03	0.0	0.0		
	1200.00	-1.95568600D+05	3.71431200D+02	-6.69440000D+	
01	0.0	0.0	0.0		
NA1TE3	728.00	-2.37883300D+05	4.31898400D+02	-8.36799900D+	
01	-2.78863500D-02	0.0	0.0		
	1200.00	-2.28928100D+05	7.85329100D+02	-1.42256000D+	
02	0.0	0.0	0.0		
NA2TE1	1226.00	-3.69716000D+05	3.99956100D+02	-7.32199900D+	
01	-6.90360000D-03	0.0	0.0		
	1300.00	-3.73744900D+05	5.58428700D+02	-9.62319900D+	

01	0.0	0.0	0.0
	N1ITE1.1	1000.00	-7.60298800D+04 3.03278800D+02 -5.71785400D+
01	-3.55640000D-03	0.0	2.00539100D+05
	NPI	553.00	2.41889500D+02 -5.75313600D+01 4.05429600D+
00	-4.12772500D-02	0.0	-4.02856400D+05
		849.00	-6.97687500D+03 2.05363600D+02 -3.93295900D+
01	0.0	0.0	0.0
		912.00	7.81509000D+02 1.76473400D+02 -3.64007900D+
01	0.0	0.0	0.0
		4500.00	-2.23433800D+03 2.41091100D+02 -4.53963900D+
01	0.0	0.0	0.0
PD1	800.00	-8.11713700D+03 1.37685600D+02 -2.60407900D+	
01	-9.97026000D-04	-3.40085300D-07	3.67355200D+04
		1500.00	-1.15342500D+04 1.68619100D+02 -3.03708000D+
01	1.02746500D-03	-4.32000000D-07	4.98603100D+05
		1825.00	-1.14075700D+05 9.28840600D+02 -1.34542800D+
02	4.80333600D-02	-4.40661600D-06	1.94121400D+07
		3300.00	5.10693100D+02 1.95317600D+02 -3.47271900D+
01	0.0	0.0	0.0
PD1TE1	1000.00	-5.23768100D+04 2.32011200D+02 -4.74465500D+	
01	-6.46427600D-03	0.0	0.0
PD1TE2	1018.00	-7.63416900D+04 3.52445600D+02 -7.06259300D+	
01	-1.00416000D-02	0.0	0.0
RU1	1800.00	-7.33175800D+03 1.30601400D+02 -2.36203500D+	
01	-8.40000600D-04	-4.27411600D-07	2.86269300D+04
		2523.00	-3.05930000D+04 2.09298600D+02 -3.28297600D+
01	-8.21591400D-04	-2.19252700D-07	8.28333600D+06
		4500.00	-1.02075000D+04 2.69630600D+02 -4.18400000D+
01	0.0	0.0	0.0
TE1	722.72	-6.67707800D+03 8.50189700D+01 -1.91003300D+	
01	-1.10505100D-02	0.0	0.0
		1261.00	3.17344900D+03 1.85555300D+02 -3.76559900D+
01	0.0	0.0	0.0

JAERI-M 92-210

ZR1	1135.00	-7.19948800D+03	1.13735700D+02	-2.22935900D+
01	-5.48940500D-03	-5.77629000D-08	9.18596900D+03	
	2125.00	2.59865600D+00	1.10440100D+02	-2.32482300D+
01	-2.31925400D-03	0.0	0.0	
	6000.00	9.66995700D+03	1.79292100D+02	-3.34720000D+
01	0.0	0.0	0.0	
CS2TE1(*)	1083.00	-3.84343500D+05	2.97704100D+02	-7.10131400D+
01	-1.20522900D-02	0.0	0.0	
CR7TE8(*)	700.00	-3.69980100D+05	1.02197100D+03	-2.67812700D+
02	-1.86631000D-01	1.78333100D-05	0.0	
	722.72	-3.62858900D+05	1.24051200D+03	-3.09965800D+
02	-9.14999800D-02	-8.99332700D-06	-2.94600400D+06	
	1026.00	-4.23959800D+05	2.23836900D+03	-4.58410600D+
02	-3.08199900D-03	-8.99332700D-06	-2.94600400D+06	

付録2 ChemSage 解析結果出力例

Table A2 に解析事例のリストを示す。このうち、以下の数例についてChemSage出力を示す。

例1 構造材を含むフッ化物溶融塩系

入力データ例1に対応するフッ化物溶融塩系で、構造材を含む場合について、 $p(F_2) = 10^{-36} \text{ atm}$ に設定したもの。入力組成に統いて、気相、液相、Ni-Cr合金相、定比凝縮相の順に平衡状態での存在量、蒸気圧、モル分率等が出力されている。気相に関する出力は蒸気圧の高い順に化学種が表示されている。気相容積を0としてあるので、気相中モル数は0であり、平衡蒸気圧だけが計算されている。液相、合金相の化学種は入力配列の順に出力されている。定比凝縮相化学種については、存在量の順に出力されている。合金中のCr濃度が若干低下したところで溶融塩と平衡している。

例2 構造材を含むフッ化物溶融塩系（混合フッ化物化学種の存在無視）

例1と同一条件の計算で、ただし、溶融塩相中の仮想的な混合フッ化物化学種(Li_2BeF_4 , LiBeF_3)を計算から除外して、その効果を調べている。顕著に効果が現れるのは、 BeF_2 の蒸気圧であり、混合フッ化物化学種を想定した例1の場合の数10倍になっている。しかし、凝縮相間の平衡には顕著な変化はない。溶融塩中の各化学種のモル分率、したがって活量が変化するのに伴って、合金相の溶融塩と平衡するCr含量が例1と僅かに異なっている。この解析は、基本となるフッ化物溶融塩系の単純なモデル化が解析結果に及ぼす影響を見るために行った。

例3 構造材を含むTRU塩化物溶融塩系

入力例2の($\text{Np}_{0.5}\text{Am}_{0.5}$) Cl_3-NaCl 溶融塩系で、重金属燃焼率1at%のとき、構造材合金との接触状態での平衡の計算例。なんらかの方法で原子価調整が行われて、平衡塩素分圧 $p(\text{Cl}_2) = 10^{-22} \text{ atm}$ に設定できたとしたもの。この付近の酸化ボテンシャルに設定できれば、合金表面からのCrの減損は少ない。一方、 $\text{NiTe}_{1.1}$ が形成され、 Pd は単体として存在する結果となっている。これについては、本文中で詳細に議論している。

例4 TRU塩化物溶融塩系への過剰なZr金属添加効果

例3と同様で、原子価調整剤としてZrを用いたとした場合。Zrを過剰に添加したとして、 $p(\text{Cl}_2)$ の下限を調べた。 $p(\text{Cl}_2)$ は約 10^{-26} atm 以下には低下せず、この限りではZrが原子価調整剤として使いやすい。

例5 TRU塩化物溶融塩系への過剰なTi金属添加効果

例4と同様で、原子価調整剤としてTiを用いたとした場合。 $\text{Np}^{4+}/\text{Np}^{3+}$ を慎重に監視しつつTiの添加を制御しないと、系の平衡塩素分圧は $p(\text{Cl}_2) = 10^{-33} \sim 10^{-32} \text{ atm}$ に容易に低下し、金属Npがプレートアウトする。

Table A2 List of calculated cases

System	structural alloys	Valence control	Features
FLIBE*	Ni-Cr ideal None None	Yes Yes Yes	p(F ₂) dependence p(F ₂) dependence Replace Th with Zr
	Ni-Cr ideal None None	Yes Yes Yes	SGTE data: UF ₄ , UF ₃ , CrF ₂ SGTE data: UF ₄ , UF ₃ , CrF ₂ Barin data: UF ₄ , UF ₃ , CrF ₂
(Np, Am) Cl ₃ -NaCl	Ni-Cr ideal Ni-Cr ideal Ni-Cr ideal Ni-Cr ideal Ni only None	No Yes - - No No	p(Cl ₂) dependence Excess Zr addition Ti addition
PuCl ₃ -NaCl	Ni-Cr ideal None	No No	Burnup dependence; Pd excluded; Cd, In, Ce included
	None None	No No	Pd included; Ce excluded; lat% burnup
			Cd, In counted in Ag yield.

* LiF-BeF₂-ThF₄-UF₄
 ** I. Barin, "Thermochemical Data of Pure Substances", VCH (1989).

例 1

T = 1000.00 K

P = 1.0000D+00 ATM

V = 0.0 DM3

REACTANTS:	AMOUNT/MOL
N11/ALLOY/	9.5000D-02
CR1/ALLOY/	5.0000D-03
CS1	6.9210D-04
BA1	5.3340D-04
ND1	1.6260D-03
ZR1	9.7800D-04
PDI	2.1600D-05
AG1	1.8300D-05
TE1	9.0300D-05
I2/LIQ/	3.8250D-05
L11	7.1700D+01
BE1	1.6000D+01
TH1	1.2000D+01
U1	2.9700D-01
F2(G)/GAS/	7.6448D+01

PHASE: GAS	EQUIL AMOUNT	PRESSURE	FUGACITY
	MOL	ATM	ATM
BE1F2(G)	0.0	2.4128D-06	2.4128D-06
TE2(G)(*)	0.0	1.1917D-06	1.1917D-06
TE1(G)	0.0	7.0320D-07	7.0320D-07
F1L1I1(G)	0.0	3.7023D-07	3.7023D-07
F2L1I2(G)	0.0	3.1663D-07	3.1663D-07
F4ZR1(G)	0.0	2.4472D-07	2.4472D-07
F3L1I3(G)	0.0	1.5629D-08	1.5629D-08
I1L1I1(G)	0.0	3.9420D-10	3.9420D-10
I1(G)	0.0	1.0242D-11	1.0242D-11
F3ZR1(G)	0.0	1.5236D-14	1.5236D-14

CR1(G)	0.0	3.0082D-15	3.0082D-15
BA1F2(G)	0.0	6.6840D-17	6.6840D-17
I2L12(G)	0.0	6.2757D-17	6.2757D-17
BE1F1(G)	0.0	5.7654D-17	5.7654D-17
F1(G)	0.0	1.0270D-19	1.0270D-19
I2(G)	0.0	3.4446D-20	3.4446D-20
F2ZR1(G)	0.0	3.6951D-21	3.6951D-21
F111(G)	0.0	1.2186D-21	1.2186D-21
BA1F1(G)	0.0	1.0264D-21	1.0264D-21
BA1I2(G)	0.0	6.9702D-24	6.9702D-24
BE1I2(G)	0.0	2.1830D-24	2.1830D-24
BE1I1(G)	0.0	1.2230D-24	1.2230D-24
BA1I1(G)	0.0	2.9794D-26	2.9794D-26
I2ZRI(G)	0.0	8.0907D-27	8.0907D-27
I3ZRI(G)	0.0	1.0505D-30	1.0505D-30
ND1TE1(G)	0.0	9.8580D-33	9.8580D-33
F1ZRI(G)	0.0	1.9830D-33	1.9830D-33
BE1F3L11(G)	0.0	2.2488D-34	2.2488D-34
I4ZRI(G)	0.0	1.4317D-35	1.4317D-35
F2(G)	0.0	1.0000D-36	1.0000D-36
F5I1(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
F7I1(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
I1ZRI(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
TOTAL:	0.0	5.2553D-06	
PHASE: LiO	MOL	MOLE FRACTION	ACTIVITY
F2N11	1.3069D-08	1.7855D-10	1.7855D-10
I2N11	7.7334D-18	1.0566D-19	1.0566D-19
CR1F2	1.7776D-03	2.4285D-05	2.4285D-05
CR1F3	3.3803D-08	4.6183D-10	4.6183D-10
CR1F4	6.6462D-25	9.0802D-27	9.0802D-27
CR1I2	1.2200D-14	1.6668D-16	1.6668D-16
CR1I3	2.8123D-24	3.8422D-26	3.8422D-26
AG1I1	2.8674D-06	3.9175D-08	3.9175D-08

JAERI-M 92-210

BA1F2	5.3340D-04	7.2874D-06	7.2874D-06
BA1I2	3.9754D-15	5.4313D-17	5.4313D-17
BE1F2	3.8808D-01	5.3020D-03	5.3020D-03
BE1F3L11	4.4158D+00	6.0329D-02	6.0329D-02
BE1F4L12	1.1196D+01	1.5296D-01	1.5296D-01
BE1I2	8.9783D-23	1.2266D-24	1.2266D-24
CS1F1	6.2742D-04	8.5719D-06	8.5719D-06
CS1I1	6.4683D-05	8.8371D-07	8.8371D-07
F1I11	4.4892D+01	6.1332D-01	6.1332D-01
F2PD1	2.8345D-22	3.8726D-24	3.8726D-24
F2ZR1	1.5526D-08	2.1211D-10	2.1211D-10
F3ND1	1.6260D-03	2.2215D-05	2.2215D-05
F3U1	5.3731D-03	7.3408D-05	7.3408D-05
F4U1	2.9162D-01	3.9842D-03	3.9842D-03
F3ZR1	4.5555D-08	6.2239D-10	6.2239D-10
F4TH1	1.2000D+01	1.6395D-01	1.6395D-01
F4ZR1	9.7794D-04	1.3361D-05	1.3361D-05
I1L11	8.9498D-06	1.2227D-07	1.2227D-07
I2	2.2354D-20	3.0540D-22	3.0540D-22
I2PD1	2.9290D-23	4.0017D-25	4.0017D-25
I2ZR1	1.9145D-23	2.6157D-25	2.6157D-25
I3ND1	1.9701D-27	2.6916D-29	2.6916D-29
I3ZR1	4.1058D-29	5.6095D-31	5.6095D-31
I4TH1	1.5088D-34	2.0614D-36	2.0614D-36
I4ZR1	3.8208D-36	5.2201D-38	5.2201D-38
TOTAL:	7.3195D+01	1.00000D+00	
PHASE: ALLOY	MOL	MOLE FRACTION	ACTIVITY
N1I	9.4925D-02	9.6717D-01	9.6717D-01
CR1	3.2224D-03	3.2832D-02	3.2832D-02
TOTAL:	9.8147D-02	1.00000D+00	
	MOL		ACTIVITY
NI1TE1.1	7.5076D-05		1.00000D+00
AG2TE1	7.7163D-06		1.00000D+00

PD3UI(*)	7.2000D-06	1.0000D+00
CR7TE8	0.0	5.3674D-01
AG1	0.0	3.6713D-01
AG1.64TE1	0.0	2.3708D-01
CR2TE3	0.0	8.5391D-02
TE1	0.0	5.6661D-03
PD1	0.0	6.3999D-05
PD1TE1	0.0	1.6169D-05
LI2TE1	0.0	1.0311D-05
PD1TE2	0.0	5.5520D-08
CS2TE1(*)	0.0	9.8556D-09
L11	0.0	4.1977D-10
CS1	0.0	1.3508D-11
BE1	0.0	1.2495D-12
ND1TE1	0.0	6.3321D-14
BA1TE1	0.0	4.4798D-14
U1	0.0	6.3832D-16
ZR1	0.0	2.9041D-16
ND2TE3	0.0	3.9752D-19
TH1	0.0	7.3769D-24
BA1	0.0	2.4882D-24
ND1	0.0	1.2751D-25

MOLE FRACTIONS OF THE SYSTEM COMPONENTS IN THE LIQ PHASE:

U	1.1744D-03
TH	4.7450D-02
F	6.0458D-01
LI	2.8351D-01
BE	6.3266D-02
CS	2.7367D-06
BA	2.1091D-06
ZR	3.8672D-06
NI	5.1675D-11

JAERI-M 92-210

CR	7.0288D-06
PD	1.2366D-24
AG	1.1338D-08
I	3.0249D-07
ND	6.4294D-06

例 2

T = 1000.00 K

P = 1.0000D+00 ATM

V = 0.0 DM3

REACTANTS:	AMOUNT/MOL
N11/ALLOY/	9.5000D-02
CR1/ALLOY/	5.0000D-03
CS1	6.9210D-04
BA1	5.3340D-04
ND1	1.6260D-03
ZR1	9.7800D-04
PDI	2.1600D-05
AG1	1.8300D-05
TE1	9.0300D-05
I2/LIQ/	3.8250D-05
L11	7.1700D+01
BE1	1.6000D+01
TH1	1.2000D+01
UF	2.9700D-01
F2(G)/GAS/	7.6449D+01

PHASE: GAS	EQUIL AMOUNT	PRESSURE	FUGACITY
	MOL	ATM	ATM
BE1F2(G)	0.0	7.2808D-05	7.2808D-05
TE2(G)(*)	0.0	1.1835D-06	1.1835D-06
TE1(G)	0.0	7.0075D-07	7.0075D-07
F1L11(G)	0.0	4.3280D-07	4.3280D-07
F2L12(G)	0.0	4.3269D-07	4.3269D-07
F4ZR1(G)	0.0	1.7912D-07	1.7912D-07
F3L13(G)	0.0	2.4968D-08	2.4968D-08
I1L11(G)	0.0	4.2267D-10	4.2267D-10
I1(G)	0.0	9.3942D-12	9.3942D-12
F3ZR1(G)	0.0	1.1151D-14	1.1151D-14

CR1(G)	0.0	2.6674D-15	2.6674D-15
BE1F1(G)	0.0	1.7398D-15	1.7398D-15
I2L12(G)	0.0	7.2148D-17	7.2148D-17
BA1F2(G)	0.0	4.8922D-17	4.8922D-17
F1(G)	0.0	1.0270D-19	1.0270D-19
I2(G)	0.0	2.8978D-20	2.8978D-20
F2ZR1(G)	0.0	2.7046D-21	2.7046D-21
F1I1(G)	0.0	1.1177D-21	1.1177D-21
BA1F1(G)	0.0	7.5123D-22	7.5123D-22
BE1I2(G)	0.0	5.5418D-23	5.5418D-23
BE1I1(G)	0.0	3.3849D-23	3.3849D-23
BA1I2(G)	0.0	4.2918D-24	4.2918D-24
BA1I1(G)	0.0	2.0001D-26	2.0001D-26
I2ZR1(G)	0.0	4.9817D-27	4.9817D-27
I3ZR1(G)	0.0	5.9325D-31	5.9325D-31
BE1F3L11(G)	0.0	7.9331D-33	7.9331D-33
ND1TE1(G)	0.0	7.1902D-33	7.1902D-33
F1ZR1(G)	0.0	1.4514D-33	1.4514D-33
I4ZR1(G)	0.0	7.4163D-36	7.4163D-36
F2(G)	0.0	1.0000D-36	1.0000D-36
F5I1(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
F7I1(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
I1ZR1(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
TOTAL:	0.0	7.5762D-05	
PHASE: LIQ	MOL	MOLE FRACTION	ACTIVITY
F2N11	1.7924D-08	1.7923D-10	1.7923D-10
I2N11	8.9228D-18	8.9225D-20	8.9225D-20
CR1F2(*)	2.1535D-03	2.1534D-05	2.1534D-05
CR1F3	4.0953D-08	4.0952D-10	4.0952D-10
CR1F4	8.0519D-25	8.0517D-27	8.0517D-27
CR1I2	1.2434D-14	1.2434D-16	1.2434D-16
CR1I3	2.6289D-24	2.6288D-26	2.6288D-26
AG1I1	3.5995D-06	3.5994D-08	3.5994D-08

JAERI-M 92-210

BA1F2		5.3340D-04	5.3338D-06	5.3338D-06
BA1I2		3.3443D-15	3.3442D-17	3.3442D-17
BE1F2		1.6000D+01	1.6000D-01	1.6000D-01
BE1F3L11	*	0.0	0.0	2.1282D+00
BE1F4L12	*	0.0	0.0	6.3080D+00
BE1I2		3.1140D-21	3.1139D-23	3.1139D-23
CS1F1		6.3231D-04	6.3229D-06	6.3229D-06
CS1I1		5.9790D-05	5.9788D-07	5.9788D-07
F1L11		7.1700D+01	7.1698D-01	7.1698D-01
F2PD1		4.2973D-22	4.2972D-24	4.2972D-24
F2ZR1		1.5526D-08	1.5525D-10	1.5525D-10
F3ND1		1.6260D-03	1.6260D-05	1.6260D-05
F3U1(*)		5.3731D-03	5.3729D-05	5.3729D-05
F4U1(*)		2.9162D-01	2.9161D-03	2.9161D-03
F3ZR1		4.5555D-08	4.5554D-10	4.5554D-10
F4TH1		1.2000D+01	1.2000D-01	1.2000D-01
F4ZR1		9.7794D-04	9.7791D-06	9.7791D-06
I1L11		1.3111D-05	1.3110D-07	1.3110D-07
I2		2.5693D-20	2.5692D-22	2.5692D-22
I2PD1		3.7356D-23	3.7355D-25	3.7355D-25
I2ZR1		1.6106D-23	1.6106D-25	1.6106D-25
I3ND1		1.5201D-27	1.5201D-29	1.5201D-29
I3ZR1		3.1680D-29	3.1680D-31	3.1680D-31
I4TH1		1.0678D-34	1.0678D-36	1.0678D-36
I4ZR1		2.7040D-36	2.7039D-38	2.7039D-38
TOTAL:		1.0000D+02	1.0000D+00	
PHASE: ALLOY	MOL	MOLE FRACTION	ACTIVITY	
N1I	9.4925D-02	9.7089D-01	9.7089D-01	
CRI	2.8464D-03	2.9113D-02	2.9113D-02	
TOTAL:	9.7771D-02	1.0000D+00		
	MOL		ACTIVITY	
NI1TE1.1	7.5409D-05		1.0000D+00	
AG2TE1	7.3502D-06		1.0000D+00	
PD3U1(*)	7.2000D-06		1.0000D+00	

AG1	0.0	3.6777D-01
AG1.64TE1	0.0	2.3693D-01
CR7TE8(*)	0.0	2.2583D-01
TE1	0.0	5.6463D-03
PD1	0.0	7.1015D-05
PD1TE1	0.0	1.7879D-05
L12TE1	0.0	1.4041D-05
PD1TE2	0.0	6.1178D-08
CS2TE1(*)	0.0	5.3437D-09
L11	0.0	4.9071D-10
BE1	0.0	3.7706D-11
CS1	0.0	9.9643D-12
ND1TE1	0.0	4.6185D-14
BA1TE1	0.0	3.2674D-14
U1	0.0	4.6720D-16
ZR1	0.0	2.1255D-16
ND2TE3	0.0	2.1074D-19
TH1	0.0	5.3994D-24
BA1	0.0	1.8211D-24
ND1	0.0	9.3325D-26

MOLE FRACTIONS OF THE SYSTEM COMPONENTS IN THE LIQ PHASE:

U	1.1743D-03
TH	4.7450D-02
F	6.0458D-01
LI	2.8351D-01
BE	6.3266D-02
CS	2.7367D-06
BA	2.1091D-06
ZR	3.8671D-06
NI	7.0873D-11
CR	8.5154D-06
PD	1.8469D-24

JAERI-M 92-210

AG	1.4233D-08
I	3.0249D-07
ND	6.4294D-06

例 3

T = 800.00 K

P = 1.0000D+00 ATM

V = 0.0 DM3

REACTANTS:	AMOUNT/MOL
CL2(G)/GAS/	8.5913D+00
CS1	7.8600D-03
BA1	3.3900D-03
ZR1	6.5400D-03
M01	1.0110D-02
RU1	1.1140D-02
AG1	1.3540D-03
PDI	3.9840D-03
TE1	1.2600D-03
I2/LIQ/	4.0500D-04
NP1	1.7820D+00
AM1	1.7984D+00
NA1	6.4000D+00
N11/ALLOY/	9.5000D-02
CR1/ALLOY/	5.0000D-03

PHASE: GAS	EQUIL AMOUNT	PRESSURE	FUGACITY
	MOL	ATM	ATM
CL4ZR1(6)	0.0	7.5557D-02	7.5557D-02
CL1NA1(G)	0.0	5.4150D-08	5.4150D-08
CL2NA2(G)	0.0	7.4739D-09	7.4739D-09
CL3ZR1(G)	0.0	3.5784D-09	3.5784D-09
TE2(G)(*)	0.0	4.8945D-10	4.8945D-10
TE1(G)	0.0	4.4369D-10	4.4369D-10
I1(G)	0.0	2.7465D-12	2.7465D-12
NA1(G)	0.0	5.4363D-14	5.4363D-14
CL2N11(G)	0.0	3.3369D-15	3.3369D-15
I2ZR1(G)	0.0	1.5017D-16	1.5017D-16

JAERI-M 92-210

CL1(G)	0.0	9.3150D-17	9.3150D-17
CL2ZR1(G)	0.0	6.5349D-17	6.5349D-17
CS1(G)	0.0	2.1987D-17	2.1987D-17
BA1CL2(G)	0.0	1.5704D-17	1.5704D-17
I3ZR1(G)	0.0	1.2860D-17	1.2860D-17
CL1N11(G)	0.0	4.8376D-18	4.8376D-18
I2(G)	0.0	2.5037D-19	2.5037D-19
CL111(G)	0.0	7.8369D-20	7.8369D-20
I4ZR1(G)	0.0	7.4632D-20	7.4632D-20
CL2(G)	0.0	1.0000D-22	1.0000D-22
BA1I2(G)	0.0	1.1752D-23	1.1752D-23
CL4M01(G)	0.0	7.5989D-25	7.5989D-25
NA2(G)	0.0	2.9182D-26	2.9182D-26
BA1CL1(G)	0.0	1.5688D-27	1.5688D-27
CL1ZR1(G)	0.0	9.1727D-28	9.1727D-28
CL2PD1(G)	0.0	5.9509D-28	5.9509D-28
I2M01(G)	0.0	2.5918D-29	2.5918D-29
BA1I1(G)	0.0	2.9715D-30	2.9715D-30
AM1(G)	0.0	1.8641D-30	1.8641D-30
I1M01(G)	0.0	2.0567D-34	2.0567D-34
I3M01(G)	0.0	2.8253D-35	2.8253D-35
CL3RU1(G)	0.0	6.0182D-36	6.0182D-36
CL5M01(G)	0.0	3.9981D-36	3.9981D-36
CL4RU1(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
CL6M01(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
I1ZR1(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
I4M01(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
TOTAL:	0.0	7.5557D-02	
PHASE: LIQ	MOL	MOLE FRACTION	ACTIVITY
CL3NP1(*)	1.7820D+00	1.7822D-01	1.7822D-01
CL4NP1(*)	1.2806D-09	1.2807D-10	1.2807D-10
AM1CL3(*)	1.7984D+00	1.7986D-01	1.7986D-01
CL1CS1(*)	7.8516D-03	7.8524D-04	7.8524D-04

AG1CL1	2.2032D-05	2.2034D-06	2.2034D-06
AG1I1	1.3636D-05	1.3637D-06	1.3637D-06
BA1CL2	3.3900D-03	3.3904D-04	3.3904D-04
BA1I2	4.9092D-12	4.9097D-13	4.9097D-13
CL1NA1	6.3992D+00	6.3999D-01	6.3999D-01
CL2CR1	7.0897D-04	7.0905D-05	7.0905D-05
CL2N11	1.0780D-09	1.0781D-10	1.0781D-10
CL2PDI	2.5324D-18	2.5327D-19	2.5327D-19
CL2M01(*)	3.7927D-16	3.7931D-17	3.7931D-17
CL3M01(*)	6.2733D-25	6.2739D-26	6.2739D-26
CL2ZR1	3.8554D-09	3.8558D-10	3.8558D-10
CL3CR1	1.1132D-09	1.1133D-10	1.1133D-10
CL3RU1	8.6276D-28	8.6285D-29	8.6285D-29
CL3ZRI	1.8104D-05	1.8106D-06	1.8106D-06
CL4M01	1.5512D-24	1.5514D-25	1.5514D-25
CL4TE1	0.0	0.0	<1.0000E-75
CL4ZRI	6.5219D-03	6.5226D-04	6.5226D-04
CL5M01	1.4316D-36	1.4318D-37	1.4318D-37
CL6M01	0.0	0.0	<1.0000E-75
CR1I2	8.8811D-12	8.8821D-13	8.8821D-13
CR1I3	4.2886D-20	4.2890D-21	4.2890D-21
CS1I1	8.3934D-06	8.3943D-07	8.3943D-07
I1NA1	7.8797D-04	7.8806D-05	7.8806D-05
I2	4.4646D-20	4.4651D-21	4.4651D-21
I2N11	4.2118D-16	4.2123D-17	4.2123D-17
I2PDI	1.4908D-17	1.4909D-18	1.4909D-18
I2ZRI	3.5763D-12	3.5767D-13	3.5767D-13
I3ZRI	8.8014D-15	8.8023D-16	8.8023D-16
I4ZRI	7.4700D-20	7.4708D-21	7.4708D-21
I2M01(*)	6.2357D-14	6.2364D-15	6.2364D-15
I3M01(*)	4.6619D-21	4.6624D-22	4.6624D-22
I4M01(*)	2.0773D-31	2.0775D-32	2.0775D-32
TOTAL:	9.9989D+00	1.0000D+00	

PHASE: ALLOY	MOL	MOLE FRACTION	ACTIVITY
CR1	4.2910D-03	4.3456D-02	4.3456D-02
NI1	9.4454D-02	9.5654D-01	9.5654D-01
TOTAL:	9.8745D-02	1.0000D+00	
	MOL		ACTIVITY
RU1	1.1140D-02		1.0000D+00
MO1	1.0110D-02		1.0000D+00
PD1	3.9840D-03		1.0000D+00
AG2TE1	6.5917D-04		1.0000D+00
NI1TE1.1	5.4621D-04		1.0000D+00
AG1	0.0		5.3880D-01
AG1.64TE1	0.0		2.0084D-01
PD1TE1	0.0		1.6209D-01
TE1	0.0		6.3298D-04
PD1TE2	0.0		1.9028D-04
NA1TE1	0.0		4.4848D-05
NA2TE1	0.0		2.3380D-07
ZR1	0.0		1.3132D-08
NA1TE3	0.0		4.0935D-11
NA1	0.0		6.4433D-12
CS2TE1(*)	0.0		9.4606D-15
NP1	0.0		1.1067D-15
BA1TE1	0.0		1.2064D-16
CS1	0.0		1.1363D-16
AM1	0.0		4.3463D-19
BA1	0.0		6.7999D-30
CR7TE8(*)	0.0		<1.0000E-75

MOLE FRACTIONS OF THE SYSTEM COMPONENTS IN THE LIQ PHASE:

CS	2.8916D-04
BA	1.2471D-04
ZR	2.4060D-04
MO	2.3080D-15

RU	3.1740D-29
PD	6.4160D-19
AG	1.3122D-06
I	2.9799D-05
NP	6.5557D-02
AM	6.6161D-02
NA	2.3545D-01
CL	6.3212D-01
NI	3.9659D-11
CR	2.6082D-05

例 4

T = 800.00 K

P = 1.0000D+00 ATM

V = 0.0 DM3

REACTANTS:	AMOUNT/MOL
CS1	7.8600D-03
BA1	3.3900D-03
ZR1	2.7000D-02
MO1	1.0110D-02
RU1	1.1140D-02
AG1	1.3540D-03
PD1	3.9840D-03
TE1	1.2600D-03
I2/LIQ/	4.0500D-04
NP1	1.7820D+00
AM1	1.7984D+00
NA1	6.4000D+00
CL2(G)/GAS/	8.6000D+00
Ni1/ALLOY/	9.5000D+01
Cr1/ALLOY/	5.0000D+00

PHASE: GAS	EQUIL AMOUNT	PRESSURE	FUGACITY
	MOL	ATM	ATM
CL4ZR1(G)	0.0	1.1042D-01	1.1042D-01
CL3ZR1(G)	0.0	4.4430D-07	4.4430D-07
CL1NA1(G)	0.0	5.4125D-08	5.4125D-08
CL2NA2(G)	0.0	7.4671D-09	7.4671D-09
TE2(G)(*)	0.0	4.9560D-10	4.9560D-10
TE1(G)	0.0	4.4647D-10	4.4647D-10
NA1(G)	0.0	4.6167D-12	4.6167D-12
I2ZR1(G)	0.0	1.6378D-12	1.6378D-12
CL2ZR1(G)	0.0	6.8937D-13	6.8937D-13
LiCl	0.0	3.28700D-14	3.28700D-14

CS1(G)	0.0	1.8672D-15	1.8672D-15
I3ZRI(G)	0.0	1.6787D-15	1.6787D-15
BA1CL2(G)	0.0	1.5697D-17	1.5697D-17
CL1(G)	0.0	1.0964D-18	1.0964D-18
CL2N11(G)	0.0	4.5911D-19	4.5911D-19
I4ZRI(G)	0.0	1.1659D-19	1.1659D-19
CL1N11(G)	0.0	5.6549D-20	5.6549D-20
CL1ZRI(G)	0.0	8.2211D-22	8.2211D-22
NA2(G)	0.0	2.1046D-22	2.1046D-22
I2(G)	0.0	3.5862D-23	3.5862D-23
BA1I2(G)	0.0	1.2146D-23	1.2146D-23
CL1I1(G)	0.0	1.1039D-23	1.1039D-23
AM1(G)	0.0	1.1427D-24	1.1427D-24
BA1CL1(G)	0.0	1.3323D-25	1.3323D-25
CL2(G)	0.0	1.3853D-26	1.3853D-26
BA1I1(G)	0.0	2.5660D-28	2.5660D-28
CL2PD1(G)	0.0	8.2440D-32	8.2440D-32
CL4M01(G)	0.0	1.4583D-32	1.4583D-32
I2M01(G)	0.0	3.7123D-33	3.7123D-33
I1M01(G)	0.0	2.4615D-36	2.4615D-36
CL3RU1(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
CL4RU1(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
CL5M01(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
CL6M01(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
I1ZRI(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
I3M01(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
I4M01(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
TOTAL:	0.0	1.1042D-01	
PHASE: LIQ	MOL	MOLE FRACTION	ACTIVITY
CL3NP1(*)	1.7820D+00	1.7814D-01	1.7814D-01
CL4NP1(*)	1.5072D-11	1.5067D-12	1.5067D-12
AM1CL3(*)	1.7984D+00	1.7978D-01	1.7978D-01
CL1CS1(*)	7.8515D-03	7.8487D-04	7.8487D-04
AG1CL1	2.5862D-07	2.5853D-08	2.5853D-08

JAERI-M 92-210

AG111	1.6276D-07	1.6270D-08	1.6270D-08
BA1CL2	3.3900D-03	3.3888D-04	3.3888D-04
BA1I2	5.0758D-12	5.0740D-13	5.0740D-13
CL1NA1	6.3992D+00	6.3970D-01	6.3970D-01
CL2CR1	1.1306D-07	1.1302D-08	1.1302D-08
CL2N11	1.4839D-13	1.4833D-14	1.4833D-14
CL2PD1	3.5098D-22	3.5086D-23	3.5086D-23
CL2M01(*)	5.2565D-20	5.2546D-21	5.2546D-21
CL3M01(*)	1.0233D-30	1.0230D-31	1.0230D-31
CL2ZR1	4.0689D-05	4.0674D-06	4.0674D-06
CL3CR1	2.0894D-15	2.0887D-16	2.0887D-16
CL3RUI	1.4074D-33	1.4069D-34	1.4069D-34
CL3ZR1	2.2489D-03	2.2481D-04	2.2481D-04
CL4M01	2.9783D-32	2.9773D-33	2.9773D-33
CL4TE1	0.0	0.0	<1.0000E-75
CL4ZR1	9.5353D-03	9.5320D-04	9.5320D-04
CL5M01	0.0	0.0	<1.0000E-75
CL6M01	0.0	0.0	<1.0000E-75
CR1I2	1.4643D-15	1.4638D-16	1.4638D-16
CR1I3	8.4625D-26	8.4596D-27	8.4596D-27
CS111	8.5344D-06	8.5314D-07	8.5314D-07
I1NA1	8.0122D-04	8.0095D-05	8.0095D-05
I2	6.3977D-24	6.3955D-25	6.3955D-25
I2N11	5.9942D-20	5.9921D-21	5.9921D-21
I2PD1	2.1363D-21	2.1355D-22	2.1355D-22
I2ZR1	3.9024D-08	3.9011D-09	3.9011D-09
I3ZR1	1.1494D-12	1.1490D-13	1.1490D-13
I4ZR1	1.1675D-19	1.1671D-20	1.1671D-20
I2M01(*)	8.9357D-18	8.9325D-19	8.9325D-19
I3M01(*)	7.9951D-27	7.9923D-28	7.9923D-28
I4M01(*)	0.0	0.0	<1.0000E-75
TOTAL:	1.0003D+01	1.0000D+00	
PHASE: ALLOY	MOL	MOLE FRACTION	ACTIVITY
CR1	5.0000D+00	5.0000D-02	5.0000D-02

JAERI-M 92-210

N11	9.4999D+01	9.5000D-01	9.5000D-01
TOTAL:	9.9999D+01	1.0000D+00	
	MOL		ACTIVITY
ZR1	1.5175D-02		1.0000D+00
RU1	1.1140D-02		1.0000D+00
MO1	1.0110D-02		1.0000D+00
PD1	3.9840D-03		1.0000D+00
AG2TE1	6.7679D-04		1.0000D+00
N11TE1.1	5.3019D-04		1.0000D+00
AG1	0.0		5.3712D-01
AG1.64TE1	0.0		2.0106D-01
PD1TE1	0.0		1.6311D-01
NA1TE1	0.0		3.8324D-03
NA2TE1	0.0		1.6967D-03
TE1	0.0		6.3694D-04
PD1TE2	0.0		1.9267D-04
NA1TE3	0.0		3.5420D-09
NP1	0.0		6.7844D-10
NA1	0.0		5.4719D-10
CS2TE1(*)	0.0		6.8654D-11
BA1TE1	0.0		8.7587D-13
AM1	0.0		2.6643D-13
CS1	0.0		9.6493D-15
BA1	0.0		4.9063D-26
CR7TE8(*)	0.0		<1.0000E-75

MOLE FRACTIONS OF THE SYSTEM COMPONENTS IN THE LIQ PHASE:

CS	2.8893D-04
BA	1.2461D-04
ZR	4.3467D-04
MO	3.3040D-19
RU	5.1734D-35
PD	9.1428D-23
AG	1.5489D-08

I	2.9775D-05
NP	6.5504D-02
AM	6.6107D-02
NA	2.3526D-01
CL	6.3225D-01
NI	5.4545D-15
CR	4.1559D-09

例 5

T = 800.00 K

P = 1.0000D+00 ATM

V = 0.0 DM3

REACTANTS: AMOUNT/MOL

CS1	7.8600D-03
BA1	3.3900D-03
ZR1	6.5400D-03
M01	1.0110D-02
AG1	1.3540D-03
PD1	3.9840D-03
TE1	1.2600D-03
I2/LIQ/	4.0500D-04
NP1	1.7820D+00
AM1	1.7984D+00
NA1	6.4000D+00
NI1/ALLOY/	9.5000D-02
CR1/ALLOY/	5.0000D-03
CL2(G)/GAS/	8.6000D+00
T11	3.0000D-02

EQUIL AMOUNT PRESSURE FUGACITY

PHASE: GAS	MOL	ATM	ATM
CL1NA1(G)	0.0	5.4042D-08	5.4042D-08
CL2NA2(G)	0.0	7.4441D-09	7.4441D-09
NA1(G)	0.0	5.2819D-09	5.2819D-09
CL2T11(G)	0.0	1.0149D-11	1.0149D-11
CL3T11(G)	0.0	9.1189D-12	9.1189D-12
CS1(G)	0.0	2.1371D-12	2.1371D-12
TE1(G)	0.0	2.0103D-13	2.0103D-13
CL4ZR1(G)	0.0	6.4049D-14	6.4049D-14
AM1(G)	0.0	1.7459D-15	1.7459D-15
CL3ZR1(G)	0.0	2.9531D-16	2.9531D-16

JAERI-M 92-210

NA2(G)	0.0	2.7548D-16	2.7548D-16
TE2(G)(*)	0.0	1.0048D-16	1.0048D-16
CL4T11(G)	0.0	6.7245D-17	6.7245D-17
CL1T11(G)	0.0	4.9249D-17	4.9249D-17
11(G)	0.0	2.8705D-17	2.8705D-17
BA1CL2(G)	0.0	1.5679D-17	1.5679D-17
I2ZR1(G)	0.0	1.2491D-18	1.2491D-18
CL2ZR1(G)	0.0	5.2503D-19	5.2503D-19
CL1(G)	0.0	9.5682D-22	9.5682D-22
BA1CL1(G)	0.0	1.5249D-22	1.5249D-22
CL1N11(G)	0.0	4.9351D-23	4.9351D-23
BA1I2(G)	0.0	1.2148D-23	1.2148D-23
I3ZR1(G)	0.0	1.1181D-24	1.1181D-24
CL1ZR1(G)	0.0	7.1746D-25	7.1746D-25
CL2N11(G)	0.0	3.4967D-25	3.4967D-25
BA1I1(G)	0.0	2.9389D-25	2.9389D-25
I2(G)	0.0	2.7351D-29	2.7351D-29
CL1I1(G)	0.0	8.4135D-30	8.4135D-30
I4ZR1(G)	0.0	6.7817D-32	6.7817D-32
CL2(G)	0.0	1.0551D-32	1.0551D-32
CL2PD1(G)	0.0	6.2788D-38	6.2788D-38
CL4M01(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
CL5M01(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
CL6M01(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
I1M01(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
I1ZR1(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
I2M01(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
I3M01(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
I4M01(G)	0.0	0.0	<1.0000E-75
TOTAL:	0.0	6.6789D-08	
PHASE: LIQ	MOL	MOLE FRACTION	ACTIVITY
CL2T11	3.0000D-02	2.9955D-03	2.9955D-03
CL3T11	1.0312D-07	1.0297D-08	1.0297D-08

CL4T11	5.6205D-18	5.6121D-19	5.6121D-19
CL3NP1(*)	1.7478D+00	1.7452D-01	1.7452D-01
CL4NP1(*)	1.2901D-14	1.2882D-15	1.2882D-15
AM1CL3(*)	1.8284D+00	1.8257D-01	1.8257D-01
CL1CS1(*)	7.8515D-03	7.8397D-04	7.8397D-04
AG1CL1	4.2070D-10	4.2007D-11	4.2007D-11
AG1I1	2.6493D-10	2.6454D-11	2.6454D-11
BA1CL2	3.3900D-03	3.3849D-04	3.3849D-04
BA1I2	5.0827D-12	5.0752D-13	5.0752D-13
CL1NA1	6.3967D+00	6.3871D-01	6.3871D-01
CL2CR1	8.6206D-14	8.6077D-15	8.6077D-15
CL2N11	1.1314D-19	1.1297D-20	1.1297D-20
CL2PD1	2.6762D-28	2.6722D-29	2.6722D-29
CL2M01(*)	4.0080D-26	4.0020D-27	4.0020D-27
CL3M01(*)	0.0	0.0	<1.0000E-75
CL2ZR1	3.1025D-11	3.0978D-12	3.0978D-12
CL3CR1	1.3903D-24	1.3883D-25	1.3883D-25
CL3ZR1	1.4965D-12	1.4943D-13	1.4943D-13
CL4M01	0.0	0.0	<1.0000E-75
CL4TE1	0.0	0.0	<1.0000E-75
CL4ZR1	5.5374D-15	5.5291D-16	5.5291D-16
CL5M01	0.0	0.0	<1.0000E-75
CL6M01	0.0	0.0	<1.0000E-75
CR1I2	1.1181D-21	1.1164D-22	1.1164D-22
CR1I3	5.6428D-35	5.6344D-36	5.6344D-36
CS1I1	8.5403D-06	8.5275D-07	8.5275D-07
I1NA1	8.0146D-04	8.0026D-05	8.0026D-05
I2	4.8849D-30	4.8776D-31	4.8776D-31
I2N11	4.5768D-26	4.5700D-27	4.5700D-27
I2PD1	1.6311D-27	1.6287D-28	1.6287D-28
I2ZR1	2.9797D-14	2.9752D-15	2.9752D-15
I3ZR1	7.6642D-22	7.6528D-23	7.6528D-23
I4ZR1	6.7987D-32	6.7886D-33	6.7886D-33
I2M01(*)	6.8227D-24	6.8125D-25	6.8125D-25

JAERI-M 92-210

13M01(*)	5.3312D-36	5.3232D-37	5.3232D-37
14M01(*)	0.0	0.0	<1.0000E-75
TOTAL:	1.00015D+01	1.0000D+00	
PHASE: ALLOY	MOL	MOLE FRACTION	ACTIVITY
CR1	5.0000D-03	5.0000D-02	5.0000D-02
NI1	9.5000D-02	9.5000D-01	9.5000D-01
TOTAL:	1.0000D-01	1.0000D+00	
	MOL		ACTIVITY
NP1	3.4170D-02		1.0000D+00
MO1	1.0110D-02		1.0000D+00
ZR1	6.5400D-03		1.0000D+00
PD1	3.9840D-03		1.0000D+00
AG1	1.3540D-03		1.0000D+00
NA2TE1	1.2600D-03		1.0000D+00
TI1	0.0		3.2197D-03
NA1TE1	0.0		1.9743D-03
AG2TE1	0.0		1.5607D-03
AM1	0.0		4.0707D-04
AG1.64TE1	0.0		2.5089D-04
NI1TE1.1	0.0		2.0836D-04
PD1TE1	0.0		7.3443D-05
NA1	0.0		6.2603D-07
TE1	0.0		2.8679D-07
CS2TE1(*)	0.0		4.0495D-08
BA1TE1	0.0		5.1722D-10
PD1TE2	0.0		3.9061D-11
CS1	0.0		1.1044D-11
NA1TE3	0.0		3.6993D-16
BA1	0.0		6.4346D-20
CR7TE8(*)	0.0		<1.0000E-75

MOLE FRACTIONS OF THE SYSTEM COMPONENTS IN THE LIQ PHASE:

CS 2.8880D-04

BA	1.2456D-04
ZR	1.1962D-12
MO	2.5216D-25
TI	1.1023D-03
PD	6.9766D-29
AG	2.5192D-11
I	2.9762D-05
NP	6.4221D-02
AM	6.7182D-02
NA	2.3507D-01
CL	6.3199D-01
NI	4.1573D-21
CR	3.1675D-15

付録3 Ni-Te 及び Pd-Te 合金の熱力学的性質

Ni-Te 合金

Geiderikhら⁽²¹⁾は、630-860Kで溶融塩セル、293Kで水溶液電解質セルを用いてδ相($\text{Ni}_{0.49}\text{Te}_{0.51}$ ~ $\text{Ni}_{0.333}\text{Te}_{0.667}$)付近の組成の合金中のNi活量を測定した。ここでは、彼らのデータに基づいて、δ相合金の生成の Gibbs自由エネルギー(ΔG_f°)を、Redlich-Kister型の式を用いて以下のように現した。

$$\begin{aligned}\Delta G_f^\circ \text{ (J/g-atom)} &= X_{\text{Ni}} X_{\text{Te}} (A_0 + A_1 (X_{\text{Ni}} - X_{\text{Te}}) + A_2 (X_{\text{Ni}} - X_{\text{Te}})^2) \\ &\quad + RT (X_{\text{Ni}} \ln X_{\text{Ni}} + X_{\text{Te}} \ln X_{\text{Te}})\end{aligned}$$

$$A_0 \text{ (J/g-atom)} = -105080 + 21.902T$$

$$A_1 \text{ (J/g-atom)} = 54059 + 0.2381T$$

$$A_2 \text{ (J/g-atom)} = -55702 + 140.25T$$

$$R = 8.31441 \text{ J/mole} \cdot \text{K}$$

ここで、Tは絶対温度(K)、Xは各成分の原子分率である。上式は固体Ni及び固体Teを参照状態としている。Teの融点(T_m)以上ではさらにTeの融解の自由エネルギー($\Delta G_m(Te)$)を考慮する必要がある。

$$\Delta G_f^\circ (T > T_m, (Te)) = \Delta G_f^\circ (T < T_m, (Te)) - X_{\text{Te}} \Delta G_m(Te)$$

$$\Delta G_m(Te) = 17489 - 24.201T$$

本文Fig. 3に見るように、上式による計算結果は、Barin熱力学表⁽²⁰⁾にあるNi-Te系についての値と良く一致する。

Sahaら⁽²²⁾は、Ni過剰なNi-Te系、すなわち、Ni+ β_1 相($\text{Ni}_{0.63}\text{Te}_{0.37}$ ~ $\text{Ni}_{0.57}\text{Te}_{0.43}$)、Ni+ β_1' ($\text{Ni}_{0.63}\text{Te}_{0.37}$ ~ $\text{Ni}_{0.61}\text{Te}_{0.39}$)相、Ni+ β_2 相($\sim \text{Ni}_{0.6}\text{Te}_{0.4}$)上のTe蒸気圧を測定している。800K付近では最もNi過剰なテルル化物としては β_2 相が安定であり、Teの部分モル自由エネルギー及び活量(a_{Te})は、以下のように表される。

$$\begin{aligned}\Delta G_{\text{Te}} \text{ (J/g-atom)} &= RT \ln a_{\text{Te}} \\ &= -45756 - 11.583T \quad (722.6K < T < 1004K)\end{aligned}$$

本文Fig. 3にNi+ β_2 二相領域の a_{Te} として示したのは同式による。

δ 相と β_2 相との間には γ_1 相が存在するが、ここでは $\beta_2 + \gamma_1$ 領域の活量データは見出すことができなかった。 $\delta + \gamma_1$ 領域のデータはGeiderikhら⁽²¹⁾による。

Pd-T_e合金

本文中に述べたように、Pd-T_e合金の熱力学的性質の文献データは相互の一致が悪く、現状では詳細な解析是不可能である。ここでは、次のようなRedlich-Kister型の式を800Kでの液体合金について仮定した。

$$\Delta G_f^\circ \text{ (J/g-atom)} = X_{\text{Pd}} X_{\text{Te}} (A_0 + A_1 (X_{\text{Pd}} - X_{\text{Te}})) + R T (X_{\text{Pd}} \ln X_{\text{Pd}} + X_{\text{Te}} \ln X_{\text{Te}})$$

$$A_0 \text{ (J/g-atom)} = -55328$$

$$A_1 \text{ (J/g-atom)} = -25149$$

参照状態は液体Pd及び液体T_eである。

T_m (T_e) < T < T_m (Pd) では、標準状態のPdは固体であるから、上式にPdの融解の自由エネルギーを考慮して、

$$\begin{aligned} \Delta G_f^\circ \text{ (J/g-atom)} = & X_{\text{Pd}} X_{\text{Te}} (A_0 + A_1 (X_{\text{Pd}} - X_{\text{Te}})) \\ & + R T (X_{\text{Pd}} \ln X_{\text{Pd}} + X_{\text{Te}} \ln X_{\text{Te}}) \\ & + X_{\text{Pd}} (17560 - 9.622 T) \end{aligned}$$

この式から800Kで ΔG_f° (Pd_{0.5}Te_{0.5}) = -18442 J/g-atomとなり、標準的な熱力学表⁽²⁰⁾にある値と一致する。また、混合の剩余自由エネルギー (ΔG_f° から理想混合の自由エネルギーを引いた値、すなわち、上式右辺第1項) は $X_{\text{Te}} = 0.4$ に最小値を有するという点で、Predelら⁽¹⁷⁾及びIpser⁽¹⁸⁾の観察と一致する。

ただし、この「液体合金」はT_e活量の組成依存性についての概略を見るための、あくまでも仮想的なものである。仮想的という理由は、①Pd_{0.5}Te_{0.5}合金の融解の自由エネルギーを考慮していない、というのも、②实际上、Pd-T_e二元系において800Kで液相が出現するのは、 $X_{\text{Te}} = 0.37 \sim 0.38$ と0.98以上との極く限られた組成領域でしかないからである。800Kでは、Pd-T_eよりもPd過剰側に幾つかの中間相が存在するので、実際にはT_e活量の組成依存性はNi-T_e系のNi過剰側(本文Fig. 3参照)と同様に階段状の関数になる。