PNC ZJ1214 94-003

限定資料

溶解度制限固相の変遷に関する研究

（動力炉・核燃料開発事業団　委託研究成果報告書）

技　術　資　料

開示区分	レポートNo.	受領日
Z	J1214 94-003	1994,6,8

この資料は技術管理室保存資料です
閲覧には技術資料閲覧票が必要です
動力炉・核燃料開発事業団　技術協力部技術管理室

1994年3月

三菱原子力工業株式会社

この資料は、動燃事業団の開発業務を進めるため、特に限られた関係者だけに開示するものです。ついては、複製、転載、引用等を行わないよう、また第三者への開示又は内容漏洩がないよう管理して下さい。また今回の開示目的以外のことには使用しないよう特に注意してください。

本資料についての問合わせは下記に願います。

〒107　東京都港区赤坂１－９－１３

動力炉・核燃料開発事業団

技術協力部　技術管理室

限 定 資 料
PNC-ZJ1214 94-002
1994年 3月

溶解度制限固相の変遷に関する研究

北尾秀夫*1　橋本達也*1　江崎正弘*2

要　旨

本研究では、ウランの非晶質固相($UO_2 \cdot xH_2O$) の結晶性固相(UO_2(cr)) への変化を実験的に観察するとともに、得られた結果を解析し、メカニズムの推定に基づく沈澱／溶解の速度式、速度定数の推定を行った。以下に得られた結果を示す。

(1)濃塩酸により金属ウランを溶解して得たU（IV）の溶液にアルカリを添加し、ウランの沈澱固相を得た。X線回折によりこの固相はウランの非結晶固相であること、ＴＧ／ＤＴＡにより１モルの結晶水が結合した状態であることがわかった。

(2)初期の非結晶固相は素早く結晶化され、２５℃、３０日後では結晶化度として約４０％の値が得られた。これに対し、ウランの溶解度はほとんど変化なく、～10^{-10} ｍｏｌ／ℓであることがわかった。

(3)平衡論モデルにより10^{-10} ｍｏｌ／ℓとなるための支配固相は、UO_2(cr) であることが推定された。また、速度論モデルにより溶液中のウラン濃度の変化を解析した結果、UO_2(cr) の沈澱速度定数が1×10^{-9}mol/cm^2-sec の場合、約５時間でUO_2(cr) の溶解度に近づくことがわかった。

本報告書は、三菱原子力工業株式会社が動力炉・核燃料開発事業団の委託により実施した研究の成果である。

契 約 番 号：０５０Ｄ０２９８

事業団担当部課室及び担当者　：環境技術開発部地層処分開発室（油井　三和）

*1　大宮研究所　第一研究室

*2　燃料サイクル統括部

COMMERCIAL PROPRIETARY
PNC-ZJ1214 94-003
March. 1994

Study on Trasformation of Solubility Limiting Solid Phase

H. Kitao*1 T. Hashimoto*1 M. Ezaki*2

Abstract

In this study, we have performed the experiments to study the transformation of UO_2 amorphous phase into crystal phase, and estimated transformation mechanism in order to obtain the rate constant of UO_2(s).

The results were sumarized as follows.

(1)The precipitate of U(IV) hydroxide was obtained by pH adjustment of uranium(IV) solution, which was prepared by dissolving uranium metal in 12 HCL. It was found to be amorphous by X-ray diffractometer, and its chemical form was found to be $UO_2 \cdot H_2O$ by TG/DTA.

(2)The initial amorphous precipitate was found to be rapidly crystallized and the crystal ratio was estimated to be around 40% after 30 days at 25℃. On the other hand, uranium concentrations were kept constant at around 10^{-10} mol/ℓ.

(3)We have estimated that a dominant solid phase corresponding to 10^{-10}mol/ℓ is to be UO_2(cr) by using equilibrium model. And confirmed that total dissolved uranium concentration approached to solubility of UO_2(cr) for about 5 hours by using kinetic model, when precipitation rate constant of UO_2(cr) is equal to 1.0×10^{-9}(mol/cm^2-sec).

Work performed by Mitsubishi Atomic Power Industries. Inc. under contract with Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation.

PNC Liaison : Waste Technology Development Division , Geological Isolation Section, Mikazu Yui

*1 Omiya Techinical Institute. Research Laboratory

*2 Nuclear Fuel Cycle Division

目　　次

項

・和文要旨 …… i

・英文要旨 …… iii

・目　　次 …… v

・図目次 …… vii

・表目次 …… ix

・写真目次 …… xi

1.　まえがき …… 1

2.　実施内容

2.1　ウランの非晶質固相($UO_2 \cdot xH_2O$) の固相変遷及びウラン濃度の変化の測定 …… 2

2.1.1 ウランの非晶質固相($UO_2 \cdot xH_2O$) の合成 …… 2

2.1.2 固相変遷及びウラン濃度の変化の測定 …… 3

2.2　メカニズムの推定に基づく速度式、速度定数の取得 …… 11

2.2.1 速度論モデルおよび速度定数の文献調査 …… 11

2.2.2 ウランに関する熱力学データの整備 …… 11

2.2.3 実験データ解析 …… 12

3.　結果及び考察

3.1　ウランの非晶質固相($UO_2 \cdot xH_2O$) の固相変遷及びウラン濃度の変化の測定 …… 13

3.1.1 ウランの非晶質固相($UO_2 \cdot xH_2O$) の合成 …… 13

3.1.2 固相変遷及びウラン濃度の変化の測定 …… 15

3.2　メカニズムの推定に基づく速度式、速度定数の取得 …… 41

3.2.1 速度論モデルおよび速度定数の文献調査 …… 41

3.2.2 ウランに関する熱力学データの整備 …… 44

3.2.3 実験データ解析 …… 46

4. まとめ …… 105

5. 参考文献 …… 107

付録　A：平衡定数算出根拠、チェックシート …… A-1
付録　B：ＰＨＲＥＥＱＥ熱力学データベース …… B-1
付録　C：ＰＨＲ－ＥＱ３６ソースプログラム …… C-1
付録　D：ＥＱＰＴ計算結果 …… D-1
付録　E：ＥＱ３６熱力学データベース …… E-1

図 目 次

頁

図2.1-1　ウラン固相の合成プロセス …… 5
図2.1-2　ウラン固相変遷に関する試験プロセス …… 6
図2.1-3　テフロン／ステンレスキャプセル概念図 …… 7
図3.1-1　ウラン固相合成時の液相のｐＨおよびＥｈの変化 …… 19
図3.1-2　ウラン固相のＸ線回折測定結果（乾燥処理の影響） …… 20
図3.1-3　ウラン固相のＴＧ／ＤＴＡ測定結果 …… 21
図3.1-4　ウラン固相のＸ線回折測定結果（２５℃試験における固相の変遷） …… 22
図3.1-5　ウラン固相のＸ線回折測定結果（５０℃試験における固相の変遷） …… 23
図3.1-6(1)ウラン固相の結晶化度の変遷 …… 24
図3.1-6(2)ウラン固相の結晶化度の変遷 …… 25
図3.1-7　液相のウラン濃度の変化（試験温度の影響） …… 26
図3.1-8　液相のウラン濃度の変化（ﾌｨﾙﾀｰﾎﾟｱｻｲｽの影響） …… 27
図3.1-9　ウラン濃度の分析結果－文献値との対比 …… 28
図3.2-1　ﾒｶﾆｽﾞﾑ の推定に基づく速度式、速度定数の取得に関する検討手順 …… 52
図3.2-2　実験ﾃﾞｰﾀ 解析結果［溶液中のｳﾗﾝ 濃度の変化、ｹｰｽ1］ …… 53
図3.2-3　実験ﾃﾞｰﾀ 解析結果［UO_2(cr) の変化　　、ｹｰｽ1］ …… 54
図3.2-4　実験ﾃﾞｰﾀ 解析結果［溶液中のｳﾗﾝ 濃度の変化、ｹｰｽ2］ …… 55
図3.2-5　実験ﾃﾞｰﾀ 解析結果［UO_2(cr) の変化　　、ｹｰｽ2］ …… 56
図3.2-6　実験ﾃﾞｰﾀ 解析結果［溶液中のｳﾗﾝ 濃度の変化、ｹｰｽ3］ …… 57
図3.2-7　実験ﾃﾞｰﾀ 解析結果［UO_2(cr) の変化　　、ｹｰｽ3］ …… 58
図3.2-8　実験ﾃﾞｰﾀ 解析結果［溶液中のｳﾗﾝ 濃度の変化、ｹｰｽ4］ …… 59
図3.2-9　実験ﾃﾞｰﾀ 解析結果［UO_2(cr) の変化　　、ｹｰｽ4］ …… 60
図3.2-10　実験ﾃﾞｰﾀ 解析結果［溶液中のｳﾗﾝ 濃度の変化、ｹｰｽ5］ …… 61
図3.2-11　実験ﾃﾞｰﾀ 解析結果［UO_2(cr) の変化　　、ｹｰｽ5］ …… 62
図3.2-12　実験ﾃﾞｰﾀ 解析結果［溶液中のｳﾗﾝ 濃度の変化、ｹｰｽ6］ …… 63
図3.2-13　実験ﾃﾞｰﾀ 解析結果［UO_2(cr) の変化　　、ｹｰｽ6］ …… 64
図3.2-14　実験ﾃﾞｰﾀ 解析結果［溶液中のｳﾗﾝ 濃度の変化、ｹｰｽ7］ …… 65
図3.2-15　実験ﾃﾞｰﾀ 解析結果［UO_2(cr) の変化　　、ｹｰｽ7］ …… 66

表 目 次

頁

表2.1-1　ウラン固相変遷に関する試験条件 …… 8
表3.1-1　ウラン固相試料乾燥－重量減少率 …… 29
表3.1-2　ＴＧ重量減少率 …… 30
表3.1-3　試験溶液のｐＨ、Ｅｈの測定結果 …… 31
表3.1-4　ウラン固相の結晶化度の変遷 …… 32
表3.1-5　試験溶液のウラン濃度の分析結果 …… 33
表3.1-6　ウラン濃度分析結果の比較 …… 34
表3.2-1(1)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 67
表3.2-1(2)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 68
表3.2-1(3)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 69
表3.2-1(4)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 70
表3.2-1(5)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 71
表3.2-1(6)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 72
表3.2-1(7)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 73
表3.2-1(8)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 74
表3.2-1(9)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 75
表3.2-1(10)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 76
表3.2-1(11)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 77
表3.2-1(12)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 78
表3.2-1(13)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 79
表3.2-1(14)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 80
表3.2-1(15)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 81
表3.2-1(16)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 82
表3.2-1(17)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 83
表3.2-1(18)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 84
表3.2-1(19)　ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 85

表3.2-1(20) ウランの溶解・沈殿速度に関する文献検索結果 …… 86
表3.2-2 文献調査結果のまとめ …… 87
表3.2-3 文献調査結果のまとめ …… 88
表3.2-4 文献調査結果のまとめ …… 89
表3.2-5 文献調査結果のまとめ …… 90
表3.2-6 文献調査結果のまとめ …… 91
表3.2-7(1) 文献調査結果のまとめ …… 92
表3.2-7(2) 文献調査結果のまとめ …… 93
表3.2-7(3) 文献調査結果のまとめ …… 94
表3.2-8(1) ウランに関する熱力学データベースの整備（水溶性化学種） …… 95
表3.2-8(2) ウランに関する熱力学データベースの整備（水溶性化学種） …… 96
表3.2-8(3) ウランに関する熱力学データベースの整備（鉱物） …… 97
表3.2-8(4) ウランに関する熱力学データベースの整備（鉱物） …… 98
表3.2-8(5) ウランに関する熱力学データベースの整備（鉱物） …… 99
表3.2-9 EQ36熱力学データベース作成検証結果 …… 100
表3.2-10 実験予備解析結果のまとめ（化学種分配解析） …… 101
表3.2-11 実験予備解析結果のまとめ（固相／液相平衡計算） …… 102
表3.2-12 実験予備解析結果のまとめ（固相／液相平衡計算） …… 103
表3.2-13 実験データ解析結果のまとめ …… 104

写 真 目 次

頁

写真2.1-1　テフロン／ステンレスキャプセル外観 …… 9

写真3.1-1　金属ウラン塩酸溶解液（遠心分離・ろ過操作後） …… 35

写真3.1-2　金属ウラン塩酸溶解液（純水５０倍希釈） …… 35

写真3.1-3　ウラン沈澱固相（ＫＯＨ溶液添加後） …… 37

写真3.1-4　ウラン試験固相（ろ過後自然乾燥） …… 37

写真3.1-5　ウラン試験固相ＳＥＭ観察写真 …… 39

1. まえがき

高レベル廃棄物地層処分の核種移行評価において、ガラス固化体からの核種放出率を決定する主要なパラメータである溶解度は、ガラス表面における溶解度制限固相に支配される。ガラス固化体の溶解初期の段階で平衡に達する固相は、非晶質の水酸化物等の準安定相であって、長期的には熱力学的により安定な結晶性固相に変化することが推定され、しかも両固相の溶解度の差は著しく、ニアフィールドの定量的評価はどちらの固相の溶解度を与えるかで大きく異なる。よって地下水中の溶解度制限固相の変化を速度論の立場より解明し、固相の変遷に関するモデル化が必要となる。

本研究では、ウランの非晶質固相（$UO_2 \cdot xH_2O$）の結晶性固相（$UO_2(cr)$）への変化を実験的に研究するとともに、実験結果を解析し、メカニズムの推定に基づく沈澱／溶解の速度式、速度定数を取得する。

2. 実施内容

2.1 ウランの非晶質固相($UO_2 \cdot xH_2O$) の固相変遷及びウラン濃度の測定

2.1.1 ウランの非晶質固相($UO_2 \cdot xH_2O$) の合成

ウランの非晶質固相の合成は、Ｒａｉら[1)]の文献を基に金属ウランを濃塩酸により溶解し、U（Ⅳ）の溶液を作製、その後アルカリを加えることにより非晶質の沈澱固相を得る方法を採用した。これらの合成プロセスを図2.1-1 に示す。

(1) ウラン溶解操作

①金属ウラン(^{235}U : 0.2%)を秤量（～20ｇ）し、その当量値よりやや少なめの濃ＨＣℓを用意した。金属ウランは予め希塩酸で表面を軽く洗浄し、ガラスビーカー（100 mℓ）に入れフードの中で溶解処理を開始した。

②濃ＨＣℓを金属ウランに添加し、H_2 ガスの発生状況を観察しながら１０分程度放置し、ガス発生がやや弱くなったら、ホットプレートにより加熱（～100 ℃）し、ガス発生がほとんど無くなるまで加熱を続けた。

③脱気水を加えてウラン溶解液容量を～３０mℓとし、遠心分離機により遠心分離処理（3000rpm 、10min ）を施した後、グローブボックス内に入れ、フィルター（0.45μｍ）でろ過し、未反応のウランの残渣を除去した。

④ろ過液は更に脱気水で希釈し、２００mℓのウラン（Ⅳ）の原液とした。

(2) ウラン固相合成操作

①上記ウラン（Ⅳ）の原液から５０mℓを分取、脱気水で２００mℓとした。

②これに、ｐＨメーターで液のｐＨを確認しながらＫＯＨ溶液（１Ｍ）を徐々に添加し、ｐＨが４前後あたりより沈澱が生成するのを確認しながら中性領域になるまで添加した。

(3) ウラン固相の物性分析

①上記で作製したウラン固相を直ちにフィルター（0.45μｍ）でろ過し、Ｘ線回折装置で測定、固相の性状を調べるとともに、一部の沈殿固相はグローブボックス内で自然乾燥処理し、Ｘ線回折測定を実施した。

②自然乾燥処理した固相については、ＴＧ／ＤＴＡ分析・ＳＥＭ観察も実施した。

2.1.2 固相の変遷及びウラン濃度の変化の測定

試験フローを図2.1-2 に、試験条件を表2.1-1 に示す。

①前項のウラン非晶質固相の合成法と同様の方法で試験固相を合成した。その際、ｐＨが中性領域（６～８）に入るようＫＯＨ添加量を調節し、その後、鉄粉末を添加し、試験溶液のＥｈを調節した。

②この非晶質固相の合成直後を試験開始とし、２５℃の試験はテフロンびん（100 mℓ）に入れグローブボックス内の室温放置とし、５０℃の試験はテフロン（100 mℓ）／ステンレス密封キャプセル（図2.1-3 に概念図を、写真2.1-1 に外観写真を示す。）に入れ、グローブボックスの外に出し、恒温槽での試験とした。

③所定の時間が終了した後、試験溶液をフィルターユニット（ﾃﾞｨｽﾎﾟﾀｲﾌﾟ 、ﾎﾟｱｻｲｽﾞ ：0.45μm）によりろ過し、ろ過液については更に限外ろ過（分画分子量10,000）によりろ過した。５０℃サンプルについては、恒温槽より取り出し後、５分以内にろ過を行った。

④ろ過された固相は速やかに（４０分以内）にX線回折測定を実施した。その際、固相に内部標準物質としてアルミナ粉末を添加し、固相と標準物質の回折線の強度の比により固相に生成された結晶質の定量化を行った。

すなわち、結晶度χ（%）は

$$\chi = [(I_a / I_{sa}) \div (I_U / I_{sU})] \times 100$$

I_a ：未知試料のUO_2 の回折線強度

I_{sa}：未知試料内の内部標準物質の回折線強度

I_U ：１００%UO_2 結晶質の回折線強度

I_{sU}：１００%UO_2 結晶質内の内部標準物質の回折線強度

この場合、未知試料のUO_2 あるいは１００%UO_2 に添加する内部標準物質の割合は一定になるようにした。また、今回は試料が湿潤状態であることから、X線回折測定条件を薄膜モードとした。この為、X線が透過する部分

は試料の表面部分となり、採取した試料の全量を測定していることにはならないが、ここでは測定されている部分での非晶質と結晶質の比を結晶化度と言う定義で表すこととした。

⑤一方、ろ過液については、ＩＣＰ－ＭＳ（誘導結合プラズマ質量分析法）により溶液中のウラン濃度を分析した。一部のサンプルについてはフィルターのポアサイズが濃度に与える影響を調べる為、0.45μmのフィルターだけでろ過したものについても分析した。

今回分析に使用した機器は以下のようなものである。

X線回折装置　：　リガク　ＲＡＤ－Ｃ

ＩＣＰ－ＭＳ　：　ﾊﾟｰｷﾝｴﾙﾏｼﾞｬﾊﾟﾝ ELAN-5000

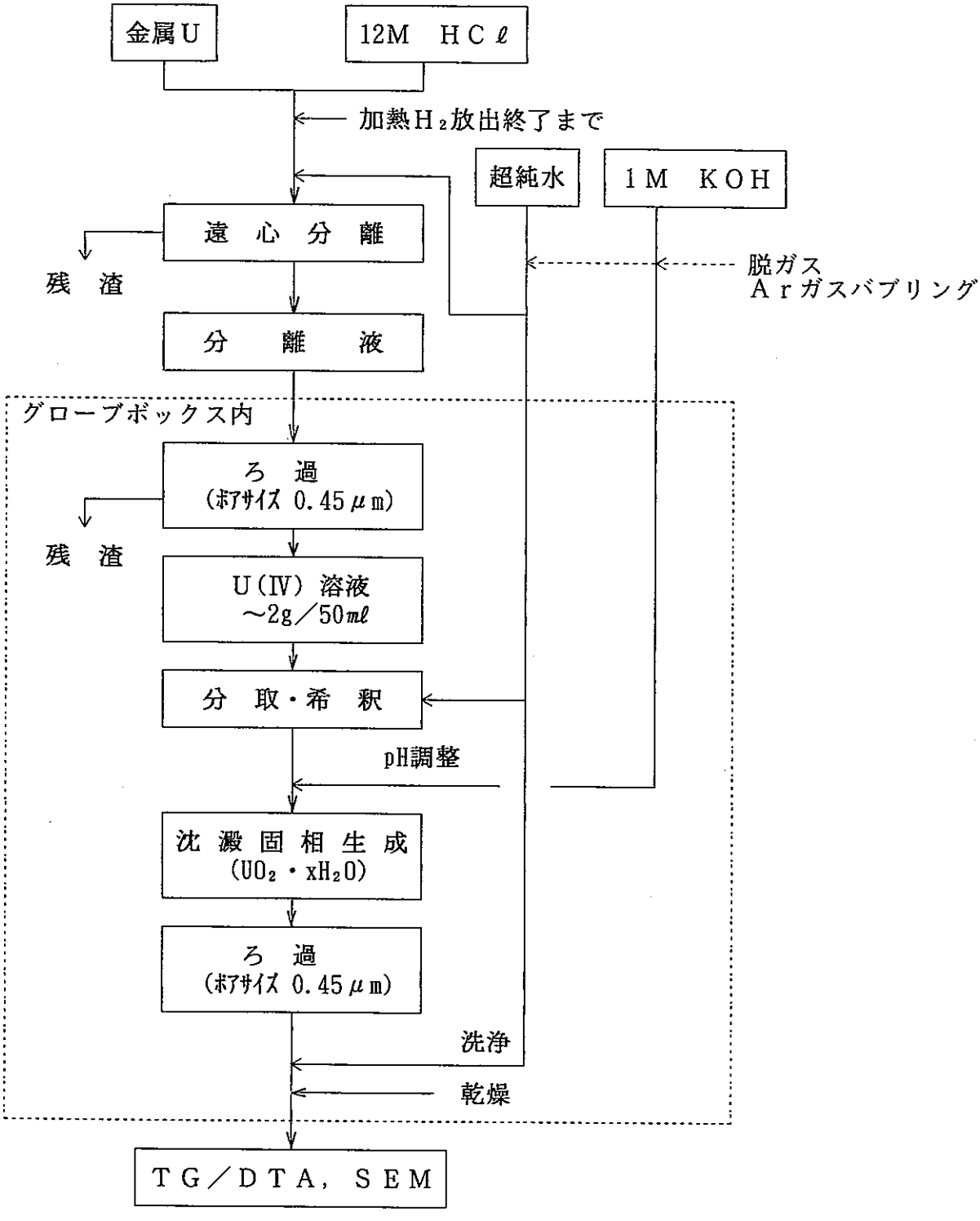


図2.1-1　　ウラン固相の合成プロセス

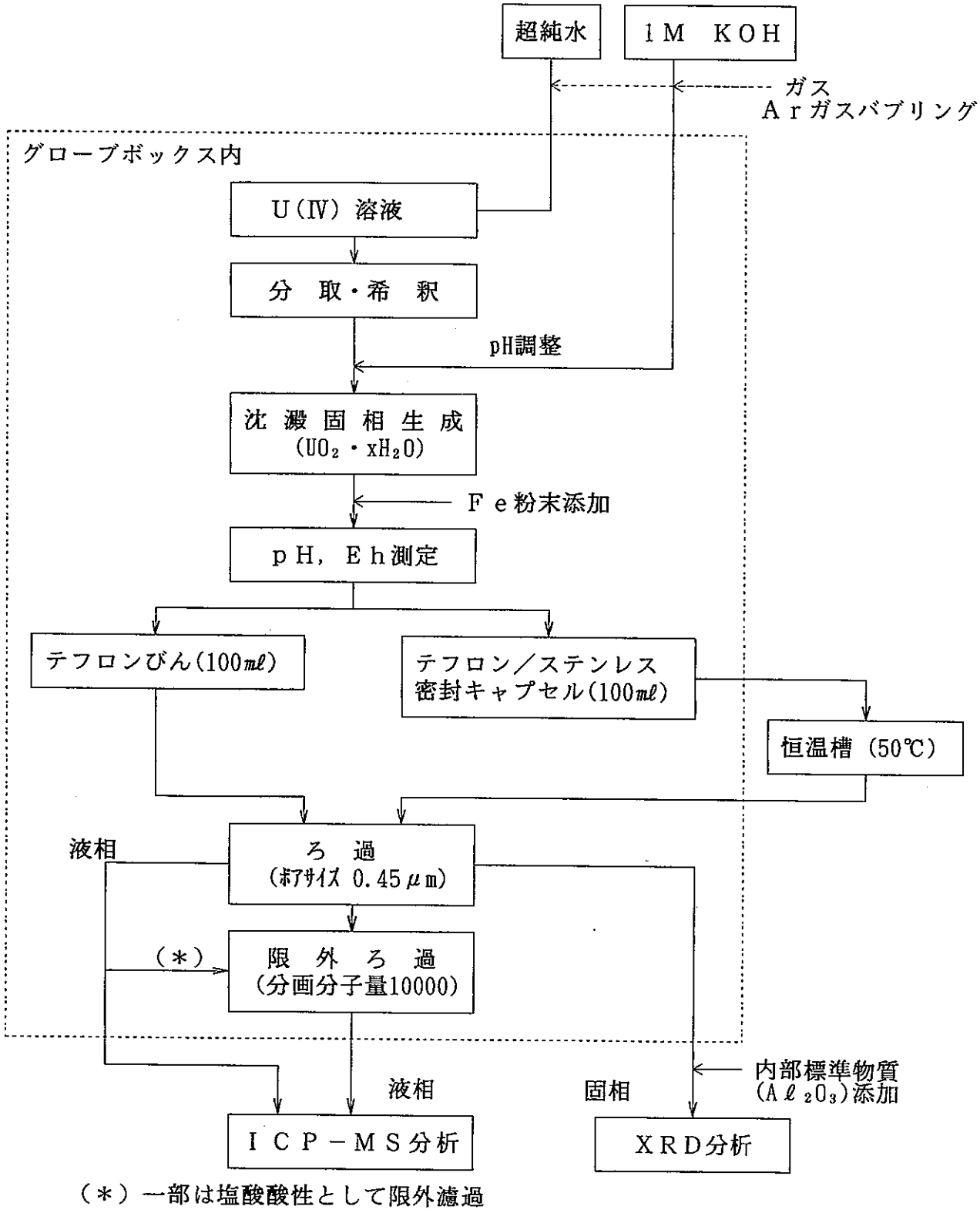


図2.1-2　ウラン固相変遷に関する試験プロセス

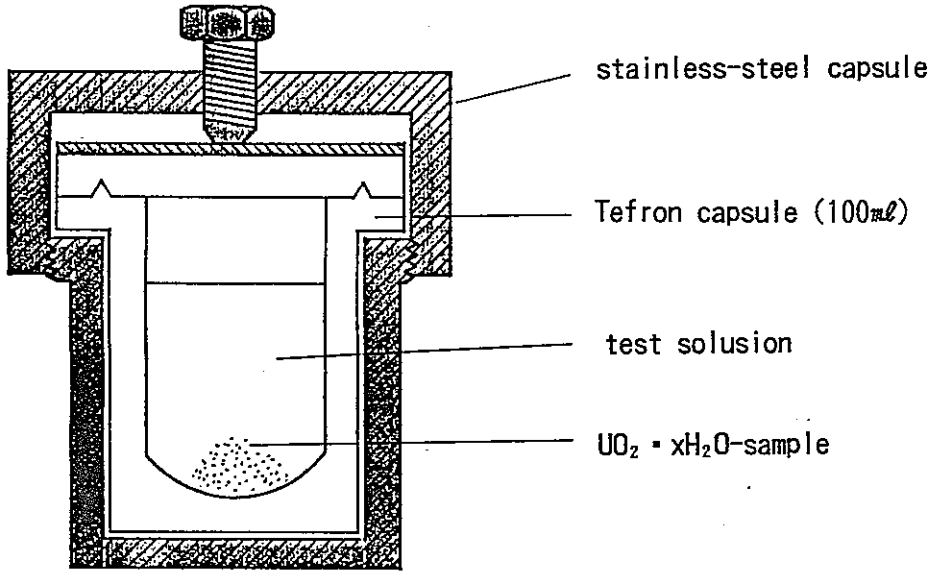
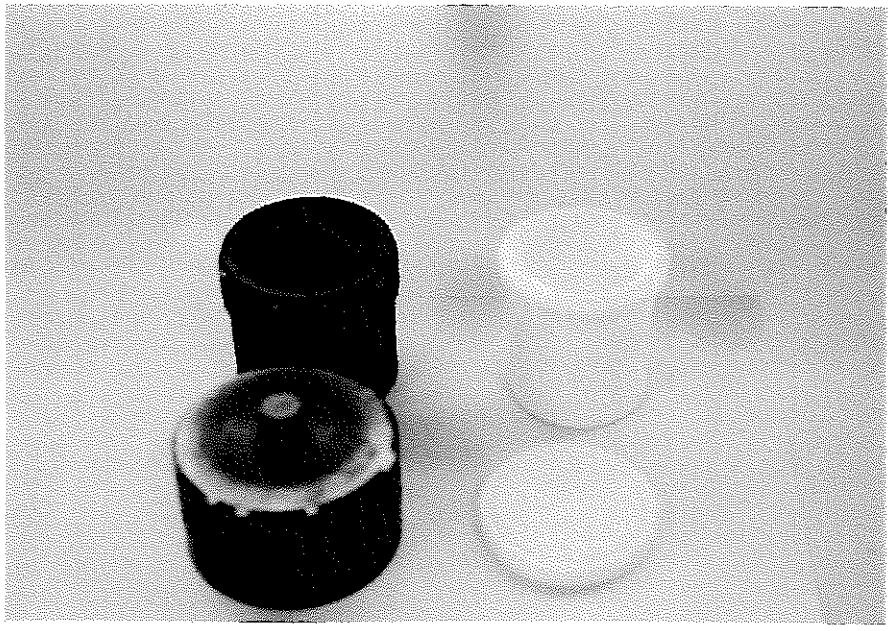


図2.1-3　テフロン／ステンレスキャプセル概念図

表2.1-1　　ウラン固相変遷に関する試験条件

固　液　条　件	UO_2 固相　:　0.4 g 液相　:　100 mℓ
共　存　成　分	K^+　:　0.012 M $Cℓ^-$　:　0.017 M
還　元　剤	Feﾊﾟｳﾀﾞｰ　:　100 ﾒｯｼｭ、99.9 % 500 mg／100 mℓ
保　存　容　器	25℃　:　テフロンびん（100 mℓ） 50℃　:　ﾃﾌﾛﾝ/ｽﾃﾝﾚｽｷｬﾌﾟｾﾙ（100 mℓ）
試　験　温　度	25℃　および　50℃
試　験　時　間	1 day , 3 day , 7 day , 14day , 30day
繰り返し数	25℃　:　2回 50℃　:　1回



左側　：　ステンレスキャプセル

右側　：　テフロンキャプセル

写真2.1-1　　テフロン／ステンレスキャプセル外観

2.2 メカニズムの推定に基づく速度式、速度定数の取得

2.2.1 速度論モデル及び速度定数の文献調査

既存の公開文献を対象として、速度論モデル（遷移状態速度則）及び速度定数に関する文献検索・調査を実施し、本研究のモデル解析のための速度モデルの調査をする。文献検索は、当社の文献検索システムを用いて、本研究に関連するキーワードを入力し、先ずタイトルのみを出力した。次に、出力した文献のタイトルから、第2キーワードとして、

(1) 還元雰囲気でのウランに関する溶解・沈澱速度定数

(2) 支配する反応式

(3) 速度論モデル

に関連する文献の概要を出力させた。ここで出力した概要に基づき(1)〜(3)に関連すると思われる文献を入手した。また、入手した文献の中でさらに参照している文献についても調査の対象とした。

2.2.2 ウランに関する熱力学データの整備

実験結果のバックアップを平衡論及び速度論モデルの両面から実施することをを目的として、ウランの水溶性化学種、鉱物に関する熱力学データを整備する。ここでは、最新のNEA レポートに記載している生成自由エネルギー基づき、動燃殿所有のPHREEQE(平衡論モデル）の反応式に従って平衡定数を算出しPHREEQE 用の熱力学データベースを作成した。次に、速度論モデルとして広く使用されているEQ3/6 の熱力学データベース(data0) を、PHREEQE の熱力学データベースに基づき作成した。熱力学データベース(data0) の作成は、動燃殿所有のphr-eq36インターフェイスを用いた。EQ3/6 の熱力学データベースdata1(EQPT実行:data0⇒data1)の作成に伴う検証は、各々のコード、熱力学データベースを用いて同一の問題（平衡問題）を計算し、両者の結果を比較した。

2.2.3 実験データ解析

先ず、実験で得られた溶液情報(pH, Eh, イオン濃度) に基づき、平衡論モデルにより、支配固相および支配化学種の推定を行う。次に、平衡論モデルの情報ならびに文献情報から、溶解・沈澱反応式の推定を行う。さらに、推定された反応式からメカニズムの推定を行う。最後に速度論モデルによる解析は、実験条件、文献情報より入力データを設定した後実施した。また、これらの情報から決定できない入力因子についてはパラメータとして取り扱っている。

3. 結果及び考察

3.1 ウランの非晶質固相($UO_2 \cdot xH_2O$) の固相変遷及びウラン濃度の変化の測定

3.1.1 ウランの非晶質固相($UO_2 \cdot xH_2O$) の合成

(1) ウラン溶解操作

金属ウランに濃ＨＣℓを添加すると、水素ガスを発生し激しく反応したが、１０分程で発生速度は遅くなり、ホットプレートにより～１００℃加熱することにより反応を促進した。加熱後３０分ほどすると水素ガスの発生はほとんどおさまったので、冷却・希釈し遠心分離にかけてその分離液をグローブボックス内でろ過し、Ｕ（Ⅳ）の原液とした。

この原液は黒緑色であったが、一部を希釈（５０倍）すると鮮やかな緑色となり、Ｕ（Ⅳ）の液であることを確認した。写真3.1-1 及び写真3.1-2 に外観写真を示す。

(2) ウラン固相合成操作

図3.1-1 にウラン固相合成時のｐＨ及びＥｈの変化を示す。１ＭのＫＯＨを添加することにより、ｐＨは徐々に上昇し、Ｅｈは逆に低下し始めた。ｐＨは３以上になると急激に立ち上がり、一方Ｅｈも急激に低下し、ｐＨ７～８においてＥｈは～－３１０mVとなった。

沈澱固相はｐＨ３～４でその生成が観察され、ｐＨ６前後では試験液は透明となり、ダークグリーン色のコロイド状のウランの沈澱固相が生成した。写真3.1-3 にその外観を示す。

(3) ウラン固相の物性分析

上記固相を合成後素早く０．４５μｍのフィルターでろ過し、湿潤状態でＸ線回折で測定した。

図3.1-2 には固相合成直後にＸ線回折測定したものと、合成後アルゴン雰囲気下のデシケータ中で一週間自然乾燥した固相をＸ線回折測定により調べたものを示す。表3.1-1 に乾燥した固相の重量減少率を示す。写真3.1-4 にその外

観を示す。固相サンプルは黒色の塊となった。固相合成直後、X線回折の回折線は非常にブロードなハローとなっており、ほぼ完全な非晶質となっていることが確認された。一方、合成後一週間デシケータ中にて乾燥したものは、UO_2 のブロードピークが現れており一部結晶化が進んでいることが分かった。従って、固相変遷及びウラン濃度の変化の測定には、ろ過・乾燥操作を行わず、合成直後のものをUO_2 の非晶質の初期固相として取り扱うこととした。

ＴＧ／ＤＴＡによる分析結果を図3.1-3 に、ＴＧによる重量減少率を表3.1-2 に示す。ＴＧ／ＤＴＡに供するサンプルは付着水（結晶水とは区別する）を除去する必要があることから、ウラン固相サンプルは、表3.1-1 に示すデシケータ中で自然乾燥させ、その重量減少率が安定したことから固相サンプルに含まれる付着水は取り除かれているものとし、測定に使用した。図3.1-3 のように昇温開始後ＤＴＡは直ぐに吸熱ピークが現れ始めた。一方、ＴＧも減少し結晶水の脱離が起こっていることが確認され、両者とも３００℃手前でほぼ安定した。　ＴＧの重量減少率は５％強であり、表3.1-2 に示すように減少率としては$UO_2 \cdot H_2O$のものに最も近く、この固相のサンプルには約１モルの結晶水が結合した状態であるものと推察される。

写真3.1-5 に走査型電子顕微鏡（ＳＥＭ）により乾燥させたウラン固相サンプルを観察した結果を示す。試料そのものは乾固した状態であり、個々の粒子は非常に小さく０．１μm程度と判断される。しかしながら、これらの試料は固相合成直後のものではなく、図3.1-2 に見られるように一部結晶化がおこっている。従って、純然たる非晶質固相を観察するには、固相合成直後、湿潤状態で観察できる方法を検討する必要があると考えられる。

3.1.2 固相変遷及びウラン濃度の変化の測定

(1) ｐＨ及びＥｈの測定

表3.1-3 に各試験サンプルの試験前後のｐＨ及びＥｈの測定結果を示す。試験前にｐＨは７～８に収まるようＫＯＨ添加量を調節した。Ｅｈは還元剤としての鉄粉末を添加した後に測定したが、いずれのサンプルも～－３３０ｍＶであった。図3.1-1 に示すように、ウラン非晶質固相合成直後はＥｈは－３１０ｍＶ程度であることから、試験初期においては、測定されるＥｈはウランによって支配されているものと考えられる。

試験後のｐＨ及びＥｈは、７日まではほとんど変化はなかったが、１４日、３０日、６５日のサンプルについてはｐＨはやや低下の、Ｅｈはやや上昇の傾向を示した。

(2) ウラン固相の変遷

図3.1-4 に２５℃試験における各試験時間でのウラン固相サンプルをＸ線回折により測定した結果を示す。試験液中に放置されたウラン固相は素早く変化し、沈殿合成より１日経過するとUO_2 のブロードなピークが現れ、時間がたつにつれそのピークは高くかつシャープになる傾向にあり、結晶化が進んでいるのが観察されるが、その変化の度合いはゆるやかなものとなった。また、沈澱の色も、沈澱合成直後はダークグリーン色のコロイド状であったものが、黒色の沈澱に変化する様子も観察された。

図3.1-5 は５０℃試験における各試験時間でのウラン固相サンプルをＸ線回折により測定した結果を示す。２５℃と同様時間がたつにつれ回折線のピークは高くかつシャープになる傾向にあるが、ピークの成長度合いは各試験時間とも２５℃より大きく、結晶化が速く進んでいる。

表3.1-4 はＸ線回折測定時に内部標準物質としてアルミナを混合し、UO_2 と$A\ell_2O_3$ の回折線の強度比よりUO_2 の結晶化度を求めたものである。添加の割合はUO_2 固相０．４ｇに対し$A\ell_2O_3$ １ｇとした。２５℃のサンプルでは２回ずつ測定を行ったが、結晶度の差としては１～４％であり、再現性

良く測定することができた。その結果、３０日後では２５℃で約４０％弱の、５０℃では約５０％以上の結晶化度となっていることがわかった。

図3.1-6(1)はこの結晶化度を時間を対数軸としてプロットしたものである。図中の直線は２５℃、５０℃それぞれを最小二乗法により直線回帰したものであるが、以下のような式及び係数で表され、それぞれの相関係数が０．９７及び０．９８の相関関係が得られた。（尚、データ処理はデータプロットのみで行い、この式よりＹ＝０即ち１００％非晶質の時間は、２５℃で２．０時間、５０℃で０．８時間となる。）

$$Y = M_0 + M_1 \times \log(t)$$

Ｙ　：　結晶化度（％）

ｔ　：　時間（日）

M_0　：　25℃:16.225 、50℃:25.596

M_1　：　25℃:14.948 、50℃:17.240

一方、図3.1-6(2)は図3.1-6(1)のプロットにフィットするように下記のような一次反応モデルを導入し曲線を描いたものである。

$$C_r = 1 - (1 - C_0)\,EXP(-k_1 \cdot t)$$

C_r　：　UO_2(cr) の割合

k_1　：　UO_2-xH_2O(am)　⇨　UO_2(cr) の速度定数

25℃:0.005 day^{-1}　　50℃:0.015 day^{-1}

C_0　：　初期のUO_2(cr) の割合

25℃:0.23　　50℃:0.31

このモデルによると１００％結晶化度までに要する時間は２５℃でおおよそ１０００日、５０℃では５００日となが、今後どのような結晶化度の変遷傾向をたどるかは長期の試験あるいは高温での加速試験等を行い、データを積み重ねて判断していく必要がある。

(3) 液相のウラン濃度の変化

表3.1-5 はＩＣＰ－ＭＳによるウラン固相ろ過後の試験溶液のウラン濃度を分析した結果を纏めたものである。一部のサンプルについては限外ろ過だけではなく、０．４５μｍフィルターろ過したものについても分析し、ろ過でのポアサイズの違いによるウラン濃度への影響を調べた。図3.1-7 および図3.1-8 は試験時間に対して温度の影響及びろ過のポアサイズの影響をプロットしたものである。

図3.1-7 に示す２５℃の試験において限外ろ過した試験液のウラン濃度は、10^{-10} ｍｏｌ／ℓ前後のオーダーであり、試験時間にかかわらずほぼ安定した値となっている。一方、５０℃では約４倍の10^{-9}ｍｏｌ／ℓのオーダーであり、ウランの溶解度の温度依存性は明瞭に出ているが、その濃度の変遷についてみると、３０日のサンプルでやや低いものの２５℃と同様ほぼ安定しており、変遷するような傾向は特に認められない。

尚、分析に用いたＩＣＰ－ＭＳでのウランの検出限界は10^{-12} ｍｏｌ／ℓ（0.1ppt）レベルにあり、今回測定された値は十分分析可能な濃度レベルと考えられる。

図3.1-8 はろ過のポアサイズの影響を調べたものであるが、０．４５μｍフィルターろ過したものは限外ろ過したしたものより３オーダー高い値となっており、かつ試験時間にかかわらずほぼ一定の値を示しており、ここでもウラン濃度として変遷するような傾向は特に認められない。1×10^{-6}ｍｏｌ／ℓのＵ（Ⅳ）の濃度ではｐＨ＝３以上の液性においてはＵ（Ⅳ）はコロイド性を示す、すなわち複雑な多核形を生成すると報告[2]されていることから、これがフィルターのポアサイズによりウラン濃度が異なる原因と推察される。

図3.1-9 は今回得られたウラン濃度の分析値（２５℃）を、これまで報告されてきている代表的な文献値と対比（ｐＨとウラン濃度の関係とし、試験時間は無視した）させたものであるが、各研究者間でその値には数オーダーの相違が見られる。すなわち限外ろ過された値はＲａｉら[1]が報告している値より約２オーダー低く、フィルターでろ過された値もＢｒｕｎｏら[3]が報告している

値よりも約2オーダー低い。

表3.1-6 は試験固相および試験条件を纏めて比較したものである。初期の試験固相はいずれもU（Ⅳ）溶液よりの水酸化物であるが、試験の雰囲気・液相条件・ろ過方法などは異なっており、このことが多核錯体として溶解するU（Ⅳ）濃度に差を生ずる原因の一つではないかとも推察される。

一方、固相の分析において非晶質より結晶質への変遷が確認されているにもかかわらず、液相のウラン濃度（溶解度）が変化しない理由としては以下のようなことが考えられる。

①固相の結晶化は進んでいるものの、液相のウラン濃度は残存している非晶質固相の溶解度に近いところで支配されている。この場合、ウラン濃度の変化を調べるには、さらに長時間の試験を要することになる。

②試験開始後直ぐにウラン固相の表層部に結晶質の膜が成長し、固相表面を覆うことによりその結果、ウラン濃度はすでに結晶質固相の溶解度に近いところで支配されている。（今回のX線回折による結晶化度の測定法では試料の表層部での非晶質と結晶質の比を見ている可能性も考えられるが、表層部でのミクロ的な変化を調べる為には別途分析方法を検討していく必要がある。）この場合、試験開始の沈澱生成直後のウラン濃度を分析する必要がある。

以上のことから、ウラン濃度そのものについて各研究者間で数オーダーもの相違がある点、得られたウラン濃度が何に支配されているか（非晶質なのか結晶質なのか）を論議するのに必要なデータを採取していくことが今後の課題とであり、具体的には以下のようなものが考えられる。

・ウランの地下環境条件下での多核錯体（コロイド）の生成と移行の挙動の解明

・今回の試験よりも更に長期間あるいは短期間のウラン濃度および固相の変遷の測定

・地下環境条件下でのUO_2（cr)の溶解度測定試験の実施

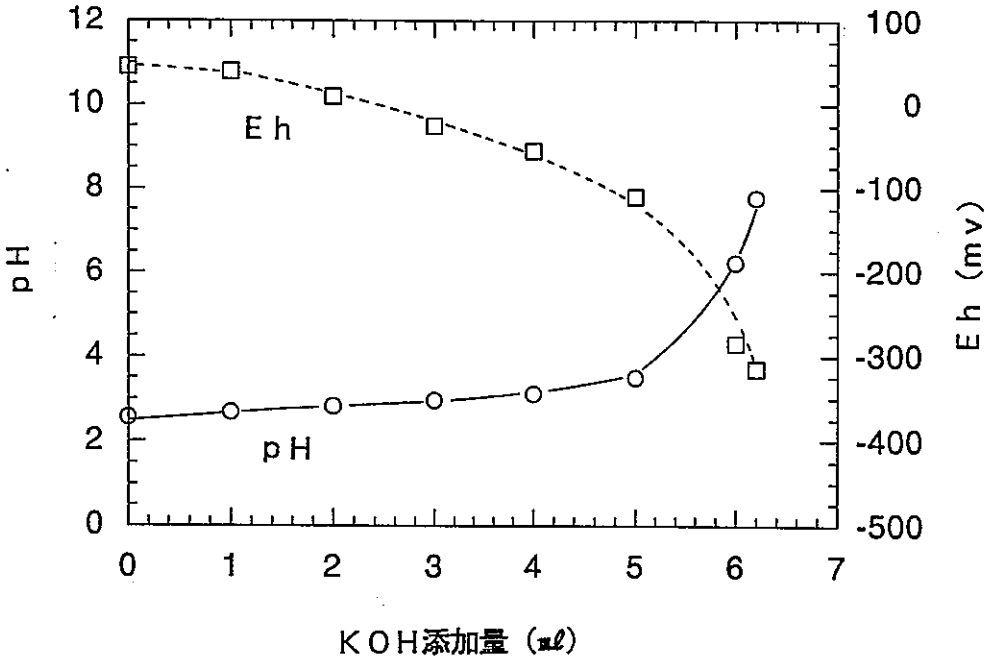


図3.1-1　ウラン固相合成時の液相のｐＨおよびＥｈの変化

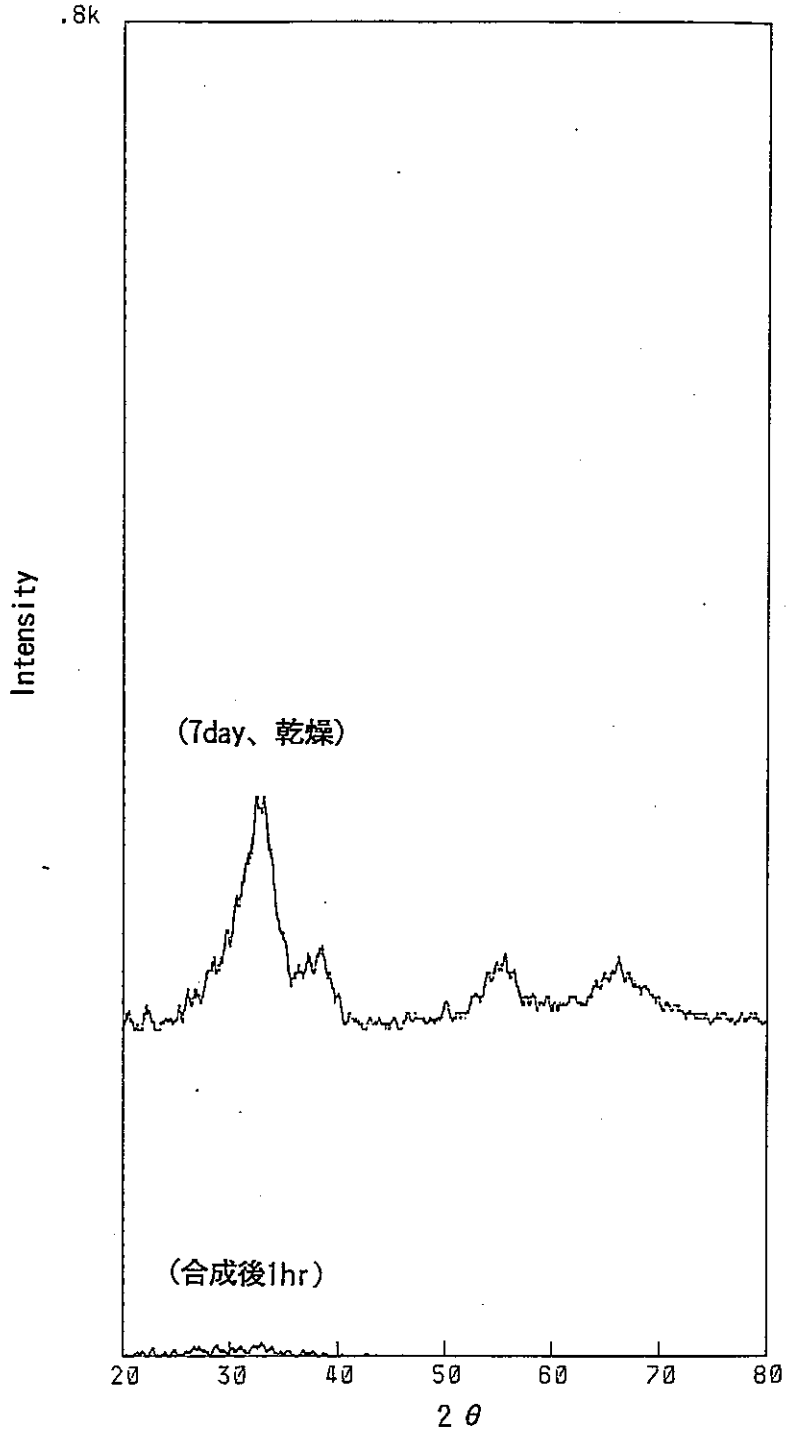


図3.1-2　ウラン固相のX線回折測定結果（乾燥処理の影響）

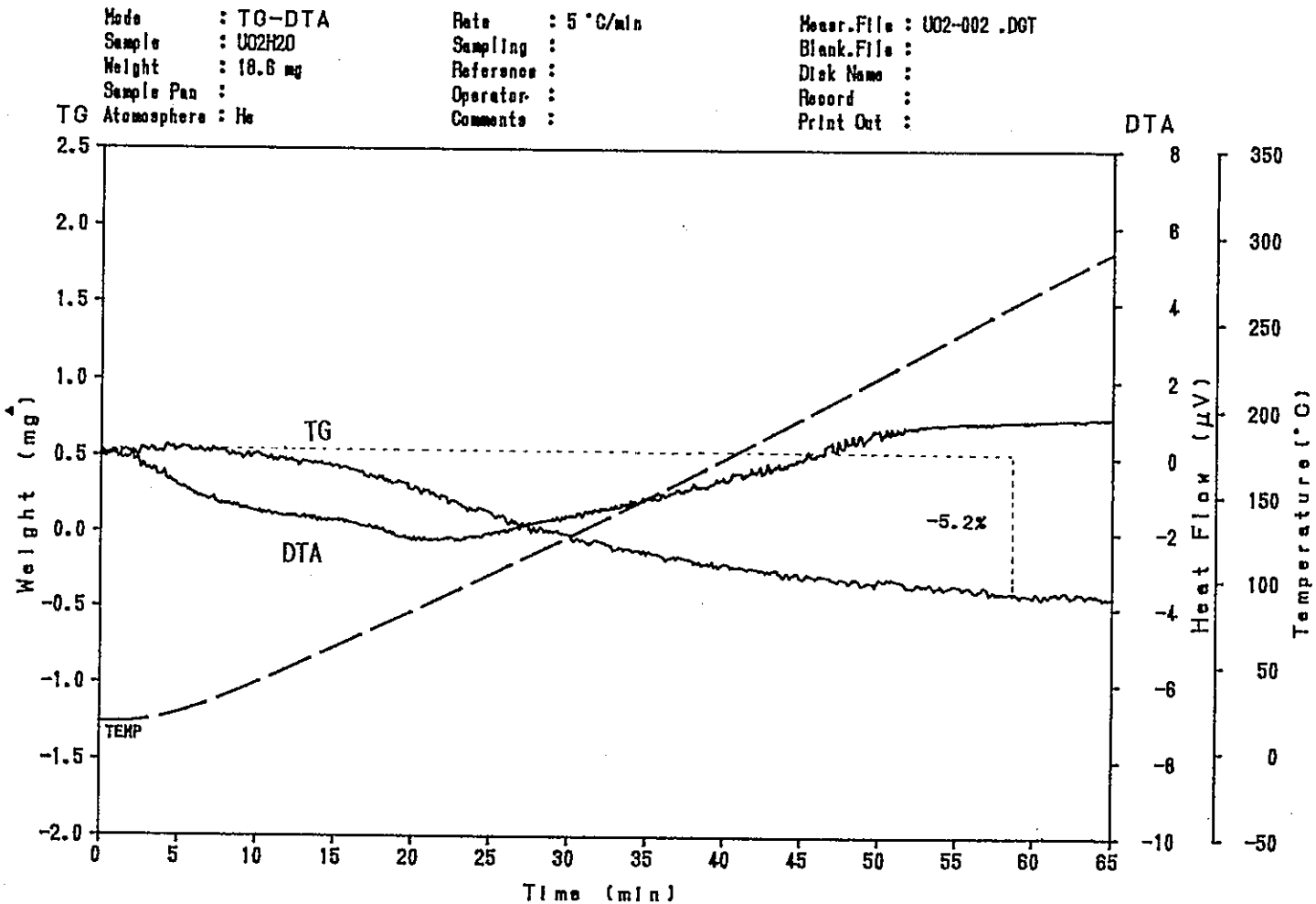


図3.1-3　ウラン固相のＴＧ／ＤＴＡ測定結果

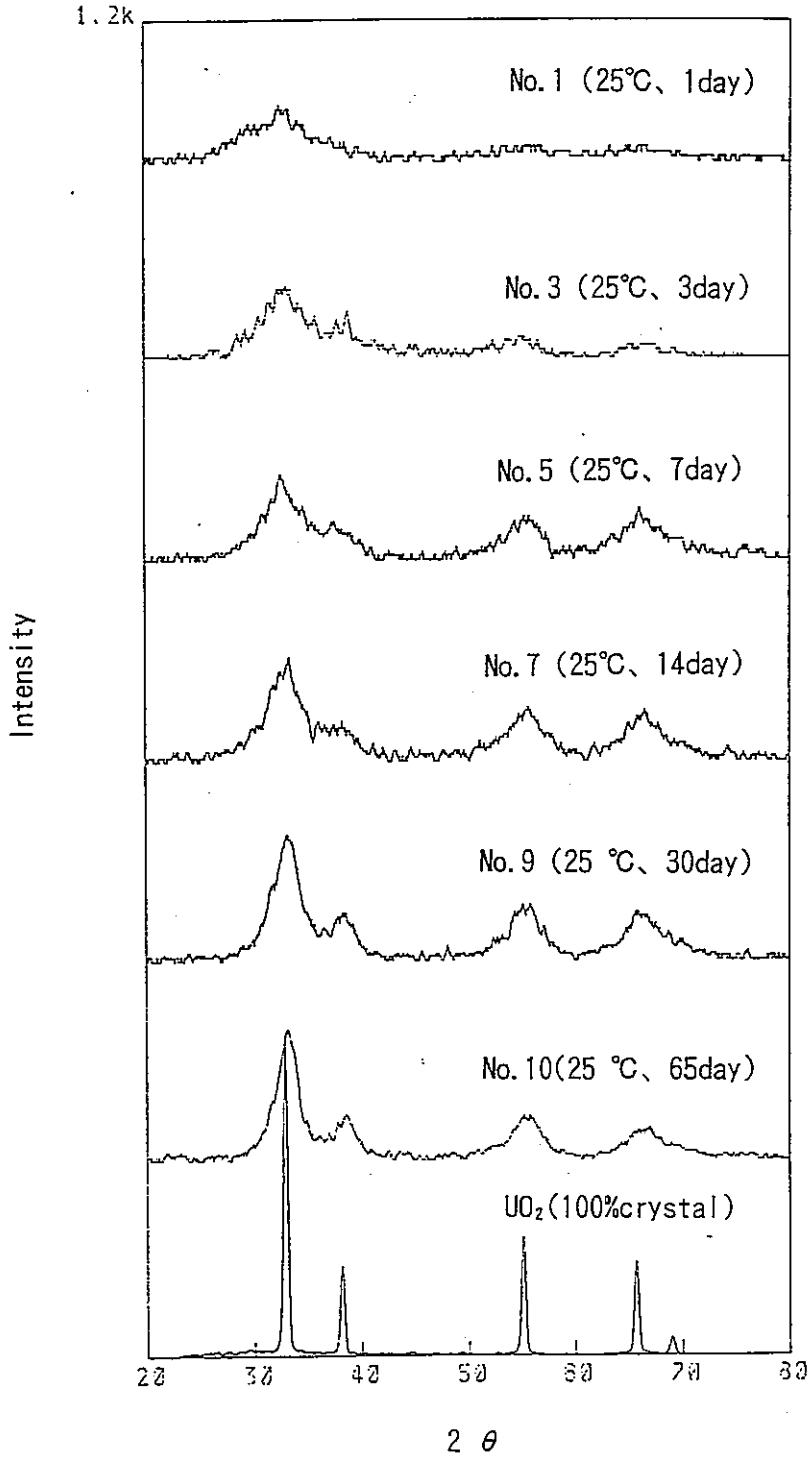


図3.1-4　　ウラン固相のX線回折測定結果（２５℃試験における固相の変遷）

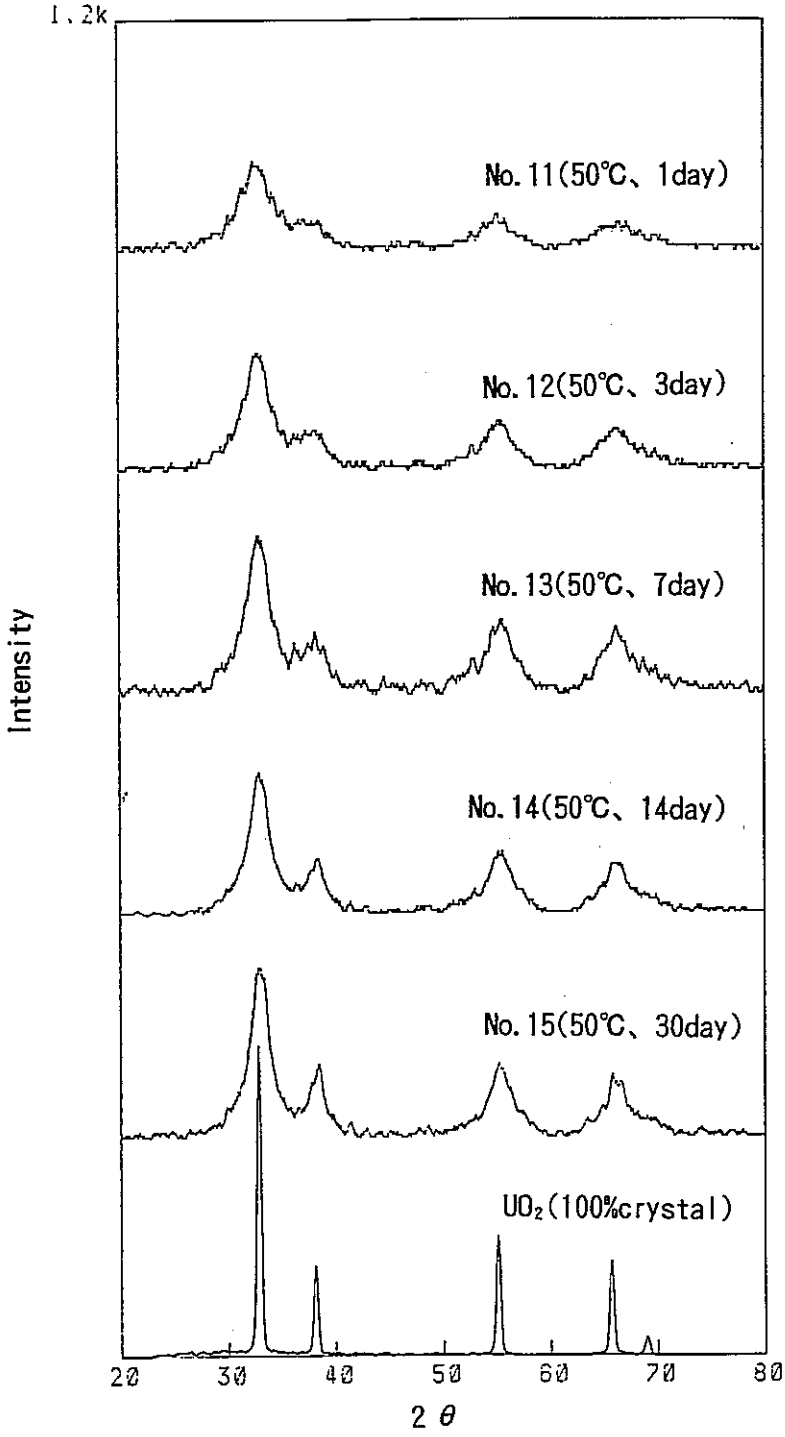


図3.1-5　ウラン固相のX線回折測定結果（５０℃試験における固相の変遷）

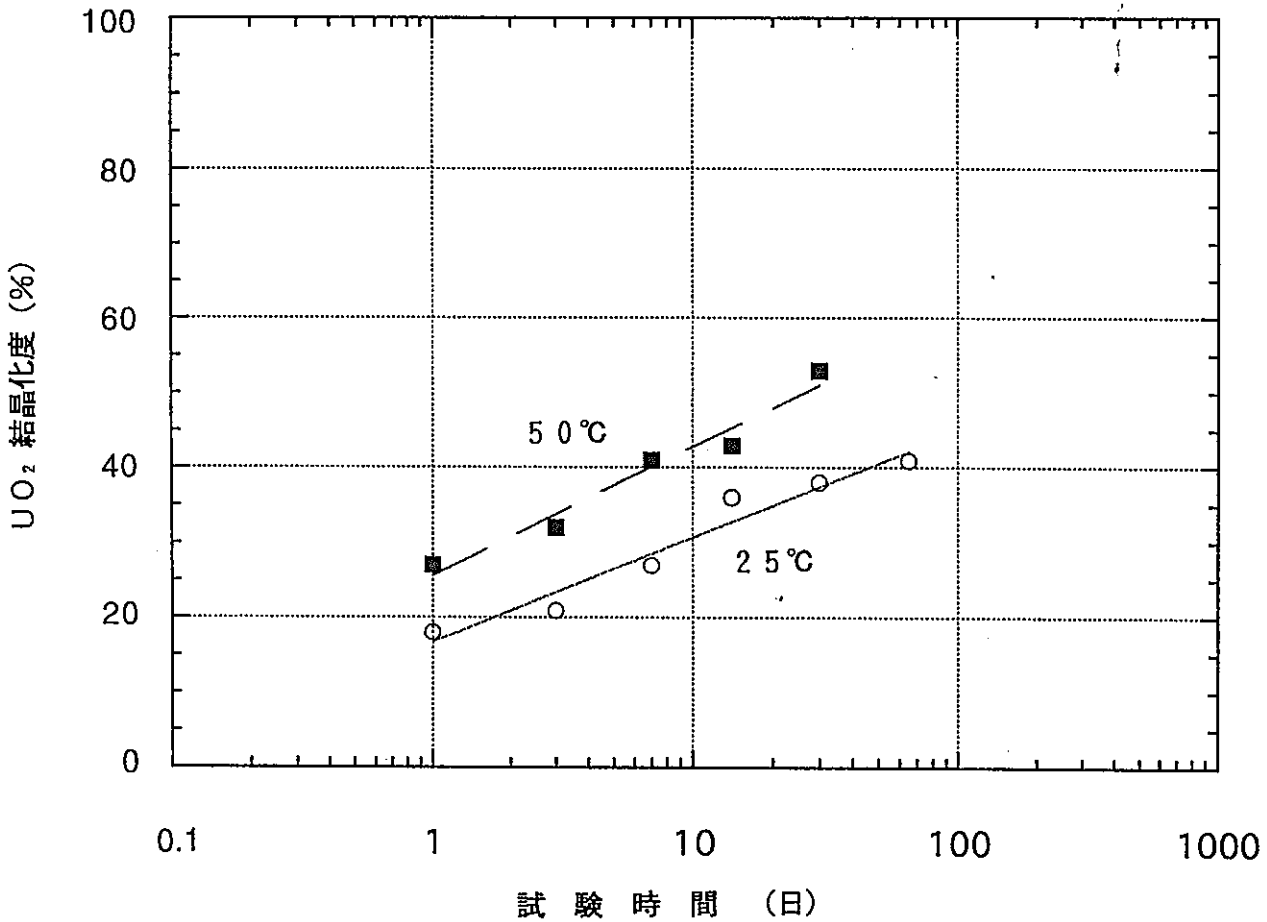


図3.1-6(1)　　ウラン固相の結晶化度の変遷

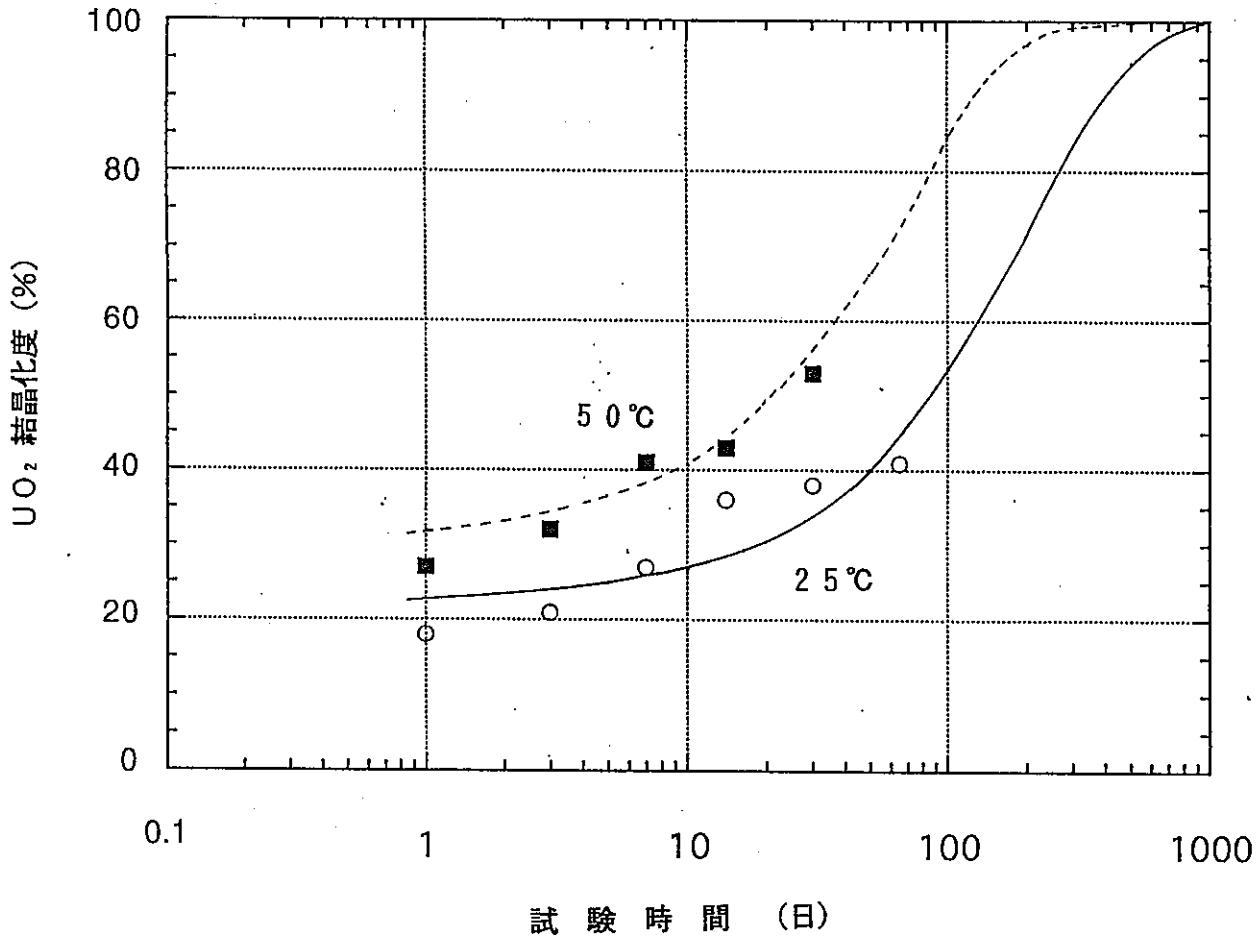


図3.1-6(2)　　ウラン固相の結晶化度の変遷

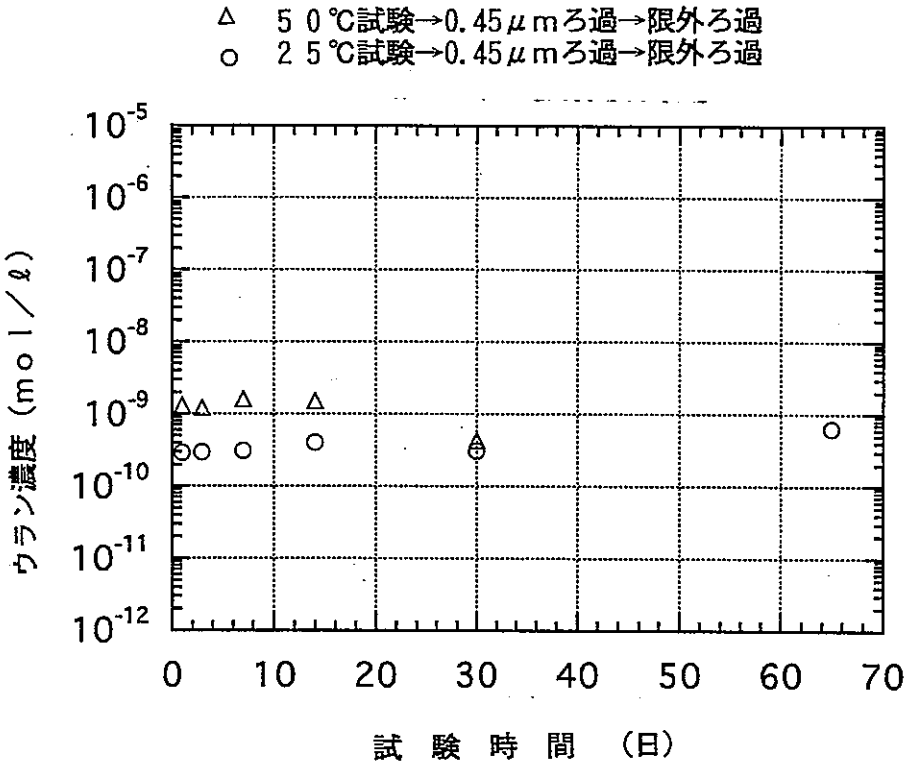


図3.1-7　液相のウラン濃度の変化（試験温度の影響）

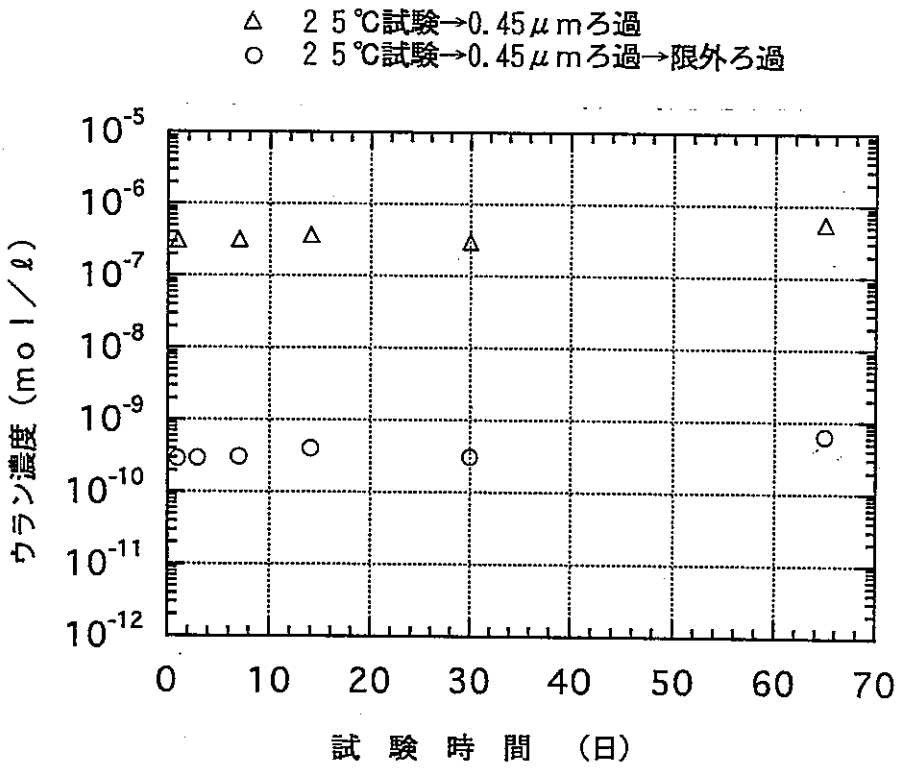


図3.1-8　液相のウラン濃度の変化（ﾌｨﾙﾀｰﾎﾟｱｻｲｽの影響）

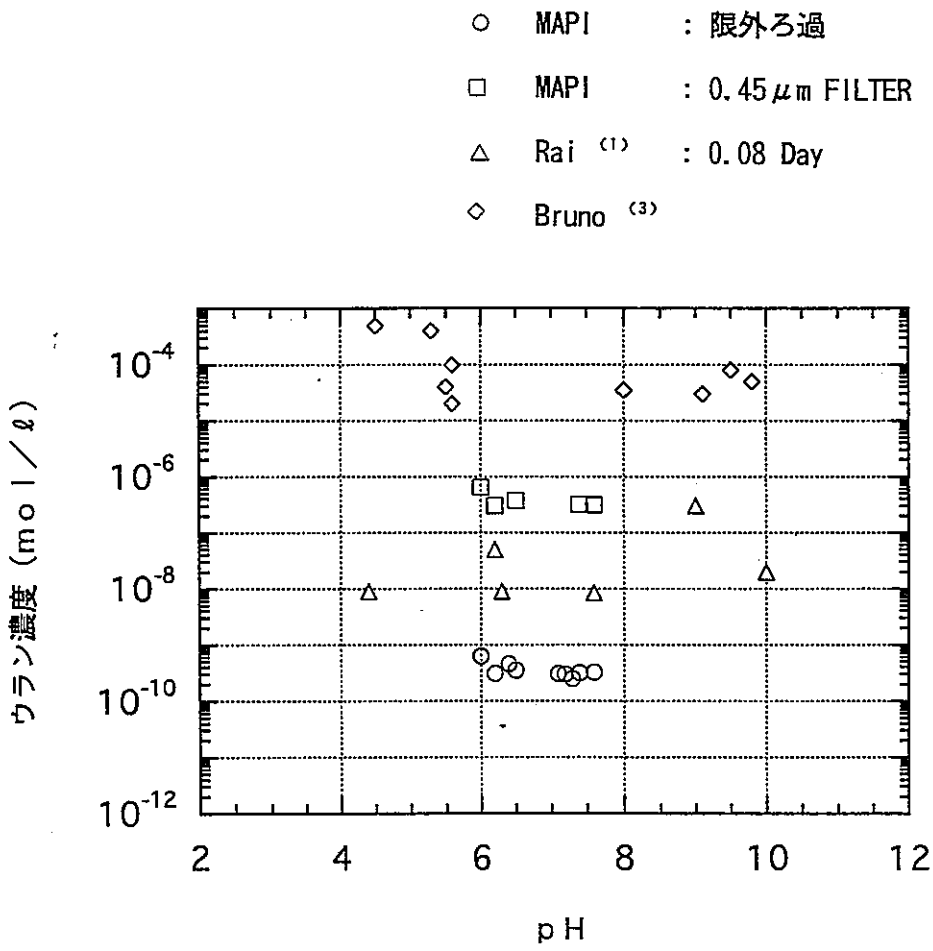


図3.1-9　　ウラン濃度の分析結果－文献値との対比

表3.1-1　　ウラン固相試料乾燥－重量減少率 [1)]

乾　燥　時　間	常温－ﾃﾞｼｹｰﾀ 中乾燥	60℃－空気中乾燥 [2)]
4　hr	——	26.1 %
20　hr	——	85.7 %
1　day	——	85.7 %
3　day	30.9 %	——
5　day	59.8 %	——
7　day	84.0 %	——
11　day	84.1 %	——
20　day	84.1 %	——

1)　重量減少率　：　$(W_0 - W_1) / W_0 \times 100$　(%)

2)　表面が一部黄色に変色

表3.1-2　　ＴＧ重量減少率

化　学　式	分子量	結晶水脱離	重量減少率[1)]
$UO_2\ 3H_2O$	３２４	⇨　UO_2	１６．７％
$UO_2\ 2H_2O$	３０６	⇨　UO_2	１１．８％
$UO_2\ H_2O$	２８８	⇨　UO_2	６．３％
UO_2	２７０	——	——
$UO_2\ \chi H_2O$	——	⇨　UO_2	５．２％[2)]

１）重量減少率

$$(W_0 - W_1) / W_0 \times 100$$

W_0　：初期重量（mg）

W_1　：試験後重量（mg）

２）固相サンプルＴＧ測定結果

表3.1-3　　試験液のｐＨ、Ｅｈの測定結果

サンプル	試験温度	試験時間	試験前		試験後	
	(℃)	(日)	pH	Eh	pH	Eh
No.1	25	1	7.32	-347	7.30	-330
No.2	25	1	7.56	-335	7.58	-331
No.3	25	3	7.18	-332	7.05	-322
No.4	25	3	7.01	-328	7.00	-319
No.5	25	7	7.57	-340	7.44	-320
No.6	25	7	7.19	-321	7.22	-313
No.7	25	14	7.70	-320	6.51	-288
No.8	25	14	7.29	-329	6.42	-295
No.9	25	30	7.14	-315	6.20	-272
No.10	25	65	7.26	-330	6.01	-174
No.11	50	1	7.73	-335	——	——
No.12	50	3	7.35	-314	——	——
No.13	50	7	7.71	-321	——	——
No.14	50	14	7.60	-311	——	——
No.15	50	30	7.80	-334	——	——

1）５０℃サンプルの試験前については２５℃でｐＨ・Ｅｈを測定、試験後については測定せず。

表3.1-4　　ウラン固相の結晶化度

ｻﾝﾌﾟﾙNo.	試験温度 (℃)	試験時間 (日)	UO_2/Al_2O_3 XRD ﾋﾟｰｸ 比	固相UO_2 結晶度 (%)
No.1	25	1	0.81	16
No.2	25	1	1.00	20
No.3	25	3	0.94	19
No.4	25	3	1.09	22
No.5	25	7	1.32	26
No.6	25	7	1.36	27
No.7	25	14	1.91	38
No.8	25	14	1.73	34
No.9	25	30	1.90	38
No.10	25	65	2.08	41
No.11	50	1	1.36	27
No.12	50	3	1.62	32
No.13	50	7	2.09	41
No.14	50	14	2.15	43
No.15	50	30	2.69	53
UO_2(100%crystal) standard			5.05	

表3.1-5　　試験溶液のウラン濃度の分析結果

ｻﾝﾌﾟﾙNo.	試験温度（℃）	試験時間（日）	限外ろ過 1) ウラン濃度（mol/l）	0.45μm ﾌｨﾙﾀろ過 2) ウラン濃度（mol/l）
No.1	25	1	2.5×10^{-10}	——
No.2	25	1	3.3×10^{-10}	3.1×10^{-7}
No.3	25	3	2.9×10^{-10}	——
No.4	25	3	3.1×10^{-10}	——
No.5	25	7	3.2×10^{-10}	3.2×10^{-7}
No.6	25	7	3.0×10^{-10}	——
No.7	25	14	3.6×10^{-10}	3.7×10^{-7}
No.8	25	14	4.6×10^{-10}	——
No.9	25	30	3.1×10^{-10}	3.0×10^{-7}
No.10	25	65	6.4×10^{-10}	5.5×10^{-7} [4.1×10^{-7}] 3)
No.11	50	1	1.3×10^{-9}	——
No.12	50	3	1.2×10^{-9}	——
No.13	50	7	1.6×10^{-9}	——
No.14	50	14	1.5×10^{-9}	8.7×10^{-7}
No.15	50	30	4.3×10^{-10}	3.2×10^{-7}

1)　0.45μm ﾌｨﾙﾀろ過　⇨　限外ろ過（分画分子量10,000）

2)　0.45μm ﾌｨﾙﾀろ過

3)　0.45μm ﾌｨﾙﾀろ過　⇨　0.1N HCl酸性　⇨　限外ろ過（分画分子量10,000）

表3.1-6　　ウラン濃度分析結果の比較

研究機関（研究者）	UO_2 試験固相		実験条件					ウラン濃度
	U区分	形態	温度	雰囲気	溶液	濾過方法	U濃度分析法	（mol／ℓ）
MAPI	DU	U(IV)- hydroxide [U(IV)chloride solution + KOH]	25 ℃	Ar (99.999%)	KCl (Fe powder)	限外濾過（分画分子量 10000 ）	ICP－MS（パーキンエルマー ELAN-5000 ）	～10^{-10}
						0.45 μm（ナルゲンフィルター）		～10^{-7}
Rai [1]	DU	U(IV)- hydroxide [U(IV)chloride solution + NaOH]	25 ℃	N_2 (99.99%)	NaCl (Fe or Eu)	限外濾過（分画分子量 25000 : 0.0018μm）	蛍光分光光度法(Scintrex UA-3) ICP－MS	～10^{-8}
Bruno [3]	－	U(IV)- hydroxide [U(IV)perchlorate solution + NaOH]	25 ℃	H_2(g)/Pd	0.5 mol/l $NaClO_4$	0.22 μm (MILLIPORE filter)	ICP（パーキンエルマー ICP/5500）	～10^{-5}

写真3.1-1　　金属ウラン塩酸溶解液（遠心分離・ろ過操作後）

写真3.1-2　　金属ウラン塩酸溶解液（純水５０倍希釈）

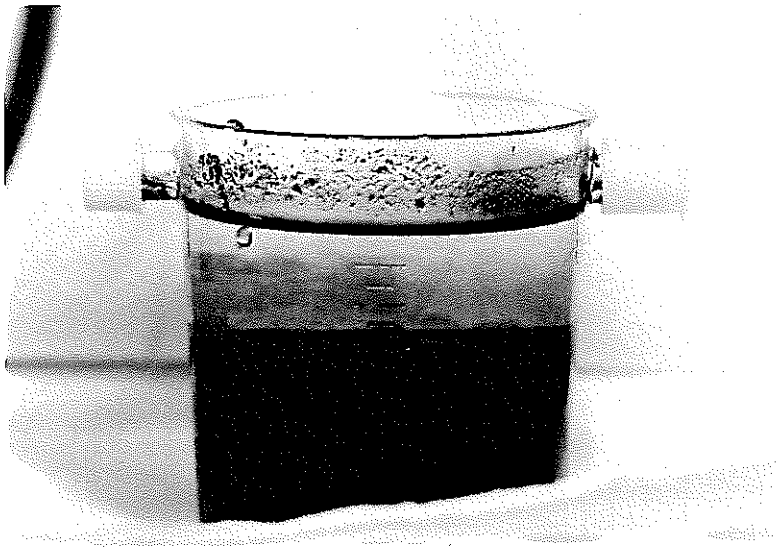


写真3.1-3　　ウラン沈澱固相（ＫＯＨ溶液添加後）

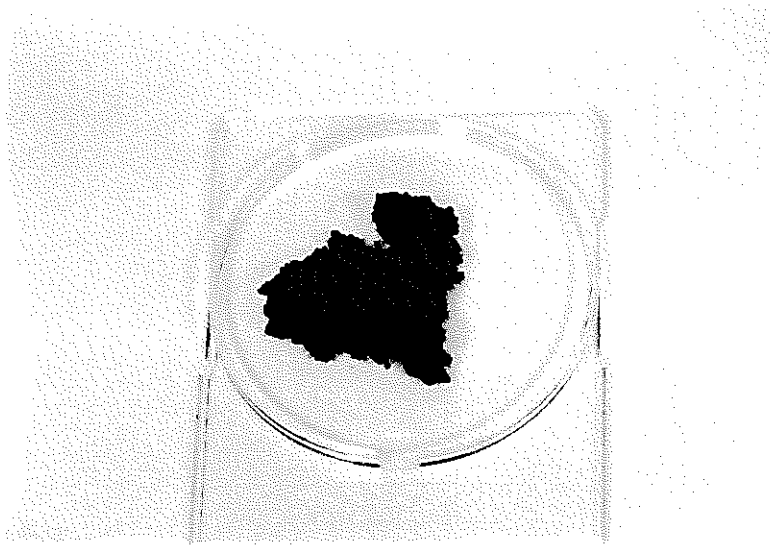
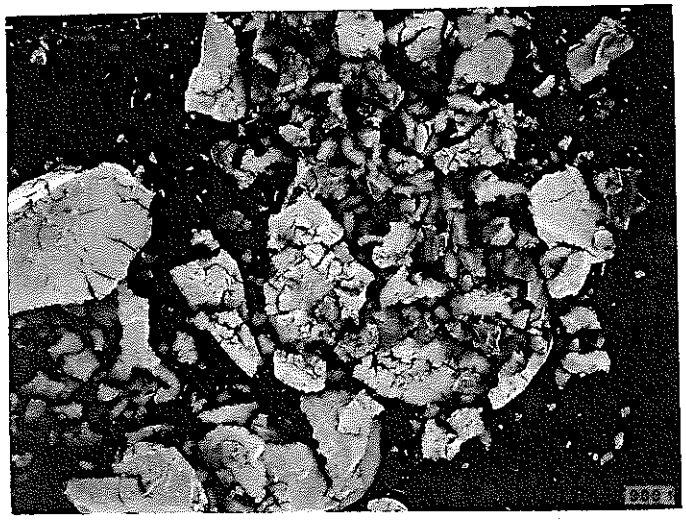


写真3.1-4　　ウラン試験固相（ろ過後自然乾燥）



（×２７）

（×３６００）

写真3.1-5　　ウラン試験固相ＳＥＭ観察写真

3.2 メカニズムの推定に基づく速度式、速度定数の取得

メカニズムの推定に基づく速度式、速度定数の取得に関する検討手順を図3.2-1に示す。ここでは、検討手順に基づき実施した結果について順次記載する。

3.2.1 速度論モデル及び速度定数の文献調査

速度論モデルおよび速度定数の文献調査を実施するに当たって、先ず当社の文献システムにより文献検索を行った。文献検索の結果を以下に記載する。

(1) 検索結果（その１）

使用データベース、キーワードを以下の様にして検索を行った。

①使用データベース ： NUCLEN (1981.01～1993.03)

②キーワード　　：(酸化ｳﾗﾝ+ｳﾗﾝ鉱山)AND(水)AND(溶解OR溶解速度)

検索の結果は、表3.2-1(1)、表3.2-1(2)に示す様に34件の候補が上がった。これらのタイトルの中から、以下に示す第２キーワード

・還元雰囲気でのウランに関する溶解・沈澱速度定数

・支配する反応式

・速度論モデル

のいずれかに関与すると思われる文献の概要を出力した。概要の出力結果を表3.2-1(3)～表3.2-1(6)に示す。ここでは、表3.2-1(4)に記載されている文献番号 5および 7が本研究に関して適切な文献であると考え入手した。また、表3.2-1(4)の文献番号 7では、さらに本研究に関与していると思われる文献(The Kinetics of Dissolutionof UO_2(s) under Reducing Conditions; JORDI BRUNO他) を引用していたことから、本文献についても入手した。

以上、検索（その１）で入手した文献は、以下に示す 3件であった。

・Estimating the Time for Dissolution of Spent Fuel Exposed to Unlimited Water　　(表3.2-1(4)の文献番号 5)

・Chemistry of UO_2 Fuel Dissolution in Relation to the Disposal of Used Nuclear Fuel　　(表3.2-1(4)の文献番号 7)

・The Kinetics of Dissolutionof UO_2(s) under Reducing Conditions　　(表3.2-1(4)の文献番号 7で引用)

ただし、速度論モデル、沈殿速度定数に関する文献が無いことから、別のデータベースを用いてさらに検索した。

(2) 検索結果（その２）

使用データベース、キーワードを以下の様に変更して検索を行った。

①使用データベース ： JICST7580(1975.01～1980.12)

②キーワード ： (酸化ｳﾗﾝ+ｳﾗﾝ鉱+ｳﾗﾝ鉱床+ｳﾗﾝ鉱物)AND(水)AND(溶解OR溶解速度)

検索の結果は、表3.2-1(7)に示す様に16件であった。これらのタイトルの中から、検索結果（その１）と同様に第２キーワードを適用した結果、文献番号 7が適切と考え表3.2-1(8)に示す概要を出力した。しかし、ロシア語であること、モデルに関する記載が無いことから入手しなかった。

(3) 検索結果（その３）

使用データベース、キーワードを以下の様に変更して検索を行った。

①使用データベース ： JICST (1981.01～1993.12)

②キーワード ： (酸化ｳﾗﾝ+ｳﾗﾝ鉱山)AND(水)AND(溶解OR溶解速度)

検索の結果は、表3.2-1(9)、表3.2-1(10) に示す様にそれぞれ 3件、計 6件であった。これらのタイトルの中から、同様に第２キーワードに関連する文献は見当たらないことから、さらに別のデータベースを用いた。

(4) 検索結果（その４）

使用データベース、キーワードを以下の様に変更して検索を行った。

①使用データベース ： CA (Chemical Abstract)

②キーワード ： (URANINITE)AND(H2O OR WATER OR AQUEOUS)AND(DISSOLUTION OR SOLUTION)

検索の結果は、表3.2-1(11) に示す様にそれぞれ 4件であった。これらのタイトルの中から、同様に第２キーワードに関連する文献は文献番号 4であると考え、概要を出力した。概要の結果を表3.2-1(12) に示すが、UO_2(cr) の溶解速度に

ついて詳細な記載があるため、以下の文献を入手した。

・A Kinetic Study of the Dissolution of Uraninite

(表3.2-1(11) の文献番号 4)

モデルおよび沈殿速度定数に関連する文献をさらに検索するた、別のデータベースを使用することとした。

(5) 検索結果（その5）

使用データベース、キーワードを以下の様に変更して検索を行った。

①使用データベース ： DIALOG

②キーワード ： (URANINITE)AND(H2O OR WATER OR AQUEOUS)AND(DISSOLUTION OR SOLUTION)

検索の結果は、表3.2-1(13)～表3.2-1(20) に示す様に 100件であった。ここでは、概要の出力において制限があったことから、有望な文献を取り寄せた。以下に示す文献（文献番号13）は、

・The Kinetics of Dissolution of UO_2 Under Reducing Conditions and Influence of an Oxidized Surface Layer (UO_{2+x}): Application of a Continuous Flow-through Reactor

溶解－沈殿速度定数およびモデルの記載があったことから、本研究で調査することとした。従って、以上の検索結果から、動燃殿より支給された文献(Dr. Rai)も含め、計 6件調査することとした。調査結果のまとめを表3.2-2 ～表3.2-7 に示す。

(6) 文献調査結果

表3.2-2 の文献では、UO_2 ・xH_2O(am)の溶解度実験が行われており、還元雰囲気で実施するための注意事項が詳細に記載されている。また、溶解度はpHが 4以上で約10^{-8}(mol/ ℓ) との報告がされており、UO_2 ・xH_2O(am)は素早く結晶化するため、全てのデータが短期間（～ 8日）で実施されている。

表3.2-3 の文献では、使用済燃料に含まれるUO_2 の溶解時間を評価するために

溶解速度定数を用いて、評価している。常温において、使用済燃料、UO_2 の溶解速度定数はほぼ同じである。また、UO_2 の溶解速度定数について、温度、溶液（純水、模擬地下水）における依存性についても記載している。

表3.2-4 の文献では、モデルによって使用済燃料に含まれるUO_2 の溶解挙動を評価することを目的として、AECLの研究成果を中心にまとめている。しかし、処分環境条件は、還元性であるが放射線分解による酸化状態などを考慮し、酸化条件下での溶解機構（固相の酸化による変遷、溶解速度など）を中心に議論している。

表3.2-5 の文献では、23℃におけるUraninite の溶解速度を表面積、溶液中の溶存酸素濃度、炭酸塩濃度、pH、温度などの関数として与えている。しかし、天然のUraninite に約12～60% のUO_3 が含有されていることから、還元条件における溶解速度として引用することは出来ないと考える。

表3.2-6 はUO_2(c)の溶解速度に関して種々の因子(pH, Eh, 炭酸塩）の依存性を調査することを目的として、常温、還元条件下、pHは 3～12でUO_2(cr) のバッチ試験を実施している。試験の結果、pHの関数で溶解速度を与えている。しかし、ここで得られたデータは、実験の初期段階において初期相の素早い溶解（濃度の増加）、その後の沈澱（濃度の減少）を説明するまでには至っていない。

表3.2-7 は、前述の溶解－沈殿応答現象を説明することを目的として、バッチ、カラムの両試験を前述と同様の条件で実施している。すなわち、初期相(UO_{2+x})の溶解とUO_2(s)の沈澱挙動を説明するための実験、モデル解析を行っている。実験の結果、バッチ試験からはUO_{2+x} の溶解速度定数、カラム試験からはUO_2(s)の溶解速度定数を与えている。さらに、これらの実験値に基づき初期相としてU_3O_7の溶解、UO_2(s)の沈澱を考慮し、地球化学コードEQ36により実験解析を行い、バッチ試験結果とほぼ一致することを示している。

3.2.2 ウランに関する熱力学データの整備

ウランに関する熱力学データの整備は、先ずウランの水溶性化学種、鉱物を対

象として最新の熱力学データに基づき平衡定数を計算し、次にPHREEQE 用の熱力学データベースを作成した。 最後にPHREEQE の熱力学データベースをEQ36のデータベースに変換し、変換にともなう検証を行った。これらの結果を順次記載する。

(1) 平衡定数の計算

CHEMICAL THERMODYNAMICS OF URANIUM(OECD, 1992)の生成自由エネルギーに基づき、動燃殿で使用しているPHREEQE の反応式に沿った平衡定数を計算した。計算結果のまとめを表3.2-8(1)～表3.2-8(5)に示す。表3.2-8 に記載している従来のlog K は、動燃殿が所有しているPHREEQE の熱力学データベースの値であり、最新のlog K は本研究で計算した値である。ただし、最新のlog K を計算するに当たって、CHEMICAL THERMODYNAMICS OF URANIUM(OECD, 1992)に生成自由エネルギーが記載されていない水溶性化学種、鉱物については、空欄にしている。尚、参考のため最新のlog K 算出根拠（全水溶性化学種、全鉱物）を付録 Aに添付する。

尚、付録 Aに記載のページは、CHEMICAL THERMODYNAMICS OF URANIUM(OECD, 1992)において引用したページを示している。

(2) PHREEQE 熱力学データベース作成

表3.2-8(1)～表3.2-8(5)の値を手作業によりPHREEQE のデータベースに入力した。ただし、表3.2-8(1)～表3.2-8(5)の空欄の部分については、従来のlog K としている。尚、参考のためここで作成したPHREEQE の熱力学データベースを付録 Bに添付する。

(3) EQ36熱力学データベース作成

EQ36の熱力学データベースを効率的かつ高精度で作成するため、本研究では、動燃殿所有のインターフェイスプログラムphr-eq36を用いてEQ36の熱力学データベースを作成した。このインターフェイスプログラムは、PHREEQE の熱力学デー

タベースをEQ36用に変換するものである。変換されるデータベースは、EQ36パッケージのdata0(アスキー形式) であり、実際にEQ36の実行で使われるデータベースは、EQPTを実行することによって得られるdata1(バイナリー形式) である。

今回は、これらの手続きにより、data0, data1 を作成した。今回使用したphr-eq36を付録 Cに添付する。また、data1 を作成した際のEQPTの結果を付録 Dに添付する。尚、参考のためphr-eq36により作成した熱力学データベースを付録 Eに添付する。

(4) 熱力学データベース作成検証

phr-eq36、EQPTにより作成したEQ36熱力学データベースが適切かどうかを確認するため、PHREEQE とEQ3NR にて同一の問題を解析し、結果を比較した。ここでは、UO_2(cr) 、UO_2(am) の溶解度を以下の条件にて計算した。

温度　　: 25℃

pH　　: 7.32

Eh　　: -347(mV)

熱力学データベース: PHREEQEは付録 B、EQ3NRは付録 Eで作成したdata1

計算の結果を表3.2-9 に示すが、両者の濃度は一致していることを確認した。

従って、実験データ解析では、ここで作成した熱力学データベースを使用することとした。

3.2.3 実験データ解析

実験データ解析では、実験データに基づき平衡モデルによる実験予備解析を行い、支配固相・支配化学種の推定を行う。次に、文献情報ならびにここで得られた予備解析結果に基づき、固相の変遷に伴う溶解・沈殿反応式の推定を行い、メカニズムについて考察する。さらに、文献情報、実験情報を参考にした上で速度論モデルによる解析を行い、本研究の実験結果と比較する。

(1) 実験予備解析

実験予備解析では、本研究の実験で実測した溶液中のウラン濃度、固相データを平衡論の視点から考察することを目的としている。

表3.1-5 の溶液ウラン濃度、表3.1-2 のpH、Ehに基づき、試験系を支配している固相の推定をPHREEQE の化学種分配オプションを用いて計算した。入力条件は表3.2-10に示す様に、温度、pH、Eh、実測ウラン濃度、pH調整剤として用いたK, Cl濃度、Eh調整剤として用いた鉄粉の溶解濃度とした。 解析結果を同じく表3.2-10に示すが、浸漬期間が 1～30日いずれのサンプルにおいても、ウラン関係の鉱物では UO_2(cr)の飽和指数がほぼ 0であり、 UO_2(cr)が平衡固相であると推定される。初期固相であるUO_2(am) は、すでに未飽和となっていることが判る。また、赤鉄鉱(Fe_2O_3) 、磁鉄鉱(Fe_3O_4) 、針鉄鉱(FeOOH) の飽和指数はいずれのサンプルにおいても 0付近であり、Eh調整剤として使われた鉄粉は、腐食生成物としてビーカーの底に堆積しているものと考えられる。さらに、O_2(gas) の分圧は極めて低くDr.Raiが厳しく言っている還元条件下における試験で必要な分圧を維持していることが判る。また、表3.2-10には記載していないが、支配している水溶性化学種は、$U(OH)_4$(aq)である。また、従来の熱力学データ (表3.2-10の旧) と本研究で作成した熱力学データ (表3.2-10の新) による飽和指数の違いは、殆ど無いことが判った。

前述の予備解析の結果、既存の熱力学データベースから UO_2(cr)が平衡であると推定されることから、純水と UO_2(cr)の平衡計算も行った。計算で求まった溶液中のトータルのウラン濃度は、表3.2-11に示す様にいずれのサンプルにおいても 4.2×10^{-10}(mol/ℓ) であり、実測値されたウラン濃度とほぼ一致している。また、支配化学種は$U(OH)_4$(aq)である。いずれのサンプル(1日～30日) においても、溶液濃度を支配している固相がUO_2(cr) と考えられることから、初期 (時間=0) 固相であるUO_2(am) の溶解度は、極めて短い時間で減少すると考える。また、参考のためUO_2(am) の溶解度を計算した結果を表3.2-12に示す。 UO_2(am)の溶解度は実測されたウラン濃度よりも約 5桁高く、試験系の溶液を UO_2(am)が支配しているとは考えにくい。支配化学種は、 UO_2(cr)のケースと同様$U(OH)_4$(aq)で

ある。

(2) 溶解・沈殿反応式の推定

表3.2-10～表3.2-12の結果より、中性領域においては以下の溶解・沈殿反応式が考えられる。

・UO_2(am) の溶解反応

$UO_2(am) + 2H_2O \Rightarrow U(OH)_4(aq)$

・UO_2(cr) の沈殿反応

$UO_2(cr) + 2H_2O \Leftarrow U(OH)_4(aq)$

また、文献調査の表3.2-2 の文献では、UO_2(am) の溶解度試験を行っており、pH≧4 においてウラン濃度は一定であり、$U(OH)_4$(aq)を支配化学種としている。さらに、文献調査の表3.2-7(2)に示す様に、UO_2(cr) の溶解度バッチ試験で測定されるウラン濃度は、pH≧ 5で前述の溶解平衡濃度に近いことを報告している。
従って、溶解・沈殿過程で考えられ得るメカニズムは、各々1種類とすることができる。

(3) 速度論モデルによる解析

本研究では、3.1.2 「固相変遷およびウラン濃度の変化の測定」で述べた様に固相の変遷は測定できたが、ウラン濃度の変化は測定できなかった。従って、測定結果から、沈殿速度定数を入手できなかったことから、本節では文献調査で得られた速度定数を用いてここで得られた実験データと比較することとした。

UO_2(am)の溶解速度定数は、文献調査の結果入手することができなかったため、文献調査の表3.2-7 に記載している UO_2(cr)の溶解速度定数2.0e-16mol/cm^2-sec を採用し、測定された溶液中ウラン濃度、 UO_2(cr)の時間変化のデータと比較することにより主なパラメータとして取り扱っている。また、 UO_2(cr)の沈殿速度定数は表3.2-7 に記載されている2.0e-9mol/cm^2-sec を採用した。尚、UO_2(am) 、UO_2(cr) の表面積については測定していないことから、それぞれ0.1(cm^2)、1.0e-4(cm^2) と仮定した。また、UO_2(am) の初期量は測定値を用い、UO_2(cr) の初期

量は極めて少ないと考え1.0e-7(mol/ ℓ) とした。さらに、初期ウラン濃度は、本来 UO_2(am)の溶解度として設定すべきであるが、UO_2(am) の熱力学データの信頼性が低いことから、文献調査の表3.2-2 に報告されている10^{-8}(mol/ ℓ) とした。速度論モデルによる解析は表3.2-13に示す様に 7ケース実施した。以下に各解析ケースの結果およびパラメータの設定根拠について記載する。

解析ケース 1は、前述のデータに基づき解析を行った。溶液中のウラン濃度の変化を図3.2-2 に示す。約 2時間でUO_2(cr) の溶解度に至るが発散傾向となる。また、図3.2-3 はUO_2(cr) の沈殿量の変化を示す。 縦軸の沈殿量は、変化量が非常に小さいことから初期固相量にて無次元化した。 UO_2(cr)の沈殿量の変化は、約 3時間後に一定となり、実測された結晶化度の増加傾向と異なることから、ケース 2では UO_2(am)の溶解速度定数を増加させた。 なお、溶解したUO_2(am) の減少量については極めて小さい量であり、ほぼ一定値である。

解析ケース 2は、前述の理由により解析ケース 1に基づきUO_2(am) の溶解速度定数2.0e-16mol/cm^2-secをU_3O_7(s) の溶解速度定数2.0e-13mol/cm^2-secに変更した。結果を図3.2-4 、図3.2-5 に示す。傾向としては解析ケース 1と同様に発散傾向にあるが、UO_2(cr) の沈殿量は増加傾向を示した。

解析ケース 3は、初期固相の表面積の影響を見るため、解析ケース 1に基づきUO_2(am) の表面積を0.1(cm^2)から1.0(cm^2)に変更した。結果を図3.2-6 、図3.2-7 に示すが解析ケース 1と同一解である。

解析ケース4,7 は、UO_2(cr) の沈殿量の変化をスムーズに増加させることを目的として、解析ケース 1に基づきUO_2(am) の溶解速度定数2.0e-16mol/cm^2-secを2.0e-12mol/cm^2-secに変更した。 結果を図3.2-8 、図3.2-9(ケース4)、図3.2-14、図3.2-15 (ケース7)に示すが解析ケース 1と比較すると、初期段階での発散は見られないが140 時間後に発散する。UO_2(cr) の沈殿量は、時間とともにほぼ

比例関係でスムーズに増加するが、測定された結晶度の指数関数型の増加傾向とは異なる。また、溶解速度定数が増加したことにより、UO_2(cr) の溶解度に到達する時間は遅い。

解析ケース 5は、UO_2(am) の初期量の影響度を見るため、解析ケース 2に基づき1.7e-2(mol/ ℓ) から1000(mol/ ℓ) に変更した。結果を図3.2-10、図3.2-11に示すが解析ケース 1と同一解であり、UO_2(am) 初期量の影響度は小さいことを示している。

解析ケース 6は、UO_2(cr) の沈殿速度定数の影響度を見るため、解析ケース 5に基づきUO_2(cr) の沈殿速度定数2.0e-09mol/cm^2-secを1.0e-09mol/cm^2-secに変更した。解析ケース 5と比較すると、図3.2-12、図3.2-13に示す様に発散現象も無くなり、約 5時間後にUO_2(cr) の溶解度にほぼ一致し、1 日後の実験結果ともほぼ一致している。。また、UO_2(cr) の沈殿量は、時間の増加とともに指数関数型で増加しており、測定値と同一の傾向を示す。

溶解度制限固相の変遷解析を平衡論、速度論モデルの両面から実施した結果、以下のことが判った。

・ウラン濃度を支配している固相は、かなり早い時期からUO_2(cr) である。
・UO_2(am) の溶解度は、約 5時間後にUO_2(cr) の溶解度となる。
・ただし、固相の大部分はUO_2(am) が残存している。
・溶解－沈殿速度定数は概ね以下の値と考えられる。

UO_2(am)の溶解速度定数	:	2.0e-13 mol/cm^2-sec
UO_2(cr)の沈殿速度定数	:	1.0e-09 mol/cm^2-sec

従って、この様な地球化学モデルを採用した場合は実験値と整合性がとれる。しかし、このモデルの一般性を確認するためには、以下に示すデータを実験により取得する必要がある。

・モデル解析の初期条件として必要となる、実験を開始した時点における溶液中のウラン濃度と固相の分析
・変遷過程における結晶、非結晶質量の分析
・溶解度制限固相の変遷に伴う溶液中のウラン濃度が短期間で達成することを確認するため、UO_2(cr) 溶解度試験の実施
・変遷過程の明確化
　－　非結晶質　⇨　溶液中への溶解　⇨　結晶質へ沈殿
　－　非結晶質　⇨　結晶質　（固相の変質）

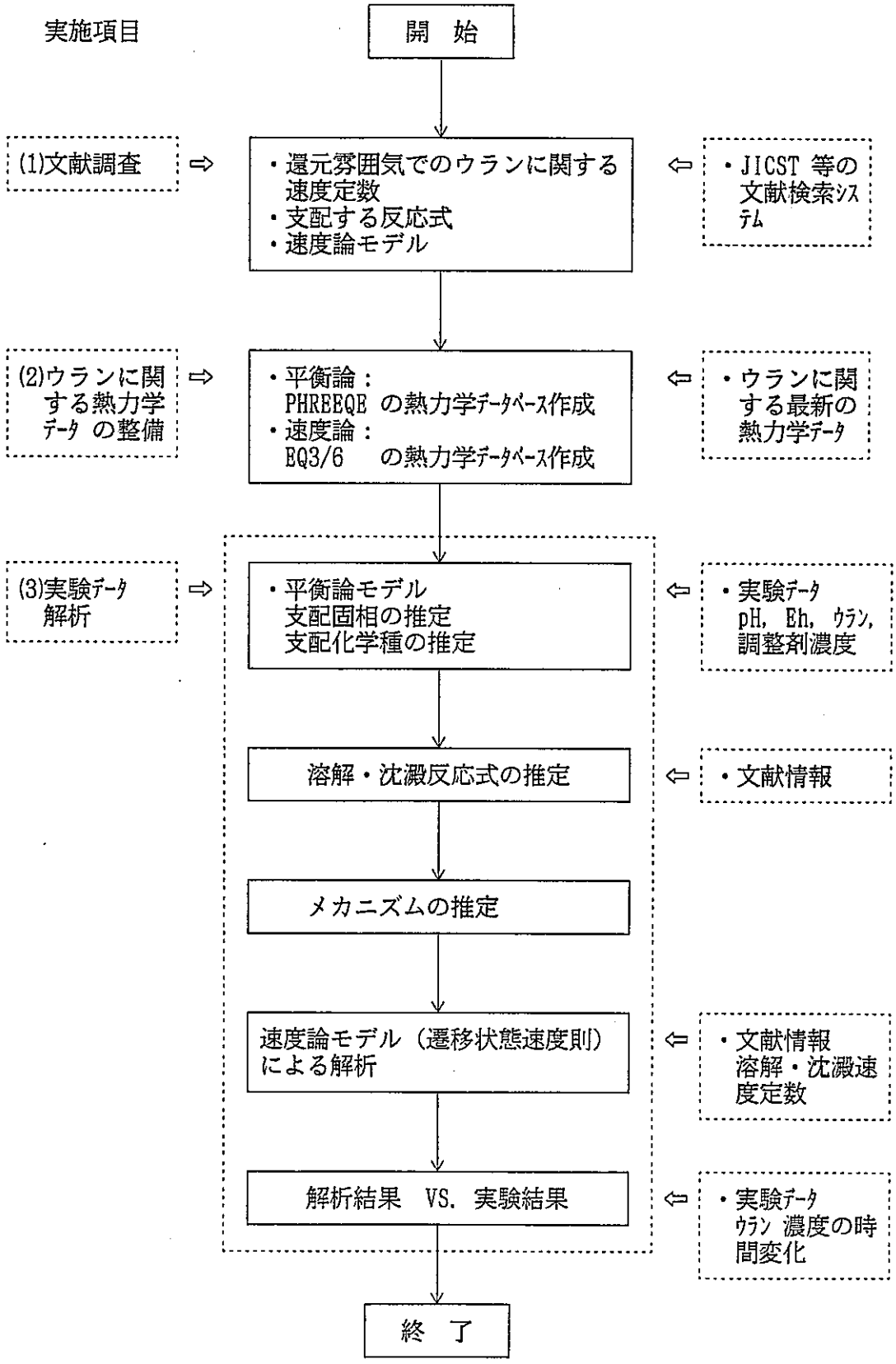


図3.2-1　メカニズムの推定に基づく速度式、速度定数の取得に関する検討手順

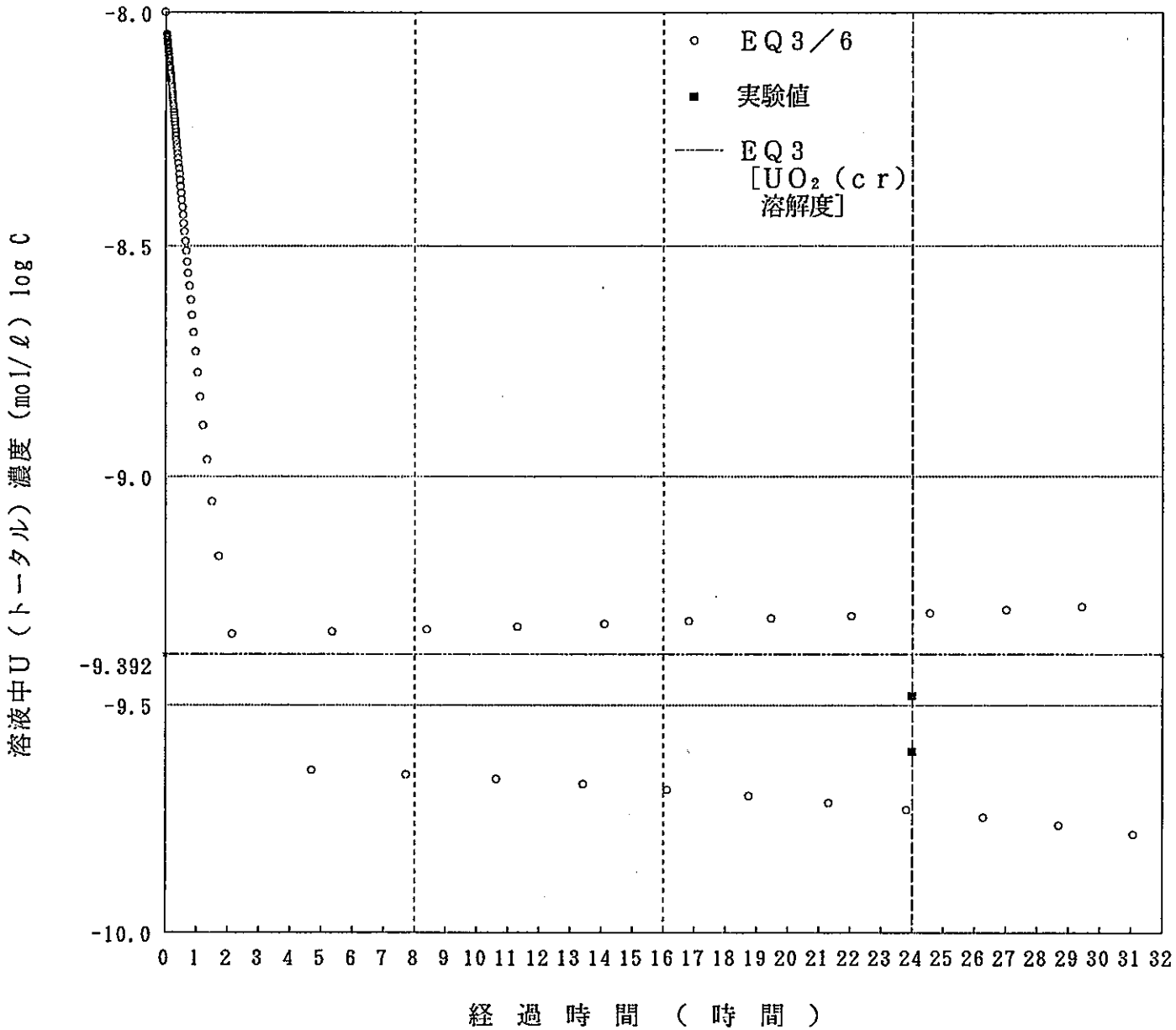


図3.2-2　実験データ解析結果［溶液中のU濃度の変化、ケース1］

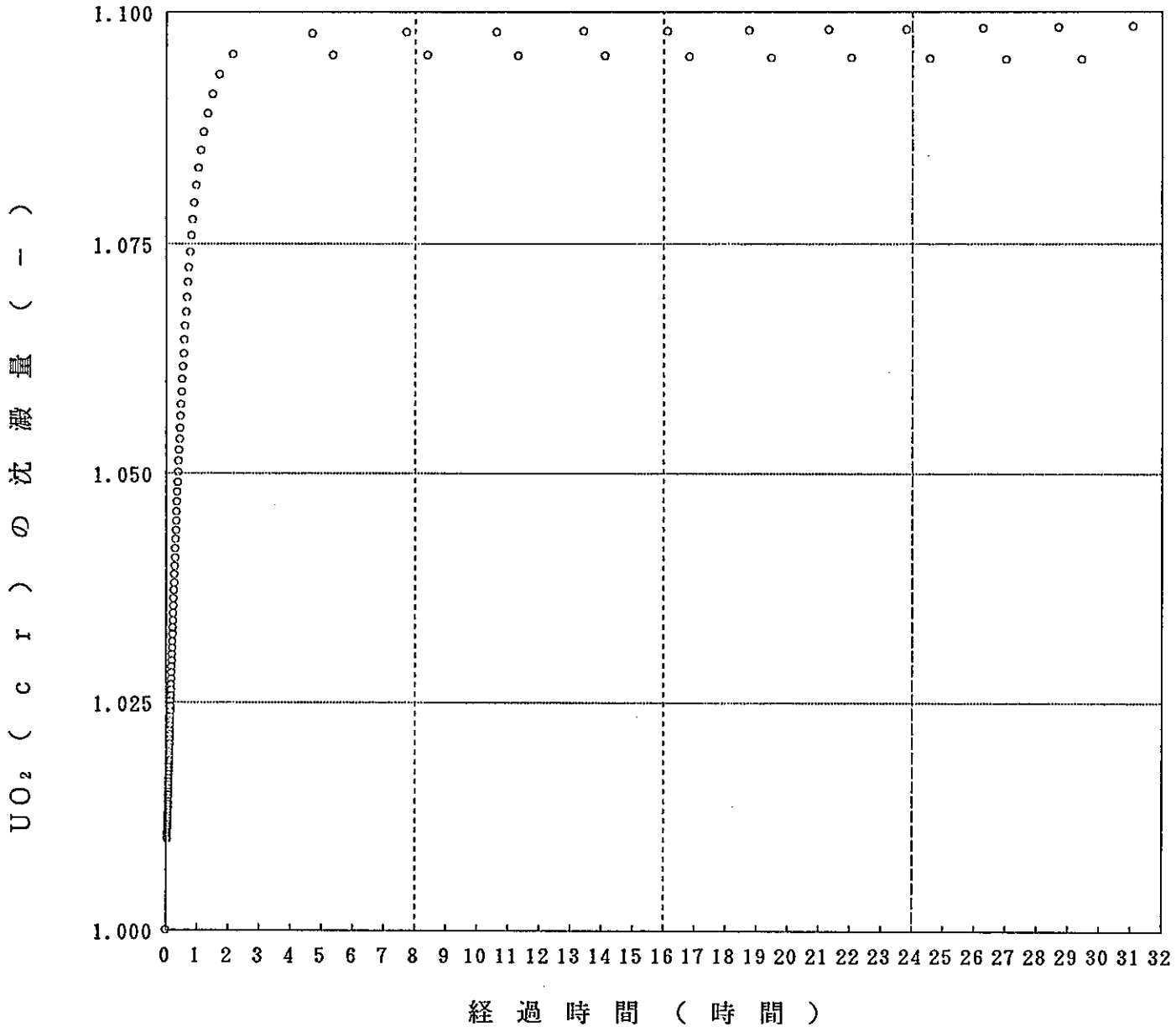


図3.2-3　実験データ解析結果［UO_2（cr）の変化、ケース1］

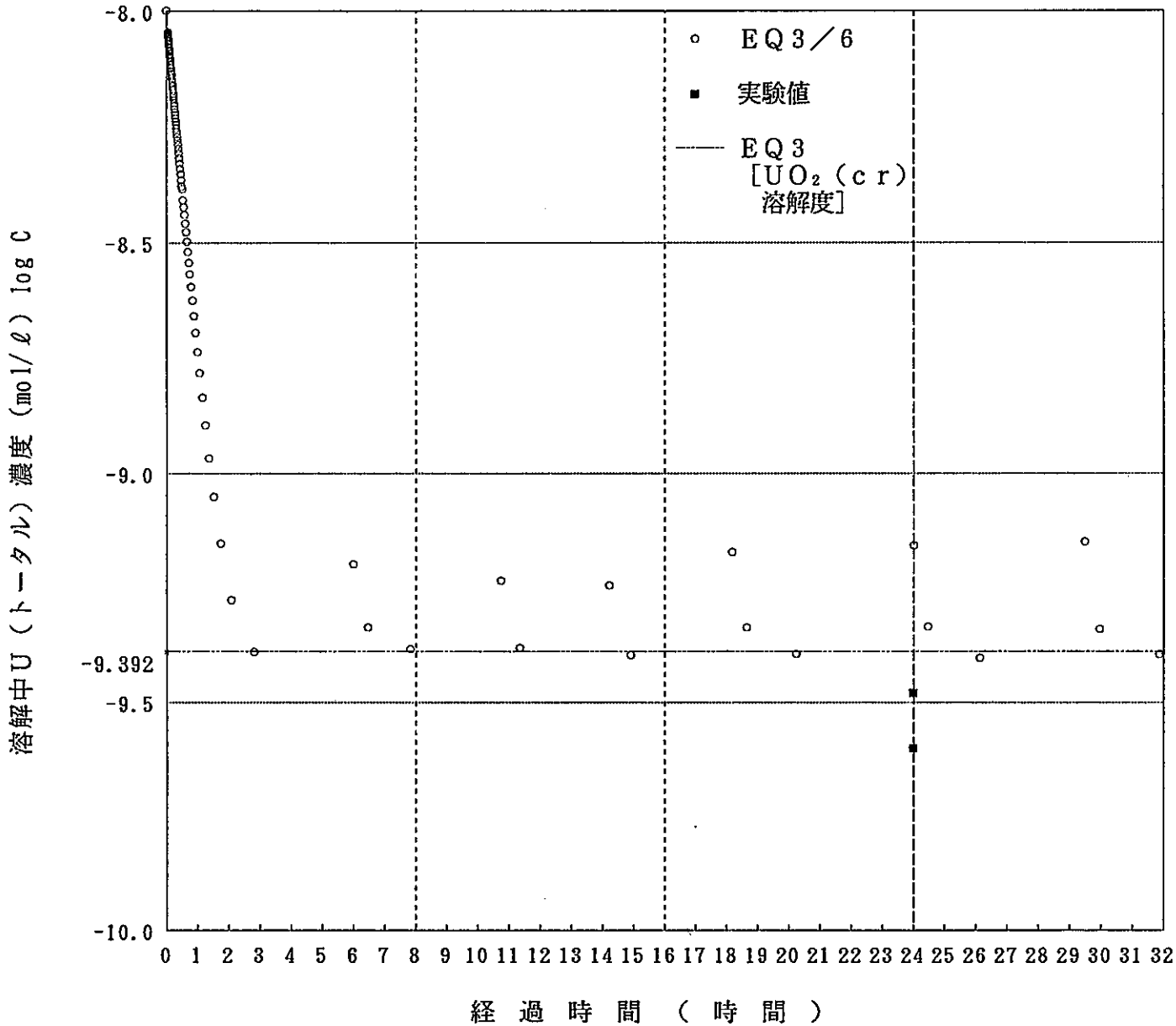


図3.2-4　実験データ解析結果［溶液中のU濃度の変化、ケース2］

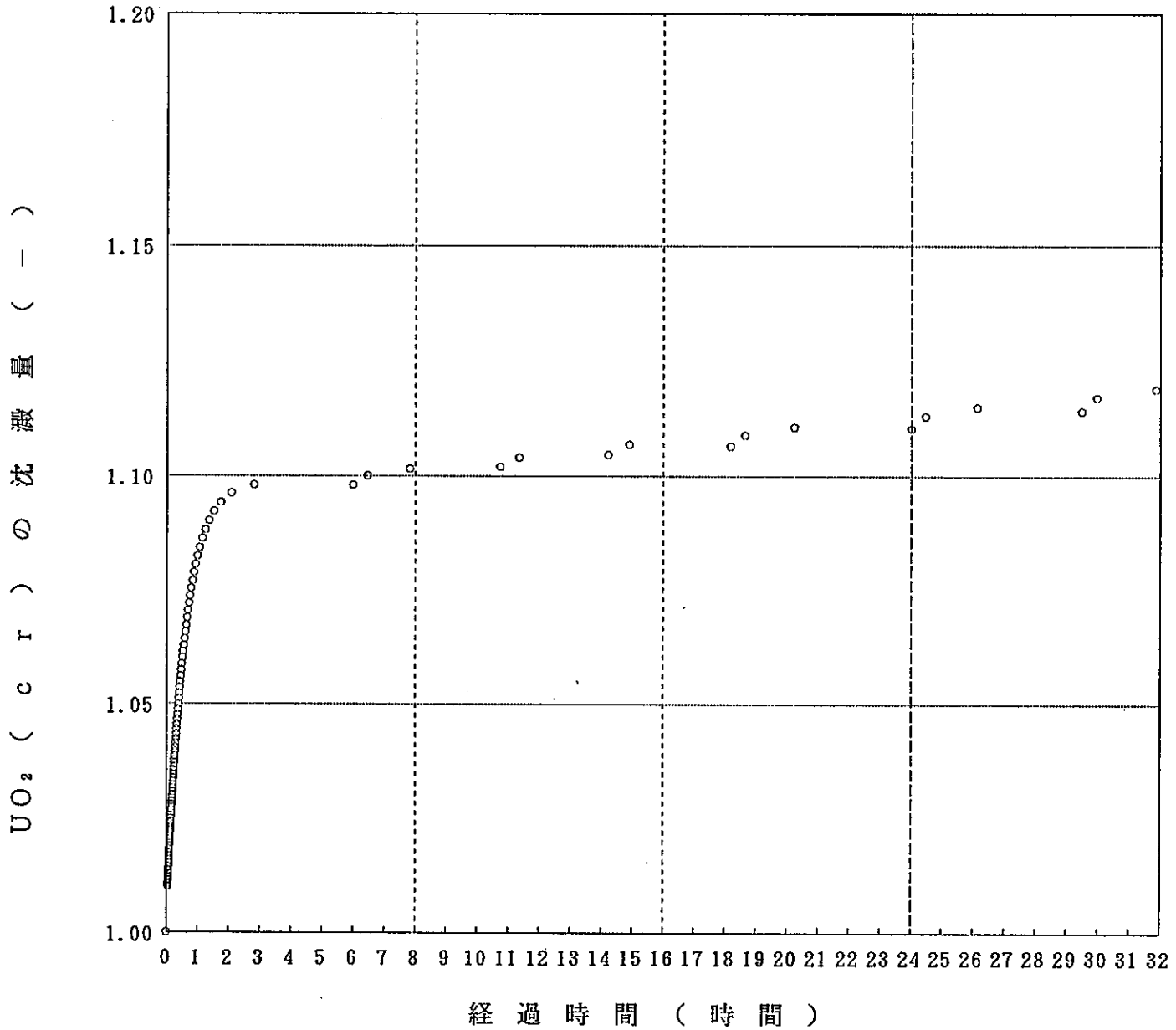


図3.2-5　実験データ解析結果［UO_2（cr）の変化、ケース2］

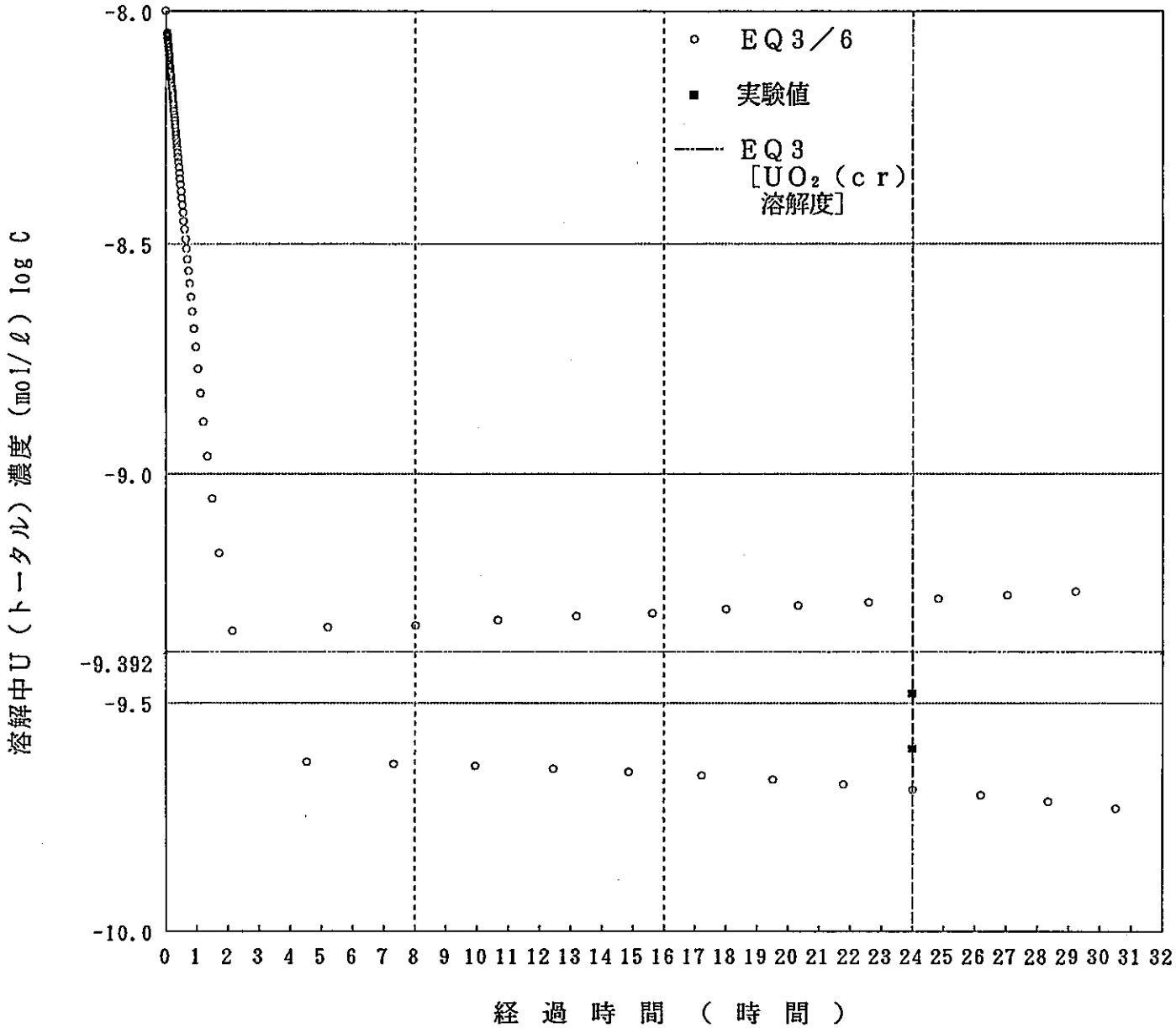


図3.2-6　実験データ解析結果［溶液中のU濃度の変化、ケース3］

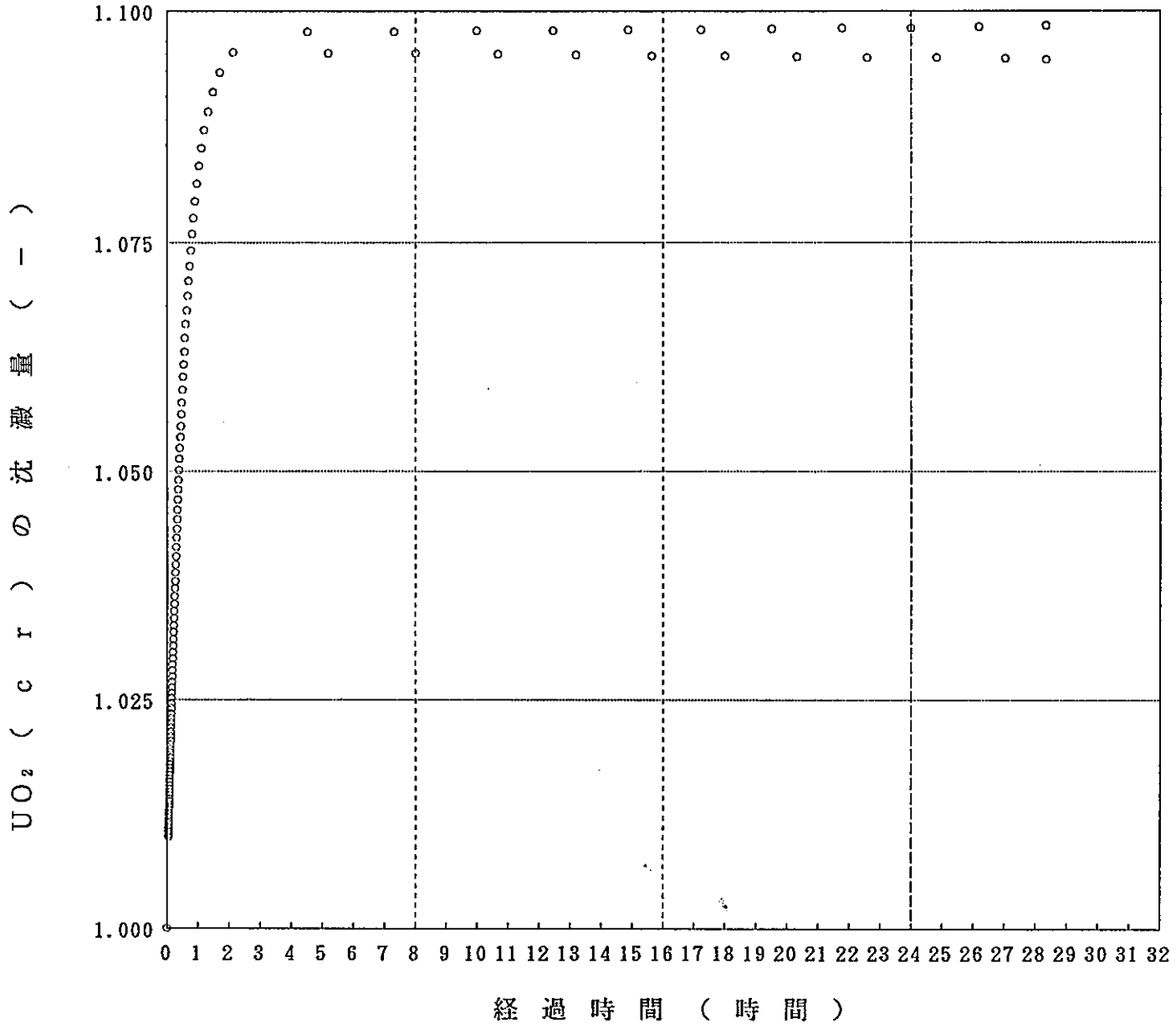


図3.2-7　実験データ解析結果［UO_2（cr）の変化、ケース3］

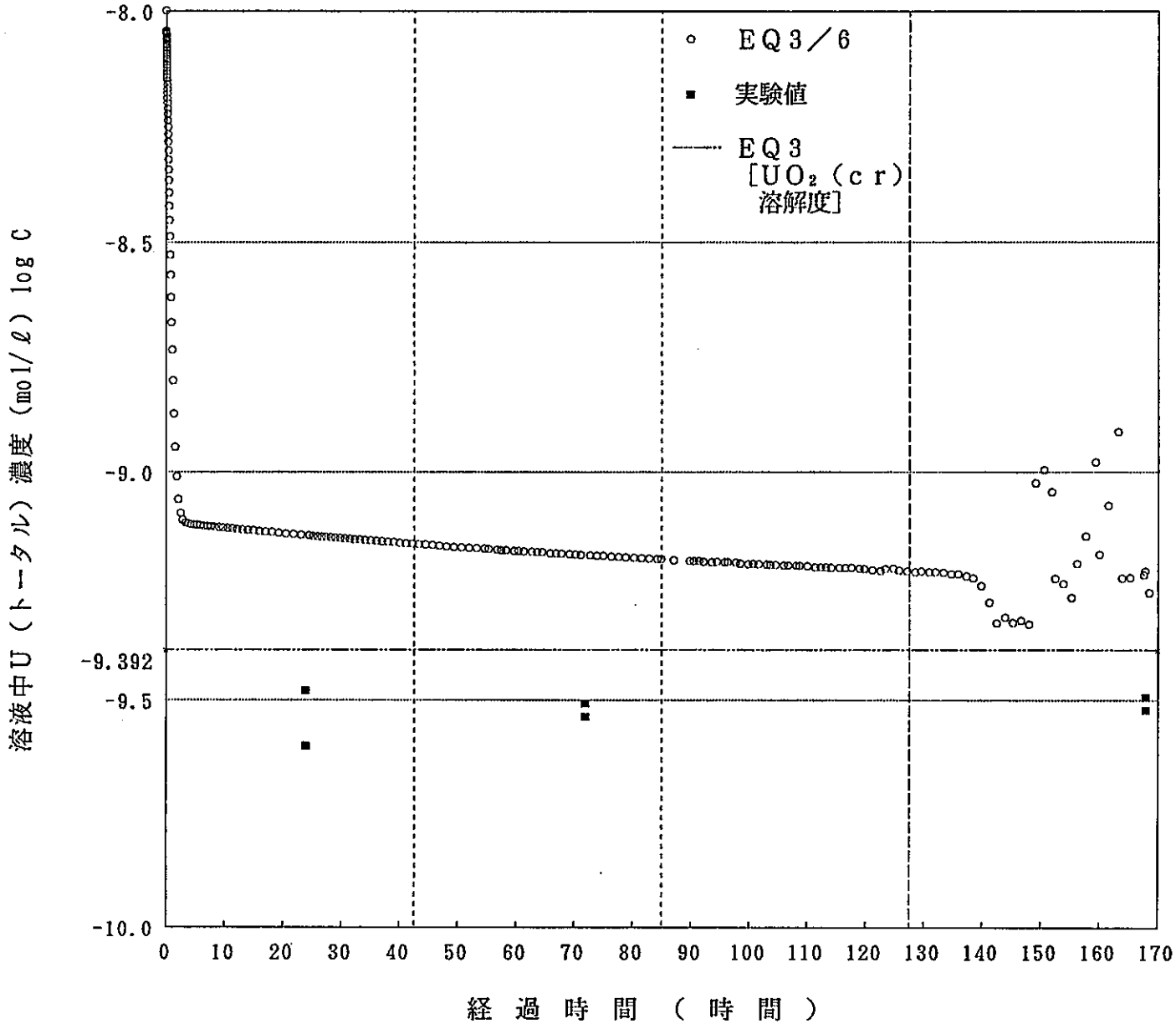


図3.2-8　実験データ解析結果［溶液中のU濃度の変化、ケース4］

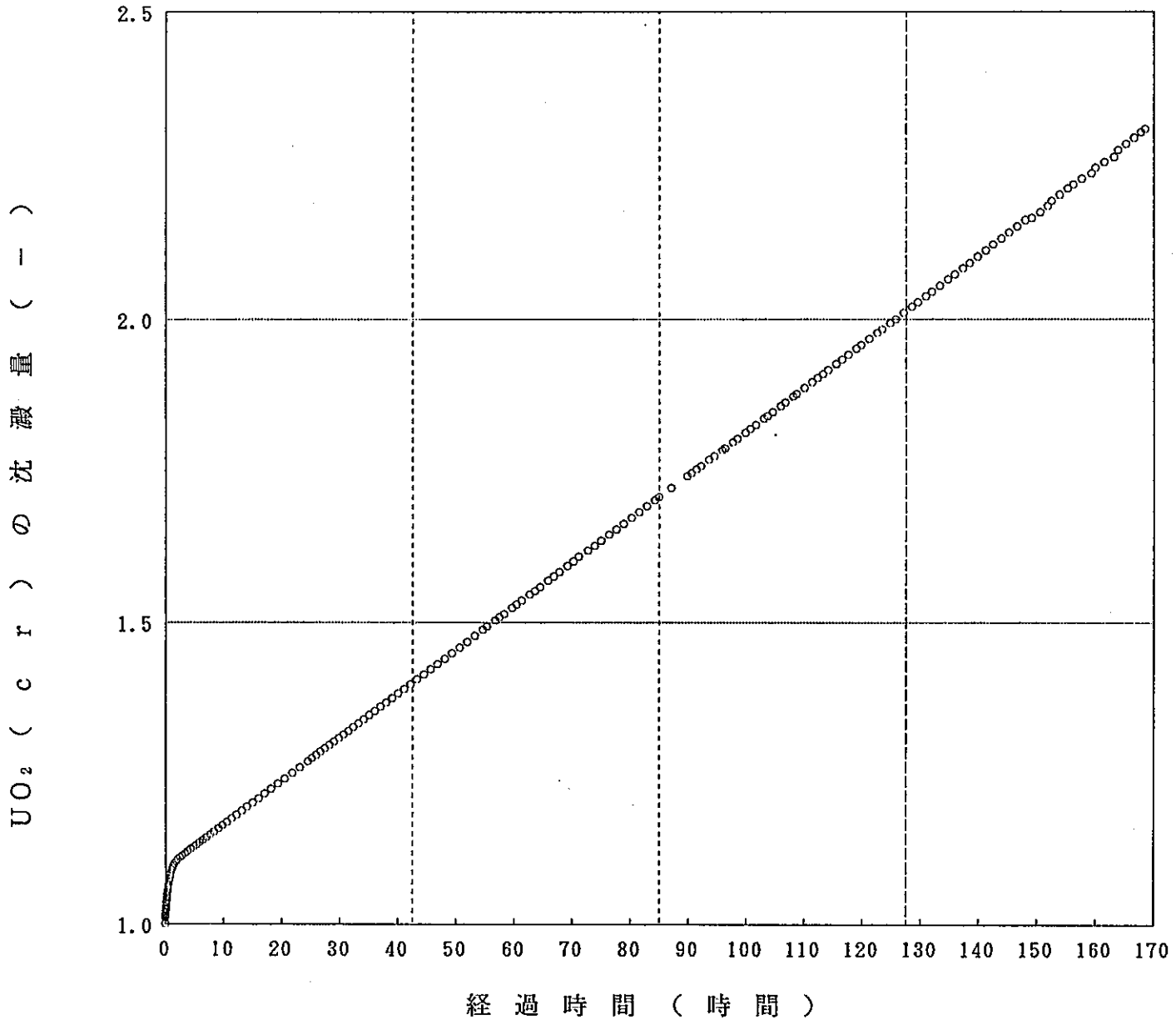


図3.2-9　実験データ解析結果（UO_2（cr）の変化、ケース4）

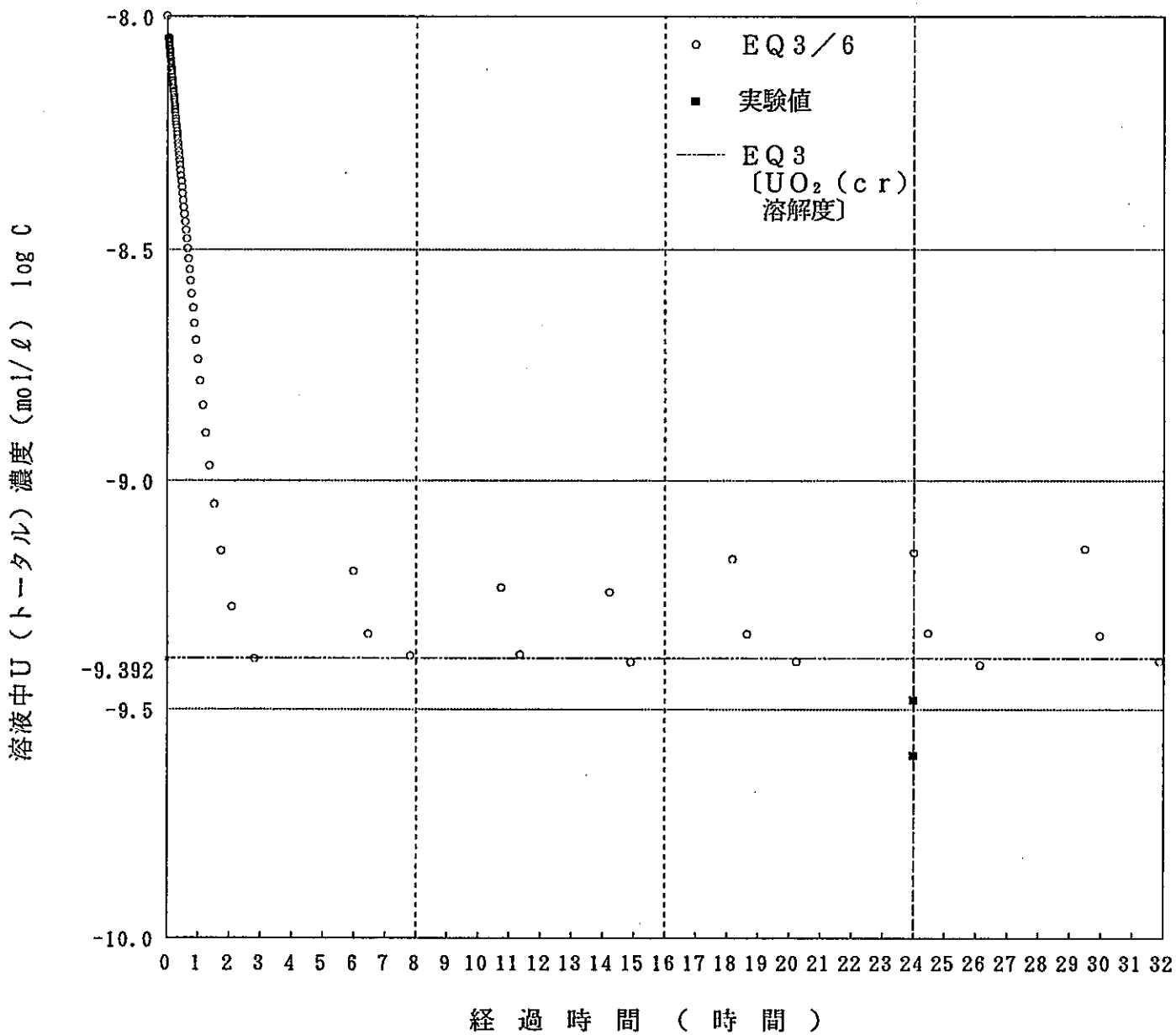


図3.2-10　実験データ解析結果［溶液中のU濃度の変化、ケース5］

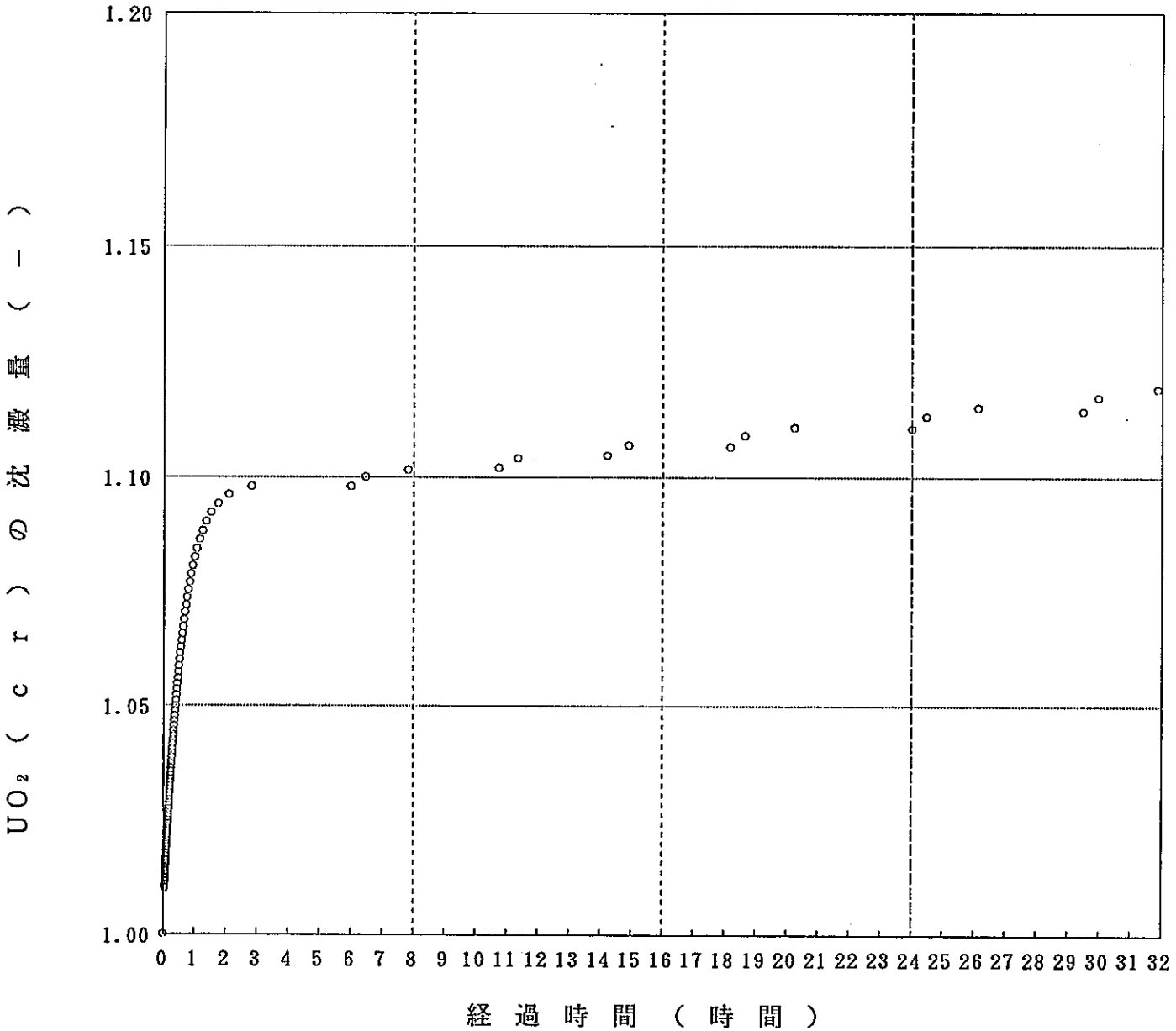


図3.2-11　実験データ解析結果［UO_2（cr）の変化、ケース5］

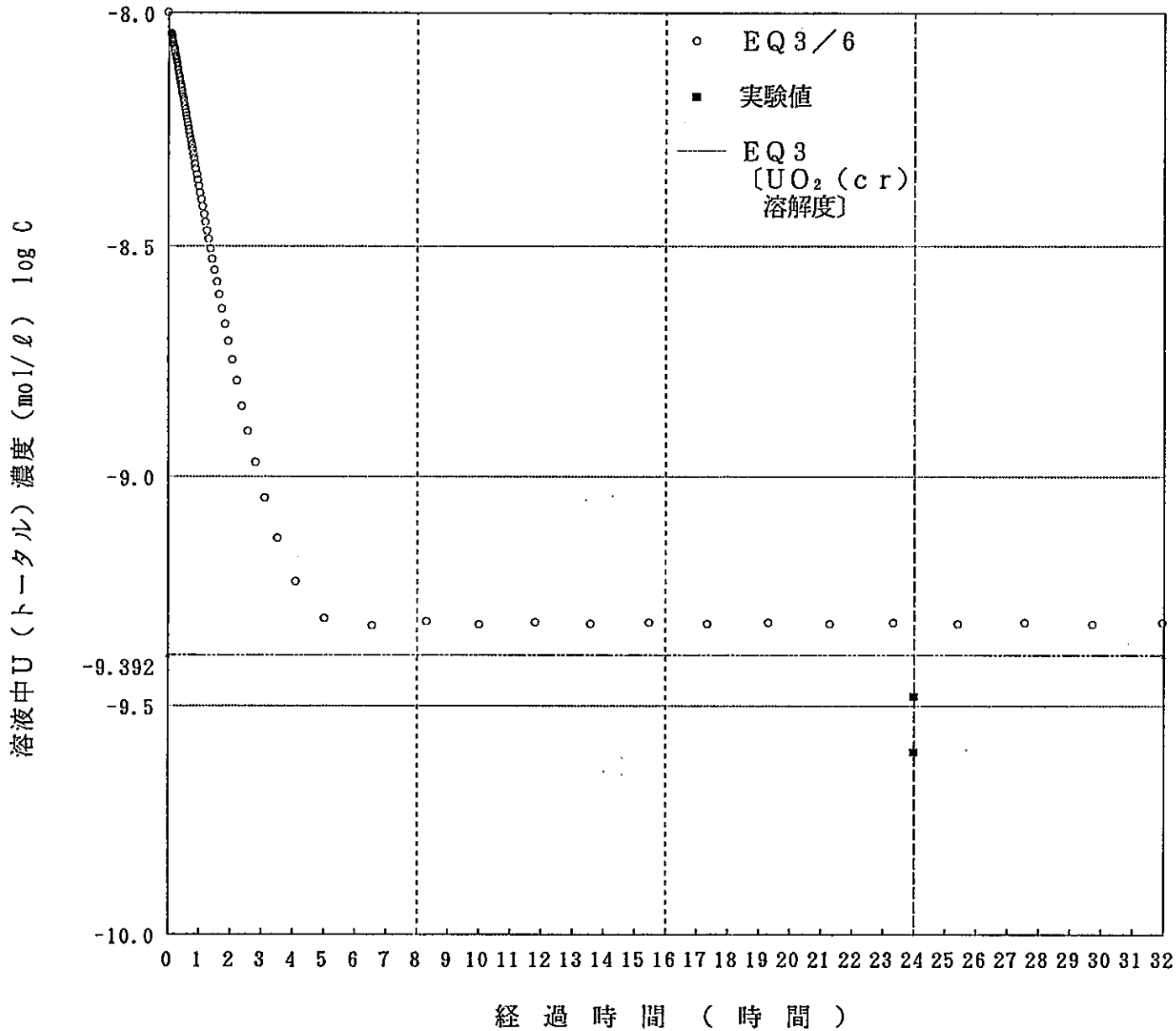


図3.2-12　実験データ解析結果［溶液中のU濃度の変化、ケース6］

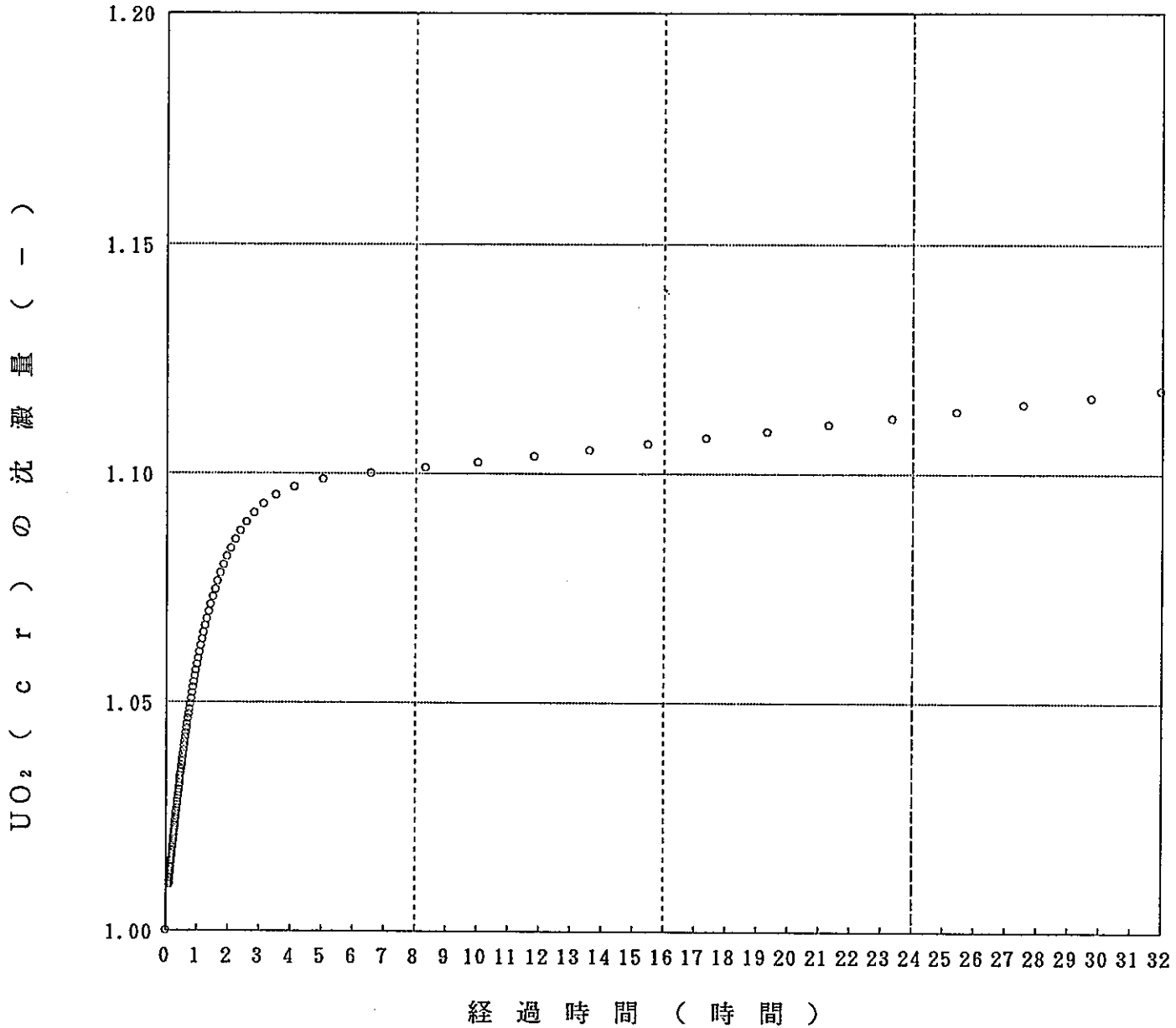


図3.2-13　実験データ解析結果［UO_2（cr）の変化、ケース6］

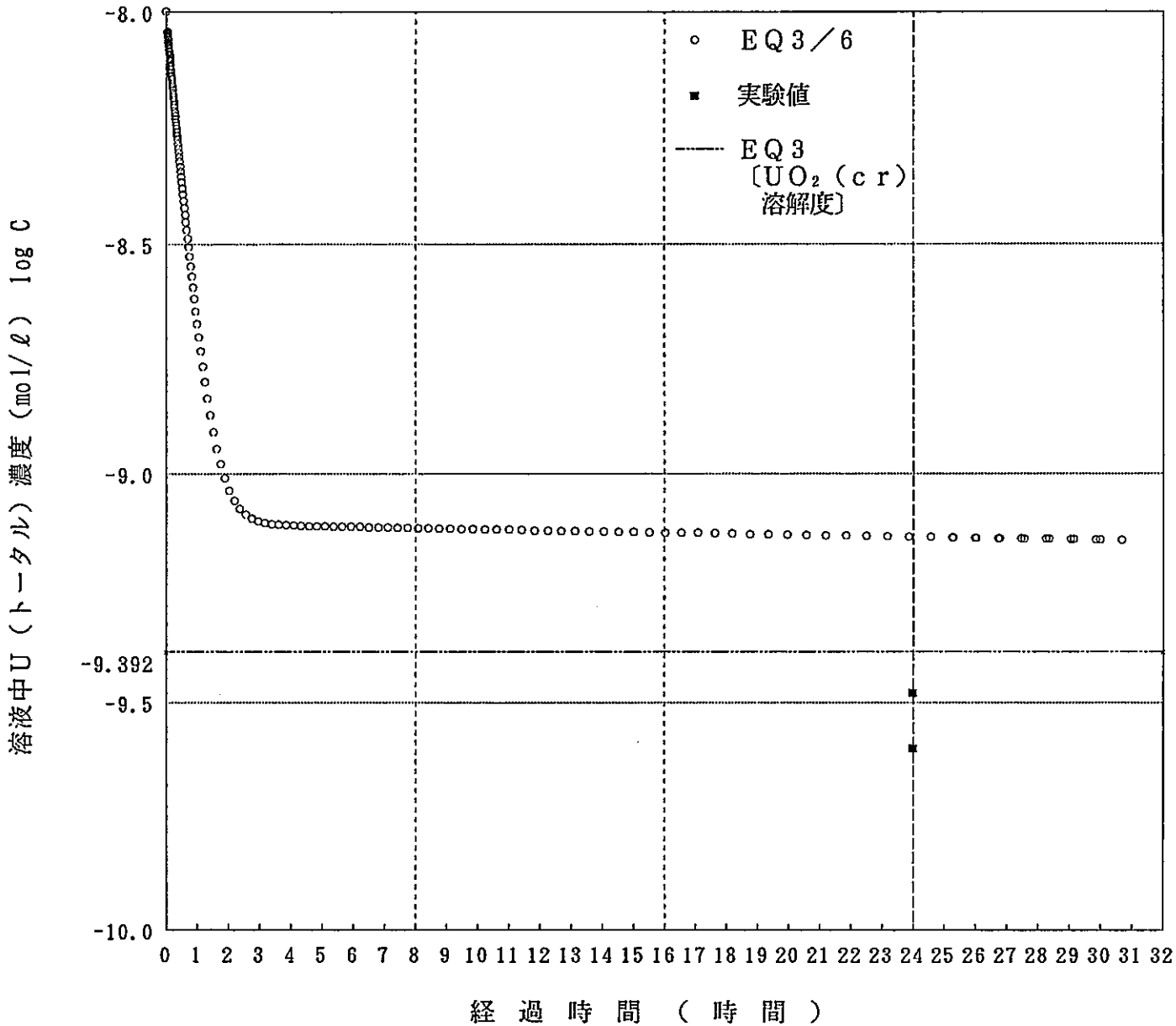


図3.2-14　実験データ解析結果［溶液中のU濃度の変化、ケース7］

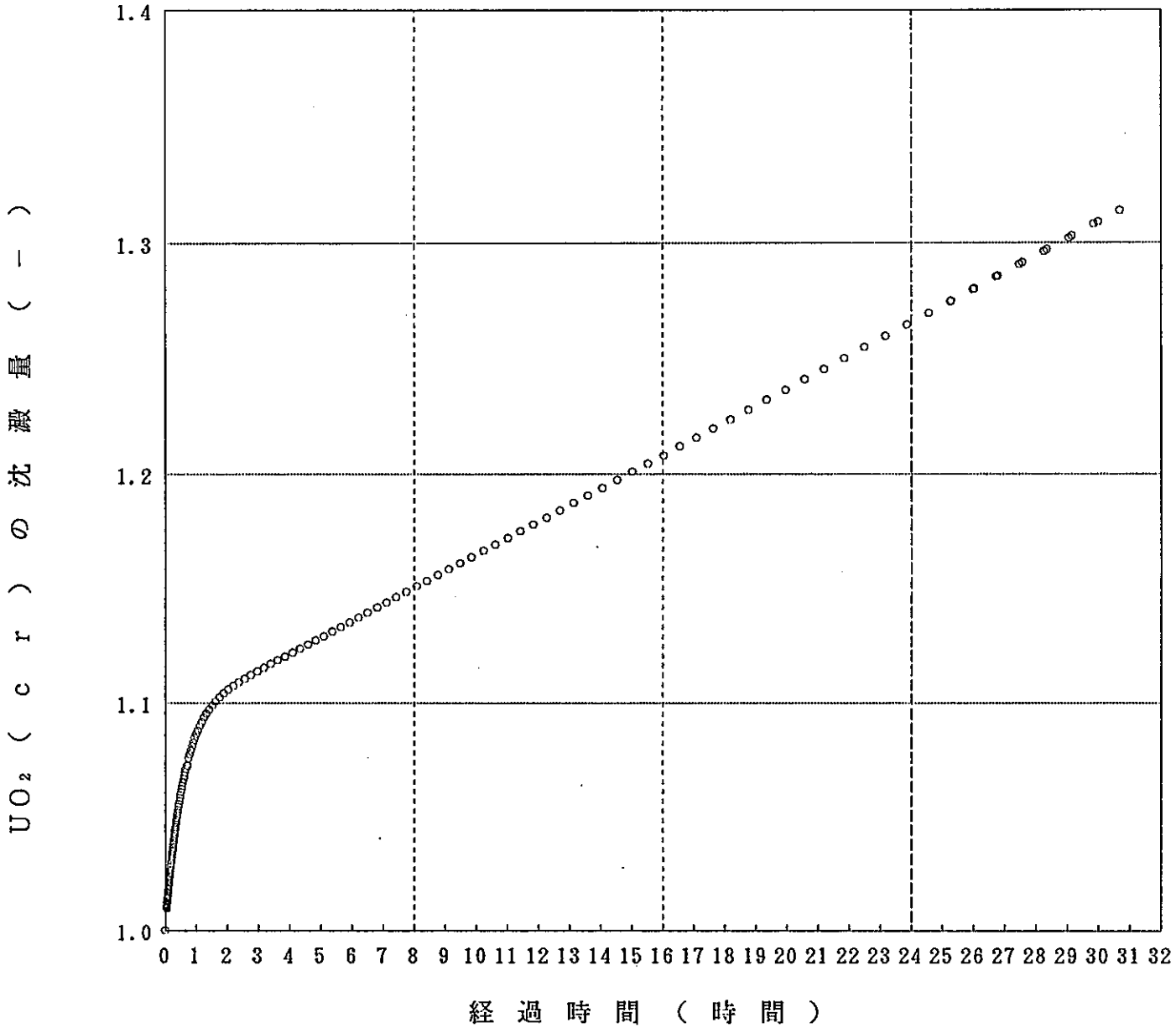


図3.2-15　実験データ解析結果［UO_2（cr）の変化、ケース7］

表3.2-1 (1)　ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

検索条件	
検索システム	： JICST
使用データベース	： NUCLEN (1981.01～1993.03)　1993.10.23現在 324302 件
キーワード	： (酸化ｳﾗﾝ+ｳﾗﾝ鉱)AND(水)AND(溶解OR溶解速度) ⇨ 34 件
	(酸化ｳﾗﾝ+ｳﾗﾝ鉱) ⇨ 5098 件
	(水) ⇨16240 件
	(溶解) ⇨ 1345 件
	(溶解速度) ⇨ 346 件

検索結果

番号	タイトル
1	還元性条件下での閃ｳﾗﾝ鉱の溶解と変質
2	UO_2の水への溶解の放射線損傷による促進
3	花崗岩地下水によるSIMFUELの溶解の研究
4	廃棄物処分の様々な条件下における核燃料(UO_2)の溶解速度の予測
5	無制限量の水に対する使用済燃料の溶解に関する時間の推定
6	UO_2の放射線誘起溶解
7	使用後燃料の処分に係わるUO_2燃料溶解の化学
8	飽和状態でのJ-13水中における混合UO_2粉体の溶解特性
9	100℃において水のｱﾙﾌｧ放射線分解によるUO_2酸化のXPSによる研究
10	使用済核燃料の地中処分の貯蔵室内のU, Np, Pu, Th, Tcの溶解性
11	核燃料廃棄物の安全、永久処分のためのｶﾅﾀﾞのｱﾌﾟﾛｰﾁ
12	核種ﾊﾟﾗﾒﾄﾘｯｸ条件下におけるUO_2の溶解　計算値と実験結果の比較
13	地下水の放射線分解で生成した特定のﾗｼﾞｶﾙによるUO_2燃料の酸化に関する電気化学的、X線光電子分光法的研究
14	使用済CANDU用燃料体から放出されるα粒子のｴﾈﾙｷﾞｰｽﾍﾟｸﾄﾙ

表3.2-1 (2)　ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

番号	タ　イ　ト　ル
15	非照射UO_2燃料ﾍﾟﾚｯﾄの地下水への溶解
16	地質の貯蔵所における使用済燃料の性能分析
17	使用済燃料廃棄物体の長期間の挙動の実験的研究
18	ｳﾗﾝを多く含む高ﾚﾍﾞﾙ放射性廃棄物の固定化
19	Volvic鉱泉水中での固体UO_2の溶解
20	ｶﾅﾀﾞのｵﾝﾀﾘｵ州北部Elliot Lake 地域の水のｳﾗﾝの含有量　ｳﾗﾝ鉱業地域 Geogia BayおよびLake Huron
21	使用済燃料廃棄物携帯の長期間挙動
22	花崗岩地帯の地下水に対する未照射ｳﾗﾝ酸化物の溶解
23	UO_2の溶解　熱力学的検討
24	使用済核燃料廃棄物の評価に使うUO_2の溶解度
25	低ﾚﾍﾞﾙ放射性廃棄物によって汚染された地域のための地質化学的情報　I Niagara Falls 貯蔵施設
26	使用済燃料処分における地下水組成の影響
27	ｳﾗﾝの酸化　水との反応による酸化物の赤外線および収着分析による特性化
28	Elliot Lakeの廃石の一時的振舞に関しての地球化学的管理の関係
29	地下水中における照射UO_2燃料の溶解
30	UO_2および使用済燃料の溶解機構
31	放射性廃棄物の地層処分
32	ｶﾞﾝﾏ線の場における酸化ｳﾗﾝの溶解
33	液体金属高速増殖炉(LMFBR)の燃料-ﾅﾄﾘｳﾑｴｱﾛｿﾞﾙの溶解特性
34	4.75% 濃縮UO_2燃料棒の溶解および貯蔵実験

表3.2-1 (3)　ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

文献番号: 1
ﾀｲﾄﾙ　: 還元性条件下での閃ｳﾗﾝ鉱の溶解と変質
Dissolution and alteration of uraninite under reducing conditions.
著者　: JANECZEK J, EWING R C (Univ. New Mexico , NM , USA)
雑誌名　: J Nucl Mater VOL.190 PAGE.157-173 , 1992
概要　:

食塩性熱水の還元性条件下では閃ウラン鉱は溶解し，鉛あるいはＹ＋ＨＲＥＥを失い，コフィナイトに変質する。溶解した閃ウラン鉱の組織はこれらの変質プロセスをよく留めており，粘土母相の中に粒界，腐食した残存鉱物が見られ，閃ウラン鉱の代わりに粘土や硫化物が満たしている。Ｏｋｌｏ（Ｇａｂｏｎ）及びＣｉｇａｒ　Ｌａｋｅ（Ｃａｎａｄａ）の天然原子炉といわれる地域から採取した閃ウラン鉱試料は組織，化学組成が良く似ており，恐らく約２００℃の食塩性弱酸性溶液によって溶解し，イライトを析出した

文献番号: 2
ﾀｲﾄﾙ　: UO_2の水への溶解の放射線損傷による促進
Radiation damage-enhasnced dissolusion of UO_2 in water.
著者　: MATZKE H(Joint Research Center, Commission of the European Communities, Karlsruhe, DEU)
雑誌名　: J Nucl Mater VOL.190 PAGE.101-106 , 1992
概要　:

ＵＯ２の水への浸出挙動は使用済み燃料の直接貯蔵の観点から重要である。ＵＯ２は損傷程度が高くても構造的に安定であることが知られている。しかし，本実験によれば，ＲｂやＫｒを３～５ａｔ％まで，損傷レベル換算で２０ｄｐａまでイオン注入したＵＯ２では，２０℃と９０℃での浸出率は一桁大きくなることが分かった

文献番号: 4
ﾀｲﾄﾙ　: 廃棄物処分の様々な条件下における核燃料(UO_2)の溶解速度の予測
The prediction of nuclear fuel(UO_2) dissolution rates under waste disposal conditions.
著者　: SHOESMITH D W,SUNDER S (AECL Research, Manitoba, CAN)
雑誌名　: J Nucl Mater VOL.190 PAGE. 20- 35 , 1992
概要　:

種々の酸化剤（溶解酸素，過酸化水素，水のγ線あるいはα線分解生成物）を含む溶液中におけるＵＯ２の陽極溶解の定常状態電気化学電流を測定し，外挿して溶解速度を予測した。酸化溶解が化学溶解に比して無視できるほど小さくなるしきい値は～２×１０－４μｇｃｍ－２ｄ－１と見積もった。この値はＣＡＮＤＵに使われる燃料がγ線分解により溶解する速度がしきい値に下がるのは約２００年後で，チタン製廃棄物容器の寿命（約１２００年）よりもはるかに短いことを示す

表3.2-1 (4)　ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

文献番号: 5
タイトル　: 無制限量の水に対する使用済燃料の溶解に関する時間の推定
Estimating the time for dissolution of spent fuel exposed to unlimited water.
著者　: LEIDER H R, NGUYEN S N, STOUT R B, WEED H C (LLNL)
雑誌名　: PO998A US DOE Report PAGE.15　, 1991
概要　:

使用済燃料（ＳＦ）からの放射性核種の放出量推定は満足する溶解モデルがないため正確には推定できない。しかしＵＯ２やＳＦの温度や水組成の関数として溶解速度が利用できる。これと燃料要素で実測した核種分析を用いて使用済燃料の溶解時間推定の計算を行い，ｃｍサイズ粒子の全溶解時間は２５℃で５．５×１０４年と推定した

文献番号: 6
タイトル　: UO_2の放射線誘起溶解
Radiation induced dissolution of UO_2 in water.
著者　: CHRISTENSEN H(Studsvik Nuclear, Nykoeping SWE)
雑誌名　: K910567(1-55899-104-2) Sci Basis Nucl. Waste Manage 14 PAGE.213-220　, 1991
概要　:

本研究では酸化作用をするラジカルの影響を適当なスカベンジャーを使用して別々に研究した。ＵＯ２の研磨試料を水に浸し，室温でＣｏ－６０γ線を照射した。溶解あるいは試料表面以外に沈澱したウランの量を測定し，表面酸化を測定した

文献番号: 7
タイトル　: 使用済燃料の処分に係わるUO_2燃料溶解の化学
Chemistry of UO_2 fuel dissolution in relation to the disposal of used nuclear fuel.
著者　: SUNDER S, SHOESMITH D W(AECL Research)
雑誌名　: P0900A (0067-0367) At Energy Can Ltd　PAGE.48　, 1991
概要　:

核廃棄物地中処分場内でのＵＯ２使用後燃料の溶解速度を推定するための，最適モデルを選択するに必要な化学情報をまとめた。すなわち，各種ウラン酸化物の固相構造，地下水中でのＵＯ２の酸化と溶解の特徴と機構の考察，酸化性条件下でＵＯ２の溶解を左右する因子の要約，酸化と溶解に対する各種酸化剤と水の放射線分解の影響，二次相形成の効果などである

表3.2-1 (5)　ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

文献番号: 8
ﾀｲﾄﾙ　: 飽和状態でのJ-13水中における混合UO_2粉体の溶解特性
Dissolution characteristics of mixed UO_2 powders in J-13 water under saturated conditions.
著者　: VELECKIS E, HOH J C(ANL)
雑誌名 : PO998A US DOE Report PAGE.29　　, 1991
概要　:

ＡＮＬのＹｕｃｃａ山計画／使用済燃料計画は廃棄物処分施設地下水に高レベル廃棄物がつかった場合に渚核種の浸出を知るため計画されている。使用済燃料での経験を得るため１４．３％濃縮ウラン粉体ＵＯ２を用い室温で予備実験を行った。粉体は溶解促進のために用い，さらに同位体希釈分析を溶解速度決定に用いられるように開発し，溶解特性決定に用いた

文献番号:19
ﾀｲﾄﾙ　: Volvic鉱泉中での固体UO_2の溶解
著者　: LAHALLE M P, FRANCO P, TROCELLIER P, KRUPA J C, GENET M, ALLEN G, HOLMES　N (Inst. Physique Nucl. aire, Orsay, FRA)
雑誌名 : B0611B(CHDCA)(0249-6305) C R cad Sci. Ser. 2
VOL.307, NO.10, PAGE.1163-1166 , 1988
概要　:

水溶液中に溶解した固体ＵＯ２の表面分析をＸ線光電子分光法で行い，溶解量を蛍光光度計によって求めた。９０°ＣのＶｏｌｖｉｃ鉱泉水に溶解させたＵＯ２の表面にはマグネシウムとけい素が多く含まれる層が形成されていることが分かり，脱イオン溶液中よりも１０３～１０４の比率でウランの溶解量が少なくなっていることが分かった

文献番号:23
ﾀｲﾄﾙ　: UO_2の溶解　熱力学的検討
The bdissolution of UO_2.　A thermodynamic approach.
著者　: GARISTO N C, GARISTO F(Atomic Energy of Canada Ltd., Manitoba,CAN)
雑誌名 : B0898C (0191-815X) Nucl. Chem Waste Manage
VOL.6, NO.3/4, PAGE.203-211　,1986
概要　:

ＣＡＮＤＵ炉の使用済核燃料の地中貯蔵では，９８％以上存在するＵＯ２の水による溶解が重要な検討事項となっている。したがって，コンピュータを使って，ＵＯ２の酸化溶解を熱力学的に解析し，実験値と比較した。反応に関与した酸素量と酸化過程が，種々のｐＨ，錯イオン濃度，温度（室温と１００°Ｃ）の関数として検討された。熱力学的計算結果と実験値との間には，良い一致があり，使用済燃料の処分の際の環境安全評価のソースタームとして利用できるものであるが，溶解機構や熱力学の動的解析は，今後の課題として残されている

表3.2-1 (6)　ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

文献番号:24
ﾀｲﾄﾙ　: 使用済核燃料廃棄物の評価に使うUO_2の溶解度
A UO_2 solubility function for the assessment of used nuclear fuel disposal.
著者　: GARISTO F, GARISTO N C(Atomic Energy of Canada Ltd.)
雑誌名　: D0212A(NSENA)(0029-5639) Nucl Sci Eng
VOL.90, NO.1, PAGE.103-110 , 1985
概要　: 使用ずみ核燃料を地下どうに廃棄処分として貯蔵中燃料被覆管が破損して地下水が燃料と接触した場合，使用済燃料から放射性核種が放出されるプロセスは複雑であるが，大別すれば第一は燃料と被覆管のすき間，燃料粒子間のＣｓ，Ｉなどの核分裂生成物が短時間のうちに放出されるものでその量は燃焼度によって変る。第二は燃料マトリクスの分解によって放射性核種がゆっくり放出されるものに分かれる。このうち第二のプロセスについて燃料ＵＯ２の水の温度，ｐＨ，酸化ポテンシャル，アニオン（Ｃ，Ｐ，Ｓ，Ｃｌの酸化物）濃度に対する溶解挙動をＵＯ２の熱力学を使い，厳密な数式で示した。ＵＯ２の熱力学的データの不確かさをへらす評価もした

文献番号:30
ﾀｲﾄﾙ　: UO_2及び使用済燃料の溶解機構
Dissolution mechanisms for UO_2 and spent fuel.
著者　: WANG R, KATAYAMA Y B, (PNL, Washington)
雑誌名　: B0898C(0191-815X) Nucl Chem Waste Manage
VOL.3, NO.2, PAGE.213-220 , 1991
概要　:

オートクレーブ及び電気化学的実験により酸化と溶解の加速試験を行ない，ＵＯ２及び使用済燃料の溶解機構について調べた。ＵＯ２の溶解は主としてＵ＋４（固相）がＵ＋６（液相）に酸化されることによって進行する。Ｕ＋６は，まずＵＯ２＋２の形で溶けるが，その後の加水分解反応で固体の水酸化ウラニルができ，容器の表面に付着し，ＵＯ２の溶解速度は，溶液中のウラン含有量によって単純には決められないことになる。使用済燃料の溶解機構もＵＯ２と同様であった

表3.2-1 (7)　ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

検索条件	
検索システム　：JICST	
使用データベース：JICST7580 (1975.01～1980.12) 1989.12.22現在2196414 件	
キーワード　：(酸化ｳﾗﾝ+ｳﾗﾝ鉱+ｳﾗﾝ鉱床+ｳﾗﾝ鉱物)AND(水)	
AND(溶解OR溶解速度)	⇨ 16 件
(水)	⇨87927 件
(溶解)	⇨16644 件
(溶解速度)	⇨ 1598 件

検索結果

番号	タイトル
1	りん酸塩生産のより良い展望
2	核分裂生成物の放出　1979年 7月 1日～ 9月30日
3	酸化ｳﾗﾝと希硫酸溶液との相互作用
4	ｳﾗﾆｳﾑ溶解鉱山における地下水ﾓﾆﾀﾘﾝｸﾞの方法
5	核分裂生成物の放出　1979年 4月 1日～ 6月30日
6	ﾜｲｵﾐﾝｸﾞ州のｳﾗﾝ鉱床内浸出鉱山に対する諸法規
7	水溶液に対する固体溶解の速度と機構に影響を与える若干の要因
8	ﾗﾄﾞﾝ、ﾗｼﾞｳﾑの検出はｳﾗﾝをさく孔する効率を増大させる
9	水中ｳﾗﾝｰﾄﾘｳﾑ酸化物の放射線損傷
10	原子力ﾎｰﾑｽﾃｰｸ合同会社における溶解採掘による古い切羽の浸出について
11	米国のｳﾗﾝ生産におけるさく孔浸出の影響について
12	火山堆積物のウランと続成作用
13	新しいｰｳﾗﾝ鉱・溶解ﾌﾟﾛｾｽ
14	Teggau湖の過剰の4He:ｳﾗﾝ鉱体の可能性
15	三酸化ｳﾗﾝと塩酸の相互作用による生成物の熱化学的および分光学的ｰﾙﾐﾈｾﾝｽ的研究
16	燃料-冷却材相互作用の模型

表3.2-1 (8)　ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

文献番号：7
ﾀｲﾄﾙ　：水溶液に対する固体溶解の速度と機構に影響を与える若干の要因
著者　：ＭＥＤＶＥＤＥＶ　Ａ　Ｃ
雑誌名　：Nauchn Tr Moskvskij Inst Stali Splavov
NO.117, PAGE.5-10　, 1979
概要　：

特に，表面欠陥上の固体と溶媒の反応または超音波，イオン化，紫外線照射及びメカノ化学的転化で起るラジカル生成物の溶解への関与に注目。水に対するＫ２ＳＯ４及び硫酸に対する酸化ウランの溶解に関する実験データにより，固体の構造欠陥，表面の性質，溶媒の放射線分解生成物の溶解速度に及ぼす影響を解明

表3.2-1 (9)　ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

検索条件	
検索システム	: JICST
使用データベース	: JICST (1981.01～1993.15)　1993.10.30現在　6765911 件
キーワード	: (ｳﾗﾝ鉱物+ｳﾗﾝ鉱床)AND(水)AND(溶解OR溶解速度) ⇨ 3 件
	(水) ⇨ 252837 件
	(溶解) ⇨ 18346 件
	(溶解速度) ⇨ 5604 件

検索結果

番号	タイトル
1	地質学的媒体中での放射性廃棄物の隔離に関連した、変成岩ｳﾗﾝ鉱床中におけるｳﾗﾝ移動の挙動
2	米国,ﾜｼﾝﾄﾝ州北東部における有機物に富む表層ｳﾗﾝ堆積物周辺の水の地球化学
3	噴出したばかりの火山灰からのｳﾗﾝおよびその他の元素の溶脱率

表3.2-1 (10) ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

検索条件	
検索システム	: JICST
使用データベース	: JICST (1981.01～1993.15) 1993.10.30現在 6765911 件
キーワード	: (酸化ｳﾗﾝ+ｳﾗﾝ鉱)AND(水)AND(溶解OR溶解速度) ⇨ 37 件
	NUCLENと重複しないもの ⇨ 3 件
	(水) ⇨ 252837 件
	(溶解) ⇨ 18346 件
	(溶解速度) ⇨ 5604 件

検索結果	
番号	タイトル
1	核燃料廃棄物管理概念評価に用いるUO_2燃料溶解ﾓﾃﾞﾙを選択するための基準の決定
2	ほうけい酸塩ｶﾞﾗｽの耐久性に対する数種の酸化物の影響
3	塩酸を含むﾌﾞﾗｲﾝによるｳﾗﾝ鉱の浸出

表3.2-1 (11) ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

検索条件	
検索システム	: CA (Chemical Abstract)
キーワード	: (URANINITE) AND (H2O OR WATER OR AQUEOUS) AND (DISSOLUTION OR SOLUTION) ⇨ 4 件

検索結果	
No	タイトル
1	Application of mineral-solution equilibria to geochemical exploration for sandstone-hosted uranium deposits in two basins in west central Utah
2	Ground water prospecting for sandstone-type uranium deposits: a preliminary comparison of the merits of mineral-solution equilibriums, and single-element tracer methods
3	Uranium solution-neral-solution equilibria to geochemical exploration for sandstone-hosted uranium deposits in two basins in west central Utah
4	A kinetic study of the dissolution of uraninite

表3.2-1 (12) ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

文献番号: 4
ﾀｲﾄﾙ : A kinetic study of the dissolution of uraninite
著者 : Grandstaff, D. E. (Dep. Geol., Temple Univ.)
雑誌名 : Econ. Geol. Bull. Soc. Econ. Geol., 71(8), 1493-506
53-1(Mineralogical and Geological Chemistry)
概要 :

(1976年)

The kinetics of ***uraninite*** [***1317-99-3***] dissoln. in ***water*** was detd.: R = -d(uran)/ dt = 1020.25(SS) (RF)-1(10-3.38-10.8NOC) (a.SIGMA.CO2)(DO)(aH+)exp(-7045/T)/day, where R is the rate of dissoln. reaction, SS is the specific surface area (cm2/g), RF is an org. retardation factor, NOC is the mole fraction of nonuranium cations in the ***uraninite*** , DO is the dissolved O content of the ***water*** in ppm, .SIGMA.CO2 is the total dissolved carbonate, d(uran)/dT is the appearance of ions dissolved from ***uraninite*** in soln. as a function of time, and T is the abs. temp. This data may be used to det. the factors influencing oxidn. of ***uraninite*** and the resulting mobility of U in natural waters.

文献番号: 1
ﾀｲﾄﾙ :

著者 :
雑誌名 :
概要 :

表3.2-1 (13) ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

検索条件	
検索システム	: DIALOG
データベース	: FILE 103:ENERGY SCIENCE & TECHNOLOGY 1974-9310B2 FILE 6:NTIS 1964-1993/Nov B2 FILE 8:EiCompendex*Plus(TM) 1970-1993/Nov W2 FILE 109:NSA (NUCLEAR SCIENCE ABSTRACTS) 1948-1976
キーワード	: (URANIUM DIOXIDE + OXIDE) * (H2O + WATER + AQUEOUS) * (DISSOLUTION + SOLUTION)(2N)(RATE + VELOCITY + KINETICS) ⇨ 100 件

検索結果	
No	タイトル
1	The dissolution rate of UO_2 in the alkaline regime under oxidizing conditions using a simplified ground water analog
2	UO_2 dissolution rate : A review
3	Reactivity effects in the oxidative dissolution of UO_2 nuclear fuel
4	The prediction of nuclear fuel UO_2 dissolution rates under waste disposal conditions
5	Effects of air oxidation on the dissolution rate of LWR spent fuel
6	An electrochemistry-based model for the dissolution of UO_2
7	Chemistry of UO_2 fuel dissolution in relation to the disposal of used nuclear fuel
8	Dissolution rates of as-received and partially oxidized spent fuel
9	Dissolution of UO_2 powders in nitric acid

表3.2-1 (14) ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

No	タ イ ト ル
10	Fuel dissolution rate and its mechanism
11	Estimating the time for dissolution of spent fuel exposed to unlimited water
12	Photodeposition of uranium oxides onto TiO_2 from aqueous uranyl solutions
13	The kinetics of dissolution of UO_2 under redicing conditions and the influence of an oxidized surface layer (UO_2^{+x}) : Application of a continuous flow-through reactor
14	The effect of pH on the corrosion of nuclear fuel (UO_2) in oxygenated solutions
15	Assessment of the performance of used fuel under disposal conditions
16	Spent fuel waste form characteristics : Grain and fragment size statistical dependence for dissolution responce (Yucca Mountain Project)
17	Dissolution characteristics of mixed UO_2 powders in J-13 water under saturated conditions
18	The effect of precipitation on radionuclide release from used fuel
19	UO_2 matrix dissolution rates and grain boundary inventories of Cs , Sr , and Tc in spent LWR fuel
20	Effects of water composition on the dissolution rate of UO_2 under oxidizing conditions
21	Dissolution of UO_2 at various parametric conditions A comparison between calculated and experimental results
22	Anodic oxidation of UO_2. V.Electrochemical and x-ray photoelectron spectroscopic studies of film growth and dissolution in phosphate-containing solutions

表3.2-1 (15) ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

No	タ イ ト ル
23	Chemical state of AUPuC and OCOM mixed oxide at different stage of the nuclear fuel cycle
24	Study of the bibliography relative to UO_2 dissolution kinetics in nitric acid
25	Dissolution mechanism of UO_2 at various parametric conditions
26	Effect of precipitation on the long-term release of radionuclides from used fuel
27	Influence of polycarboxylic acid chelaing agents on the kinetics of the dissolution of metal oxides
28	Effect of complexones dissolution kinetics of metal oxides
29	Spent fuel as a wasteform. The Swedish program for studies and evaluation of spent fuel for direct disposal
30	Long-term performance of materials used for high-level waste packaging. Second quarterly report, year four, July-September 1985. Volume 2
31	Potential effect of water influx on the dissolution rate of UO_2 in spent fuel at the Yucca Mountain, Nevada site
32	Source term modelling in the Swedish KBS-3 study
33	The dissolution of unirradiated UO_2 fuel pellets under simulated disposal conditions
34	Immobilization of Three-Mile Island core debris
35	Zirconium in the nuclear industry

表3.2-1 (16) ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

No	タ イ ト ル
36	Dissolution rate of U_3O_8 powders in nitric acid
37	Canadian studies on the corrosion behaviour of nuclear fuel waste forms
38	A kinetic model of UO_2 dissolution in acid, H_2O solution that includes iranium peroxide hydrate precipitation
39	Dissolution of irradiated UO_2 fuel in groundwater
40	Effects of ionizing radiation on HLW glasses
41	UO_2 magnetite concrete interaction and penetration study (PWR BWR)
42	Pertial-equilibrium model based on the kinetics of dissolution and equilibrium in solution of the UO_2-FeS_2-Fe_2SO_4-H_2SO_4 system
43	Dissolution fraction and falf-times of single source yellowcake in simulated lung fluids
44	Electrochemical methods for leaching of spent fuel
45	Dissolution of uranium oxides in the gamma-radiation field
46	Comparison of physical chemical properties of powders and respirable aerosols of industrial mixed uranium and plutonium oxide fuels. Tec. rep
47	Probable leaching mechanisms for spent fuel
48	Spent-fuel special-studies progress report : probable mechanisms for oxidation and dissolution of single-crystal UO_2 surface

表3.2-1 (17) ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

No	タ イ ト ル
49	Hydrogen peroxide leaching of uranium in carbonate solutions
50	Dilute chemical decontamination program.
51	Chemical Engineering Division Fuel Cycle Programs
52	Investigation of oxidation and dissolution processes of uranium compounds in non-aqueous media. 8.Oxidation and dissolution of uranium dioxide in HNO_3 solvates with oxygen-containing solvents
53	Factor influencing the solution rate of uranium dioxide under conditions applicable to in situ leaching.
54	Fission product release. Progress report, July 1-September 30,1979
55	Fission product release. Progress report, April 1-June 30,1979
56	Study of the dissolution velocity of dispersed solid particles. Development of a calculation method for analyzing the kinetic curves. Extension to the study of composed kinetics
57	Fission product release. Progress report, October 1-December31,1978
58	Fission gas bubble distribution in a mixed oxide test reactor fuel pin
59	Diffusion of nuclides of low solubility from a copper capsule after penetration through a hole in the capsule
60	Light water reactor fuel reprocessing : dissolution studies of voloxidized fuel
61	Kinetics of dissolution of ..beta..-uranium trioxide in acid and carbonate solutions

表3.2-1 (18) ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

No	タ イ ト ル
62	Dissolution of oxides of uranium in sodium carbonate solutions
63	UO_2 matrix dissolution rates and grain boundary inventories of Cs, Sr, and Tc in spent LWR fuel
64	Effect of water composition on the dissolution rate of UO_2 under oxidizing conditions
65	Dissolution mechanism of UO_2 at various parametric conditions
66	The chemical state of AUPuC and OCOM mixed oxide at different stage of the nuclear fuel cycle
67	Potential effect of water influx on the dissolution rate of UO_2 in spent fuel at the Yucca Mountain, Nevada Site
68	Dissolution experiments of unirradiated uranium dioxide pellets
69	Autoclave system for uranium oxide dissolution experiment
70	Dissolution of Irradiated UO_2 fuel in groundwater
71	Pertial-equilibrium model based on the kinetics of dissolution and equilibrium in solution of the UO_2-FeS_2-Fe_2SO_4-H_2SO_4 system
72	Spent-fuel special-studies progress report : probable mechanisms for oxidation and dissolution of single-crystal UO_2 surface
73	Comparison of physical chemical properties of powders and respirable aerosols of industrial mixed uranium and pultonium oxide fuels
74	Factor influencing the solution rate of uranium dioxide under conditions applicable to in situ leaching.

表3.2-1 (19) ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

No	タ イ ト ル
75	Reactivity effects in the oxidative dissolution of UO_2 nuclear fuel
76	Prediction of nuclear fuel UO_2 dissolution rate under waste disposal conditions
77	Electrochemistry-based model for the dissolution of UO_2
78	STUDY OF FURTHER PURIFICATION OF PLUTONIUM ENRICHED FUEL ELEMENTS.
79	DEVELOPMENT OF AQUEOUS PROCESSES FOR LMFBR FUELS
80	PL/K METHOD FOR SOLUTION OF THE ONE-VELOCITY TRANSPORT EQUATION IN DOUBLY-PERIODIC LATTICES OF FUEL ELEMENTS.
81	AQUEOUS PROCESSING OF THORIUM FUELS.
82	SALT PHASE CHLORINATION OF REACTOR FUELS.
83	DISSOLUTION OF BeO-AND Al_2O_3-BASED REACTOR FUEL ELEMENTS. PART 1
84	CHEMICAL TECHNOLOGY DIVISION UNIT OPERATIONS SECTION MONTHLY PROGRESS REPORT , APRIL 1961
85	APPLICATIONS OF ULTRASONIC ENERGY. TASK 1: ULTRASONIC CHEMICAL PROCESSING. TASK 2:ULTRASONIC METAL AND CERAMIC POWDER PROCESSING. TASK 3:ULTRASONIC INSTRUMENTATION
86	SINGLE-BEAM GAMMA ABSORPTIOMETER
87	THE ZIRFLEX PROCESS TERMINAL DEVELOPMENT REPORT

表3.2-1 (20) ウランの溶解・沈澱速度に関する文献検索結果

No	タ イ ト ル
88	CHEMICAL TECHNOLOGY DIVISION, UNIT OPERATIONS SECTION MONTHLY PROGRESS REPORT , APRIL 1960
89	CHEMICAL TECHNOLOGY DIVISION, CHEMICAL DEVELOPMENT SECTION B MONTHLY PROGRESS REPORT , JANUARY 1960
90	CHEMICAL TECHNOLOGY DIVISION, UNIT OPERATIONS SECTION MONTHLY PROGRESS REPORT , JULY 1960
91	HOMOGENEOUS REACTOR PROGRAM QUARTERLY PROGRESS REPORT FOR PERIOD ENDING , JULY 31, 1960
92	PROCESS DEVELOPMENT QUARTERLY REPORT, PART 1. LABORATORY WORK
93	TECHNOLOGY OF NON-PRODUCTION REACTOR FUELS REPROCESSING BUDGET ACTIVITY 2790 QUARTERLY REPORT
94	CHEMICAL TECHNOLOGY DIVISION, UNIT OPERATIONS SECTION MONTHLY PROGRESS REPORT , MAY 1959
95	QUARTERLY REPORT ON TECHNOLOGY OF NON-PRODUCTION REACTOR FUELS REPROCESSING BUDGET ACTIVITY 2790
96	SOLID STATE DIVISION ANNUAL PROGRESS REPORT FOR PERIOD ENDING AUGUST 31, 1959
97	A PRELIMINARY STUDY OF PRE-SOLVENT EXTRACTION TREATMENT OF STAINLESS STEEL-URANIUM FUELS WITH DILUTE AQUA REGIA
98	AQUEOUS HOMOGENEOUS REACTOR FUEL TECHNOLOGY
99	RESUME OF URANIUM OXIDE DATA--VII
100	KINETICS OF DISSOLUTION OF UO_2 IN SULFURIC ACID.

表3.2-2　　文献調査結果のまとめ

文献番号	
タイトル	Uranium(IV) Hydrolysis Constants and Solubility Product of $UO_2 \cdot xH_2O$(am)
著者	Dhanpat Rai , A.R.Felmy , and J.L.Ryan
雑誌名	Inorg. Chem. , 1990 , 29 , 260-264

概要：　$UO_2 \cdot xH_2O$(am)の溶解度を室温、pH 2～12の希薄溶液中で実験している。O_2を有効に取り除き、かつU(IV) からU(VI) への酸化状態の可能性を最小にすべく還元条件を保持するため鉄粉とEu^{2+}を使用している。$UO_2 \cdot xH_2O$は X線によりアモルファスであることを確認しており、この試料の溶解度は、pH>4 においてこれまでに報告されている値よりも 3～ 4桁小さいことを確認している。本文献の溶解度データに基づく熱力学の解析では、以下に示す溶解反応

$$UO_2 \cdot xH_2O(am) + 3H^+ \Leftrightarrow UOH^{3+} + (x+1)H_2O$$

でイオン強度0において3.5±0.8の平衡定数を得ている。

本文献は溶解速度に関する文献ではないが、還元条件下での試験を実施していることから、実験方法等を参考にするために調査したものである。

表3.2-3　　文献調査結果のまとめ

文献番号	
タイトル	Estimating the Time for Dissolution of Spent Fuel Exposed to Unlimited Water
著者	H.R.Leider , S.N.Nguyen , R.B.Stout , H.C.Weed (Lawrence Livermore National Laboratory)
雑誌名	UCRL-ID-107289 December 1991

概要：　本文献では、使用済燃料の溶解時間を計算するため、使用済燃料の破片を用いた実験値に基づき評価している。最悪のケースとなる評価では、最大の溶解速度を採用しており、溶解時間は25℃で5.5×10^{4}年である。

本文献では、使用済燃料の溶解時間を評価するに当たり、使用済燃料、UO_2 の溶解速度定数に関するデータについても記載している。使用済燃料の溶解速度データについては、25℃、54℃、85℃において 3種類の溶液中$NaHCO_3$、蒸留水、（蒸留水＋Ca＋Si）のデータが記載されている。溶液の違いによる溶解速度の依存性が示されており、いづれの温度においても$NaHCO_3$が最も溶解速度が高く、蒸留水、（蒸留水＋Ca＋Si）の順に低くなる。また、どの溶液においても温度の増加とともに溶解速度は高くなる。尚、試験の環境条件は酸化条件である。

使用済燃料の溶解速度の評価においては、以下に示す様にUO_2 の溶解速度と比較しほぼ同じであることが記載されている。

25℃　使用済燃料　蒸留水中　$1.2\sim1.7\times10^{-12}$ ($g\text{-}cm^{-2}\text{-}sec^{-1}$)
25℃　UO_2　蒸留水中　$\sim5.0\times10^{-12}$ ($g\text{-}cm^{-2}\text{-}sec^{-1}$)

本文献に記載されている使用済燃料の溶解速度式を以下に示す。

$Q = 6.43\times10^{-9}\times\exp(-4740/RT)$

ここで、

Q：溶解速度($g\text{-}cm^{-2}\text{-}sec^{-1}$)
R：ガス定数　(cal/mol-K)
t：絶対温度　(K)

表3.2-4　　文献調査結果のまとめ

文献番号	
タイトル	CHEMISTRY OF UO_2 FUEL DISSOLUTION IN RELATION TO THE DISPOSAL OF USED NUCLEAR FUEL
著者	S.Sunder , D.W.Shoesmith
雑誌名	AECL-10395 (1991)

概要：　本文献では、放射性廃棄物処分場に埋設されるUO_2 燃料の溶解速度を評価するために最も適用性のあるモデルを選定するために必要な化学的な情報をまとめたものである。この文献では、AECLの研究を中心として種々の情報についてまとめている。ただし、モデルに関する情報についてはあまり記載されていない。深部地下では一般的には還元状態であるが、放射線分解によって酸化還元状態は変化する可能性があるとのこと。従って、本文献では基本的に酸化条件下での溶解速度を中心に記載しており、特に酸化条件下の溶解は単一のウラニウム相に支配されないとのこと。記載内容は以下の項目毎にまとめている。

①ウラン酸化物（固相）の構造的性質

②UO_2の溶解に関する性質とメカニズム　：　還元条件下での溶解試験は非常に困難であり、研究例は少なく大部分の研究では少量の酸化剤が含まれているとのこと。Bruno らの実験についても紹介している。 UO_2の酸化溶解は 5段階で表現できるとのこと。第 1段階⇨燃料表面での酸化膜生成、第 2段階⇨酸化膜近傍でUO_2^{2+} の生成、第 3段階⇨UO_2^{2+} との錯体生成、第 4段階⇨2次層の沈殿、第 5段階⇨ウラン化学種の移行

③UO_2の溶解に関する電気化学　：　UO_2の溶解は酸化還元電位、地下水中の化学種濃度、温度に依存しているとのこと。 UO_2の表面酸化は、非常に低い酸化還元電位（-400～-800mV）で起こるが、monolayer,表面のspecific area で認められる。pHが5 を超えると溶解速度は減少する傾向にある。地下水中の陰イオンとの錯体化は溶存ウラニルイオンの安定化により溶解を促進させる。酸化還元電位が100mV 以下では溶液中の陰イオンにより溶解速度への影響は顕著でない。試験溶液によって、活性化エネルギーは以下の様になっている。

溶液	活性化エネルギー(KJ/mol)
酸溶液中	約50～67
酸化炭酸塩溶液中	約43～63
H_2O_2を含む酸溶液中	約27

CANDU 燃料に関する実験結果では、花崗岩地下水において温度の関数として溶解速度が減少することを示しているが、蒸留水では増加する。これは$NaUO_3$, $Na_2U_2O_7$の様な無抵抗の生成が考えられる。花崗岩地下水中の溶解速度は2次相、鉱物化層の生成によって溶解は妨げられるとのこと。酸化還元状態別の溶解速度を以下に示す。

	溶解速度($g\text{-}cm^2\text{-}day^{-1}$) pH=～9.5
酸化状態	10^{-7} ～ 10^{-8}
還元状態	10^{-11} ～ 10^{-13}

表3.2-5　　文献調査結果のまとめ

文献番号	
タイトル	A Kinetic Study of the Dissolution of Uraninite
著者	D.E.Grandstaff
雑誌名	ECONOMIC GEOLOGY AND THE BULLETIN OF THE SOCIETY OF ECONOMIC GEOLOGISTS , Vol.71 , No.8 , December, 1976

概要：　従来の溶解速度に関する研究は、人工的なUO_2とかU_3O_8を対象にしており、天然の閃ウラン鉱に含まれる元素により生成される効果を研究するため、温度23℃、2℃、低酸素濃度の条件において溶解実験が行われた。ただし、低酸素濃度の実験であるが、使用された試料は12.3%～59.8%のUO_3が含有されているため、地下処分環境下におけるUO_2の溶解速度に直接適用することはできないと考える。

試料として採用されたUO_2は、Blind River-Elliot Lake, Ontario, CanadaとVaal Reefs West mine, Klerksdorp, Witwatersrand, South Africa産の2種類の試料である。実験で使用した溶液は、蒸留水、天然水（海水、河川水）と人工海水を用いている。本文献では、溶解速度と表面積の相関が示されている。実験におけるpHは約4～約9の範囲であり、溶解速度の代表的な値を以下に示す。

pH	試験期間(days)	温度（℃）	溶解速度($gm\text{-}cm^{-2}\text{-}day^{-1}$)	溶液
4.20	0.1	23±2	(7.2 ± 0.6)×10^{-5}	河川水
4.32	1.0	⇩	(24.0 ± 1.0)×10^{-5}	蒸留水
5.21	1.0	⇩	(4.5 ± 0.2)×10^{-5}	蒸留水
5.38	1.0	⇩	(1.9 ± 0.2)×10^{-5}	蒸留水
5.99	4.0	⇩	(0.042± 0.008)×10^{-5}	蒸留水
5.98	4.0	⇩	(0.042± 0.008)×10^{-5}	蒸留水
6.53	0.5	⇩	(0.10 ± 0.02)×10^{-5}	蒸留水
8.15	0.1	23±2	(0.049± 0.006)×10^{-5}	海水

水中における閃ウラン鉱の溶解速度は以下の様に示されている。

$$R=10^{20.25}(SS)(RF)^{-1}(10^{-3.38-10.8NOC})(DO)(a_{CO_2})(a_{H^+})\exp(-7045/T)$$

ここで、

- R　：溶解反応の速度
- SS　：表面積
- RF　：固有の遅延係数
- NOC　：閃ウラン鉱に含まれるウラン以外のモルフラックス
- DO　：溶存酸素濃度(ppm)
- a_{CO_2}　：トータルの溶存炭酸塩濃度(molar)
- a_{H^+}　：pH
- T　：絶対温度

表3.2-6　　文献調査結果のまとめ

文献番号	
タイトル	The kinetics of dissolution of UO_2(s) under reducing conditions
著者	JORDI BRUNO , IGNASI CASAS , and IGNASI PUIGDOMENECH (Department of Inorganic Chemistry , The Royal Institute Technology , S-100 44 Stockholm , Sweden)
雑誌名	Radiochimica Acta 44/45 , pp 11-16 (1988)

概要：　本研究は、UO_2(c)の溶解速度に関して異なるパラメータ（pH, Eh, 炭酸塩など）の依存性を調査することを目的としている。UO_2(c)の溶解速度に関する実験が、還元条件下(H_2(gas)/Pd)、25℃で実施している。実験データはpHが 3, 5, 9, 12で取得されている。pHが 3～ 9の範囲において溶液のpHに関する反応速度の依存性を以下に示す。

$$R_{diss}(gl^{-1}m^{-2}h^{-1}) = S \times k_H[H^+]^{-0.3}$$

ここで、

$k_H = 9.24 \times 10^{-7}$

S ：固相の表面積(m^2l^{-1})

$[H^+]$ を関数とした速度は、表面錯体の生成によって溶解反応を促進する水酸基を提案している。また、溶解する際の２次層の結晶度をX線法によって同定することが困難であることから、熱力学的に２次層の沈殿を予測するために、実験で決定できない UO_{2+x} 型酸化物の生成自由エネルギー算出式を以下の様に設定している。

$$\Delta G^0_f(U_aO_b) = -733.0 \times a - 149.4 \times b \quad (kJ/mol)$$

ここでa, b の値は $2 \leq b/a \leq 2.67$である。本式で得られたデータを基に算出した溶解度と実験データの比較は以下の通りである。

pH	Eh(mV)	$[U]_{exp}$	UO_2	U_4O_9	U_3O_7	U_2O_5
3.0	-180	———	2.0e-6	4.0e-6	1.73e-4	1.73e-4
5.0	-300	3.2e-6	1.2e-7	2.3e-7	9.87e-6	9.98e-6
9.0	-540	1.4e-6	1.0e-7	1.9e-7	8.3 e-6	8.3 e-6
12.0	-720	0.8e-6	1.0e-7	1.9e-7	8.3 e-6	8.3 e-6

ここで、得られたデータは、pHの範囲が 5～12では初期相がすばやく溶解することを示している。アルカリ性のpH(9, 12)で平衡状態に達するまで 200時間であった。pHが 9と12において定常状態で測定されたウラニウム濃度は、還元条件下で測定されたUO_2(c)の溶解度(9.2×10^{-8}mol/l)に一致しているとのこと。

ただし、還元条件下でのUO_2(s)の初期溶解の応答現象を結論付けることは出来ないと述べている。

表3.2-7(1)　文献調査結果のまとめ（その１）

文献番号	
タイトル	The kinetics of dissolution of UO_2 under reducing conditions and the influence of an oxidized surface layer(UO_{2+x}):Application of a continuous flow-through reactor
著者	JORDI BRUNO , IGNASI CASAS , and IGNASI PUIGDOMENECH (Department of Inorganic Chemistry , The Royal Institute Technology , S-100 44 Stockholm , Sweden)
雑誌名	Geochimica et Cosmochimica Acta Vol.55 , pp647-658 , 1991

概要：　本研究では、バッチ型の試験を行うことにより表面層のUO_{2+x} の溶解に関する速度論とその後に起こるUO_2 の沈殿について研究している。また、初期UO_2は実験前に処理しているが、表面層の酸化を避けるのは非常に困難であるとのこと。また、以下の理由によりカラム試験も実施している。

・バッチ試験の妥当性を示す。
・表面層に生成する２次固相の影響を無くする。
　本研究で設定された溶解速度を以下に示す。

3≦pH≦7 の範囲（カラム試験結果）

r_{dis} (UO_2 :mol-sec^{-1}m^{-2})=1.4(±0.3)×10^{-8}[H$^+$]$^{0.53+0.02}$

7≦pH≦11の範囲（カラム試験結果）

r_{dis} (UO_2 :mol-sec^{-1}m^{-2})=1.9(±0.8)×10^{-12}

3≦pH≦9 の範囲（バッチ試験結果）

r_{dis} (UO_{2+x}:mol-sec^{-1}m^{-2})=1.1(±0.3)×10^{-12}[H$^+$]$^{-0.30+0.02}$

実験で使用した固相 :ASEA ATOM Co. の二酸化ウランであり、平均粒子の大きさは約50μm である。固体のバルクの組成はX線粉末回析法(XPD) によって$UO_{2.001}$ である。また、試料の表面積はBET 法によって測定し、0.201±0.002m^{2}g^{-1}である。

バッチ試験 :pHとHCO_3^- の影響を調べることを目的とし、8 ケースの実験を行っている。pHは 3～12までのをパラメータとしており、固液条件は、液体200mL,固体2gである。試験期間は、～479 時間である。pH調整剤は、$HClO_4$ 、NaOHのどちらかを用いている。測定は4mL 分取し0.22μm のポアサイズを持つフィルターで濾過し、ウラン濃度を測定している。Eh, pHは連続測定している。

カラム試験 :0.5gのUO_2(s)を直径13mmの0.22μm のポアサイズを持つフィルターでサンドイッチにして、ここに溶液を通過させている。Eh, pHは連続測定しており、ウラン濃度は規則的な時間間隔で流水試料を取っている。

表3.2-7(2)　文献調査結果のまとめ（その２）

試験結果を以下に示す。

バッチ試験　:ウラン濃度は20時間(pH=7, CO_2=1%)～400 時間(pH=7.9, CO_2=5%)で定常状態となる。しかし、初期(2～3 時間後には減少傾向となる）においてウラン濃度のピークがどのケースにおいても観察されている。この挙動の原因としてはUO_{2+x} の表面層を実験で特定していないが、$UO_{2.3}$ が表面層で生成され、これが短時間で溶解し、その後でUO_2 が沈殿している可能性があることを述べている。ここで得られた溶解速度は、時間－ウラン濃度の初期の線形部分の傾斜から求めており、かつ得られた値は全表面積と試験溶液で規格化されている。ここで得られた溶解速度は下式の様に 3≦pH≦9 の範囲でpHに依存する傾向にある。

r_{dis}/S (mol-sec^{-1}-m^{-2}) = $k_H \times [H^+]^{-0.32+0.05}$

ここで、速度定数は、k_H = 1.1(±0.3)×10^{-12}である。

カラム試験　:試験結果を以下に示す。

3≦pH≦7 の範囲

r_{dis}/S (mol-sec^{-1}-m^{-2}) = $k_{H1} \times [H^+]^{0.53+0.01}$

ここで、速度定数は、k_H = 1.4(±0.3)×10^{-8}である。

7≦pH≦11の範囲

r_{dis}/S (mol-sec^{-1}-m^{-2}) = k_{H2}

ここで、速度定数は、k_H = 4.4(±3.9)×10^{-12}である。

カラム、バッチ試験で得られたデータは、以下の考察をしている。

バッチ試験で測定される流水のウラン濃度は、pH≧ 5において以下の溶解平衡濃度に近い。

$$UO_2(s) + 2H_2O = U(OH)_4(aq)$$

この時$[U(OH)_4(aq)]_{eq}$= 9(±4)×10^{-8}(mol/l) である。従って、カラム試験で得られた反応速度を評価するために、以下に示す様に沈殿反応を考慮している。

$$r_{diss} = r_{meas} - r_{prec} = d[U(IV)]/dt - k_p[U(OH)_4(aq)]$$

となり、 7≦pH≦11の範囲では[U(IV)] = $[U(OH)_4(aq)]$であることから下式となる

$$r_{diss} = d[U(IV)]/dt - k_p[U(IV)] \qquad 式-1$$

ここで、 k_pはカラム試験と同一の条件で得られたバッチ試験の結果とする。

k_p = 1.9(±0.8)×10^{-5}

従って、式-1により修正したUO_2 の溶解速度定数は以下の様になる。

k_{diss}= 1.9(±0.8)×10^{-12}

$K_{eq} = k_{diss} / k_p$ の関係を用いると、K_{eq} =1.0(±0.6)×10^{-7}となり、その結果平衡定数log (K_{eq}) = -7.10±0.3 となり、以前の溶解度試験で得られた平衡定数と一致している[log (K_{eq}) = -7.08±0.17] 。以上のことから、本研究で取り扱っている溶解反応は、 $UO_2(s) + 2H_2O = U(OH)_4(aq)$ であるとのこと。

地球化学モデル　:本文献では、バッチ試験で得られた実験結果（ウラン濃度 vs. 時間）を地球化学コードEQ3/6 を用いてシミュレーションしている。モデル解析に当たって、親化学種は、U^{+4} , H_2O , H^+ O_2(gas) , HCO_3^- に限定している。固相の熱力学データは、次ページに示す反応式の値を設定している。

$$U_3O_7(s) + 12H^+ \Leftrightarrow 3U^{+4} + 6H_2O + 1/2O_2(gas)$$
$$UO_2(s) + 4H^+ \Leftrightarrow U^{+4} + 2H_2O$$

解析方法としては、遷移状態速度則を用い、$U_3O_7(s)$ の溶解とUO_2 の沈殿を考慮しており、入力パラメータを以下に示す。

$U_3O_7(s)$の溶解速度定数	:	$k_d \times [H^+]^{-0.3} = 1.93\times10^{-13}$ sec^{-1}/cm^2
UO_2　の沈殿速度定数	:	$k_p = 1.95\times10^{-9}$ sec^{-1}/cm^2
$U_3O_7(s)$の初期固相量	:	0.4414　μ-mol/l

データ解析の結果を以下に示す。

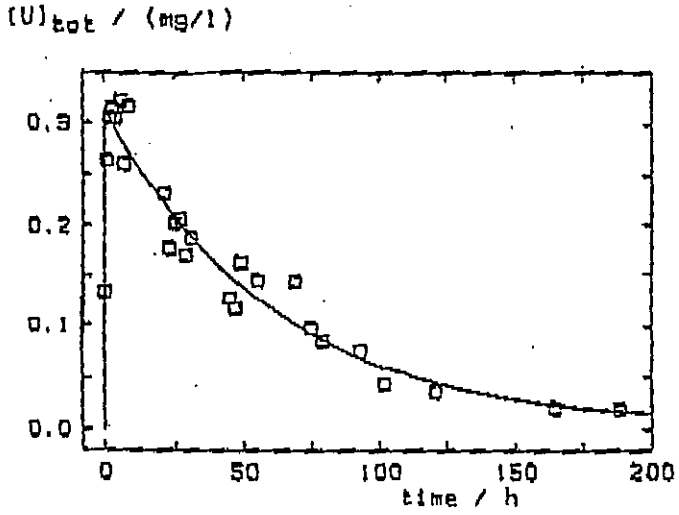


FIG. 8. Results from EQ3/6 calculations (continuous line) simulating the experimental data (squares) obtained in the present work for pH = 8.5, 8 mM $NaClO_4$, $p(H_2)$ = 0.97 atm, amount of UO_2: 1.2 g dm^{-3} (surface area: 0.2412 m^2).

表3.2-8 (1)　ウランに関する熱力学データベースの整備（水溶性化学種）

反　応　式	従来の log K	最新の log K
$6CO_3^{2-} + 3U^{4+} + 6H_2O(l) - 12H^+ - 6e^- = (UO_2)_3(CO_3)_6^{6-}$	+ 26.922	+ 26.895
$CO_3^{2-} + 3U^{4+} + 6H_2O(l) - 12H^+ - 6e^- = (UO_2)_3(OH)_5CO_3^+$	- 26.328	
$4CO_3^{2-} + U^{4+} = U(CO_3)_4^{4-}$	+ 32.881	+ 35.132
$5CO_3^{2-} + U^{4+} = U(CO_3)_5^{-6}$	+ 34.001	+ 34.016
$2CO_3^{2-} + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^- = UO_2(CO_3)_2^{2-}$	+ 8.007	+ 7.905
$3CO_3^{2-} + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^- = UO_2(CO_3)_3^{4-}$	+ 12.637	+ 12.566
$3CO_3^{2-} + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - e^- = UO_2(CO_3)_3^{5-}$	- 0.073	- 0.148
$CO_3^{2-} + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^- = UO_2CO_3(aq)$	+ 0.707	+ 0.642
$2SO_4^{2-} + U^{4+} = U(SO_4)^2(aq)$	+ 10.420	+ 10.513
$2SO_4^{2-} + U^{4+} + 2e^- = UO_2(SO_3)_2^{2-}$	- 8.187	
$2SO_4^{2-} + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^- = UO_2(SO_4)_2^{2-}$	- 4.843	- 4.899
$2SO_4^{2-} + U^{4+} - 3H_2O + 6H^+ + 6e^- = UO_2S_2O_3(aq)$	+ 31.822	+ 31.786
$SO_4^{2-} + U^{4+} + H_2O - 2H^+ = UO_2SO_3(aq)$	- 5.650	- 5.837
$SO_4^{2-} + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^- = UO_2SO_4(aq)$	- 5.843	- 5.890
$SO_4^{2-} + U^{4+} = USO_4^{2+}$	+ 6.480	+ 6.582
$Cl^- + U^{4+} = UCl^{3+}$	+ 1.720	+ 1.721
$Cl^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^- = UO_2Cl^+$	- 8.833	- 8.871
$2Cl^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^- = UO_2Cl_2(aq)$	- 10.093	- 10.141
$Cl^- + U^{4+} + 5H_2O - 10H^+ - 8l^- = UO_2ClO_3^+$	- 154.736	- 154.825
$2U^{4+} + 6H_2O - 10H^+ - 4e^- = (UO_2)_2(OH)_2^{2+}$	- 23.617	- 23.704
$2U^{4+} + 5H_2O - 9H^+ - 4e^- = (UO_2)_2OH^{3+}$	- 20.787	- 20.783
$3U^{4+} + 10H_2O - 16H^+ - 6e^- = (UO_2)_3(OH)_4^{2+}$	- 38.880	- 39.026
$3U^{4+} + 11H_2O - 17H^+ - 6e^- = (UO_2)_3(OH)_5^+$	- 42.540	- 42.677
$3U^{4+} + 13H_2O - 19H^+ - 6e^- = (UO_2)_3(OH)_7^-$	- 57.981	- 58.132
$4U^{4+} + 15H_2O - 23H^+ - 8e^- = (UO_2)_4(OH)_7^+$	- 57.874	- 58.070
$U^{4+} + 4H_2O - 4H^+ = U(OH)_4(aq)$	- 4.479	- 4.542
$U^{4+} + 5H_2O - 5H^+ = U(OH)_5^-$	- 15.470	- 16.546
$U^{4+} + e^- = U^{3+}$	- 8.615	- 9.356

表3.2-8 (2)　ウランに関する熱力学データベースの整備（水溶性化学種）

反　応　式		従来の log K	最新の log K
$U^{4+} + 4H_2O - 6H^+ - 2e^-$	$= UO_2(OH)_2(aq)$	- 20.994	- 19.345
$U^{4+} + 5H_2O - 7H^+ - 2e^-$	$= UO_2(OH)_3^-$	- 28.994	- 28.247
$U^{4+} + 6H_2O - 8H^+ - 2e^-$	$= UO_2(OH)_4^{2-}$	- 41.994	- 42.051
$U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - e^-$	$= UO_2^+$	- 7.507	- 7.556
$U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$	$= UO_2^{2+}$	- 8.993	- 9.041
$U^{4+} + 3H_2O - 5H^+ - 2e^-$	$= UO_2OH^+$	- 14.193	- 14.242
$U^{4+} + H_2O - H^+$	$= UOH^{3+}$	- 0.540	- 0.540
$F^- + U^{4+}$	$= UF^{3+}$	+ 9.280	+ 9.283
$2F^- + U^{4+}$	$= UF_2^{2+}$	+ 16.110	+ 16.235
$3F^- + U^{4+}$	$= UF_3^+$	+ 21.181	+ 21.607
$4F^- + U^{4+}$	$= UF_4(aq)$	+ 25.451	+ 25.608
$5F^- + U^{4+}$	$= UF_5^-$	+ 27.031	+ 27.019
$6F^- + U^{4+}$	$= UF_6^{2-}$	+ 29.101	+ 29.089
$F^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - e^-$	$= UO_2F(aq)$	- 5.607	
$F^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$	$= UO_2F^+$	- 3.903	- 3.949
$2F^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$	$= UO_2F_2(aq)$	- 0.373	- 0.418
$3F^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$	$= UO_2F_3^-$	+ 1.907	+ 1.863
$4F^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$	$= UO_2F_4^{2-}$	+ 2.707	+ 2.663

表3.2-8 (3)　ウランに関する熱力学データベースの整備（鉱物）

反　応　式			従来の log K	最新の log K
$U(OH)_2SO_4(c)$	$= -2H^+$	$+ 2H_2O + SO_4^{2-} + U^{4+}$	- 3.17	- 3.168
$UO_2(am)$	$= -4H^+$	$+ 2H_2O + U^{4+}$	+ 0.10	
$Na_2U_2O_7(c)$	$= 2Na^+$	$+ 2U^{4+} + 7H_2O - 14H^+ - 4e^-$	+ 69.41	+ 40.684
Na_2UO_4	$= 2Na^+$	$+ U^{4+} + 4H_2O - 8H^+ - 2e^-$	+ 56.14	+ 39.084
$USiO_4(am)$	$= H_4SiO_4(aq)$	$+ U^{4+} - 4H^+$	- 2.73	
$USiO_4(c)$	$= H_4SiO_4(aq)$	$+ U^{4+} - 4H^+$	- 7.67	- 8.062
$(CO_2)_2CO_3$	$= CO_3^{2-}$	$+ 2U^{4+} + 4H_2O - 8H^+ - 2e^-$	- 19.82	
$U(CO_3)_2$	$= 2CO_3^{2-}$	$+ U^{4+}$	- 13.21	
$UC_2(c)$	$= 2CO_3^{2-}$	$+ U^{4+} - 6H_2O + 12H^+ + 12e^-$	- 13.15	
UO_2CO_3	$= CO_3^{2-}$	$+ U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$	- 5.46	- 5.43
$U(SO_3)_2(c)$	$= 2SO_4^{2-}$	$+ U^{4+} - 2H_2O + 4H^+ + 4e^-$	- 28.88	- 29.658
$U(SO_4)_2(c)$	$= 2SO_4^{2-}$	$+ U^{4+}$	- 11.72	- 11.681
$UO_2SO_3(c)$	$= SO_4^{2-}$	$+ U^{4+} + H_2O - 2H^+$	- 2.97	- 3.394
$UO_2SO_4(c)$	$= SO_4^{2-}$	$+ U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$	10.88	10.930
$UO_2SO_{4.2}$	$= SO_4^{2-}$	$+ U^{4+} + 4H_2O - 3H^+ - e^-$	- 13.37	
$UO_2SO_{4.3}$	$= SO_4^{2-}$	$+ U^{4+} + 5H_2O - 3H^+ - e^-$	- 13.37	
$UO_2SO_4 \cdot 3H_2O(c)$	$= SO_4^{2-}$	$+ U^{4+} + 5H_2O - 4H^+ - 2e^-$	+ 7.49	+ 7.536
$(UO_2)_2Cl_3(c)$	$= 3Cl^-$	$+ 2U^{4+} + 4H_2O - 8H^+ - 3e^-$	+ 29.20	+ 29.297
$U_2O_2Cl_5(c)$	$= 5Cl^-$	$+ 2U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - e^-$	+ 26.68	+ 26.774
$U_5O_{12}Cl(c)$	$= Cl^-$	$+ 5U^{4+} + 12H_2O - 24H^+ - 5e^-$	+ 18.74	+ 18.970
$UCl_3(c)$	$= 3Cl^-$	$+ U^{4+} + e^-$	+ 21.81	+ 22.328
$UCl_4(c)$	$= 4Cl^-$	$+ U^{4+}$	+ 21.88	+ 21.933
$UCl_5(c)$	$= 5Cl^-$	$+ U^{4+} - e^-$	+ 41.34	+ 44.833
$UCl_6(c)$	$= 6Cl^-$	$+ U^{4+} - 2e^-$	+ 62.05	+ 66.586
$UO_2Cl(c)$	$= Cl^-$	$+ U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - e^-$	+ 7.15	+ 7.028
$UO_2Cl_2(c)$	$= 2Cl^-$	$+ U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$	+ 21.11	+ 21.159
$UO_2Cl_2 \cdot 3H_2O(c)$	$= 2Cl^-$	$+ U^{4+} + 5H_2O - 4H^+ - 2e^-$	+ 14.56	+ 14.612
$UO_2Cl_2 \cdot H_2O(c)$	$= 2Cl^-$	$+ U^{4+} + 3H_2O - 4H^+ - 2e^-$	+ 17.25	+ 17.299

表3.2-8 (4)　ウランに関する熱力学データベースの整備（鉱物）

反　応　式			従来の log K	最新の log K
UO_2ClOH	$= Cl^-$	$+ U^{4+} + 5H_2O - 5H^+ - 2e^-$	+ 17.59	
$UOCl(c)$	$= Cl^-$	$+ U^{4+} + H_2O - 2H^+ - e^-$	+ 19.85	+ 19.726
$UOCl_2(c)$	$= 2Cl^-$	$+ U^{4+} + H_2O - 2H^+$	+ 5.80	+ 5.425
$UOCl_3(c)$	$= 3Cl^-$	$+ U^{4+} + H_2O - 2H^+ - e^-$	+ 16.04	+ 20.167
$(UO_2)_2Cl_3(c)$	$= 3Cl^-$	$+ 2U^{4+} + 4H_2O - 8H^+ - 3e^-$	+ 29.20	+ 29.297
$U_2O_2Cl_5(c)$	$= 5Cl^-$	$+ 2U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - e^-$	+ 26.68	+ 26.774
U_3O_7	$= 3U^{4+}$	$+ 7H_2O - 14H^+ - 2e^-$	+ 1.19	
$U_3O_8(c)$	$= 3U^{4+}$	$+ 8H_2O - 16H^+ - 4e^-$	+ 20.40	
U_4O_9	$= 4U^{4+}$	$+ 9H_2O - 18H^+ - 2e^-$	+ 8.70	
$UO_2(OH)_2$	$= U^{4+}$	$+ 4H_2O - 6H^+ - 2e^-$	+ 13.92	
$UO_2(PO_3)_2$	$= 2PO_4^{3-}$	$+ U^{4+} - 2e^-$	- 29.20	
URANINIT	$= U^{4+}$	$+ 2H_2O - 4e^-$	- 4.90	- 4.85
$UO_3(alph)$	$= U^{4+}$	$+ 3H_2O - 6H^+ - 2e^-$	+ 17.63	+ 17.675
$UO_3(bet)$	$= U^{4+}$	$+ 3H_2O - 6H^+ - 2e^-$	+ 17.30	+ 17.346
$UO_3(gam)$	$= U^{4+}$	$+ 3H_2O - 6H^+ - 2e^-$	+ 16.69	+ 16.743
$UO_{3.0.9H}$	$= U^{4+}$	$+ 3H_2O - 5H^+ - e^-$	- 23.40	
$UO_3 \cdot 2H_2O(c)$	$= U^{4+}$	$+ 5H_2O - 6H^+ - 2e^-$	+ 13.81	+ 13.854
$U_2F_9(c)$	$= 9F^-$	$+ 2U^{4+} - e^-$	- 38.38	- 38.304
$U_2O_3F_6(c)$	$= 6F^-$	$+ 2U^{4+} + 3H_2O - 6H^+ - 4e^-$	+ 13.42	+ 15.342
$U_3O_5F_8(c)$	$= 8F^-$	$+ 3U^{4+} + 5H_2O - 10H^+ - 6e^-$	+ 22.73	+ 24.066
$U_4F_{17}(c)$	$= 17F^-$	$+ 4U^{4+} - e^-$	- 99.98	- 97.905
$UCl_2F_2(c)$	$= 2F^-$	$+ 2Cl^- + U^{4+}$	- 3.66	- 3.615
$UCl_3F(c)$	$= F^-$	$+ 3Cl + U^{4+}$	+ 10.20	+ 10.245
$UClF_3(c)$	$= 3F^-$	$+ Cl^- + U^{4+}$	- 17.69	- 17.650
$UF_3(c)$	$= 3F^-$	$+ U^{4+} + e^-$	- 10.35	- 10.182
$UF_4(c)$	$= 4F^-$	$+ U^{4+}$	- 29.41	- 29.369
$UF_4 \cdot 2.5H_2O(c)$	$= 4F^-$	$+ U^{4+} + 2H_2O + H^+ + e^-$	- 52.21	
$UF_5(alph)$	$= 5F^-$	$+ U^{4+} - e^-$	- 5.51	- 5.470

表3.2-8 (5)　ウランに関する熱力学データベースの整備（鉱物）

反　応　式		従来の log K	最新の log K
β-UF_5	$= 5F^- + U^{4+} - e^-$	- 5.85	- 5.804
$UF_6(c)$	$= 6F^- + U^{4+} - 2e^-$	+ 26.32	+ 26.251
$UO_2F_2(c)$	$= 2F^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$	+ 1.68	+ 23.318
$UO_2F_2 \cdot 3H_2O(c)$	$= 2F^- + U^{4+} + 5H_2O - 4H^+ - 2e^-$	+ 2.38	+ 1.568
$UO_2FOH(c)$	$= F^- + U^{4+} + 3H_2O - 5H^+ - e^-$	+ 7.10	
$UO_2FOH \cdot 2H_2O(c)$	$= F^- + U^{4+} + 5H_2O - 5H^+ - 2e^-$	+ 6.28	+ 6.318
$UO_2FOH \cdot H_2O(c)$	$= F^- + U^{4+} + 4H_2O - 5H^+ - e^-$	+ 6.66	+ 6.702
$UOF_2(c)$	$= 2F^- + U^{4+} + H_2O - 2H^+$	- 18.28	- 18.240
$UOF_2 \cdot H_2O(c)$	$= 2F^- + U^{4+} + 2H_2O - 2H^+$	- 18.84	- 18.802
$UOF_4(c)$	$= 4F^- + U^{4+} + H_2O - 2H^+ - 2e^-$	13.42	13.464
$UOFOH(c)$	$= F^- + U^{4+} + 2H_2O - 3H^+$	- 14.56	- 8.984
$UOFOH \cdot 0.5H_2O(c)$	$= F^- + U^{4+} + 2H_2O + 2H^+ + e^-$	- 35.74	
$UO_2CO_3(c)$	$= UO_2^{2+} + CO_3^{2-}$	- 14.40	- 14.475
UO_2OH	$= UO_2^+ + H_2O - H^+$	+ 5.00	
$NaUO_3(c)$	$= UO_2^+ + H_2O - 2H^+ + Na^+$	+ 9.75	+ 13.602
Na_2UO_4	$= UO_2^{2+} + 2H_2O - 4H^+ + 2Na^+$	+ 31.56	+ 30.043
$Na_3UO_4(c)$	$= UO_2^+ + 2H_2O - 4H^+ + 3Na^+$	+ 57.90	+ 56.298
$Na_2U_2O_7(c)$	$= 2UO_2^{2+} + 3H_2O - 6H^+ + 2Na^+$	+ 24.52	+ 22.602
$CaUO_4(c)$	$= UO_2^{2+} + 2H_2O - 4H^+ + Ca^{2+}$	+ 15.00	+ 15.935
$MgUO_4(c)$	$= UO_2^{2+} + 2H_2O - 4H^+ + Mg^{2+}$	+ 23.20	+ 23.239
$(UO_2)_3(PO_4)_2$	$= 3U^{4+} - 12H^+ - 6e^- + 6H_2O + 2PO_4^{3-}$	- 21.67	
$H_2UO_2PO_4$	$= 2U^{4+} - 6H^+ - 4e^- + 4H_2O + 2PO_4^{3-}$	- 29.92	
$UO_2HPO_4 4H_2O(cr)$	$= U^{4+} - 3H^+ - 2e^- + 2H_2O + PO_4^{3-}$	- 15.39	
$U(HPO_4)_2$	$= U^{4+} + 4H_2O + 2H^+ + 2PO_4^{3-}$	- 51.47	
$CaUPO_4$	$= U^{4+} + Ca^{2+} + 2H_2O + 2PO_4^{3-}$	- 54.14	

表3.2-9　　EQ36熱力学データベース作成検証結果

使用コード / 水溶性化学種	EQ3NRの解 濃度(mol／ℓ)	PHREEQEの解 濃度(mol／ℓ)	平衡固相
U(total)	4.0551693e-10	4.055169 e-10	URANINITE
U^{+4}	7.463 e-35	7.463 e-35	URANINITE
$U(OH)_4(aq)$	4.055 e-10	4.055 e-10	URANINITE
$U(OH)_5^-$	8.398 e-15	8.398 e-15	URANINITE
$UO_2(OH)_2(aq)$	5.169 e-22	7.674 e-22	URANINITE
$UO_2(OH)_3^-$	1.354 e-23	2.010 e-23	URANINITE
$UO_2(OH)_4^{-2}$	4.448 e-30	6.603 e-30	URANINITE
UO_2^+	5.331 e-19	6.519 e-19	URANINITE
UO_2^{+2}	2.510 e-26	3.546 e-26	URANINITE
UO_2OH^+	3.236 e-24	4.658 e-24	URANINITE
U(total)	3.6141735e-05	3.614169 e-05	$UO_2(am)$
U^{+4}	6.651 e-30	6.729 e-30	$UO_2(am)$
$U(OH)_4(aq)$	3.614 e-05	3.614 e-05	$UO_2(am)$
$U(OH)_5^-$	7.485 e-10	7.463 e-10	$UO_2(am)$
$UO_2(OH)_2(aq)$	4.607 e-17	6.799 e-17	$UO_2(am)$
$UO_2(OH)_3^-$	1.207 e-18	1.776 e-18	$UO_2(am)$
$UO_2(OH)_4^{-2}$	3.964 e-25	5.817 e-25	$UO_2(am)$
UO_2^+	4.751 e-14	5.810 e-14	$UO_2(am)$
UO_2^{+2}	2.237 e-21	3.160 e-21	$UO_2(am)$
UO_2OH^+	2.884 e-19	4.139 e-19	$UO_2(am)$

表3.2-10　　実験予備解析結果のまとめ（化学種分配解析）

入力条件									計算結果（固相の飽和指数、気体の分圧）								
サンプル No.	温度 ℃	pH (-)	pe (-)	実測U濃度 mol/L	K濃度 mol/L	Cl濃度 mol/L	Fe濃度 ppm	熱力学データベース	UO_2(cr	UO_2(am	U_3O_7	UO_2OH	UO_2Cl	Fe_2O_3	Fe_3O_4	FeOOH	O_2 gas
1	25	7.30	-5.50	2.3 e-10	0.012	0.017	10	旧	-0.257	-5.257	-13.06	-15.86	-19.63	2.51	4.91	1.16	-75.92
2	⇩	7.58	-5.52	2.7 e-10	⇩	⇩	⇩	旧	-0.188	-5.188	-12.33	-15.54	-19.73	4.17	7.15	2.00	-74.88
3	⇩	7.05	-5.53	2.5 e-10	⇩	⇩	⇩	旧	-0.221	-5.221	-13.51	-16.11	-19.77	0.98	2.89	0.40	-77.04
4	⇩	7.00	-5.32	2.4 e-10	⇩	⇩	⇩	旧	-0.239	-5.239	-13.25	-15.97	-19.58	1.10	2.91	0.46	-76.40
5	⇩	7.44	-5.33	2.3 e-1	⇩	⇩	⇩	旧	-0.257	-5.257	-12.44	-15.55	-19.46	3.68	6.37	1.75	-74.68
6	⇩	7.22	-5.22	2.7 e-10	⇩	⇩	⇩	旧	-0.188	-5.188	-12.45	-15.59	-19.43	2.61	4.87	1.22	-75.12
7	⇩	6.51	-4.80	2.5 e-10	⇩	⇩	⇩	旧	-0.221	-5.221	-13.13	-15.92	-19.04	-0.80	0.04	-0.49	-76.28
8	⇩	6.42	-4.92	2.4 e-10	⇩	⇩	⇩	旧	-0.239	-5.239	-13.61	-16.15	-19.18	-1.58	-0.92	-0.88	-77.12
9	⇩	6.20	-4.53	2.4 e-10	⇩	⇩	⇩	旧	-0.239	-5.239	-13.27	-15.98	-18.79	-2.12	-1.90	-1.15	-76.44
1	25	7.30	-5.50	2.3 e-10	0.012	0.017	10	新	-0.244	-5.194	-12.87	-15.85	-19.45	2.51	4.91	1.16	-75.92
2	⇩	7.58	-5.52	2.7 e-10	⇩	⇩	⇩	新	-0.175	-5.125	-12.14	-15.52	-19.54	4.17	7.15	2.00	-74.88
3	⇩	7.05	-5.53	2.5 e-10	⇩	⇩	⇩	新	-0.208	-5.158	-13.32	-16.09	-19.59	0.98	2.89	0.40	-77.04
4	⇩	7.00	-5.32	2.4 e-10	⇩	⇩	⇩	新	-0.226	-5.176	-13.06	-15.95	-19.39	1.10	2.91	0.46	-76.40
5	⇩	7.44	-5.33	2.3 e-10	⇩	⇩	⇩	新	-0.244	-5.193	-12.25	-15.54	-19.28	3.68	6.37	1.75	-74.68
6	⇩	7.22	-5.22	2.7 e-10	⇩	⇩	⇩	新	-0.175	-5.125	-12.26	-15.58	-19.24	2.61	4.87	1.22	-75.12
7	⇩	6.51	-4.80	2.5 e-10	⇩	⇩	⇩	新	-0.208	-5.158	-12.94	-15.90	-18.86	-0.80	0.04	-0.49	-76.28
8	⇩	6.42	-4.92	2.4 e-10	⇩	⇩	⇩	新	-0.226	-5.176	-13.42	-16.13	-18.99	-1.58	-0.92	-0.88	-77.12
9	⇩	6.20	-4.53	2.4 e-10	⇩	⇩	⇩	新	-0.226	-5.176	-13.08	-15.96	-18.60	-2.12	-1.90	-1.15	-76.44

表3.2-11　実験予備解析結果のまとめ（固相／液相平衡計算）

実験条件・結果						入力条件					計算結果	
サンプル No.	温度 ℃	試験期間 日	pH (-)	Eh (mV)	実測U濃度 mol/L	温度 ℃	pH (-)	pe (-)	支配固相	熱力学データベース	U濃度 mol/L	支配化学種濃度 $U(OH)_4(aq)$
1	25	1	7.32	-347	2.3×10^{-10}	25	7.32	-5.78	URANINITE	旧	4.1792×10^{-10}	4.178×10^{-10}
2	⇩	1	7.56	-335	2.7×10^{-10}	⇩	7.56	-5.58	URANINITE	旧	4.1798×10^{-10}	4.178×10^{-10}
3	⇩	3	7.18	-332	2.5×10^{-10}	⇩	7.18	-5.53	URANINITE	旧	4.1789×10^{-10}	4.178×10^{-10}
4	⇩	3	7.01	-328	2.4×10^{-10}	⇩	7.01	-5.47	URANINITE	旧	4.1787×10^{-10}	4.178×10^{-10}
5	⇩	7	7.57	-340	3.2×10^{-10}	⇩	7.57	-5.67	URANINITE	旧	4.1799×10^{-10}	4.178×10^{-10}
6	⇩	7	7.19	-321	3.0×10^{-10}	⇩	7.70	-5.33	URANINITE	旧	4.1804×10^{-10}	4.178×10^{-10}
7	⇩	14	7.70	-320	3.6×10^{-10}	⇩	7.70	-5.33	URANINITE	旧	4.1804×10^{-10}	4.178×10^{-10}
8	⇩	14	7.29	-329	4.6×10^{-10}	⇩	7.29	-5.48	URANINITE	旧	4.1791×10^{-10}	4.178×10^{-10}
9	⇩	30	7.14	-315	3.1×10^{-10}	⇩	7.14	-5.25	URANINITE	旧	4.1789×10^{-10}	4.178×10^{-10}
1	⇩	1	7.32	-347	2.3×10^{-10}	⇩	7.32	-5.78	URANINITE	新	4.0552×10^{-10}	4.055×10^{-10}
2	⇩	1	7.56	-335	2.7×10^{-10}	⇩	7.56	-5.58	URANINITE	新	4.0552×10^{-10}	4.055×10^{-10}
3	⇩	3	7.18	-332	2.5×10^{-10}	⇩	7.18	-5.53	URANINITE	新	4.0551×10^{-10}	4.055×10^{-10}
4	⇩	3	7.01	-328	2.4×10^{-10}	⇩	7.01	-5.47	URANINITE	新	4.0551×10^{-10}	4.055×10^{-10}
5	⇩	7	7.57	-340	3.2×10^{-10}	⇩	7.57	-5.67	URANINITE	新	4.0552×10^{-10}	4.055×10^{-10}
6	⇩	7	7.19	-321	3.0×10^{-10}	⇩	7.19	-5.35	URANINITE	新	4.0551×10^{-10}	4.055×10^{-10}
7	⇩	14	7.70	-320	3.6×10^{-10}	⇩	7.70	-5.33	URANINITE	新	4.0553×10^{-10}	4.055×10^{-10}
8	⇩	14	7.29	-329	4.6×10^{-10}	⇩	7.29	-5.48	URANINITE	新	4.0552×10^{-10}	4.055×10^{-10}
9	⇩	30	7.14	-315	3.1×10^{-10}	⇩	7.14	-5.25	URANINITE	新	4.0551×10^{-10}	4.055×10^{-10}

表3.2-12　実験予備解析結果のまとめ（固相／液相平衡計算）

実験条件・結果						入力条件					計算結果	
サンプル No.	温度 ℃	試験期間 日	pH (-)	Eh (mV)	実測U濃度 mol/L	温度 ℃	pH (-)	pe (-)	支配固相	熱力学データベース	U濃度 mol/L	支配化学種濃度 $U(OH)_4(aq)$
1	25	1	7.32	-347	2.3×10^{-10}	25	7.32	-5.78	$UO_2(am)$	旧	4.1792×10^{-5}	4.178×10^{-5}
2	⇩	1	7.56	-335	2.7×10^{-10}	⇩	7.56	-5.58	$UO_2(am)$	旧	4.1798×10^{-5}	4.178×10^{-5}
3	⇩	3	7.18	-332	2.5×10^{-10}	⇩	7.18	-5.53	$UO_2(am)$	旧	4.1789×10^{-5}	4.178×10^{-5}
4	⇩	3	7.01	-328	2.4×10^{-10}	⇩	7.01	-5.47	$UO_2(am)$	旧	4.1787×10^{-5}	4.178×10^{-5}
5	⇩	7	7.57	-340	3.2×10^{-10}	⇩	7.57	-5.67	$UO_2(am)$	旧	4.1798×10^{-5}	4.178×10^{-5}
6	⇩	7	7.19	-321	3.0×10^{-10}	⇩	7.19	-5.35	$UO_2(am)$	旧	4.1789×10^{-5}	4.178×10^{-5}
7	⇩	14	7.70	-320	3.6×10^{-10}	⇩	7.70	-5.33	$UO_2(am)$	旧	4.1804×10^{-5}	4.178×10^{-5}
8	⇩	14	7.29	-329	4.6×10^{-10}	⇩	7.29	-5.48	$UO_2(am)$	旧	4.1791×10^{-5}	4.178×10^{-5}
9	⇩	30	7.14	-315	3.1×10^{-10}	⇩	7.14	-5.25	$UO_2(am)$	旧	4.1789×10^{-5}	4.178×10^{-5}
1	⇩	1	7.32	-347	2.3×10^{-10}	⇩	7.32	-5.78	$UO_2(am)$	新	3.6142×10^{-5}	3.614×10^{-5}
2	⇩	1	7.56	-335	2.7×10^{-10}	⇩	7.56	-5.58	$UO_2(am)$	新	3.6142×10^{-5}	3.614×10^{-5}
3	⇩	3	7.18	-332	2.5×10^{-10}	⇩	7.18	-5.53	$UO_2(am)$	新	3.6141×10^{-5}	3.614×10^{-5}
4	⇩	3	7.01	-328	2.4×10^{-10}	⇩	7.01	-5.47	$UO_2(am)$	新	3.6141×10^{-5}	3.614×10^{-5}
5	⇩	7	7.57	-340	3.2×10^{-10}	⇩	7.57	-5.67	$UO_2(am)$	新	3.6142×10^{-5}	3.614×10^{-5}
6	⇩	7	7.19	-321	3.0×10^{-10}	⇩	7.19	-5.35	$UO_2(am)$	新	3.6141×10^{-5}	3.614×10^{-5}
7	⇩	14	7.70	-320	3.6×10^{-10}	⇩	7.70	-5.33	$UO_2(am)$	新	3.6143×10^{-5}	3.614×10^{-5}
8	⇩	14	7.29	-329	4.6×10^{-10}	⇩	7.29	-5.48	$UO_2(am)$	新	3.6142×10^{-5}	3.614×10^{-5}
9	⇩	30	7.14	-315	3.1×10^{-10}	⇩	7.14	-5.25	$UO_2(am)$	新	3.6141×10^{-5}	3.614×10^{-5}

表3.2-13　　実験データ解析結果のまとめ

入力条件													計算結果		
解析ケース	初期溶液				熱力学データベース	UO_2(am)			UO_2(cr)			取り扱う固相	濃度 mol/L	時間(時間)	結果の図番号
	温度 ℃	pH (-)	Eh (mV)	UO_2(am) 溶解度 mol/L		初期量 mol/L	表面積 cm^2	溶解k mol/cm^2-sec	初期量 mol/L	表面積 cm^2	沈澱k mol/cm^2-sec				
1	25	7.32 測定	-347 測定	1.0 e-08 Rai実験値	新	1.7e-2 測定	0.1 仮定	2.00e-16 Bruno 文献	1.00e-07 仮定	1.0e-04 仮定	2.00e-09 Bruno 文献	UO_2(am) UO_2(cr)	4.50e-10	2.16	3.2-2 3.2-3
2	25	7.32 測定	-347 測定	1.0 e-08 Rai実験値	新	1.7e-2 測定	0.1 仮定	2.00e-13 Bruno 文献	1.00e-07 仮定	1.0e-04 仮定	2.00e-09 Bruno 文献	UO_2(am) UO_2(cr)	4.06e-10	2.82	3.2-4 3.2-5
3	25	7.32 測定	-347 測定	1.0 e-08 Rai実験値	新	1.7e-2 測定	1.0 仮定	2.00e-16 Bruno 文献	1.00e-07 仮定	1.0e-04 仮定	2.00e-09 Bruno 文献	UO_2(am) UO_2(cr)	4.53e-10	2.15	3.2-6 3.2-7
4	25	7.32 測定	-347 測定	1.0 e-08 Rai実験値	新	1.7e-2 測定	0.1 仮定	2.00e-12 仮定	1.00e-07 仮定	1.0e-04 仮定	2.00e-09 Bruno 文献	UO_2(am) UO_2(cr)	6.38e-10	約 90	3.2-8 3.2-9
5	25	7.32 測定	-347 測定	1.0 e-08 Rai実験値	新	1000.0 仮定	0.1 仮定	2.00e-13 Bruno 文献	1.00e-07 仮定	1.0e-04 仮定	2.00e-09 Bruno 文献	UO_2(am) UO_2(cr)	4.06e-10	2.82	3.2-10 3.2-11
6	25	7.32 測定	-347 測定	1.0 e-08 Rai実験値	新	1000.0 仮定	0.1 仮定	2.00e-13 Bruno 文献	1.00e-07 仮定	1.0e-04 仮定	1.00e-09	UO_2(am) UO_2(cr)	4.74e-10	6.56	3.2-12 3.2-13
7	25	7.32 測定	-347 測定	1.0 e-08 Rai実験値	新	1000.0 仮定	0.1 仮定	2.00e-12 仮定	1.00e-07 仮定	1.0e-04 仮定	2.00e-09 Bruno 文献	UO_2(am) UO_2(cr)	7.15e-10	30.70	3.2-14 3.2-15
8															
9															
10															

4. まとめ

ウランの非晶質固相の結晶質固相への変化を実験的に求めるとともに、得られた結果を解析し、メカニズムの推定に基づく沈澱／溶解の速度式、速度定数を求めることを目的に試験を行い、以下のような知見を得た。

(1) 濃塩酸により金属ウランを溶解することにより、U（Ⅳ）の溶液を作製し、これにアルカリを添加することにより、ウランの沈澱固相を得た。X線回折により、この固相はウランの非晶質固相であること、ＴＧ／ＤＴＡ測定により、乾燥された固相は、１モルの結晶水が結合した状態であることを確認した。

(2) 固相の変遷試験において、初期の非晶質固相はその一部が素早く結晶化し、２５℃、３０日後では約４０％の結晶化度を得た。また、温度が高く（５０℃）なると、結晶化が促進されることがわかった。

これに対し、ウラン濃度はほとんど変化せず、～10^{-10} mol/ℓであった。また、ろ過時のフィルターのポアサイズにより３オーダーの濃度差が生じること、およびウラン濃度そのものも各研究者によって数オーダーもの相違が生じることが明らかになった。

(3) 既存の熱力学データベースを用いた平衡論モデルによる実験予備解析の結果、ウラン濃度が約10^{-10}(mol/ℓ）における支配固相は、UO_2(cr）であり、支配化学種は$U(OH)_4$(aq)であると推定された。ただし、実験における固相はUO_2(am）が支配的であること、また、Dr. Rai らのUO_2(am）の溶解度試験では、溶解度が10^{-8}(mol/ℓ）と報告されていることから、既存の熱力学データではこれまでに実施された試験データを十分に説明することができない。従って、今後は既存の熱力学データの出典についても十分に調査するとともに、UO_2(am）、UO_2(cr）の溶解度試に基づき溶解度および化学種の熱力学データを取得する必要がある。

(4) 本研究では、溶液中のウラン濃度の変化が見られなかったため、速度定数の取得は出来なかった。これらのことから、今回は、調査で得られた速度定数[UO_2(cr)沈殿速度定数] を引用し、且つ不明な情報についてはパラメータとして速度論モデルによる解析を行った。その結果、UO_2(am）の溶解速度定数が 2.0×10^{-13}(mol/cm²-sec）、UO_2(cr）の沈殿速度定数が 1.0×10^{-09}(mol/cm²-sec）の場合に溶

液中のウラン濃度は、約 5時間後にUO_2(cr) の溶解度 [約10^{-10}(mol/ℓ)] に近づき、実験値とほぼ一致することを確認した。ただし、これらのモデル解析においては、試験開始時間における溶液濃度、溶解速度定数を仮定していることから、今後は実験によりデータを取得する必要がある。

(5) 以上のことから本研究に関する今後の取り組むべき課題としては以下に示すような項目が考えられる。

・モデル解析の初期条件として必要となる、実験を開始した時点における溶液中のウラン濃度と固相の変遷挙動の解明

・UO_2(cr) 溶解度、およびU(IV) 存在形態の把握

・変遷過程の明確化

－非結晶質 ⇨ 溶液中への溶解 ⇨ 結晶質へ沈殿

－非結晶質 ⇨ 結晶質 (固相の変質)

5. 参考文献

(1)Dhanpat Rai, A.R.Felmy, and J.L.Ryan : Inorg.Chem.1990,29,260-264

(2)Yu.P.Davydov, （坂上正信、市川富士夫　訳）
溶液中の放射性核種の存在状態、pp.128-137, 現代工学社

(3)Bruno,J.;Casas,;Lagerman,B.;Munoz,M. In Scientific Basis for Nuclear Waste Management X;Bates,J.K.,Seefeldt,W.B.,Eds.;Materials Research Society Proceedings 84;Materials Research Society: Pittsburgh,PA,1987;PP 153～160.

付録 A

平衡定数算出根拠，チェックシート

表. A-1　　平衡定数のチェックシート

化学種	$(UO_2)_3(CO_3)_6^{6-}$		
反応式	$6CO_3^{2-} + 3U^{4+} + 6H_2O(l) - 12H^+ - 6e^-$		
G_f (CO_3^{2-})	①	- 527.899 × 6 =	P. 71 参照
G_f (U^{4+})	②	- 529.860 × 3 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	-237.140 × 6 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 6179.814	
G_f (化学種)	⑦	= - 6333.284	P. 46 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 153.47	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = - 26.895		
備　考			

表.A-2　　平衡定数のチェックシート

化学種	$(UO_2)_3(OH)_5CO_3^+$		
反応式	$CO_3^{2-} + 3U^{4+} + 6H_2O(l) - 12H^+ - 6e^-$		
G_f (CO_3^{2-})	①	= -527.899	P. 71 参照
G_f (U^{4+})	②	- 529.860 × 3 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 6 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 3540.319	
G_f (化学種)	⑦	=	P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表. A-3　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U(CO_3)_4^{4-}$		
反応式	$4CO_3^{2-} + U^{4+}$		
G_f (CO_3^{2-})	①	$-527.899 \times 4 =$	P. 71 参照
G_f (U^{4+})	②	$= -529.860$	P. 30 参照
G_f (　　)	③		P.　　参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G = -2641.456$	
G_f (化学種)	⑦	$= -2841.925$	P. 46 参照
ΔG_r	⑧= ⑦−⑥	$\Delta G_r = -200.469$	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 35.132		
備　考			

表. A-4　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U(CO_3)_5^{-6}$		
反応式	$5CO_3^{2-} + U^{4+}$		
G_f (CO_3^{2-})	①	- 527.899 × 5 =	P. 71 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (　　)	③		P.　　参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 3169.355	
G_f (化学種)	⑦	= - 3363.431	P. 46 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 194.106	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 34.016		
備　考			

表.A-5　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2(CO_3)_2^{2-}$		
反応式	$2CO_3^{2-} + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (CO_3^{2-})	①	- 527.899 × 2 =	P. 71 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2059.938	
G_f (化学種)	⑦	= - 2105.044	P. 46 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 45.106	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 7.905		
備　考			

表. A-6　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2(CO_3)_3^{4-}$		
反応式	$3CO_3^{2-} + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (CO_3^{2-})	①	- 586.845 × 3 =	P. 71 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2587.837	
G_f (化学種)	⑦	= - 2659.543	P. 46 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 71.706	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 12.566		
備　考			

表. A-7　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2(CO_3)_3^{5-}$		
反応式	$3CO_3^{2-} + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - e^-$		
G_f (CO_3^{2-})	①	- 527.899 × 3 =	P. 71 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2587.837	
G_f (化学種)	⑦	= - 2586.994	P. 46 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 0.843	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = - 0.148		
備　考			

表.A-8　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2CO_3(aq)$		
反応式	$CO_3^{2-} + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (CO_3^{2-})	①	= - 527.899	P. 71 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	-237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1532.039	
G_f (化学種)	⑦	= - 1535.704	P. 46 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 3.665	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 0.642		
備　考			

表. A-9　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U(SO_4)_2(aq)$		
反応式	$2SO_4^{2-} + U^{4+}$		
G_f (SO_4^{2-})	①	- 744.004 × 2 =	P. 67 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (e^-)	③		P. 参照
G_f ( )	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2017.868	
G_f (化学種)	⑦	= - 2077.860	P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 59.992	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 10.513		
備　考			

表. A-10　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2(SO_3)_2^{2-}$		
反応式	$2SO_4^{2-} + U^{4+} + 2e^-$		
G_f (SO_4^{2-})	①	- 744.004 × 2 =	P. 67 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (e^-)	③		P. 参照
G_f ( )	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2017.868	
G_f (化学種)	⑦	=	P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表. A-11　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2(SO_4)_2^{2-}$		
反応式	$2SO_4^{2-} + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (SO_4^{2-})	①	- 744.004 × 2 =	P. 67 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2492.148	
G_f (化学種)	⑦	= - 2464.190	P. 41 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 27.954	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = - 4.899		
備　考			

表. A-12　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2S_2O_3(aq)$		
反応式	$2CO_4^{2-} + U^{4+} - 3H_2O + 6H^+ + 6e^-$		
G_f (SO_4^{2-})	①	$-744.004 \times 2 =$	P. 67 参照
G_f (U^{4+})	②	$= -529.860$	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	$-237.140 \times -3 =$	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	$= 0$	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G = -1306.448$	
G_f (化学種)	⑦	$= -1487.827$	P. 41 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	$\Delta G_r = -181.379$	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 31.786		
備　考			

表.A-13　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2SO_3(aq)$		
反応式	$SO_4^{2-} + U^{4+} + H_2O - 2H^+$		
G_f (SO_4^{2-})	①	= - 744.004	P. 67 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	= - 237.140	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1511.004	
G_f (化学種)	⑦	= - 1477.697	P. 41 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 33.307	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 5.837		
備　考			

表. A-14　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2SO_4(aq)$		
反応式	$SO_4^{2-} + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (SO_4^{2-})	①	= - 744.004	P. 67 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1748.144	
G_f (化学種)	⑦	= - 1714.535	P. 41 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 33.609	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = - 5.890		
備　考			

表.A-15　　平衡定数のチェックシート

化学種	USO_4^{2+}		
反応式	SO_4^{2-} + U^{4+}		
G_f (SO_4^{2+})	①	= - 744.004	P. 67 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (　　)	③		P.　　参照
G_f (　　)	④	=	P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1273.864	
G_f (化学種)	⑦	= - 1311.423	P. 41 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 37.559	
log K	= (⑧) / (-2.302 × 8.314×10^{-3}×298.15) = - 6.582		
備　考			

表. A-16　　平衡定数のチェックシート

化学種	UCl^{3+}		
反応式	$Cl^{-} + U^{4+}$		
G_f (Cl^{-})	①	= -131.217	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (　　)	③		P.　　参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 661.077	
G_f (化学種)	⑦	= - 670.895	P. 36 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 9.818	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 1.721		
備　考			

表.A-17　　平衡定数のチェックシート

化学種	UO_2Cl^+		
反応式	$Cl^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (Cl^-)	①	= - 131.217	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = 1135.357	
G_f (化学種)	⑦	= - 1084.738	P. 37 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 50.619	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 8.871		
備　考			

表.A-18　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2Cl_2(aq)$		
反応式	$2Cl^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (Cl^-)	①	$-131.217 \times 2 =$	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	$= -529.860$	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	$-237.140 \times 2 =$	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	$= 0$	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G = -1266.574$	
G_f (化学種)	⑦	$= -1208.707$	P. 37 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	$\Delta G_r = 57.867$	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) $= -10.141$		
備　考			

表.A-19　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2ClO_3^+$		
反応式	$Cl^- + U^{4+} + 5H_2O - 10H^+ - 8e^-$		
G_f (Cl^-)	①	= - 131.217	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 5 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1846.775	
G_f (化学種)	⑦	= - 963.308	P. 37 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 883.469	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 154.825		
備　考			

表. A-20　　平衡定数のチェックシート

化学種	$(UO_2)_2(OH)_2^{2+}$		
反応式	$2U^{4+} + 6H_2O - 10H^+ - 4e^-$		
G_f (U^{4+})	①	- 529.860 × 2 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 6 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e)	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2482.56	
G_f (化学種)	⑦	= - 2347.302	P. 33 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 135.258	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 23.704		
備　考			

表.A-21　　平衡定数のチェックシート

化学種	$(UO_2)_2OH^{3+}$		
反応式	$2U^{4+} + 5H_2O - 9H^+ - 4e^-$		
G_f (U^{4+})	①	- 529.860 × 2 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 5 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2245.42	
G_f (化学種)	⑦	= - 2126.830	P. 33 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 118.59	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 20.783		
備　考			

表.A-22　　平衡定数のチェックシート

化学種	$(UO_2)_3(OH)_4^{2+}$		
反応式	$3U^{4+} + 10H_2O - 16H^+ - 6e^-$		
G_f (U^{4+})	①	- 529.860 × 3 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 10 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 3960.98	
G_f (化学種)	⑦	= - 3738.287	P. 33 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 222.693	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = - 39.026		
備　考			

表.A-23　　平衡定数のチェックシート

化学種	$(UO_2)_3(OH)_5^+$		
反応式	$3U^{4+} + 11H_2O - 17H^+ - 6e^-$		
G_f (U^{4+})	①	- 529.860 × 3 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.180 × 11 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 4198.12	
G_f (化学種)	⑦	= - 3954.593	P. 33 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 243.527	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 42.677		
備　考			

表.A-24　　平衡定数のチェックシート

化学種	$(UO_2)_3(OH)_7^-$		
反応式	$3U^{4+} + 13H_2O - 19H^+ - 6e^-$		
G_f (U^{4+})	①	- 529.860 × 3 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 13 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = 4672.4	
G_f (化学種)	⑦	= - 4340.684	P. 33 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 331.716	
log K	= (⑧) / (-2.302 × 8.314×10^{-3}×298.15) = - 58.132		
備　考			

表.A-25　　平衡定数のチェックシート

化学種	$(UO_2)_4(OH)_7^+$		
反応式	$4U^{4+} + 15H_2O - 23H^+ - 8e^-$		
G_f (U^{4+})	①	- 529.860 × 4 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 15 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 5676.54	
G_f (化学種)	⑦	= - 5345.177	P. 33 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 331.363	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 58.070		
備　考			

表.A-26　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U(OH)_4(aq)$		
反応式	$U^{4+} + 4H_2O - 4H^+$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 4 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1478.42	
G_f (化学種)	⑦	= - 1452.500	P. 32 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 25.95	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 4.542		
備　考			

表. A-27　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U(OH)_5^-$		
反応式	$U^{4+} + 5H_2O - 5H^+$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 5 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1715.560	
G_f (化学種)	⑦	= - 1621.144	P. 32 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 94.416	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = - 16.546		
備　考			

表.A-28　　平衡定数のチェックシート

化学種	U^{3+}		
反応式	$U^{4+} + e^-$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (e^-)	②		P. 参照
G_f ( )	③		P. 参照
G_f ( )	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 529.860	
G_f (化学種)	⑦	= - 476.473	P. 30 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 53.387	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = - 9.356		
備　考			

表. A-29　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2(OH)_2(aq)$		
反応式	$U^{4+} + 4H_2O - 6H^+ - 2e^-$		
G_f (U^4)	①	= - 529.680	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 4	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1478.420	
G_f (化学種)	⑦	=> - 1368.038	P. 32 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 110.382	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = - 19.345		
備　考			

表.A-30　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2(OH)_3^-$		
反応式	$U^{4+} + 5H_2O - 7H^+ - 2e^-$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 5 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1715.56	
G_f (化学種)	⑦	= - 1554.377	P. 32 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 161.183	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 28.247		
備　考			

表. A-31　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2(OH)_4^{2-}$		
反応式	$U^{4+} + 6H_2O - 8H^+ - 2e^-$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 6 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = 1952.7	
G_f (化学種)	⑦	= - 1712.746	P. 32 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 239.954	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 42.051		
備　考			

表.A-32　　平衡定数のチェックシート

化学種	UO_2^+		
反応式	$U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - e^-$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1004.14	
G_f (化学種)	⑦	= - 961.021	P. 30 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 43.119	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 7.556		
備　考			

表. A-33　　平衡定数のチェックシート

化学種	UO_2^{2+}		
反応式	$U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1004.14	
G_f (化学種)	⑦	= - 952.551	P. 30 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 51.589	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = - 9.041		
備　考			

表.A-34　　平衡定数のチェックシート

化学種	UO_2OH^+		
反応式	$U^{4+} + 3H_2O - 5H^+ - 2e^-$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 3 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1241.28	
G_f (化学種)	⑦	= - 1160.009	P. 32 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 81.271	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = - 14.242		
備　考			

表.A-35　　平衡定数のチェックシート

化学種	UOH^{3+}		
反応式	$U^{4+} + H_2O - H^+$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	= - 237.140	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 767.000	
G_f (化学種)	⑦	= - 763.918	P. 31 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 3.082	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 0.540		
備　考			

表. A-36　　平衡定数のチェックシート

化学種	UF^{3+}		
反応式	$F^- + U^{4+}$		
G_f (F^-)	①	= - 281.523	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (　　)	③	=	P.　　参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 811.383	
G_f (化学種)	⑦	= - 864.354	P. 33 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 52.971	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 9.283		
備　考			

表.A-37　　平衡定数のチェックシート

化学種	UF_2^{2+}		
反応式	$2F^- + U^{4+}$		
G_f (F^-)	①	$-281.523 \times 2 =$	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	$= -529.860$	P. 30 参照
G_f (　　)	③	$= 0$	P.　　参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G = -1092.906$	
G_f (化学種)	⑦	$= -1185.548$	P. 33 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	$\Delta G_r = -92.642$	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 16.235		
備　考			

表.A-38　　平衡定数のチェックシート

化学種	UF_3^+		
反応式	$3F^- + U^{4+}$		
G_f (F^-)	①	-281.523×3 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= -529.860	P. 30 参照
G_f (　　)	③	=	P.　　参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤	=	P.　　参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G = -1374.429$	
G_f (化学種)	⑦	= -1497.723	P. 33 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	$\Delta G_r = -123.294$	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 21.607		
備　考			

表. A-39　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UF_4(aq)$		
反応式	$4F^- + U^{4+}$		
G_f (F^-)	①	- 281.523 × 4 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (　　)	③	=	P.　参照
G_f (　　)	④		P.　参照
G_f (　　)	⑤		P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1655.952	
G_f (化学種)	⑦	= - 1802.078	P. 33 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 146.126	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 25.608		
備　考			

表.A-40　　平衡定数のチェックシート

化学種	UF_5^-		
反応式	$5F^- + U^{4+}$		
G_f (F^-)	①	- 281.523 × 5 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (　　)	③		P.　　参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1937.475	
G_f (化学種)	⑦	= - 2091.650	P. 34 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 154.175	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 27.019		
備考			

表. A-41　　平衡定数のチェックシート

化学種	UF_6^{2-}		
反応式	$6F^- + U^{4+}$		
G_f (F^-)	①	- 281.523 × 6 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (　　)	③	=	P.　　参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2218.998	
G_f (化学種)	⑦	= - 2384.989	P. 34 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 165.991	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 29.089		
備　考			

表.A-42　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2F(aq)^-$		
反応式	$F^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - e^-$		
G_f (F^-)	①	= − 281.523	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= − 529.86	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	− 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^4)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①〜⑤	ΣG = − 1285.663	
G_f (化学種)	⑦	=	P.　　参照
ΔG_r	⑧= ⑦−⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表.A-43　　平衡定数のチェックシート

化学種	UO_2F^+		
反応式	$F^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (F^-)	①	= - 281.523	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤	= 0	P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1285.663	
G_f (化学種)	⑦	= - 1263.128	P. 35 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 22.535	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 3.949		
備　考			

表.A-44　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2F_2(aq)$		
反応式	$2F^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (F^-)	①	- 281.523 × 2 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	=	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1567.186	
G_f (化学種)	⑦	= - 1564.800	P. 35 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 2.386	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 0.418		
備　考			

表.A-45　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2F_3^-$		
反応式	$3F^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ 2e^-$		
G_f (F^-)	①	- 281.523 × 3 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1848.709	
G_f (化学種)	⑦	= - 1859.338	P. 35 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 10.629	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 1.863		
備　考			

表. A-46　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2F_4^{2-}$		
反応式	$4F^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (F^-)	①	- 281.523 × 4 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^4)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2130.232	
G_f (化学種)	⑦	= - 2145.427	P. 35 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 15.195	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 2.663		
備　考			

表. A-47　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U(OH)_2SO_4(c)$		
反応式	$-2H^+ + 2H_2O + SO_4^{2-} + U^{4+}$		
G_f (H^+)	①	= 0	P. 64 参照
G_f (H_2O)	②	-237.140×2 =	P. 64 参照
G_f (SO_4^{2-})	③	= − 744.004	P. 67 参照
G_f (H^{4+})	④	= − 529.860	P. 30 参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①〜⑤	ΣG = − 1748.144	
G_f (化学種)	⑦	= − 1766.223	P. 41 参照
ΔG_r	⑧= ⑦−⑥	ΔG_r = − 18.079	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = −3.168		
備　考			

表. A-48　　平衡定数のチェックシート

化学種	UO_2(AM)		
反応式	$-4H^+ + 2H_2O + U^{4+}$		
G_f (H^+)	①	= 0	P. 64 参照
G_f (H_2O)	②	-237.140 × 2 =	P. 参照
G_f (U^{4+})	③	= - 529.860	P. 30 参照
G_f ( )	④	=	P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦	=	P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表. A-49　　平衡定数のチェックシート

化学種	$Na_2U_2O_7(c)$		
反応式	$2Na^+ + 2U^{4+} + 7H_2O - 14H^+ - 4e^-$		
G_f (Na^+)	①	-261.953 × 2 =	P. 78 参照
G_f (U^{4+})	②	-529.860 × 2 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	-237.140 × 7 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 3243.606	
G_f (化学種)	⑦	= - 3011.454	P. 49 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = -232.152	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 40.684		
備　考			

表. A-50　　平衡定数のチェックシート

化学種	Na_2UO_4		
反応式	$2Na^{+} + U^{4+} + 4H_2O - 8H^{+} - 2e^{-}$		
G_f (Na^{+})	①	-261.953 × 2 =	P.　参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 4 =	P. 64 参照
G_f (H^{+})	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^{-})	⑤	= 0	P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2002.326	
G_f (化学種)	⑦	= - 1779.303 (α)	P. 49 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 223.023	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 39.084		
備　考			

表. A-51　　平衡定数のチェックシート

化学種	$USiO_4(am)$		
反応式	$H_4SiO_4(A) + U^{4+} - 4H^+$		
$G_f(H_4SiO_4aq)$	①	= - 1307.735	P. 72 参照
$G_f(U^{4+})$	②	= - 529.860	P. 30 参照
$G_f(H^+)$	③		P. 64 参照
$G_f(\quad)$	④		P. 参照
$G_f(\quad)$	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f（化学種）	⑦	=	P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= （ ⑧ ）/（ $-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$ ） =		
備　考			

表.A-52　　平衡定数のチェックシート

化学種	$USiO_4(c)$		
反応式	$H_4SiO_4(A) + U^{4+} - 4H^+$		
G_f (H_4SiO_4aq)	①	= - 1307.735	P. 72 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (　　)	④	= 0	P.　　参照
G_f (　　)	⑤	=	P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1837.598	
G_f (化学種)	⑦	= - 1883.600	P. 47 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 46.005	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 8.062		
備　考			

表. A-53　　平衡定数のチェックシート

化学種	$(UO_2)_2CO_3$		
反応式	$CO_3^{2-} + 2U^{4+} + 4H_2O - 8H^+ - 2e^-$		
G_f (CO_3^{2-})	①	= -527.899	P. 71 参照
G_f (U^{4+})	②	- 529.860 × 2 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^4)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦	=	P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表. A-54　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U(CO_3)_2$		
反応式	$2CO_3^{2-} + U^{4+}$		
G_f (CO_3^{2-})	①	-527.899　× 2　=	P. 71 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (　　)	③		P.　　参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦	=	P.　　参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (　⑧　) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) =		
備　考			

表. A-55　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UC_2(c)$		
反応式	$2CO_3^{2-} + U^{4+} - 6H_2O + 12H^+ + 12e^-$		
$G_f(CO_3^{2-})$	①	$-527.899 \times 2 =$	P. 71 参照
$G_f(U^{4+})$	②	$= -529.860$	P. 30 参照
$G_f(H_2O)$	③	$-237.140 \times 6 =$	P. 64 参照
$G_f(H^+)$	④	$= 0$	P. 64 参照
$G_f(e^-)$	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G =$	
G_f（化学種）	⑦	=	P.　　参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	$\Delta G_r =$	
log K	= （　⑧　）/（$-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$） =		
備　考			

表. A-56　　平衡定数のチェックシート

化学種	UO_2CO_3		
反応式	$CO_3^{2-} + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ + 2e$		
G_f (CO_3^{2-})	①	= - 529.899	P. 71 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1532.039	
G_f (化学種)	⑦	= - 1563.046(c)	P. 46 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 31.007	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 5.43		
備　考			

表. A-57　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U(SO_3)_2(c)$		
反応式	$2SO_4^{2-} + U^{4+} - 2H_2O - 4H^+ - 4e^-$		
G_f (SO_4^{2-})	①	-744.004 × 2 =	P. 67 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤	= 0	P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1543.588	
G_f (化学種)	⑦	= - 1712.826	P. 41 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 169.238	
log K	= (⑧) / (-2.302 × 8.314×10^{-3}×298.15) = - 29.658		
備　考			

表. A-58　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U(SO_4)_2$		
反応式	$2SO_4^{2-} + U^{4+}$		
G_f (SO_4^{2-})	①	-744.004 × 2 =	P. 67 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (　　)	③		P.　　参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2017.868	
G_f (化学種)	⑦	= - 2084.521	P. 41 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 66.653	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = - 11.681		
備　考			

表. A-59　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2SO_3(c)$		
反応式	$SO_4^{2-} + U^{4+} + H_2O - 2H^+$		
$G_f(SO_4^{2-})$	①	= - 744.004	P. 67 参照
$G_f(U^{4+})$	②	= - 529.860	P. 30 参照
$G_f(H_2O)$	③	= - 237.140	P. 64 参照
$G_f(H^+)$	④	= 0	P. 64 参照
G_f( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1511.004	
G_f(化学種)	⑦	= - 1530.370	P. 41 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 19.366	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 3.394		
備　考			

表. A-60　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2SO_4(c)$		
反応式	$SO_4^{2-} + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (SO_4^{2-})	①	= - 744.004	P. 67 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④		P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1748.144	
G_f (化学種)	⑦	= - 1685.776	P. 41 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 62.368	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 10.930		
備　考			

表. A-61　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2SO_{4.3}$		
反応式	$SO_4^{2-} + U^{4+} + 5H_2O - 3H^+ - e^-$		
G_f (SO_4^{2-})	①	= - 744.004	P. 67 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 5 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦	=	P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表.A-62　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2SO_{4.3}$		
反応式	$SO_4^{2-} + U^{4+} + 5H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (SO_4^{2-})	①	= - 744.004	P. 67 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 5 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦	=	P.　参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表.A-63　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2SO_4 \cdot 3H_2O(c)$		
反応式	$SO_4^{2-} + U^{4+} + 5H_2O - 4H^+ + 2e^-$		
G_f (SO_4^{2-})	①	= -744.004	P. 67 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 5 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2459.564	
G_f (化学種)	⑦	= - 2416.561	P. 41 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 43.003	
log K	= (⑧) / (-2.302 × 8.314×10^{-3}×298.15) = 7.536		
備　考			

表. A-64　　平衡定数のチェックシート

化学種	$(UO_2)_2Cl_3(c)$			
反応式	$3Cl^- + 2U^{4+} + 4H_2O - 8H^+ - 3e$			
G_f (Cl^-)	①	- 131.217 × 3 =		P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	- 529.860 × 2 =		P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 4 =		P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0		P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤	= 0		P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2401.931		
G_f (化学種)	⑦	= - 2234.755		P. 37 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 167.176		
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 29.297			
備　考				

表. A-65　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U_2O_2Cl_5(c)$		
反応式	$5Cl^- + 2U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - e^-$		
G_f (Cl^-)	①	- 131.217 × 5 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	- 529.860 × 2 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2190.085	
G_f (化学種)	⑦	= - 2037.307	P. 37 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 152.778	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 26.774		
備　考			

表. A-66　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U_5O_{12}Cl(c)$		
反応式	$Cl^- + 5U^{4+} + 12H_2O - 24H^+ - 5e^-$		
$G_f(Cl^-)$	①	= - 131.217	P. 65 参照
$G_f(U^{4+})$	②	- 529.860 × 5 =	P. 30 参照
$G_f(H_2O)$	③	- 237.140 × 12 =	P. 64 参照
$G_f(H^+)$	④	= 0	P. 64 参照
$G_f(e^-)$	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = 5626.197	
G_f(化学種)	⑦	= - 5517.951	
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 108.246	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 18.970		
備　考			

表.A-67　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UCl_3(c)$		
反応式	$3Cl^- + U^{4+} + e^-$		
$G_f(Cl^-)$	①	-131.217×3	P. 65 参照
$G_f(U^{4+})$	②	$= -529.860$	P. 30 参照
$G_f(e^-)$	③		P. 参照
$G_f(\quad)$	④		P. 参照
$G_f(\quad)$	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G = -923.511$	
G_f(化学種)	⑦	$= -796.103$	P. 36 参照
ΔG_r	⑧= ⑦−⑥	$\Delta G_r = -127.408$	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 22.328		
備　考			

表. A-68　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UCl_4(c)$		
反応式	$4Cl^- + U^{4+}$		
G_f (Cl^-)	①	- 131.217 × 4	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	≒ - 529.860	P. 30 参照
G_f (　　)	③		P.　　参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = -1054.728	
G_f (化学種)	⑦	= -929.575	P. 36 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = -125.153	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 21.933		
備　考			

表. A-69　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UCl_5(c)$		
反応式	$5Cl^- + U^{4+} - e^-$		
G_f (Cl^-)	①	- 131.217 × 5	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (e^-)	③		P. 参照
G_f ( )	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1185.945	
G_f (化学種)	⑦	= - 930.115	P. 36 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = -225.83	
log K	= (⑧) / (-2.302 × 8.314×10^{-3}×298.15) = 44.833		
備　考			

表. A-70　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UCl_6(c)$		
反応式	$6Cl^- + U^{4+} - 2e^-$		
G_f (Cl^-)	①	-131.217 × 6 =	P. 65 参照
G_f (U^{4-})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (e^-)	③		P. 参照
G_f ( )	④		P. 参照
G_f ( )	⑤	= - 937.209	P. 36 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1317.162	
G_f (化学種)	⑦	= - 937.209	P. 39 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 379.953	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 66.586		
備　考			

表. A-71　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2Cl(c)$		
反応式	$Cl^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - e^-$		
G_f (Cl^-)	①	= - 131.217	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1135.357	
G_f (化学種)	⑦	= - 1095.253	P. 37 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 40.104	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 7.028		
備　考			

表.A-72　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2Cl_2(c)$		
反応式	$2Cl^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (Cl^-)	①	- 131.217 × 2 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	- 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1266.574	
G_f (化学種)	⑦	= - 1145.838	P. 37 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 120.736	
log K	= (⑧) / (-2.302 × 8.314×10^{-3}×298.15) = 21.159		
備　考			

表. A-73　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2Cl_2 \cdot 3H_2O(c)$		
反応式	$2Cl^- + U^{4+} + 5H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
$G_f(Cl^-)$	①	$-131.217 \times 2 =$	P. 65 参照
$G_f(U^{4+})$	②	-529.860	P. 30 参照
$G_f(H_2O)$	③	$-237.140 \times 5 =$	P. 64 参照
$G_f(H^+)$	④	$= 0$	P. 64 参照
$G_f(e^-)$	⑤		P.　参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G = -1977.994$	
G_f（化学種）	⑦	$= -1894.615$	P. 37 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	$\Delta G_r = -83.379$	
log K	$=$ （ ⑧ ）/（$-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$） $= 14.612$		
備　考			

表.A-74　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2Cl \cdot H_2O(c)$		
反応式	$2Cl^- + U^{4+} + 3H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (Cl^-)	①	- 131.217 × 2	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 3	P. 64 参照
G_f (H^+)	④		P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1503.714	
G_f (化学種)	⑦	= - 1405.003	P. 37 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 98.711	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 17.299		
備　考			

表.A-75　　平衡定数のチェックシート

化学種	UO_2ClOH		
反応式	$Cl^- + U^{4+} + 5H_2O - 5H^+ - 2e^-$		
G_f (Cl^-)	①	= 131.217	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 5	P. 64 参照
G_f (H^+)	④		P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦	=	P.　参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表.A-76　　平衡定数のチェックシート

化学種	UOCl(c)		
反応式	$Cl^- + U^{4+} + H_2O - 2H^+ + e^-$		
G_f (Cl^-)	①	= - 131.217	P. 65 参照
G_f (U^4)	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	= - 237.140	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 898.217	
G_f (化学種)	⑦	= - 785.654	P. 36 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = -112.563	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 19.726		
備　考			

表.A-77　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UOCl_2(c)$		
反応式	$2Cl^- + U^{4+} + H_2O - 2H^+$		
G_f (Cl^-)	①	-131.217 × 2 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	= - 237.140	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (　　)	⑤	=	P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1029.434	
G_f (化学種)	⑦	= - 998.478	P. 37 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 30.956	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 5.425		
備　考			

表.A-78　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UOCl_3(c)$		
反応式	$3Cl^- + U^{4+} + H_2O - 2H^+ - e^-$		
G_f (Cl^-)	①	-131.217×3 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= -529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	= -237.140	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G = -1160.651$	
G_f (化学種)	⑦	= -1045.576	P. 37 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	$\Delta G_r = -115.075$	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 20.167		
備　考			

表. A-79　　平衡定数のチェックシート

化学種	$(UO_2)_2Cl_3(c)$		
反応式	$3Cl^- + 2U^{4+} + 4H_2O - 8H^+ - 3e^-$		
G_f (Cl^-)	①	- 131.217 × 3 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	- 529.860 × 2 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 4 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2401.931	
G_f (化学種)	⑦	= - 2234.755	P. 37 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 167.176	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 29.297		
備　考			

表. A-80　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U_2O_2Cl_5(c)$		
反応式	$5Cl^- + 2U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - e^-$		
$G_f(Cl^-)$	①	$-131.217 \times 5 =$	P. 65 参照
$G_f(U^{4+})$	②	$-529.860 \times 2 =$	P. 30 参照
$G_f(H_2O)$	③	$-237.140 \times 2 =$	P. 64 参照
$G_f(H^+)$	④	$= 0$	P. 64 参照
$G_f(e^-)$	⑤		P.　参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G = 2190.085$	
G_f（化学種）	⑦	$= -2037.307$	P. 37 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	$\Delta G_r = -152.778$	
log K	$=$ （ ⑧ ）/（ $-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$ ） $= 26.774$		
備　考			

表. A-81　　平衡定数のチェックシート

化学種	U_3O_7(bet)		
反応式	$3U^{4+} + 7H_2O - 14H^+ - 2e^-$		
G_f (U^{4+})	①	- 529.860 × 3 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 7 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 4102.671	
G_f (化学種)	⑦	=	P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表.A-82　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U_3O_8(c)$		
反応式	$3U^{4+} + 8H_2O - 16H^+ - 4e^-$		
G_f (U^{4+})	①	- 529.860 × 3 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 8 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦	=	P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表. A-83　　平衡定数のチェックシート

化学種	U_4O_9(bet)		
反応式	$4U^{4+} + 9H_2O - 18H^+ + 2e^-$		
G_f (U^{4+})	①	- 529.860 × 4 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 9 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	=	P. 64 参照
G_f (e^-)	④	=	P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦	=	P. 36 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表.A-84　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2(OH)_2(aq)$		
反応式	$U^{4+} + 4H_2O - 6H^+ - 2e^-$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 ×4 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④	= 0	P. 参照
G_f ( )	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦	> - 1368.038	P. 32 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表.A-85　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2(PO_3)_2$		
反応式	$2PO_4^{3-} + U^{4+} - 2e^-$		
G_f (PO_4^{3-})	①	- 1025.491 × 2 =	P. 69 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (e^-)	③	=	P. 参照
G_f ( )	④	=	P. 参照
G_f ( )	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2580.842	
G_f (化学種)	⑦	=	P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) =		
備　考			

表. A-86　　平衡定数のチェックシート

化学種	URANINIT		
反応式	$U^{4+} + 2H_2O - 4e^-$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (e^-)	③	=	P. 参照
G_f ( )	④	= 0	P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1004.14	
G_f (化学種)	⑦	= - 1031.833	P. 30 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 27.693	
log K	= (⑧) / (-2.302 × 8.314×10^{-3}×298.15) = - 4.85		
備　考			

表.A-87　　平衡定数のチェックシート

化学種	UO_3(alph)　　－		
反応式	$U^{4+} + 3H_2O - 6H^+ - 2e^-$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 3 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④	=	P.　参照
G_f (　)	⑤		P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1241.28	
G_f (化学種)	⑦	= - 1140.420	P. 31 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 100.86	
log K	= (⑧) / (-2.302 × 8.314×10^{-3}×298.15) = 17.675		
備　考			

表.A-88　　平衡定数のチェックシート

化学種	UO_3(bet)		
反応式	$U^{4+} + 3H_2O - 6H^+ - 2e^-$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 3 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1241.28	
G_f (化学種)	⑦	= - 1142.301	P. 31 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 98.979	
log K	= (⑧) / (-2.302 × 8.314×10^{-3}×298.15) = 17.346		
備　考			

表.A-89　　平衡定数のチェックシート

化学種	UO_3(gamm)		
反応式	$U^{4+} + 3H_2O - 6H^+ - 2e^-$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 3 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1241.28	
G_f (化学種)	⑦	= - 1145.739	P. 31 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 95.541	
log K	= (⑧) / (-2.302 × 8.314×10^{-3}×298.15) = 16.743		
備　考			

表. A-90　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_{3.0.9}H$		
反応式	$U^{4+} + 3H_2O - 5H^+ - e^-$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 5 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④	=	P. 参照
G_f ( )	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦	=	P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表.A-91　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_3 \cdot 2H_2O(c)$		
反応式	$U^{4+} + 5H_2O - 6H^+ - 2e^-$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 ×5 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	④	= 0	P. 参照
G_f ( )	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1715.56	
G_f (化学種)	⑦	- 1636.506	P. 32 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = -79.054	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) =13.854		
備　考			

表.A-92　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U_2F_9(c)$		
反応式	$9F^- + 2U^{4+} - e^-$		
G_f (F^-)	①	- 281.523 × 9 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	- 529.860 × 2 =	P. 30 参照
G_f (e^-)	③	=	P. 参照
G_f ( )	④	=	P. 参照
G_f ( )	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 3593.427	
G_f (化学種)	⑦	= - 3812.000	P. 34 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 218.573	
log K	= (⑧) / (-2.302 × 8.314×10^{-3}×298.15) = - 38.304		
備　考			

表. A-93　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U_2O_3F_6(c)$		
反応式	$6F^- + 2U^{4+} + 3H_2O - 6H^+ - 4e^-$		
G_f (F^-)	①	- 281.523 × 6 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	- 529.860 × 2 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 3 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P.　参照
G_f (e^-)	⑤		P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 3460.278	
G_f (化学種)	⑦	= - 3372.730	P. 35 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 87.548	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 15.342		
備　考			

表.A-94　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U_3O_5F_8(c)$		
反応式	$8F^- + 3U^{4+} + 5H_2O - 10H^+ - 6e^-$		
G_f (F^-)	①	- 281.523 × 8 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	- 529.860 × 3 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 5 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 5027.464	
G_f (化学種)	⑦	= - 4890.135	P. 35 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 137.329	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 24.066		
備　考			

表.A-95　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U_4F_{17}(c)$		
反応式	$17F^- + 4U^{4+} - e^-$		
G_f (F^-)	①	- 281.523 × 17 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	- 529.860 × 4 =	P. 30 参照
G_f (e^-)	③	=	P. 参照
G_f ( )	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 6905.331	
G_f (化学種)	⑦	= - 7464.000	P. 34 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 558.669	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 97.905		
備　考			

表.A-96　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UCl_2F_2(c)$		
反応式	$2F^- + 2Cl^- + U^{4+}$		
G_f (F^-)	①	- 281.523 × 2 =	P. 65 参照
G_f (Cl^-)	②	- 131.217 × 2 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	③	= 529.860	P. 30 参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1355.34	
G_f (化学種)	⑦	= - 1375.967	P. 38 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 20.627	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = - 3.615		
備　考			

表.A-97　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UCl_3F(c)$		
反応式	$F^- + 3Cl^- + U^{4+}$		
$G_f(F^-)$	①	= - 281.523	P. 65 参照
$G_f(Cl^-)$	②	- 131.217 × 3 =	P. 65 参照
$G_f(U^{4+})$	③	= - 529.860	P. 30 参照
G_f( )	④	=	P. 参照
G_f( )	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1205.034	
G_f(化学種)	⑦	= - 1146.573	P. 39 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 58.461	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 10.245		
備　考			

表.A-98　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UClF_3(c)$		
反応式	$3F^- + Cl^- + U^{4+}$		
G_f (F^-)	①	- 281.523 ×3 =	P. 65 参照
G_f (Cl^-)	②	= - 131.217	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	③	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (　　)	④	=	P.　　参照
G_f (　　)	⑤	=	P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1505.646	
G_f (化学種)	⑦	- 1606.360	P. 38 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 100.714	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 17.650		
備　考			

表.A-99　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UF_3(c)$		
反応式	$3F^- + U^{4+} - e^-$		
G_f (F^-)	①	$-281.523 \times 3 =$	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	$= -529.860$	P. 30 参照
G_f (e^-)	③	=	P. 参照
G_f ( )	④	=	P. 参照
G_f ( )	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G = -1374.429$	
G_f (化学種)	⑦	$= -1432.531$	P. 33 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	$\Delta G_r = 58.102$	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) $= -10.182$		
備　考			

表. A-100　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UF_4(c)$		
反応式	$4F^- + U^{4+}$		
G_f (F^-)	①	$-281.523 \times 4 =$	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	$= -529.860$	P. 30 参照
G_f (　　)	③	=	P.　　参照
G_f (　　)	④	=	P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G = -1655.952$	
G_f (化学種)	⑦	$= -1823.538$	P. 34 参照
ΔG_r	⑧= ⑦−⑥	$\Delta G_r = 167.586$	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) $= -29.369$		
備　考			

表. A-101　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UF_4 \cdot 2.5H_2O(c)$		
反応式	$4F^- + U^{4+} + 2H_2O + H^+ + e^-$		
G_f (F^-)	①	$-281.523 \times 4 =$	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	$= -529.860$	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	$-237.140 \times 2 =$	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	$= 0$	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G =$	
G_f (化学種)	⑦	$= -2440.282$	P. 35 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	$\Delta G_r =$	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) =		
備　考			

表.A-102　　平衡定数のチェックシート

化学種	UF_5 (alph)		
反応式	$5F^- + U^{4+} - e^-$		
G_f (F^-)	①	- 281.523 × 5 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (e^-)	③	=	P. 参照
G_f ( )	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1937.475	
G_f (化学種)	⑦	= - 1968.688	P. 34 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 31.213	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = - 5.470		
備　考			

表.A-103　　平衡定数のチェックシート

化学種	β - UF_5		
反応式	$5F^-$ + U^{4+} - e^-		
G_f (F^-)	①	- 281.523 × 5 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (e^-)	③	=	P. 参照
G_f ( )	④		P. 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1937.475	
G_f (化学種)	⑦	= - 1970.595	P. 34 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 33.120	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = - 5.804		
備　考			

表. A-104　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UF_6(c)$		
反応式	$6F^- + U^{4+} - 2e^-$		
$G_f(F^-)$	①	$-281.523 \times 6 =$	P. 65 参照
$G_f(U^{4+})$	②	$= -529.860$	P. 30 参照
$G_f(e^-)$	③	=	P. 参照
G_f ( )	④	=	P. 参照
G_f ( )	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G = -2218.998$	
G_f (化学種)	⑦	$= -2069.205$	P. 34 参照
ΔG_r	⑧= ⑦−⑥	$\Delta G_r = -149.793$	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 26.251		
備　考			

表.A-105　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2F_2(c)$		
反応式	$2F^- + U^{4+} + 2H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (F^-)	①	- 281.523 × 2 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	=	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤	=	P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1567.186	
G_f (化学種)	⑦	- 1434.127	P. 34 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = -133.059	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 23.318		
備　考			

表.A-106　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2F_2 \cdot 3H_2O(c)$		
反応式	$2F^- + U^{4+} + 5H_2O - 4H^+ - 2e^-$		
G_f (F^-)	①	- 281.523 × 2 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 5 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	=	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤	=	P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2278.606	
G_f (化学種)	⑦	= - 2269.658	P. 36 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = -8.948	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 1.568		
備　考			

表.A-107　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2FOH(c)$		
反応式	$F^- + U^{4+} + 3H_2O - 5H^+ - 2e^-$		
G_f (F^-)	①	= - 281.523	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	-237.140 × 3 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	=	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1522.803	
G_f (化学種)	⑦	=	P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表.A-108　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2FOH \cdot 2H_2O(c)$		
反応式	$F^- + U^{4+} + 5H_2O - 5H^+ + 2e^-$		
G_f (F^-)	①	= - 281.523	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 5 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1997.083	
G_f (化学種)	⑦	= - 1961.032	P. 35 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 36.051	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 6.318		
備　考			

表. A-109　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2FOH \cdot H_2O(c)$		
反応式	$F^- + U^{4+} - 4H_2O - 5H^+ - 2e^-$		
G_f (F^-)	①	= - 281.523	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 4 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④		P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P.　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1759.943	
G_f (化学種)	⑦	= - 1721.700	P. 35 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 38.243	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 6.702		
備　考			

表.A-110　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UOF_2(c)$		
反応式	$2F^- + U^{4+} + H_2O - 2H^+$		
G_f (F^-)	①	$-281.523 \times 2 =$	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	$= -529.860$	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	$= -237.140$	P. 64 参照
G_f (H^+)	④		P. 64 参照
G_f ( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G = -1330.046$	
G_f (化学種)	⑦	$= -1434.127$	P. 34 参照
ΔG_r	⑧= ⑦−⑥	$\Delta G_r = 104.081$	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) $= -18.240$		
備　考			

表. A-111　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UOF_2 \cdot H_2O(c)$		
反応式	$2F^- + U^{4+} + 2H_2O - 2H^+$		
G_f (F^-)	①	$-281.523 \times 2 =$	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	$= -529.860$	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	$-237.140 \times 2 =$	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	$= 0$	P. 64 参照
G_f (　　)	⑤	=	P.　　参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G = -1567.186$	
G_f (化学種)	⑦	$= -1674.474$	P. 35 参照
ΔG_r	⑧= ⑦−⑥	$\Delta G_r = 107.288$	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) $= -18.802$		
備　考			

表.A-112　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UOF_4(c)$		
反応式	$4F^- + U^{4+} + H_2O - 2H^+ - 2e^-$		
G_f (F^-)	①	-281.523×4 =	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= -529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	= -237.140	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	=	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	$\Sigma G = -1893.092$	
G_f (化学種)	⑦	-1816.264	P. 34 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	$\Delta G_r = -76.828$	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 13.464		
備　考			

表. A-113　　平衡定数のチェックシート

化学種	UOFOH(c)		
反応式	$F^- + U^{4+} + 2H_2O - 3H^+$		
G_f (F^-)	①	= - 281.523	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	=	P. 64 参照
G_f ( )	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1285.663	
G_f (化学種)	⑦	= - 1336.930	P. 35 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 51.267	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = - 8.984		
備　考			

表. A-114　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UOFOH \cdot 0.5H_2O(c)$		
反応式	$F^- + U^{4+} + 2H_2O - 2H^+ + e^-$		
G_f (F^-)	①	= − 281.523	P. 65 参照
G_f (U^{4+})	②	= − 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	③	−237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	④	=	P. 64 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①〜⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦	=	P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦−⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) =		
備　考			

表.A-115　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2CU_3(c)$		
反応式	$UO_2^{2+} + CO_3^{2-}$		
G_f (UO_2^{2+})	①	= - 952.551	P. 30 参照
G_f (CO_3^{2-})	②	= - 527.899	P. 71 参照
G_f (　　)	③	=	P.　　参照
G_f (　　)	④	=	P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1480.45	
G_f (化学種)	⑦	= - 1563.046	P. 46 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 82.596	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = - 14.475		
備　考			

表. A-116　　平衡定数のチェックシート

化学種	UO_2OH^-		
反応式	$UO_2^+ + H_2O - H^+$		
G_f (UO_2^+)	①	= - 961.021	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	= - 237.140	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (　　)	④		P.　　参照
G_f (　　)	⑤		P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦	=	P.　　参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表. A-117　　平衡定数のチェックシート

化学種	$NaUO_3(c)$		
反応式	$UO_2^+ + H_2O - 2H^+ + Na^+$		
$G_f(UO_2^+)$	①	= - 961.021	P. 30 参照
$G_f(H_2O)$	②	= - 237.140	P. 64 参照
$G_f(H^+)$	③	= 0	P. 64 参照
$G_f(Na^+)$	④	= - 291.953	P. 78 参照
G_f( )	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1490.114	
G_f(化学種)	⑦	= - 1412.495	P. 49 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 77.619	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 13.602		
備　考			

表. A-118　　平衡定数のチェックシート

化学種	Na_2UO_4		
反応式	$UO_2^{2+} + 2H_2O - 4H^+ + 2Na^+$		
G_f (UO_2^{2+})	①	= - 952.551	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	=	P. 64 参照
G_f (Na^+)	④	-261.953 × 2 =	P. 78 参照
G_f (　　)	⑤	=	P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1950.737	
G_f (化学種)	⑦	= - 1779.303	P. 49 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 171.434	
log K	= (⑧) / (-2.302 × 8.314×10^{-3}×298.15) = 30.043		
備　考			

表. A-119　　平衡定数のチェックシート

化学種	$Na_3UO_4(c)$		
反応式	$UO_2^{+} + 2H_2O - 4H^{+} + 3Na^{+}$		
G_f (UO_2^{+})	①	= - 961.021	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^{+})	③	=	P. 64 参照
G_f (Na^{+})	④	- 261.953 × 3 =	P. 78 参照
G_f (　　)	⑤	=	P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2221.16	
G_f (化学種)	⑦	- 1899.909	P. 49 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 321.251	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 56.298		
備　考			

表. A-120　　平衡定数のチェックシート

化学種	$Na_2U_2O_7(c)$		
反応式	$2UO_2^{2+} + 3H_2O - 6H^+ + 2Na^+$		
G_f (UO_2^{2+})	①	- 952.551 × 2 =	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 3 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	=	P. 64 参照
G_f (Na^+)	④	-261.953 × 2 =	P. 78 参照
G_f ( )	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 3140.428	
G_f (化学種)	⑦	= - 3011.454	P. 49 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 128.974	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) = 22.602		
備　考			

表. A-121　　平衡定数のチェックシート

化学種	$CaUO_4(c)$		
反応式	$UO_2^{2+} + 2H_2O - 4H^+ + Ca^{2+}$		
G_f (UO_2^{2+})	①	= - 952.551	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	= 0	P. 64 参照
G_f (Ca^{2+})	④	= - 552.806	P. 77 参照
G_f (	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = -1979.637	
G_f (化学種)	⑦	= - 1888.706	P. 47 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 90.931	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) = 15.935		
備　考			

表.A-122　　平衡定数のチェックシート

化学種	$(UO_2)_3(PO_4)_2$		
反応式	$3U^{4+} - 12H^+ - 6e^- + 6H_2O + 2PO_4^{3-}$		
G_f (U^4)	①	- 529.860 × 3 =	P. 30 参照
G_f (H^+)	②	=	P. 64 参照
G_f (e^-)	③	=	P. 参照
G_f (H_2O)	④	- 237.140 × 6 =	P. 64 参照
G_f (PO_4^{3-})	⑤	- 1025.491 × 2 =	P. 69 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦	=	P. 47 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) =		
備　考			

表. A-123　　平衡定数のチェックシート

化学種	$H_2UO_2PO_4$		
反応式	$2U^{4+} - 6H^+ - 4e^- + 4H_2O + 2PO_4^{3-}$		
G_f (U^{4+})	①	- 529.86 × 2 =	P. 30 参照
G_f (H^+)	②	=	P. 64 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 4 =	P. 64 参照
G_f (PO_4^{3-})	④	- 1025.491 × 2 =	P. 69 参照
G_f (e^-)	⑤		P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦	=	P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) =		
備　考			

表.A-124　　平衡定数のチェックシート

化学種	$UO_2HPO_4(aq)$		
反応式	$U^{4+} - 3H^+ - 2e^- + 2H_2O + PO_4^{3-}$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H^+)	②	= 0	P. 64 参照
G_f (e^-)	③	= 0	P. 参照
G_f (H_2O)	④	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (PO_4^{3-})	⑤	= - 1025.491	P. 69 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 2029.631	
G_f (化学種)	⑦	= - 2089.862	P. 44 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = 60.231	
log K	= (⑧) / (-2.302 × 8.314×10^{-3}×298.15) = - 10.555		
備　考			

表.A-125　　平衡定数のチェックシート

化学種	$U(HPO_4)_2$		
反応式	$U^{4+} + 4H_2O + 2H^+ + 2PO_4^{3-}$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 4 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	=	P. 64 参照
G_f (PO_4^{3-})	④	- 1025.491 × 2 =	P. 69 参照
G_f ( )	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦	=	P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314\times10^{-3}\times298.15$) =		
備　考			

表. A-126　　平衡定数のチェックシート

化学種	$MgUO_4(c)$		
反応式	$UO_2^{2+} + 2H_2O - 4H^+ + Mg^{2+}$		
G_f (UO_2^{2+})	①	= - 952.551	P. 30 参照
G_f (H_2O)	②	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (H^+)	③	=	P. 64 参照
G_f (Mg^{2+})	④	= - 455.375	P. 76 参照
G_f (　　)	⑤	=	P.　　参照
	⑥= ①～⑤	ΣG = - 1882.206	
G_f (化学種)	⑦	- 1749.601	P. 47 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r = - 132.605	
log K	= (⑧) / (-2.302 × 8.314×10^{-3}×298.15) = - 23.239		
備　考			

表.A-127　　平衡定数のチェックシート

化学種	$CaUPO_4$		
反応式	$U^{4+} + Ca^{2+} + 2H_2O + 2PO_4^{3-}$		
G_f (U^{4+})	①	= - 529.860	P. 30 参照
G_f (Ca^{2+})	②	= - 552.806	P. 77 参照
G_f (H_2O)	③	- 237.140 × 2 =	P. 64 参照
G_f (PO_4^{3-})	④	- 1025.491 × 2 =	P. 69 参照
G_f ( )	⑤	=	P. 参照
	⑥= ①～⑤	ΣG =	
G_f (化学種)	⑦		P. 参照
ΔG_r	⑧= ⑦－⑥	ΔG_r =	
log K	= (⑧) / ($-2.302 \times 8.314 \times 10^{-3} \times 298.15$) =		
備　考			

付録　B

PHREEQE　熱力学データベース

```
  1 ELEMENTS
  2 ca          4          40.     ca+2
  3 mg          5          24.     mg+2
  4 na          6          23.     na+
  5 k           7          39.     k+
  6 fe          8          56.     fe+2
  7 mn          9          55.     mn+2
  8 al         10          27.     al+3
  9 ba         11         137.     ba+2
 10 sr         12          88.     sr+2
 11 si         13          96.     h4sio4(aq)
 12 cl         14          35.     cl-
 13 c          15          60.     co3-2
 14 s          16          96.     so4-2
 15 n          17          62.     no3-
 16 b          18          62.     b(oh)3(aq)
 17 p          19          95.     po4-3
 18 f          20          19.     f-
 19 li         21           7.     li+
 20 br         22          80.     br-
 21 i          23         127.     i-
 22 tc         24         115.     tco+2
 23 u          25         238.     u+4
 24 co         27          59.     co+2
 25 am         28         243.     am+3
 26 pu         29         239.     pu+4
 27 cs         30         133.     cs+
 28 ni         31          59.     ni+2
 29 se         32         143.     seo4-2
 30 zr         33          91.     zr+4
 31 sn         34         119.     sn+2
 32 sm         35         150.     sm+3 no species
 33 pb         36         207.     pb+2
 34 ra         37         226.     ra+2
 35 th         38         232.     th+4
 36 pa         39         231.     pa+4
 37 np         40         237.     np+4
 38 nb         41         141.     nbo3-
 39 pd         42         106.     pd+2
 40 ag         43                  no species
 41 nd         44         144.     nd+3
 42 z          45        1080.     z-
 43 sb         46         154.     sbo2-
 44 bi         47         209.     bi+3
 45 po         48         209.     po+4
 46 ac         49         227.     ac+3
 47 cm         50         247.     cm+3
 48
 49 SPECIES
 50   1
 51 H+          100     1.000     0.000     9.000     0.000     0.000     0.
 52  0.0       0.0
 53   1 1.0
 54   2
 55 E-          100    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
 56  0.0       0.0
 57   2 1.0
 58   3
 59 H20(l)      100     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
 60  0.0       0.0
 61   3 1.0
 62   4
 63 ca+2        101     2.000     0.000     6.000     5.000     0.165     0.
 64  0.0       0.0
 65   4 1.0
 66   5
 67 mg+2        101     2.000     0.000     8.000     5.500     0.200     0.
 68 0.0       0.0
 69   5 1.0
 70   6
 71 na+         101     1.000     0.000     4.000     4.000     0.075     0.
 72 0.0       0.0
 73   6 1.0
 74   7
 75 k+          101     1.000     0.000     3.000     3.500     0.015     0.
 76 0.0       0.0
 77   7 1.0
 78   8
 79 fe+2        100     2.000     2.000     6.000     0.000     0.000     0.
 80 0.0       0.0
 81   8 1.0
 82   9
 83 mn+2        100     2.000     2.000     6.000     0.000     0.000     0.
 84  0.0       0.0
 85   9 1.0
 86  10
 87 al+3        100     3.000     0.000     9.000     0.000     0.000     0.
 88  0.0       0.0
 89  10 1.0
 90  11
 91 ba+2        100     2.000     0.000     5.000     0.000     0.000     0.
 92  0.0       0.0
 93  11 1.0
 94  12
 95 sr+2        101     2.000     0.000     5.000     5.260     0.121     0.
 96  0.0       0.0
```

```
 97  12 1.0
 98  13
 99 h4sio4(a    100     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
100  0.0       0.0
101  13 1.0
102  14
103 cl-         101    -1.000     0.000     3.000     3.500     0.015     0.
104  0.0       0.0
105  14 1.0
106  15
107 co3-2       101    -2.000     4.000     4.500     5.400     0.000     2.
108  0.0       0.0
109  15 1.0
110  16
111 so4-2       101    -2.000     6.000     4.000     5.000    -0.040     0.
112  0.0       0.0
113  16 1.0
114  17
115 no3-        100    -1.000     5.000     3.000     0.000     0.000     0.
116  0.0       0.0
117  17 1.0
118  18
119 b(oh)3(a    100     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
120 0.0       0.0
121  18 1.0
122  19
123 po4-3       100    -3.000     0.000     4.000     0.000     0.000     2.
124  0.0       0.0
125  19 1.0
126  20
127 f-          100    -1.000     0.000     3.500     0.000     0.000     0.
128  0.0       0.0
129  20 1.0
130  21
131 li+         100     1.000     0.000     6.000     0.000     0.000     0.
132 0.0       0.0
133  21 1.0
134  22
135 br-         100    -1.000     0.000     3.000     0.000     0.000     0.
136 0.0       0.0
137  22 1.0
138  23
139 i-          100    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
140 0.0       0.0
141  23 1.0
142  24
143 tco+2       100     2.000     4.000     0.000     0.000     0.000     0.
144 0.0       0.0
145  24 1.0
146  25
147 u+4         100     4.000     4.000     0.000     0.000     0.000     0.
148 0.0       0.0
149  25 1.0
150  27
151 co+2        100     2.000     2.000     0.000     0.000     0.000     0.
152 0.0       0.0
153  27 1.0
154  28
155 am+3        100     3.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
156 0.0       0.0
157  28 1.0
158  29
159 pu+4        100     4.000     4.000     0.000     0.000     0.000     0.
160 0.0       0.0
161  29 1.0
162  30
163 cs+         100     1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
164 0.0       0.0
165  30 1.0
166  31
167 ni+2        100     2.000     0.0       0.0       0.0       0.0       0.
168      0.0       0.0
169  31  1.000
170  32
171 seo4-2      100    -2.000     6.0       0.0       0.0       0.0       0.
172      0.0       0.0
173  32  1.000
174  33
175 zr+4        100     4.000     0.0       0.0       0.0       0.0       0.
176      0.0       0.0
177  33  1.000
178  34
179 sn+2        100     2.000     2.0       0.0       0.0       0.0       0.
180      0.0       1.0
181  34  1.000
182  35
183 sm+3        100     3.000     0.0       0.0       0.0       0.0       0.
184      0.0       0.0
185  35  1.000
186  36
187 pb+2        100     2.000     2.0       0.0       0.0       0.0       0.
188      0.0       0.0
189  36  1.000
190  37
191 ra+2        100     2.000     0.0       0.0       0.0       0.0       0.
192      0.0       0.0
```

```
193  37  1.000
194  38
195 th+4        100     4.000     0.0       0.0       0.0       0.0       0.
196      0.0       0.0
197  38  1.000
198  39
199 pa+4        100     4.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
200      0.0       0.0
201  39  1.000
202  40
203 np+4        100     4.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
204      0.0       0.0
205  40  1.000
206  41 for nbo3- from nbs table
207 nbo3-       100    -1.000     5.0       0.0       0.0       0.0       0.
208      0.0       0.0
209  41  1.000
210  42 for pd+2  from nea ref3200
211 pd+2        100     2.000     2.0       0.0       0.0       0.0       0.
212      0.0       0.0
213  42  1.000
214  44
215 nd+3        100     3.000     3.0       0.0       0.0       0.0       0.
216      0.0       0.0
217  44  1.000
218  45 for z from others
219  z-         100 -1.0      0.0       0.0                         0.0
220 0.0       0.0
221  45 1.0
222  46 for sbo2- from nbs table
223 sbo2-       100 -1.0      3.0       0.0                         0.0
224 0.0       0.0
225  46 1.0
226  47 for bi+3  from nbs table
227 bi+3        100  3.0      0.0       0.0                         0.0
228 0.0       0.0
229  47 1.0
230  48 for po+4  from nbs table
231 po+4        100  4.0      4.0       0.0                         0.0
232 0.0       0.0
233  48 1.0
234  49 for ac+3  from nea ref3200
235 ac+3        100  3.0      0.0       0.0                         0.0
236 0.0       0.0
237  49 1.0
238  50 for cm+3  from nea ref3200
239 cm+3        100  3.0      3.0       0.0                         0.0
240 0.0       0.0
241  50 1.0
242  61
243 oh-         200    -1.000     0.000     3.500     0.000     0.000     1.
244 -14.000   13.345
245   3 1.0     1 -1.0
246  62
247 o2 aq       300     0.000     4.000     0.000     0.000     0.000     0.
248 -86.08    134.79
249   3 2.0     1 -4.0    2 -4.0
250  63
251 h2 aq       200     0.000    -2.000     0.000     0.000     0.000     0.
252 -3.15     -1.759
253   1 2.0     2 2.0
254  64
255 hco3-       211    -1.000     4.000     4.500     5.400     0.000     1.
256  10.330    -3.561    107.8871    0.03252849  -5151.79    -38.92561   563713.9
257  15 1.0     1 1.0
258  65
259 h2co3       210     0.000     4.000     0.000     0.000     0.000     0.
260  16.681    -5.738    464.1965    0.09344813  -26986.16   -165.75951  2248628.9
261  15 1.0     1 2.0
262  66
263 ch4 aq      400     0.000    -4.000     0.000     0.000     0.000     0.
264  41.071    -61.039
265  15 1.0     1 10.0    2 8.0     3 -3.0
266  70
267 hso4-       210    -1.000     6.000     0.000     0.000     0.000     0.
268  2.000     4.91      -5.3505     0.0183412   557.2461
269  16 1.0     1 1.0
270  71
271 s-2         400    -2.000    -2.000     5.000     0.000     0.000     2.
272  20.735    -28.04
273  16 1.0     1 8.0     2 8.0     3 -4.0
274  72
275 hs-         400    -1.000    -2.000     3.500     0.000     0.000     1.
276  33.652    -40.14
277  16 1.0     1 9.0     2 8.0     3 -4.0
278  78
279 no2-        400    -1.000     3.000     3.000     0.000     0.000     0.
280  28.57     -43.76
281  17 1.0     1 2.0     2 2.0     3 -1.0
282  79
283 n2 aq       400     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
284  207.08    -312.13
285  17 2.0     1 12.0    2 10.0    3 -6.0
286  80
287 nh3(aq)     400     0.000    -3.000     0.000     0.000     0.000     1.
288  109.83    -174.58
```

```
289  17 1.0     1 9.0     2 8.0     3 -3.0
290  81
291 nh4+        400     1.000    -3.000     2.500     0.000     0.000     0.
292  119.070   -187.055
293  17 1.0     1 10.0    2 8.0     3 -3.0
294  82
295 nh4so4-     500    -1.000     3.000     0.000     0.000     0.000     0.
296  120.19   -187.055
297  17 1.0     1 10.0    2 8.0    16 1.0     3 -3.0
298  87
299 h2bo3-      200    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     1.
300 -9.240    3.224
301  18 1.0     1 -1.0
302  88
303 bfoh3-      200    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
304 -0.40     1.85
305  18 1.0    20 1.0
306  89
307 bf2oh2-     400    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
308 7.628     1.635
309  18 1.0    20 2.0     1 1.0     3 -1.0
310  90
311 bf3oh-      400    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
312 13.666    -1.58
313  18 1.0     1 2.0    20 3.0     3 -2.0
314  91
315 bf4-        400    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
316 20.274    -1.795
317  18 1.0     1 3.0    20 4.0     3 -3.0
318  95
319 hpo4-2      200    -2.000     0.000     4.000     0.000     0.000     1.
320  12.350    -3.53
321  19 1.0     1 1.0
322  96
323 h2po4-      200    -1.000     0.000     4.500     0.000     0.000     0.
324  19.550    -4.52
325  19 1.0     1 2.0
326  99
327 hf aq       200     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
328  3.170     3.46
329   1 1.0    20 1.0
330 100
331 hf2-        200    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
332  3.749     4.55
333   1 1.0    20 2.0
334 105
335 caoh+       .300    1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     1.
336  -12.598  14.535
337   4 1.0     3 1.0     1 -1.0
338 106
339 caco3       210     0.000     4.000     0.000     0.000     0.000     2.
340 3.225     3.547     -1228.732   -0.299440   35512.75     485.818
341   4 1.0    15 1.0
342 107
343 cahco3+     311     1.000     4.000     0.000     5.400     0.000     1.
344 11.435    -0.869    1317.0071   0.34546894  -39916.84    -517.70761  563713.9
345   4 1.0    15 1.0     1 1.0
346 108
347 caso4       200     0.000     6.000     0.000     0.000     0.000     0.
348 2.309     1.470
349   4 1.0    16 1.0
350 109
351 capo4-      200    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     2.
352 6.459     3.100
353   4 1.0    19 1.0
354 110
355 cahpo4      300     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000     1.
356 15.085    -0.230
357   4 1.0     1 1.0    19 1.0
358 111
359 cah2po4+    300     1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
360 20.961    -1.120
361   4 1.0     1 2.0    19 1.0
362 112
363 caf+        200     1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
364 0.940     3.798
365   4 1.0    20 1.0
366 115
367 mgoh+       300     1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     1.
368 -11.794   15.419
369   5 1.0     3 1.0     1 -1.0
370 116
371 mgco3       210     0.000     4.000     0.000     0.000     0.000     2.
372 2.981     2.535     -32.172     0.0          1093.486    12.72433
373   5 1.0    15 1.0
374 117
375 mghco3+     310     1.000     4.000     0.000     0.000     0.000     1.
376 11.397    -2.775    48.6721     0.03252849  -2614.335    -18.00263  563713.9
377   5 1.0     1 1.0    15 1.0
378 118
379 mgso4       200     0.000     6.000     0.000     0.000     0.000     0.
380 2.250     1.4
381   5 1.0    16 1.0
382 119
383 mgpo4-      200    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     2.
384 6.589     3.100
```

```
385   5 1.0    19 1.0
386 120
387 mghpo4      300     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000     1.
388 15.216    -0.230
389   5 1.0     1 1.0    19 1.0
390 121
391 mgh2po4+    300     1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
392 21.066    -1.120
393   5 1.0     1 2.0    19 1.0
394 122
395 mgf+        200     1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
396 1.820     4.674
397   5 1.0    20 1.0
398 125
399 naco3-      200    -1.000     4.000     0.000     0.000     0.000     2.
400 1.268     8.911
401   6 1.0    15 1.0
402 126
403 nahco3      300     0.000     4.000     0.000     0.000     0.000     1.
404 10.080    -3.604
405   6 1.0     1 1.0    15 1.0
406 127
407 naso4-      200    -1.000     6.000     0.000     0.000     0.000     0.
408 0.700     1.120
409   6 1.0    16 1.0
410 128
411 nahpo4-     300    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     1.
412 12.636    -3.530
413   6 1.0     1 1.0    19 1.0
414 130
415 kso4-       200    -1.000     6.000     0.000     0.000     0.000     0.
416 0.85      2.25
417   7 1.0    16 1.0
418 131
419 khpo4-      300    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     1.
420 12.636    -3.530
421   7 1.0     1 1.0    19 1.0
422 135
423 feoh+       300     1.000     2.000     0.000     0.000     0.000     1.
424 -9.500    13.2
425   8 1.0     3 1.0     1 -1.0
426 136
427 feoh2       300     0.000     2.000     0.000     0.000     0.000     2.
428 -20.570   28.565
429   8 1.0     3 2.0     1 -2.0
430 137
431 feoh3-      300    -1.000     2.000     0.000     0.000     0.000     3.
432 -31.000   30.300
433   8 1.0     3 3.0     1 -3.0
434 138
435 feso4       200     0.000     8.000     0.000     0.000     0.000     0.
436 2.25      3.23
437   8 1.0    16 1.0
438 139
439 fe(hs)2     500     0.000    -2.000     0.000     0.000     0.000     2.
440 76.250    -120.280
441   8 1.0    16 2.0     1 18.0    2 16.0    3 -8.0
442 140
443 fe(hs)3-    500    -1.000    -4.000     0.000     0.000     0.000     3.
444 111.937   -180.420
445   8 1.0    16 3.0     1 27.0    2 24.0    3 -12.0
446 141
447 fehpo4      300     0.000     2.000     0.000     0.000     0.000     1.
448 15.946    -3.530
449   8 1.0     1 1.0    19 1.0
450 142
451 feh2po4+    300     1.000     2.000     0.000     0.000     0.000     0.
452 22.253    -4.520
453   8 1.0     1 2.0    19 1.0
454 145
455 fe+3        200     3.000     3.000     9.000     0.000     0.000     0.
456 -13.032   10.0
457   8 1.0     2 -1.0
458 146
459 feoh+2      400     2.000     3.000     0.000     0.000     0.000     0.
460 -15.22    20.4
461   8 1.0     3 1.0     2 -1.0    1 -1.0
462 147
463 feoh2+      400     1.000     3.000     0.000     0.000     0.000     0.
464 -18.70    10.0
465   8 1.0     3 2.0     1 -2.0    2 -1.0
466 148
467 feoh3       400     0.000     3.000     0.000     0.000     0.000     1.
468 -26.63    10.0
469   8 1.0     3 3.0     1 -3.0    2 -1.0
470 149
471 feoh4-      400    -1.000     3.000     0.000     0.000     0.000     2.
472 -34.63    10.0
473   8 1.0     3 4.0     1 -4.0    2 -1.0
474 150
475 fe2oh2+4    400     4.000     6.000     0.000     0.000     0.000     0.
476 -29.01    33.5
477   8 2.0     3 2.0     1 -2.0    2 -2.0
478 151
479 fe3oh4+5    400     5.000     9.000     0.000     0.000     0.000     0.
480 -45.4     44.3
```

```
481   8 3.0     3 4.0     1 -4.0    2 -3.0
482 152
483 fecl+2      300     2.000     3.000     0.000     0.000     0.000     0.
484 -11.55    15.6
485   8 1.0    14 1.0     2 -1.0
486 153
487 fecl2+      300     1.000     3.000     0.000     0.000     0.000     0.
488 -10.90    10.0
489   8 1.0    14 2.0     2 -1.0
490 154
491 fecl3       300     0.000     3.000     0.000     0.000     0.000     0.
492 -11.90    10.0
493   8 1.0    14 3.0     2 -1.0
494 155
495 feso4+      300     1.000     9.000     0.000     0.000     0.000     0.
496 -9.11     13.91
497   8 1.0    16 1.0     2 -1.0
498 156
499 feso42-     300    -1.000    15.000     0.000     0.000     0.000     0.
500 -7.61     14.60
501   8 1.0    16 2.0     2 -1.0
502 157
503 fehpo4+     400     1.000     3.000     0.000     0.000     0.000     1.
504  4.74     12.23
505   8 1.0     1 1.0    19 1.0     2 -1.0
506 158
507 feh2p+2     400     2.000     3.000     0.000     0.000     0.000     0.
508  11.95    5.48
509   8 1.0     1 2.0    19 1.0     2 -1.0
510 159
511 fef+2       300     2.000     3.000     0.000     0.000     0.000     0.
512 -6.8      12.7
513   8 1.0    20 1.0     2 -1.0
514 160
515 fef2+       300     1.000     3.000     0.000     0.000     0.000     0.
516 -2.2      14.7
517   8 1.0    20 2.0     2 -1.0
518 161
519 fef3        300     0.000     3.000     0.000     0.000     0.000     0.
520 0.97      15.4
521   8 1.0    20 3.0     2 -1.0
522 165
523 mnoh+       300     1.000     2.000     0.000     0.000     0.000     1.
524 -10.59    14.40
525   9 1.0     3 1.0     1 -1.0
526 166
527 mnoh3-      300    -1.000     2.000     0.000     0.000     0.000     3.
528 -34.80    0.0
529   9 1.0     3 3.0     1 -3.0
530 167
531 mncl+       200     1.000     2.000     0.000     0.000     0.000     0.
532  0.607     0.0
533   9 1.0    14 1.0
534 168
535 mncl2       200     0.000     2.000     0.000     0.000     0.000     0.
536  0.041     0.0
537   9 1.0    14 2.0
538 169
539 mncl3-      200    -1.000     2.000     0.000     0.000     0.000     0.
540  -0.305    0.0
541   9 1.0    14 3.0
542 170
543 mnhco3+     300     1.000     2.000     0.000     0.000     0.000     1.
544  11.60    -3.604
545   9 1.0    15 1.0     1 1.0
546 171
547 mnso4       200     0.000     8.000     0.000     0.000     0.000     0.
548  2.26     2.17
549   9 1.0    16 1.0
550 172
551 mn(no3)2    200     0.000    12.000     0.000     0.000     0.000     0.
552 0.6      -0.396
553   9 1.0    17 2.0
554 173
555 mnf+        200     1.000     2.000     0.000     0.000     0.000     0.
556  0.85      0.0
557   9 1.0    20 1.0
558 174
559 mn+3        200     3.000     3.000     0.000     0.000     0.000     0.
560  -25.507   25.76
561   9 1.0     2 -1.0
562 175
563 mno4-2      400    -2.000     6.000     0.000     0.000     0.000     0.
564  -118.440  150.02
565   9 1.0     3 4.0     1 -8.0    2 -4.0
566 176
567 mno4-       400    -1.000     7.000     3.500     0.000     0.000     0.
568  -127.824  176.62
569   9 1.0     3 4.0     1 -8.0    2 -5.0
570 180
571 aloh+2      300     2.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
572 -4.99     11.9
573  10 1.0     3 1.0     1 -1.0
574 181
575 aloh2+      300     1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
576 -10.1     0.0
```

```
577  10 1.0     3 2.0     1 -2.0
578 182
579 aloh3       300     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000     1.
580 -16.0     0.0
581  10 1.0     3 3.0     1 -3.0
582 183
583 aloh4-      300    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     2.
584 -23.000   44.06
585  10 1.0     3 4.0     1 -4.0
586 184
587 also4+      200     1.000     6.000     0.000     0.000     0.000     0.
588  3.02      2.15
589  10 1.0    16 1.0
590 185
591 also42-     200    -1.000    12.000     0.000     0.000     0.000     0.
592  4.92      2.84
593  10 1.0    16 2.0
594 186
595 alf+2       200     2.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
596  7.01      0.0
597  10 1.0    20 1.0
598 187
599 alf2+       200     1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
600  12.75     20.0
601  10 1.0    20 2.0
602 188
603 alf3        200     0.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
604  17.02     2.50
605  10 1.0    20 3.0
606 189
607 alf4-       200    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
608  19.72     0.0
609  10 1.0    20 4.0
610 193
611 baoh+       300     1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     1.
612  -13.358   15.095
613  11 1.0     3 1.0     1 -1.0
614 195
615 sroh+       300     1.000     0.000     5.000     0.000     0.000     1.
616  -13.178   14.495
617  12 1.0     3 1.0     1 -1.0
618 196
619 srhco3+     310     1.000     4.000     5.400     0.000     0.000     1.
620  11.513    2.486    104.6389   0.04739549  -5151.79    -38.92561   563713.9
621  12    1.0 15    1.0  1    1.0
622 197
623 srco3       210     0.000     4.000     0.000     0.000     0.000     2.
624  2.805     5.217    -1.019     0.012826
625  12    1.0 15    1.0
626 198
627 srso4       200     0.000     6.000     0.000     0.000     0.000     0.
628  2.55      1.6
629  12    1.0 16    1.0
630 202
631 sif6-2      400    -2.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
632  30.18    -16.26
633  13 1.0     1 4.0    20 6.0     3 -4.0
634 211
635 liso4-      200    -1.000     6.000     0.000     0.000     0.000     0.
636 0.640     0.0
637  21 1.0    16 1.0
638 215
639 io3-        400    -1.000     6.000     0.000     0.000     0.000     0.
640 -110.357  0.0
641  23 1.000   1 -6.000  2 -6.000  3  3.000
642 217 for si2o2(oh)5-
643 si2o2(oh    300    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
644     -8.100     0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
645  13  2.000  3 -1.000  1 -1.000
646 218 for si2o3(oh)4-2
647 si2o3(oh    300    -2.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
648    -19.001     0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
649  13  2.000  3 -1.000  1 -2.000
650 219 for si3o5(oh)5-3
651 si3o5(oh    300    -3.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
652    -27.501     0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
653  13  3.000  3 -2.000  1 -3.000
654 220 for si3o6(oh)3-3
655 si3o6(oh    300    -3.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
656    -28.601     0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
657  13  3.000  3 -3.000  1 -3.000
658 221 for si4o3(oh)13-3
659 si4o3(oh    200    -3.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
660    -34.901     0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
661  13  4.000  1 -3.000
662 222 for si4o7(oh)5-3
663 si4o7(oh    300    -3.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
664    -25.501     0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
665  13  4.000  3 -4.000  1 -3.000
666 223 for sio(oh)3-
667 sio(oh)3    200    -1.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
668     -9.810     0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
669  13  1.000  1 -1.000
670 224 for sio2(oh)2-2
671 sio2(oh)    200    -2.000     0.000     0.000     0.000     0.000     0.
672    -23.141     0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
```

```
 13  1.000  1 -2.000
225 for (uo2)3(co3)6-6
(uo2)3(c     500     -6.000     42.000      0.000      0.000      0.000      0.
    26.895     86.774 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 15  6.000 25  3.000  3  6.000  1-12.000  2 -6.000
226 for (uo2)3(oh)5co2+
(uo2)3(o     500      1.000     22.000      0.000      0.000      0.000      0.
   -26.328      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 15  1.000 25  3.000  3 10.000  1-15.000  2 -6.000
227 for co2(aq)
co2(aq)      300      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
    16.681     -5.705 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 15  1.000  3 -1.000  1  2.000
230 for u(co3)4-4
u(co3)4-     200     -4.000     20.000      0.000      0.000      0.000      0.
    35.132      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 15  4.000 25  1.000
231 for u(co3)5-6
u(co3)5-     200     -6.000     24.000      0.000      0.000      0.000      0.
    34.016     -4.782 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 15  5.000 25  1.000
232 for uo2(co3)2-2
uo2(co3)     500     -2.000     14.000      0.000      0.000      0.000      0.
     7.905     37.891 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 15  2.000 25  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -2.000
233 for uo2(co3)3-4
uo2(co3)     500     -4.000     18.000      0.000      0.000      0.000      0.
    12.566     25.241 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 15  3.000 25  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -2.000
234 for uo2(co3)3-5
uo2(co3)     500     -5.000     17.000      0.000      0.000      0.000      0.
    -0.148      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 15  3.000 25  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -1.000
235 for uo2co3(aq)
uo2co3(a     500      0.000     10.000      0.000      0.000      0.000      0.
     0.642     35.595 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 15  1.000 25  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -2.000
236 for h2s(aq)
h2s(aq)      400      0.000     -2.000      0.000      0.000      0.000      0.
    40.681    -65.179 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 16  1.000  3 -4.000  1 10.000  2  8.000
237 for h2so3(aq)
h2so3(aq     400      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
     5.663      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 16  1.000  3 -1.000  1  4.000  2  2.000
239 for hs2o3-
hs2o3-       400     -1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
    39.605      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 16  2.000  3 -5.000  1 11.000  2  8.000
240 for hso3-
hso3-        400     -1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
     3.823      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 16  1.000  3 -1.000  1  3.000  2  2.000
243 for s2o3-2
s2o3-2       400     -2.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
    38.015      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 16  2.000  3 -5.000  1 10.000  2  8.000
244 for so3-2
so3-2        400     -2.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
    -3.397      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 16  1.000  3 -1.000  1  2.000  2  2.000
246 for u(so4)2(aq)
u(so4)2(     200      0.000     16.000      0.000      0.000      0.000      0.
    10.513      7.819 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 16  2.000 25  1.000
247 for uo2(so3)2-2
uo2(so3)     300     -2.000     14.000      0.000      0.000      0.000      0.
    -8.187      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 16  2.000 25  1.000  2  2.000
248 for uo2(so4)2-2
uo2(so4)     500     -2.000     18.000      0.000      0.000      0.000      0.
    -4.899     42.793 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 16  2.000 25  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -2.000
249 for uo2s2o3(aq)
uo2s2o3(     500      0.000     10.000      0.000      0.000      0.000      0.
    31.786      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 16  2.000 25  1.000  3 -3.000  1  6.000  2  6.000
250 for uo2so3(aq)
uo2so3(a     400      0.000     10.000      0.000      0.000      0.000      0.
    -5.837      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 16  1.000 25  1.000  3  1.000  1 -2.000
251 for uo2so4(aq)
uo2so4(a     500      0.000     12.000      0.000      0.000      0.000      0.
    -5.890     39.063 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 16  1.000 25  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -2.000
252 for uso4+2
uso4+2       200      2.000     10.000      0.000      0.000      0.000      0.
     6.582      1.913 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 16  1.000 25  1.000
253 for clo-
clo-         400     -1.000      2.000      0.000      0.000      0.000      0.
   -57.935      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
 14  1.000  3  1.000  1 -2.000  2 -2.000
254 for clo2-
clo2-        400     -1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
  -107.877      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
```

```
769  14  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -4.000
770 255 for clo3-
771 clo3-        400     -1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
772   -146.242    220.127 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
773  14  1.000  3  3.000  1 -6.000  2 -6.000
774 256 for clo4-
775 clo4-        400     -1.000      8.000      0.000      0.000      0.000      0.
776   -187.791    282.712 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
777  14  1.000  3  4.000  1 -8.000  2 -8.000
778 257 for hclo(aq)
779 hclo(aq)     400      0.000      2.000      0.000      0.000      0.000      0.
780    -50.515      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
781  14  1.000  3  1.000  1 -1.000  2 -2.000
782 258 for hclo2(aq)
783 hclo2(aq     400      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
784   -105.916      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
785  14  1.000  3  2.000  1 -3.000  2 -4.000
786 259 for ucl+3
787 ucl+3        200      3.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
788      1.721     -4.543 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
789  14  1.000 25  1.000
790 260 for uo2cl+
791 uo2cl+       500      1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
792     -8.871     36.313 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
793  14  1.000 25  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -2.000
794 261 for uo2cl2(aq)
795 uo2cl2(a     500      0.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
796    -10.141     37.987 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
797  14  2.000 25  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -2.000
798 262 for uo2clo3+
799 uo2clo3+     500      1.000     12.000      0.000      0.000      0.000      0.
800   -154.825    253.594 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
801  14  1.000 25  1.000  3  5.000  1-10.000  2 -8.000
802 268 for pu+3 from haw
803 pu+3         200      3.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.
804     16.9       0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
805  29  1.000  2  1.000
806 269 for puo2+ from haw
807 puo2+        400      1.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.
808    -18.600     46.230 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
809  29  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -1.000
810 270 for puo2+2 from haw
811 puo2+2       400      2.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
812    -34.900      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
813  29  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -2.000
814 272 for (uo2)2(oh)2+2
815 (uo2)2(o     400      2.000     12.000      0.000      0.000      0.000      0.
816    -23.704     77.803 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
817  25  2.000  3  6.000  1-10.000  2 -4.000
818 273 for (uo2)2oh+3
819 (uo2)2oh     400      3.000     12.000      0.000      0.000      0.000      0.
820    -20.783      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
821  25  2.000  3  5.000  1 -9.000  2 -4.000
822 275 for (uo2)3(oh)4+2
823 (uo2)3(o     400      2.000     18.000      0.000      0.000      0.000      0.
824    -39.026      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
825  25  3.000  3 10.000  1-16.000  2 -6.000
826 276 for (uo2)3(oh)5+
827 (uo2)3(o     400      1.000     18.000      0.000      0.000      0.000      0.
828    -42.677    126.423 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
829  25  3.000  3 11.000  1-17.000  2 -6.000
830 278 for (uo2)3(oh)7-
831 (uo2)3(o     400     -1.000     18.000      0.000      0.000      0.000      0.
832    -58.132      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
833  25  3.000  3 13.000  1-19.000  2 -6.000
834 279 for (uo2)4(oh)7+
835 (uo2)4(o     400      1.000     24.000      0.000      0.000      0.000      0.
836    -58.070      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
837  25  4.000  3 15.000  1-23.000  2 -8.000
838 282 for u(oh)4(aq)
839 u(oh)4(a     300      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
840     -4.542      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
841  25  1.000  3  4.000  1 -4.000
842 283 for u(oh)5-
843 u(oh)5-      300     -1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
844    -16.546      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
845  25  1.000  3  5.000  1 -5.000
846 285 for u+3
847 u+3          200      3.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.
848     -9.356     24.414 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
849  25  1.000  2  1.000
850 291 for uo2(oh)2(aq)
851 uo2(oh)2     400      0.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
852    -19.345      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
853  25  1.000  3  4.000  1 -6.000  2 -2.000
854 292 for uo2(oh)3-
855 uo2(oh)3     400     -1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
856    -28.247      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
857  25  1.000  3  5.000  1 -7.000  2 -2.000
858 293 for uo2(oh)4-2
859 uo2(oh)4     400     -2.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
860    -42.051      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
861  25  1.000  3  6.000  1 -8.000  2 -2.000
862 296 for uo2+
863 uo2+         400      1.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.
864     -7.556     32.932 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
```

```
865  25  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -1.000
866 297 for uo2+2
867 uo2+2        400      2.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
868     -9.041     34.400 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
869  25  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -2.000
870 302 for uo2oh+
871 uo2oh+       400      1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
872    -14.242     44.723 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
873  25  1.000  3  3.000  1 -5.000  2 -2.000
874 306 for uoh+3
875 uoh+3        300      3.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
876     -0.540     11.217 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
877  25  1.000  3  1.000  1 -1.000
878 309 for (tco(oh)2)2(aq)
879 (tco(oh)     300      0.000      8.000      0.000      0.000      0.000      0.
880     -0.133      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
881  24  2.000  1 -4.000  3  4.000
882 310 for h2tco4(aq)
883 h2tco4(a     400      0.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
884    -34.310      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
885  24  1.000  1 -4.000  3  3.000  2 -2.000
886 311 for htco4-
887 htco4-       400     -1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
888    -34.608      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
889  24  1.000  1 -5.000  3  3.000  2 -2.000
890 312 for tc+3
891 tc+3         400      3.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.
892      5.391      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
893  24  1.000  1  2.000  3 -1.000  2  1.000
894 313 for tco(oh)2(aq)
895 tco(oh)2     300      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
896     -3.325      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
897  24  1.000  1 -2.000  3  2.000
898 315 for tco4-
899 tco4-        400     -1.000      7.000      0.000      0.000      0.000      0.
900    -32.993    102.109 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
901  24  1.000  1 -6.000  3  3.000  2 -3.000
902 316 for tco4-2
903 tco4-2       400     -2.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
904    -43.315      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
905  24  1.000  1 -6.000  3  3.000  2 -2.000
906 317 for tco4-3
907 tco4-3       400     -3.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.
908    -53.287      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
909  24  1.000  1 -6.000  3  3.000  2 -1.000
910 318 for tcooh+
911 tcooh+       300      1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
912     -1.137      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
913  24  1.000  3  1.000  1 -1.000
914 320 for uf+3
915 uf+3         200      3.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
916      9.283      0.191 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
917  20  1.000 25  1.000
918 321 for uf2+2
919 uf2+2        200      2.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
920     16.235     -4.853 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
921  20  2.000 25  1.000
922 322 for uf3+
923 uf3+         200      1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
924     21.607     -6.297 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
925  20  3.000 25  1.000
926 323 for uf4(aq)
927 uf4(aq)      200      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
928     25.608     -8.504 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
929  20  4.000 25  1.000
930 324 for uf5-
931 uf5-         200     -1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
932     27.019      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
933  20  5.000 25  1.000
934 325 for uf6-2
935 uf6-2        200     -2.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
936     29.089      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
937  20  6.000 25  1.000
938 326 for uo2f(aq)
939 uo2f(aq)     500      0.000      5.000      0.000      0.000      0.000      0.
940     -5.607      0.000 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
941  20  1.000 25  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -1.000
942 327 for uo2f+
943 uo2f+        500      1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
944     -3.9949    34.806 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
945  20  1.000 25  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -2.000
946 328 for uo2f2(aq)
947 uo2f2(aq     500      0.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
948     -0.418     34.495 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
949  20  2.000 25  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -2.000
950 329 for uo2f3-
951 uo2f3-       500     -1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
952      1.863     34.460 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
953  20  3.000 25  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -2.000
954 330 for uo2f4-2
955 uo2f4-2      500     -2.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
956      2.663     33.907 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.00000e+00 0.0
957  20  4.000 25  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -2.000
958 331 for puo2oh+ from harwell
959 puo2oh+      400      1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
960    -40.5       0.0
```

```
961  29  1.000  1 -5.000  2 -2.000  3  3.000
962 332 for puo2oh2 from har
963 puo2oh2      400      0.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
964    -45.3        0.0
965  29  1.000  1 -6.000  2 -2.000  3  4.000
966 333 for puo2oh3- from har
967 puo2oh3-     400     -1.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
968    -54.9        0.0
969  29  1.000  1 -7.000  2 -2.000  3  5.000
970 334 for puoh+3 from har
971 puoh+3       300      3.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
972     -1.19       0.0
973  29  1.000  1 -1.000  3  1.000
974 335 for puoh2+2 from har
975 puoh2+2      300      2.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
976     -1.79       0.0
977  29  1.000  1 -2.000  3  2.000
978 336 for puoh3+ from har
979 puoh3+       300      1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
980     -4.75       0.0
981  29  1.000  1 -3.000  3  3.000
982 337 for pu(oh)4 from har
983 pu(oh)4      300      0.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
984    -10.54       0.0
985  29  1.000  3  4.000  1 -4.000
986 338 for pu(oh)5- from har
987 pu(oh)5-     300     -1.000      4.000      0.000      0.000      0.000      0.
988    -99.0        0.0
989  29  1.000  3  5.000  1 -5.000
990 339 for puoh+2 from har
991 puoh+2       400      2.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.
992      9.9        0.0
993  29  1.000  1 -1.000  2  1.000  3  1.000
994 340 for puoh2+ from har
995 puoh2+       400      1.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.
996     -0.1        0.0
997  29  1.000  1 -2.000  2  1.000  3  2.000
998 341 for pu(oh)3 from har
999 pu(oh)3      400      0.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.
1000    -9.6        0.0
1001  29  1.000  1 -3.000  2  1.000  3  3.000
1002 342 for puoh4- from har
1003 puoh4-      400     -1.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.
1004    -20.1        0.0
1005  29  1.000  1 -4.000  2  1.000  3  4.000
1006 343 for amoh+2 from bat
1007 amoh+2      300      2.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.
1008    -8.2        0.0
1009  28  1.000  3  1.000  1 -1.000
1010 344 for am(oh)2+ from bat
1011 am(oh)2+    300      1.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.
1012    -17.1        0.0
1013  28  1.000  3  2.000  1 -2.000
1014 345 for am(oh)3  from bat
1015 am(oh)3     300      0.000      0.000      0.000      0.000      0.000      0.
1016    -28.5        0.0
1017  28  1.000  3  3.000  1 -3.000
1018 346 for ndoh+2 from others
1019 ndoh+2      300      2.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.
1020    -8.0        0.0
1021  44  1.000  3  1.000  1 -1.000
1022 347 for nd(oh)2+ from others
1023 nd(oh)2+    300      1.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.
1024    -16.9        0.0
1025  44  1.000  3  2.000  1 -2.000
1026 348 for nd(oh)3 from others
1027 nd(oh)3     300      0.000      3.000      0.000      0.000      0.000      0.
1028    -26.5        0.0
1029  44  1.000  3  3.000  1 -3.000
1030 349 for nd(oh)4- from others
1031 nd(oh)4-    300     -1.00       3.000      0.000      0.000      0.000      0.
1032    -37.1        0.0
1033  44  1.000  3  4.000  1 -4.000
1034 350 for nd2(oh)2 from others
1035 nd2(oh)2    300      4.000      6.000      0.000      0.000      0.000      0.
1036    -13.9        0.0
1037  44  2.000  3  2.000  1 -2.000
1038 353 for ni(oh)2 from har
1039 ni(oh)2     300      0.000      0.0        0.0        0.0        0.0        2.
1040    -19.0        0.0
1041  31  1.000  3  2.000  1 -2.000
1042 354 for ni(oh)3- from har
1043 ni(oh)3-    300     -1.000      0.0        0.0        0.0        0.0        3.
1044    -30.0        0.0
1045  31  1.000  3  3.000  1 -3.000
1046 355 for nioh+ from har
1047 nioh+       300      1.000      0.0        0.0        0.0        0.0        1.
1048     -9.9        0.0
1049  31  1.000  3  1.000  1 -1.000
1050 356 for ni2(oh)+3 from har
1051 ni2(oh)+    300      3.000      0.0        0.0        0.0        0.0        1.
1052    -10.7        0.0
1053  31  2.000  3  1.000  1 -1.000
1054 357 for ni4(oh)4+4 from har
1055 ni4(oh)+    300      4.000      0.0        0.0        0.0        0.0        4.
1056    -27.7        0.0
```

```
1057  31  4.000  3  4.000  1 -4.000
1058 358 for niso4 from har
1059 niso4        200     0.000     0.0       0.0       0.0       0.0       2.
1060       2.3       0.0
1061  31  1.000 16  1.000
1062 359 for se-2 from har
1063 se-2         400    -2.000    -2.0       0.0       0.0       0.0       2.
1064      66.3       0.0
1065  32  1.000  1  8.000  2  8.000  3 -4.000
1066 360 for hse- from har
1067 hse-         400    -1.000    -2.0       0.0       0.0       0.0       1.
1068      81.2       0.0
1069  32  1.000  1  9.000  2  8.000  3 -4.000
1070 361 for seo3-2 from har
1071 seo3-2       400    -2.000     4.0       0.0       0.0       0.0       2.
1072      29.0       0.0
1073  32  1.000  1  2.000  2  2.000  3 -1.000
1074 362 for hseo3- from har
1075 hseo3-       400    -1.000     4.0       0.0       0.0       0.0       1.
1076      36.3       0.0
1077  32  1.000  1  3.000  2  2.000  3 -1.000
1078 363 for hseo4- from har
1079 hseo4-       200    -1.000     6.0       0.0       0.0       0.0       1.
1080       1.9       0.0
1081  32  1.000  1  1.000
1082 364 for h2seo3 from har
1083 h2seo3       400     0.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1084      38.9       0.0
1085  32  1.000  1  4.000  2  2.000  3 -1.000
1086 365 for h2se from har
1087 h2se         400     0.000    -2.0       0.0       0.0       0.0       0.
1088      85.1       0.0
1089  32  1.000  1 10.000  2  8.000  3 -4.000
1090 366 for sr(oh)2 from har
1091 sr(oh)2      300     0.000     0.0       0.0       0.0       0.0       0.
1092     -28.5       0.0
1093  12  1.000  3  2.000  1 -2.000
1094 367 for srcl+1 from har
1095 srcl+1       200     1.000     0.0       0.0       0.0       0.0       0.
1096      -0.2       0.0
1097  12  1.000 14  1.000
1098 368 for srcl2 from har
1099 srcl2        200     0.000     0.0       0.0       0.0       0.0       0.
1100       0.0       0.0
1101  12  1.000 14  2.000
1102 369 for srno3+ from har
1103 srno3+       200     1.000     5.0       0.0       0.0       0.0       0.
1104       0.8       0.0
1105  12  1.000 17  1.000
1106 370 for srpo4- from har
1107 srpo4-       200    -1.000     0.0       0.0       0.0       0.0       0.
1108       4.2       0.0
1109  12  1.000 19  1.000
1110 371 for zroh+3 from har
1111 zroh+3       300     3.000     0.0       0.0       0.0       0.0       1.
1112       0.3       0.0
1113  33  1.000  3  1.000  1 -1.000
1114 372 for zr(oh)4 from har
1115 zr(oh)4      300     0.000     0.0       0.0       0.0       0.0       4.
1116      -9.7       0.0
1117  33  1.000  3  4.000  1 -4.000
1118 373 for zr(oh)5- from har
1119 zr(oh)5-     300    -1.000     0.0       0.0       0.0       0.0       5.
1120     -16.0       0.0
1121  33  1.000  3  5.000  1 -5.000
1122 374 for zr3(oh)4+8 from har
1123 zr3(oh)4     300     8.000     0.0       0.0       0.0       0.0       4.
1124      -0.6       0.0
1125  33  3.000  3  4.000  1 -4.000
1126 375 for zr4(oh)8+8 from har
1127 zr4(oh)8     300     8.000     0.0       0.0       0.0       0.0       8.
1128       6.0       0.0
1129  33  4.000  3  8.000  1 -8.000
1130 376 for zrso4+2 from har
1131 zrso4+2      200     2.000     6.0       0.0       0.0       0.0       1.
1132       2.5       0.0
1133  33  1.000 16  1.000
1134 377 for zrcl+3 from har
1135 zrcl+3       200     3.000     6.0       0.0       0.0       0.0       0.
1136       0.3       0.0
1137  33  1.000 14  1.000
1138 378 for sn+4 from eq3/6
1139 sn+4         200     4.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1140      -5.38      0.0
1141  34  1.000  2 -2.000
1142 379 for snoh+ from eq3/6
1143 snoh+        300     1.000     2.0       0.0       0.0       0.0       0.
1144      -3.89      0.0
1145  34  1.000  3  1.000  1 -1.000
1146 380 for sn(oh)2 from eq3/6
1147 sn(oh)2      300     0.000     2.0       0.0       0.0       0.0       0.
1148      -7.90      0.0
1149  34  1.000  3  2.000  1 -2.000
1150 381 for sn(oh)3- from eq3/6
1151 sn(oh)3-     300    -1.000     2.0       0.0       0.0       0.0       0.
1152     -17.39      0.0
```

```
1153  34  1.000  3  3.000  1 -3.000
1154 382 for sn(oh)2+2 from eq3/6
1155 sn(oh)22     400      2.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1156      -5.56       0.0
1157  34  1.000  3  2.000  1 -2.000  2 -2.000
1158 383 for sn(oh)3+ from eq3/6
1159 sn(oh)3+     400      1.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1160      -4.85       0.0
1161  34  1.000  3  3.000  1 -3.000  2 -2.000
1162 384 for sncl+ from eq3/6
1163 sncl+        200      1.000     2.0       0.0       0.0       0.0       0.
1164       1.05       0.0
1165  34  1.000 14  1.000
1166 385 for sncl2 from eq3/6
1167 sncl2        200      0.000     2.0       0.0       0.0       0.0       0.
1168       1.71       0.0
1169  34  1.000 14  2.000
1170 386 for sncl3- from eq3/6
1171 sncl3-       200     -1.000     2.0       0.0       0.0       0.0       0.
1172       1.69       0.0
1173  34  1.000 14  3.000
1174 387 for i3- from har
1175 i3-          200     -1.000    -3.0       0.0       0.0       0.0       0.
1176     -18.3      28.5
1177  23  3.000  2 -2.000
1178 388 for hi from har
1179 hi           200      0.000    -1.0       0.0       0.0       0.0       0.
1180      -0.051     0.41
1181  23  1.000  1  1.000
1182 389 for io- from har
1183 io-          400     -1.000     1.0       0.0       0.0       0.0       0.
1184     -44.0      56.2
1185  23  1.000  3  1.000  1 -2.000  2 -2.000
1186 390 for io4- from har
1187 io4-         400     -1.000     7.0       0.0       0.0       0.0       0.
1188    -165.0     251.0
1189  23  1.000  3  4.000  1 -8.000  2 -8.000
1190 391 for i2o-2 from har
1191 i2o-2        400     -2.000     0.0       0.0       0.0       0.0       0.
1192     -45.30      0.0
1193  23  2.000  3  1.000  1 -2.000  2 -2.000
1194 392 for hio from har
1195 hio          400      0.000     1.0       0.0       0.0       0.0       0.
1196     -33.3      48.9
1197  23  1.000  3  1.000  1 -1.000  2 -2.000
1198 393 for h2oi- from har
1199 h2oi-        200     -1.000    -1.0       0.0       0.0       0.0       0.
1200     -32.10      0.0
1201  23  1.000  3  1.000
1202 394 for i2oh- from har
1203 i2oh-        400     -1.000     0.0       0.0       0.0       0.0       1.
1204     -19.4       0.0
1205  23  2.000  3  1.000  1 -1.000  2 -2.000
1206 395 for hio3 from har
1207 hio3         400      0.000     5.0       0.0       0.0       0.0       0.
1208    -111.0     168.0
1209  23  1.000  3  3.000  1 -5.000  2 -6.000
1210 396 for i2cl- from har
1211 i2cl-        300     -1.000     0.0       0.0       0.0       0.0       0.
1212     -20.8      34.2
1213  23  2.000 14  1.000  2 -2.000
1214 397 for icl- from har
1215 icl-         300     -1.000     0.0       0.0       0.0       0.0       0.
1216     -29.0       0.0
1217  23  1.000 14  1.000  2 -1.000
1218 398 for icl2- from har
1219 icl2-        300     -1.000     1.0       0.0       0.0       0.0       0.
1220     -26.9       0.0
1221  23  1.000 14  2.000  2 -2.000
1222 399 for i2 from har
1223 i2           200      0.000     0.0       0.0       0.0       0.0       0.
1224     -18.18     27.2
1225  23  2.000  2 -2.000
1226 400 for pboh+ from har
1227 pboh+        300      1.000     2.0       0.0       0.0       0.0       1.
1228      -7.7       0.0
1229  36  1.000  3  1.000  1 -1.000
1230 401 for pb(oh)2 from har
1231 pb(oh)2      300      0.000     2.0       0.0       0.0       0.0       2.
1232     -17.1       0.0
1233  36  1.000  3  2.000  1 -2.000
1234 402 for pb(oh)3- from har
1235 pb(oh)3-     300     -1.000     2.0       0.0       0.0       0.0       3.
1236     -27.3       0.0
1237  36  1.000  3  3.000  1 -3.000
1238 403 for pb2(oh)+3 from har
1239 pb2(oh)      300      3.000     4.0       0.0       0.0       0.0       1.
1240      -6.4       0.0
1241  36  2.000  3  1.000  1 -1.000
1242 404 for pb3(oh)4+2 from har
1243 pb3(oh)4     300      2.000     6.0       0.0       0.0       0.0       4.
1244     -23.9       0.0
1245  36  3.000  3  4.000  1 -4.000
1246 405 for pb6(oh)8+4 from har
1247 pb6(oh)8     300      4.000    12.0       0.0       0.0       0.0       8.
1248     -43.6       0.0
```

```
1249  36  6.000  3  8.000  1 -8.000
1250 406 for pbco3 from har
1251 pbco3        200      0.000      6.0        0.0        0.0        0.0        2.
1252       7.3        0.0
1253  36  1.000 15  1.000
1254 407 for pb(co3)2-2 from har
1255 pb(co3)2     200     -2.000     10.0        0.0        0.0        0.0        4.
1256      10.78       0.0
1257  36  1.000 15  2.000
1258 408 for pbso4 from har
1259 pbso4        200      0.000      8.0        0.0        0.0        0.0        0.
1260       2.59       0.0
1261  36  1.000 16  1.000
1262 409 for pb(so4)2-2 from har
1263 pb(so4)2     200     -2.000     14.0        0.0        0.0        0.0        0.
1264       3.5        0.0
1265  36  1.000 16  2.000
1266 410 for pbcl+ from har
1267 pbcl+        200      1.000      2.0        0.0        0.0        0.0        0.
1268       1.61       0.0
1269  36  1.000 14  1.000
1270 411 for pbcl2 from har
1271 pbcl2        200      0.000      2.0        0.0        0.0        0.0        0.
1272       2.44       0.0
1273  36  1.000 14  2.000
1274 412 for pbcl3- from har
1275 pbcl3-       200     -1.000      2.0        0.0        0.0        0.0        0.
1276       2.01       0.0
1277  36  1.000 14  3.000
1278 413 for pb4(oh)4+4 from har
1279 pb4(oh)+     300      4.000      8.0        0.0        0.0        0.0        4.
1280     -20.88       0.0
1281  36  4.000  3  4.000  1 -4.000
1282 424 for raoh+ from har
1283 raoh+        300      1.000      0.0        0.0        0.0        0.0        1.
1284     -13.6        0.0
1285  37  1.000  3  1.000  1 -1.000
1286 425 for raso4 from har
1287 raso4        200      0.000      6.0        0.0        0.0        0.0        0.
1288       0.022      0.0
1289  37  1.000 16  1.000
1290 426 for thoh+3 from har
1291 thoh+3       300      3.000      0.0        0.0        0.0        0.0        1.
1292      -3.20       0.0
1293  38  1.000  3  1.000  1 -1.000
1294 427 for th(oh)2+2 from har
1295 th(oh)2+     300      2.000      0.0        0.0        0.0        0.0        2.
1296      -6.9        0.0
1297  38  1.000  3  2.000  1 -2.000
1298 428 for th(oh)3+ from har
1299 th(oh)3+     300      1.000      0.0        0.0        0.0        0.0        3.
1300     -11.70       0.0
1301  38  1.000  3  3.000  1 -3.000
1302 429 for th(oh)4 from har
1303 th(oh)4      300      0.000      0.0        0.0        0.0        0.0        4.
1304     -15.87      18.66
1305  38  1.000  3  4.000  1 -4.000
1306 430 for th4(oh)8+8 from har
1307 th4(oh)8     300      8.000      0.0        0.0        0.0        0.0        8.
1308     -21.10       0.0
1309  38  4.000  3  8.000  1 -8.000
1310 431 for th2(oh)2+6 from har
1311 th2(oh)2     300      6.000      0.0        0.0        0.0        0.0        2.
1312      -6.14       0.0
1313  38  2.000  3  2.000  1 -2.000
1314 432 for thco3+2 from har
1315 thco3+2      200      2.000      0.0        0.0        0.0        0.0        2.
1316      11.03       0.0
1317  38  1.000 15  1.000
1318 433 for thhpo4+2 from har
1319 thhpo4+2     300      2.000      0.0        0.0        0.0        0.0        2.
1320      23.16       0.0
1321  38  1.000 19  1.000  1  1.000
1322 434 for th(hpo4)2 from har
1323 th(hpo4)     300      0.000      0.0        0.0        0.0        0.0        4.
1324      47.49       0.0
1325  38  1.000 19  2.000  1  2.000
1326 435 for th(hpo4)3-2 from har
1327 thhpo43-     300     -2.000      0.0        0.0        0.0        0.0        6.
1328      68.30       0.0
1329  38  1.000 19  3.000  1  3.000
1330 436 for thh2po4+3 from har
1331 thh2po4+     300      3.000      0.0        0.0        0.0        0.0        1.
1332      24.19       0.0
1333  38  1.000 19  1.000  1  2.000
1334 437 for thh2po42+2 from har
1335 thh2po42     300      2.000      0.0        0.0        0.0        0.0        2.
1336      48.0        0.0
1337  38  1.000 19  2.000  1  4.000
1338 438 for thh3po4+4 from har
1339 thh3po4+     300      4.000      0.0        0.0        0.0        0.0        0.
1340      23.6        0.0
1341  38  1.000 19  1.000  1  3.000
1342 439 for thso4+2 from har
1343 thso4+2      200      2.000      6.0        0.0        0.0        0.0        2.
1344       5.441      0.0
```

```
1345  38  1.000 16  1.000
1346 440 for th(so4)2 from har
1347 th(so4)2     200      0.000     12.0       0.0       0.0       0.0       4.
1348       9.75       0.0
1349  38  1.000 16  2.000
1350 441 for th(so4)3-2 from har
1351 th(so4)3-    200     -2.000     18.0       0.0       0.0       0.0       6.
1352      10.46       0.0
1353  38  1.000 16  3.000
1354 442 for th(so4)4-4 from har
1355 th(so4)4     200     -4.000     24.0       0.0       0.0       0.0       8.
1356       8.44       0.0
1357  38  1.000 16  4.000
1358 443 for thcl4 from har
1359 thcl4        200      0.000      0.0       0.0       0.0       0.0       0.
1360       1.24       0.0
1361  38  1.000 14  4.000
1362 444 for thcl3+ from har
1363 thcl3+       200      1.000      0.0       0.0       0.0       0.0       0.
1364       1.67       0.0
1365  38  1.000 14  3.000
1366 445 for thcl2+2 from har
1367 thcl2+2      200      2.000      0.0       0.0       0.0       0.0       0.
1368       0.76       0.0
1369  38  1.000 14  2.000
1370 446 for thcl+3 from har
1371 thcl+3       200      3.000      0.0       0.0       0.0       0.0       0.
1372       1.38       0.0
1373  38  1.000 14  1.000
1374 447 for thf4 from har
1375 thf4         200      0.000      0.0       0.0       0.0       0.0       0.
1376      23.2        0.0
1377  38  1.000 20  4.000
1378 448 for th(no3)+3 from har
1379 th(no3)+     200      3.000      5.0       0.0       0.0       0.0       0.
1380       1.6        0.0
1381  38  1.000 17  1.000
1382 449 for th(no3)2+2 from har
1383 th(no3)2     200      2.000     10.0       0.0       0.0       0.0       0.
1384       2.84       0.0
1385  38  1.000 17  2.000
1386 450 for th4(no3)3+ from har
1387 th4(no3)     200      1.000     15.0       0.0       0.0       0.0       0.
1388       2.00       0.0
1389  38  1.000 17  3.000
1390 451 for th(no3)4 from har
1391 th(no3)4     200      0.000     20.0       0.0       0.0       0.0       0.
1392       1.0        0.0
1393  38  1.000 17  4.000
1394 452 for pa+3 from har
1395 pa+3         200      3.000      3.0       0.0       0.0       0.0       0.
1396       2.03       0.0
1397  39  1.000  2  1.000
1398 453 for pao2+ from har
1399 pao2+        400      1.000      5.0       0.0       0.0       0.0       0.
1400       7.79       0.0
1401  39  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -1.000
1402 454 for pa(oh)+3 from har
1403 pa(oh)+3     300      3.000      4.0       0.0       0.0       0.0       1.
1404       0.84       0.0
1405  39  1.000  3  1.000  1 -1.000
1406 455 for pa(oh)2+2 from har
1407 pa(oh)2+     300      2.000      4.0       0.0       0.0       0.0       2.
1408      -0.02       0.0
1409  39  1.000  3  2.000  1 -2.000
1410 456 for pa(oh)3+ from har
1411 pa(oh)3+     300      1.000      4.0       0.0       0.0       0.0       3.
1412      -1.5        0.0
1413  39  1.000  3  3.000  1 -3.000
1414 457 for pao(oh)+2 from har
1415 pao(oh)+     400      2.000      5.0       0.0       0.0       0.0       1.
1416       7.29       0.0
1417  39  1.000  3  2.000  2 -1.000  1 -3.000
1418 458 for pao2(oh) from har
1419 pao2(oh)     400      0.000      5.0       0.0       0.0       0.0       1.
1420       3.29       0.0
1421  39  1.000  3  3.000  2 -1.000  1 -5.000
1422 484 for npo2+ from har
1423 npo2+        400      1.000      5.0       0.0       0.0       0.0       0.
1424     -11.37      35.73
1425  40  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -1.000
1426 485 for npo2+2 from har
1427 npo2+2       400      2.000      6.0       0.0       0.0       0.0       0.
1428     -32.29       0.0
1429  40  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000
1430 486 for np+3 from har
1431 np+3         200      3.000      3.0       0.0       0.0       0.0       0.
1432       3.03       0.0
1433  40  1.000  2  1.000
1434 487 for npoh+2 from har
1435 npoh+2       400      2.000      3.0       0.0       0.0       0.0       0.
1436      -4.37       0.0
1437  40  1.000  3  1.000  1 -1.000  2  1.000
1438 488 for np(oh)2+ from har
1439 np(oh)2+     400      1.000      3.0       0.0       0.0       0.0       0.
1440     -13.97       0.0
```

```
1441  40  1.000  1 -2.000  2  1.000  3  2.000
1442 489 for np(oh)3 from har
1443 np(oh)3      400      0.000      3.0       0.0       0.0       0.0       0.
1444    -23.97       0.0
1445  40  1.000  1 -3.000  2  1.000  3  3.000
1446 490 for np(oh)4- from har
1447 np(oh)4-     400     -1.000      3.0       0.0       0.0       0.0       0.
1448    -34.97       0.0
1449  40  1.000  1 -4.000  2  1.000  3  4.000
1450 491 for np2(oh)2+4 from har
1451 np2(oh)2     400      4.000      6.0       0.0       0.0       0.0       0.
1452     -7.43       0.0
1453  40  2.000  1 -2.000  2  2.000  3  2.000
1454 492 for npco3+ from har
1455 npco3+       300      1.000      7.0       0.0       0.0       0.0       0.
1456      9.53       0.0
1457  40  1.000  2  1.000 15  1.000
1458 493 for np(co3)2- from har
1459 np(co3)2     300     -1.000     11.0       0.0       0.0       0.0       0.
1460     14.03       0.0
1461  40  1.000  2  1.000 15  2.000
1462 494 for np(co3)3-3 from har
1463 np(co3)3     300     -3.000     15.0       0.0       0.0       0.0       0.
1464     17.53       0.0
1465  40  1.000  2  1.000 15  3.000
1466 495 for npcl+2 from har
1467 npcl+2       300      2.000      3.0       0.0       0.0       0.0       0.
1468      0.63       0.0
1469  40  1.000  2  1.000 14  1.000
1470 496 for npcl2+ from har
1471 npcl2+       300      1.000      3.0       0.0       0.0       0.0       0.
1472     -2.35       0.0
1473  40  1.000  2  1.000 14  2.000
1474 497 for npoh+3 from har
1475 npoh+3       300      3.000      4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1476     -1.5       0.0
1477  40  1.000  1 -1.000  3  1.000
1478 498 for np(oh)2+2 from har
1479 npoh2+2      300      2.000      4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1480     -3.0       0.0
1481  40  1.000  1 -2.000  3  2.000
1482 499 for np(oh)3+ from har
1483 np(oh)3+     300      1.000      4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1484     -6.0       0.0
1485  40  1.000  1 -3.000  3  3.000
1486 500 for np(oh)4 from har
1487 np(oh)4      300      0.000      4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1488     -9.0       0.0
1489  40  1.000  1 -4.000  3  4.000
1490 501 for np(oh)5- from har
1491 np(oh)5-     300     -1.000      4.0       0.0       0.0       0.0       1.
1492    -24.7       0.0
1493  40  1.000  3  5.000  1 -5.000
1494 502 for np2(oh)2+6 from har
1495 np2oh2+6     300      6.000      8.0       0.0       0.0       0.0       0.
1496     -2.0       0.0
1497  40  2.000  1 -2.000  3  2.000
1498 503 for np(oh)3co3- from har
1499 npoh3co3     400     -1.000      8.0       0.0       0.0       0.0       0.
1500     -1.0       0.0
1501  40  1.000  1 -3.000  3  3.000 15  1.000
1502 504 for npso4+2 from har
1503 npso4+2      200      2.000     10.0       0.0       0.0       0.0       0.
1504      3.41       0.0
1505  40  1.000 16  1.000
1506 505 for np(so4)2 from har
1507 np(so4)2     200      0.000     16.0       0.0       0.0       0.0       0.
1508      5.42       0.0
1509  40  1.000 16  2.000
1510 506 for npcl+3 from har
1511 npcl+3       200      3.000      4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1512     -0.04       0.0
1513  40  1.000 14  1.000
1514 507 for npcl2+2 from har
1515 npcl2+2      200      2.000      4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1516     -0.24       0.0
1517  40  1.000 14  2.000
1518 508 for npcl3+ from har
1519 npcl3+       200      1.000      4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1520     -0.5       0.0
1521  40  1.000 14  3.000
1522 509 for npo2oh from har
1523 npo2oh       400      0.000      5.0       0.0       0.0       0.0       1.
1524    -24.50       0.0
1525  40  1.000  1 -5.000  2 -1.000  3  3.000
1526 510 for npo2(oh)2- from har
1527 npo2oh2-     400     -1.000      5.0       0.0       0.0       0.0       2.
1528    -36.15       0.0
1529  40  1.000  1 -6.000  2 -1.000  3  4.000
1530 511 for npo2cl from har
1531 npo2cl       500      0.000      5.0       0.0       0.0       0.0       0.
1532    -11.67       0.0
1533  40  1.000  1 -4.000  2 -1.000  3  2.000 14  1.000
1534 512 for npo2hco3 from har
1535 npo2hco3     500      0.000      9.0       0.0       0.0       0.0       0.
1536      2.05       0.0
```

```
1537  40  1.000  1 -3.000  2 -1.000  3  2.000 15  1.000
1538 513 for npo2co3- from har
1539 npo2co3-    500    -1.000     9.0       0.0       0.0       0.0       0.
1540     -6.48       0.0
1541  40  1.000  1 -4.000  2 -1.000  3  2.000 15  1.000
1542 514 for npo2(co3)2-3 from har
1543 npo2co32    500    -3.000    13.0       0.0       0.0       0.0       0.
1544     -4.26       0.0
1545  40  1.000  1 -4.000  2 -1.000  3  2.000 15  2.000
1546 515 for npo2(co3)3-5 from har
1547 npo2co33    500    -5.000    17.0       0.0       0.0       0.0       0.
1548     -4.03       0.0
1549  40  1.000  1 -4.000  2 -1.000  3  2.000 15  3.000
1550 516 for npo2oh+ from har
1551 npo2oh      400     1.000     6.0       0.0       0.0       0.0       0.
1552    -37.39       0.0
1553  40  1.000  1 -5.000  2 -2.000  3  3.000
1554 517 for npo2(oh)2 from har
1555 npo2oh2     400     0.000     6.0       0.0       0.0       0.0       0.
1556    -43.81       0.0
1557  40  1.000  1 -6.000  2 -2.000  3  4.000
1558 518 for npo2(oh)3- from har
1559 npo2oh3-    400    -1.000     6.0       0.0       0.0       0.0       0.
1560    -53.99       0.0
1561  40  1.000  1 -7.000  2 -2.000  3  5.000
1562 519 for npo2(oh)2+2 from har
1563 npo2oh2+    400     2.000    12.0       0.0       0.0       0.0       0.
1564    -70.98       0.0
1565  40  2.000  1-10.000  2 -4.000  3  6.000
1566 520 for (npo2)3(oh)5+ from har
1567 npo23oh5    400     1.000    18.0       0.0       0.0       0.0       0.
1568   -114.37       0.0
1569  40  3.000  1-17.000  2 -6.000  3 11.000
1570 521 for (npo2)2oh+3 from har
1571 npo22oh+    400     3.000    12.0       0.0       0.0       0.0       0.
1572    -68.58       0.0
1573  40  2.000  1 -9.000  2 -4.000  3  5.000
1574 522 for npo2co3 from har
1575 npo2co3     500     0.000    10.0       0.0       0.0       0.0       0.
1576    -22.29       0.0
1577  40  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000 15  1.000
1578 523 for npo2(co3)2-2 from har
1579 npo2co32    500    -2.000    14.0       0.0       0.0       0.0       0.
1580    -15.29       0.0
1581  40  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000 15  2.000
1582 524 for npo2(co3)3-4 from har
1583 npo2co33    500    -4.000    18.0       0.0       0.0       0.0       0.
1584    -11.29       0.0
1585  40  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000 15  3.000
1586 525 for npo2so4 from har
1587 npo2so4     500     0.000    12.0       0.0       0.0       0.0       0.
1588    -29.02       0.0
1589  40  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000 16  1.000
1590 526 for npo2(so4)2-2 from har
1591 npo2so42    500    -2.000    18.0       0.0       0.0       0.0       0.
1592    -28.19       0.0
1593  40  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000 16  2.000
1594 527 for npo2(so4)3-4 from har
1595 npo2so43    500    -4.000    24.0       0.0       0.0       0.0       0.
1596    -27.29       0.0
1597  40  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000 16  3.000
1598 528 for npo2cl+ from har
1599 npo2cl+     500     1.000     6.0       0.0       0.0       0.0       0.
1600    -32.59       0.0
1601  40  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000 14  1.000
1602 529 for npo2cl2 from har
1603 npo2cl2     500     0.000     6.0       0.0       0.0       0.0       0.
1604    -31.29       0.0
1605  40  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000 14  2.000
1606 530 for npo2f from har
1607 npo2f       500     0.000     5.0       0.0       0.0       0.0       0.
1608    -10.38       0.0
1609  40  1.000  3  2.000  1 -4.000  2 -1.000 20  1.000
1610 531 for npf+3 from har
1611 npf+3       200     3.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1612      8.33       0.0
1613  40  1.000 20  1.000
1614 532 for npf2+2 from har
1615 npf2+2      200     2.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1616     14.59       0.0
1617  40  1.000 20  2.000
1618 533 for npf3+ from har
1619 npf3+       200     1.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1620     20.3       0.0
1621  40  1.000 20  3.000
1622 534 for npf4 from ahar
1623 npf4        200     0.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1624     25.1       0.0
1625  40  1.000 20  4.000
1626 535 for (puo2)2(oh)2+2 from har
1627 puo22oh2    400     2.000    12.0       0.0       0.0       0.0       0.
1628    -78.2       0.0
1629  29  2.000  1-10.000  2 -4.000  3  6.000
1630 536 for (puo2)3(oh)5+ from har
1631 puo23oh5    400     1.000    18.0       0.0       0.0       0.0       0.
1632   -126.3       0.0
```

```
1633  29  3.000  1-17.000  2 -6.000  3 11.000
1634 537 for (puo2)3(oh)4+2 from har
1635 puo23oh4     400      2.000     18.0       0.0       0.0       0.0       0.
1636   -109.7       0.0
1637  29  3.000  1-16.000  2 -6.000  3 10.000
1638 538 for puo2co3 from har
1639 puo2co3      500      0.000     10.0       0.0       0.0       0.0       0.
1640    -22.9       0.0
1641  29  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000 15  1.000
1642 539 for puo2(co3)2-2 from har
1643 puo2co32     500     -2.000     14.0       0.0       0.0       0.0       0.
1644    -19.9       0.0
1645  29  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000 15  2.000
1646 540 for puo2(co3)3-4 from har
1647 puo2co33     500     -4.000     18.0       0.0       0.0       0.0       0.
1648    -14.0       0.0
1649  29  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000 15  3.000
1650 541 for puo2(oh)co3- from har
1651 puo2ohco     500     -1.000     10.0       0.0       0.0       0.0       0.
1652    -25.05      0.0
1653  29  1.000  1 -5.000  2 -2.000  3  3.000 15  1.000
1654 542 for puo2(oh)2co3-2 from har
1655 puo2oh2c     500     -2.000     10.0       0.0       0.0       0.0       0.
1656    -39.9       0.0
1657  29  1.000  1 -6.000  2 -2.000  3  4.000 15  1.000
1658 543 for puo2h(co3)- from har
1659 puo2hco3     500     -1.000     14.0       0.0       0.0       0.0       0.
1660    -12.6       0.0
1661  29  1.000  1 -3.000  2 -2.000  3  2.000 15  2.000
1662 544 for puo2cl+ from har
1663 puo2cl+      500      1.000      6.0       0.0       0.0       0.0       0.
1664    -35.2       0.0
1665  29  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000 14  1.000
1666 545 for puo2cl2 from har
1667 puo2cl2      500      0.000      6.0       0.0       0.0       0.0       0.
1668    -35.15      0.0
1669  29  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000 14  2.000
1670 546 for puo2so4 from har
1671 puo2so4      500      0.000     12.0       0.0       0.0       0.0       0.
1672    -31.7       0.0
1673  29  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000 16  1.000
1674 547 for puo2oh from har
1675 puo2oh       400      0.000      5.0       0.0       0.0       0.0       0.
1676    -28.3       0.0
1677  29  1.000  1 -5.000  2 -1.000  3  3.000
1678 548 for puo2(oh)2- from har
1679 puo2oh2-     400     -1.000      5.0       0.0       0.0       0.0       0.
1680    -37.6       0.0
1681  29  1.000  1 -6.000  2 -1.000  3  4.000
1682 549 for puo2cl from har
1683 puo2cl       500      0.000      5.0       0.0       0.0       0.0       0.
1684    -18.77      0.0
1685  29  1.000  1 -4.000  2 -1.000  3  2.000 14  1.000
1686 550 for pu2(oh)2+6 from har
1687 pu2oh2+6     300      6.000      8.0       0.0       0.0       0.0       0.
1688     -1.0       0.0
1689  29  2.000  1 -2.000  3  2.000
1690 551 for pu2(oh)3+5 from har
1691 pu2oh3+5     300      5.000      8.0       0.0       0.0       0.0       0.
1692     -2.0       0.0
1693  29  2.000  1 -3.000  3  3.000
1694 552 for pu2(oh)4+4 from har
1695 pu2oh4+4     300      4.000      8.0       0.0       0.0       0.0       0.
1696     -3.0       0.0
1697  29  2.000  1 -4.000  3  4.000
1698 553 for pu2(oh)5+3 from har
1699 pu2oh5+3     300      3.000      8.0       0.0       0.0       0.0       0.
1700     -7.0       0.0
1701  29  2.000  1 -5.000  3  5.000
1702 554 for puso4+2 from har
1703 puso4+2      200      2.000     10.0       0.0       0.0       0.0       0.
1704      5.72      0.0
1705  29  1.000 16  1.000
1706 555 for pu(so4)2 from har
1707 puso42       200      0.000     16.0       0.0       0.0       0.0       0.
1708     10.25      0.0
1709  29  1.000 16  2.000
1710 556 for pu(so4)3-2 from har
1711 puso43-2     200     -2.000     22.0       0.0       0.0       0.0       0.
1712     11.5       0.0
1713  29  1.000 16  3.000
1714 557 for pucl+3 from har
1715 pucl+3       200      3.000      4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1716      0.93      0.0
1717  29  1.000 14  1.000
1718 558 for pucl2+2 from har
1719 pucl2+2      200      2.000      4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1720     -0.17      0.0
1721  29  1.000 14  2.000
1722 559 for pucl3+ from har
1723 pucl3+       200      1.000      4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1724     -1.0       0.0
1725  29  1.000 14  3.000
1726 560 for pu3(oh)5+4 from har
1727 pu3oh5+4     400      4.000      9.0       0.0       0.0       0.0       0.
1728     17.7       0.0
```

```
1729  29  3.000  1 -5.000  2  3.000  3  5.000
1730 561 for pu2(oh)2+4 from har
1731 pu2oh2+4     400     4.000     6.0       0.0       0.0       0.0       0.
1732     19.8       0.0
1733  29  2.000  1 -2.000  2  2.000  3  2.000
1734 562 for puco3+ from har
1735 puco3+       300     1.000     7.0       0.0       0.0       0.0       0.
1736     23.4       0.0
1737  29  1.000  2  1.000 15  1.000
1738 563 for pu(co3)2- from har
1739 puco32-      300    -1.000    11.0       0.0       0.0       0.0       0.
1740     27.9       0.0
1741  29  1.000  2  1.000 15  2.000
1742 564 for pu(co3)3-3 from har
1743 puco33-3     300    -3.000    15.0       0.0       0.0       0.0       0.
1744     31.4       0.0
1745  29  1.000  2  1.000 15  3.000
1746 565 for puso4+ from har
1747 puso4+       300     1.000     9.0       0.0       0.0       0.0       0.
1748     20.4       0.0
1749  29  1.000  2  1.000 16  1.000
1750 566 for pu(hso4)2+ from har
1751 puhso42+     400     1.000    15.0       0.0       0.0       0.0       0.
1752     23.8       0.0
1753  29  1.000  2  1.000  1  2.000 16  2.000
1754 567 for puhso4+2 from har
1755 puhso4+2     400     2.000     9.0       0.0       0.0       0.0       0.
1756     17.9       0.0
1757  29  1.000  2  1.000  1  1.000 16  1.000
1758 568 for pu(so4)2- from har
1759 puso42-      300    -1.000    15.0       0.0       0.0       0.0       0.
1760     22.1       0.0
1761  29  1.000  2  1.000 16  2.000
1762 569 for pucl+2 from har
1763 pucl+2       300     2.000     3.0       0.0       0.0       0.0       0.
1764     16.8       0.0
1765  29  1.000  2  1.000 14  1.000
1766 570 for pucl2+ from har
1767 pucl2+       300     1.000     3.0       0.0       0.0       0.0       0.
1768     11.9       0.0
1769  29  1.000  2  1.000 14  2.000
1770 571 for puo2h2po4+ from har
1771 puo2h2po     500     1.000     6.0       0.0       0.0       0.0       0.
1772    -11.46      0.0
1773  29  1.000  3  2.000 19  1.000  2 -2.000  1 -2.000
1774 572 for puo2hpo4- from har
1775 puo2hpo4     500    -1.000     5.0       0.0       0.0       0.0       0.
1776     -3.45      0.0
1777  29  1.000  3  2.000 19  1.000  2 -1.000  1 -3.000
1778 573 for puhpo4+2 from har
1779 puhpo4+2     300     2.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1780     25.28      0.0
1781  29  1.000  1  1.000 19  1.000
1782 574 for puh2(po4)2 from har
1783 puh2po42     300     0.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1784     48.44      0.0
1785  29  1.000  1  2.000 19  2.000
1786 575 for puh3(po4)3-2 from har
1787 puh3po43     300    -2.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1788     70.42      0.0
1789  29  1.000  1  3.000 19  3.000
1790 576 for puh4(po4)4-4 from har
1791 puh4po44     300    -4.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
1792     92.53      0.0
1793  29  1.000  1  4.000 19  4.000
1794 577 for puh2po4+2 from har
1795 puh2po4+     400     2.000     3.0       0.0       0.0       0.0       0.
1796     38.93      0.0
1797  29  1.000  1  2.000 19  1.000  2  1.000
1798 578 for puco3+2 from har
1799 puco3+2      200     2.000     8.0       0.0       0.0       0.0       0.
1800     19.1       0.0
1801  29  1.000 15  1.000
1802 579 for pu(co3)2 from har
1803 puco32       200     0.000    12.0       0.0       0.0       0.0       0.
1804     33.10      0.0
1805  29  1.000 15  2.000
1806 580 for pu(co3)3-2 from har
1807 puco33-2     200    -2.000    16.0       0.0       0.0       0.0       0.
1808     42.30      0.0
1809  29  1.000 15  3.000
1810 581 for pu(co3)4-4 from har
1811 puco34-4     200    -4.000    20.0       0.0       0.0       0.0       0.
1812     45.10      0.0
1813  29  1.000 15  4.000
1814 582 for pu(co3)5-6 from har
1815 puco35-6     200    -6.000    24.0       0.0       0.0       0.0       0.
1816     44.50      0.0
1817  29  1.000 15  5.000
1818 583 for puno3+3 from har
1819 puno3+3      200     3.000     9.0       0.0       0.0       0.0       0.
1820      1.80      0.0
1821  29  1.000 17  1.000
1822 584 for pu(no3)2+2 from har
1823 puno32+2     200     2.000    14.0       0.0       0.0       0.0       0.
1824      2.40      0.0
```

```
1825  29  1.000 17  2.000
1826 585 for pu(no3)3+ from har
1827 puno33+      200      1.000     19.0        0.0        0.0        0.0        0.
1828       2.30       0.0
1829  29  1.000 17  3.000
1830 586 for pu02no3+ from har
1831 puo2no3+     500      1.000     11.0        0.0        0.0        0.0        0.
1832     -35.5       0.0
1833  29  1.000  1 -4.000  2 -2.000  3  2.000 17  1.000
1834 587 for puf+3 from har
1835 puf+3        200      3.000      4.0        0.0        0.0        0.0        0.
1836       8.44       0.0
1837  29  1.000 20  1.000
1838 588 for puf2+2 from har
1839 puf2+2       200      2.000      4.0        0.0        0.0        0.0        0.
1840      15.08       0.0
1841  29  1.000 20  2.000
1842 589 for puf3+ from har
1843 puf3+        200      1.000      4.0        0.0        0.0        0.0        0.
1844      19.8       0.0
1845  29  1.000 20  3.000
1846 590 for puf4 from har
1847 puf4         200      0.000      4.0        0.0        0.0        0.0        0.
1848      23.20       0.0
1849  29  1.000 20  4.000
1850 591 for puo2f+ from har
1851 puo2f+       500      1.000      6.0        0.0        0.0        0.0        0.
1852     -30.69       0.0
1853  29  1.000  3  2.000  2 -2.000  1 -4.000 20  1.000
1854 592 for amco3+ from bat
1855 amco3+       200      1.000      4.0        0.0        0.0        0.0        0.
1856       7.60       0.0
1857  28  1.000 15  1.000
1858 593 for am(co3)2- from bat
1859 amco32-      200     -1.000      8.0        0.0        0.0        0.0        0.
1860      12.30       0.0
1861  28  1.000 15  2.000
1862 594 for am(co3)3-3 from bat
1863 amco33-3     200     -3.000     12.0        0.0        0.0        0.0        0.
1864      15.23       0.0
1865  28  1.000 15  3.000
1866 602 for zna from others
1867 zna          200      0.000      0.000                                   0.0
1868     20.00       0.000
1869   6  1.000 45  1.000
1870 603 for zk from others
1871 zk           200      0.000      0.000
1872     20.60       0.000
1873   7  1.000 45  1.000
1874 604 for z2mg from others
1875 z2mg         200      0.000      0.000
1876     40.40       0.000
1877   5  1.000 45  2.000
1878 605 for z2ca from others
1879 z2ca         200      0.000      0.000
1880     41.20       0.000
1881   4  1.000 45  2.000
1882 608 for pdoh+ from nea
1883 pdoh+        300      1.000      2.0        0.0        0.0        0.0        0.
1884      -2.12       0.0
1885  42  1.000  3  1.000  1 -1.000
1886 609 for pd(oh)2(aq) from nea
1887 pd(oh)2(     300      0.000      2.0        0.0        0.0        0.0        0.
1888      -4.62       0.0
1889  42  1.000  3  2.000  1 -2.000
1890 610 for snf+       from eq3/6
1891 snf+         200      1.000      2.0        0.0        0.0        0.0        0.
1892       4.08       0.0
1893  34  1.000 20  1.000
1894 611 for snf+++     from eq3/6
1895 snf+++       300      3.000      2.0        0.0        0.0        0.0        0.
1896      -6.57       0.0
1897  34  1.000 20  1.000  2 -2.000
1898 612 for snf2       from eq3/6
1899 snf2         200      0.000      2.0        0.0        0.0        0.0        0.
1900       6.68       0.0
1901  34  1.000 20  2.000
1902 613 for snf2++     from eq3/6
1903 snf2++       300      2.000      4.0        0.0        0.0        0.0        0.
1904      -4.60       0.0
1905  34  1.000 20  2.000  2 -2.000
1906 614 for snf3+      from eq3/6
1907 snf3+        300      1.000      4.0        0.0        0.0        0.0        0.
1908      -6.31       0.0
1909  34  1.000 20  3.000  2 -2.000
1910 615 for snf3-      from eq3/6
1911 snf3-        200     -1.000      2.0        0.0        0.0        0.0        0.
1912       9.46       0.0
1913  34  1.000 20  3.000
1914 616 for snf4       from eq3/6
1915 snf4         300      0.000      4.0        0.0        0.0        0.0        0.
1916      -4.34       0.0
1917  34  1.000 20  4.000  2 -2.000
1918 617 for snoh+++    from eq3/6
1919 snoh+++      400      3.000      4.0        0.0        0.0        0.0        0.
1920      -4.77       0.0
```

```
 34  1.000  3  1.000  1 -1.000  2 -2.000
618 for sn(oh)4   from eq3/6
sn(oh)4       400     0.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
      -4.53        0.0
 34  1.000  3  4.000  1 -4.000  2 -2.000
619 for sn(so4)2  from eq3/6
sn(so4)2      300     0.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
      -6.14        0.0
 34  1.000 16  2.000  2 -2.000
620 for sn(so4)++ from eq3/6
sn(so4++      300     2.000     4.0       0.0       0.0       0.0       0.
      -19.6        0.0
 34  1.000 16  1.000  2 -2.000
621 for acoh+2 from har
acoh+2        300     2.000     0.0       0.0       0.0       0.0       0.
      -10.4        0.0
 49  1.000  3  1.000  1 -1.000

LOOK MIN
u(oh)2so    4         10.00    -3.168     0.00    0                0.000
   1     -2.000   3      2.000  16      1.000  25      1.000
uo2(am)     3          4.00     0.10      0.00    0                0.000
   1     -4.000   3      2.000  25      1.000
na2u2o7(    5         12.00    40.684   -110.02   0                0.000
   6      2.000  25      2.000   3      7.000  1  -14.000  2       -4.
na2uo4(a    5          6.00    39.084    -75.61   0                0.000
   6      2.000  25      1.000   3      4.000  1   -8.000  2       -2.
usio4(am    3          4.00    -2.73    -141.37   0                0.000
  13      1.000  25      1.000   1     -4.000
coffinit    3          4.00    -8.062     0.00    0                0.000
  13      1.000  25      1.000   1     -4.000
(uo2)2co    5         14.00   -19.82     -43.13   0                0.000
  15      1.000  25      2.000   3      4.000  1   -8.000  2       -2.
u(co3)2(    2         12.00   -13.21     -33.78   0                0.000
  15      2.000  25      1.000
uc2(c)      5          0.00    13.15     -33.78   0                0.000
  15      2.000  25      1.000   3     -6.000  1   12.000  2       12.
rutherfo    5         10.00    -5.43      0.00    0                0.000
  15      1.000  25      1.000   3      2.000  1   -4.000  2       -2.
u(so3)2(    5         12.00   -29.658    10.71    0                0.000
  16      2.000  25      1.000   3     -2.000  1    4.000  2        4.
u(so4)2(    2         16.00   -11.681   -23.98    0                0.000
  16      2.000  25      1.000
uo2so3(c    4         10.00    -3.394   -29.98    0                0.000
  16      1.000  25      1.000   3      1.000  1   -2.000
uo2so4(c    5         12.00    10.93    -54.29    0                0.000
  16      1.000  25      1.000   3      2.000  1   -4.000  2       -2.
uo2so4.2    5         11.00   -13.37     -8.69    0                0.000
  16      1.000  25      1.000   3      4.000  1   -3.000  2       -1.
uo2so4.3    5         11.00   -13.37     -6.72    0                0.000
  16      1.000  25      1.000   3      5.000  1   -3.000  2       -1.
uo2so4.3    5         12.00     7.536   -41.70    0                0.000
  16      1.000  25      1.000   3      5.000  1   -4.000  2       -2.
(uo2)2cl    5         11.00    29.297  -101.02    0                0.000
  14      3.000  25      2.000   3      4.000  1   -8.000  2       -3.
u2o2cl5(    5          9.00    26.774   -93.75    0                0.000
  14      5.000  25      2.000   3      2.000  1   -4.000  2       -1.
u5o12cl(    5         25.00    18.97   -167.06    0                0.000
  14      1.000  25      5.000   3     12.000  1  -24.000  2       -5.
ucl3(c)     3          3.00    22.328   -54.12    0                0.000
  14      3.000  25      1.000   2      1.000
ucl4(c)     2          4.00    21.933   -57.56    0                0.000
  14      4.000  25      1.000
ucl5(c)     3          5.00    44.833   -88.00    0                0.000
  14      5.000  25      1.000   2     -1.000
ucl6(c)     3          6.00    66.586  -119.96    0                0.000
  14      6.000  25      1.000   2     -2.000
uo2cl(c)    5          5.00     7.028   -38.24    0                0.000
  14      1.000  25      1.000   3      2.000  1   -4.000  2       -1.
uo2cl2(c    5          6.00    21.159   -60.60    0                0.000
  14      2.000  25      1.000   3      2.000  1   -4.000  2       -2.
uo2cl2.3    5          6.00    14.612   -45.36    0                0.000
  14      2.000  25      1.000   3      5.000  1   -4.000  2       -2.
uo2cl2.h    5          6.00    17.299   -53.34    0                0.000
  14      2.000  25      1.000   3      3.000  1   -4.000  2       -2.
uo2cloh.    5          6.00    17.59    -42.33    0                0.000
  14      1.000  25      1.000   3      5.000  1   -5.000  2       -2.
uocl(c)     5          3.00    19.726   -50.50    0                0.000
  14      1.000  25      1.000   3      1.000  1   -2.000  2        1.
uocl2(c)    4          4.00     5.425   -34.50    0                0.000
  14      2.000  25      1.000   3      1.000  1   -2.000
uocl3(c)    5          5.00    20.167   -51.48    0                0.000
  14      3.000  25      1.000   3      1.000  1   -2.000  2       -1.
(uo2)2cl    5         11.00    29.297  -101.02    0                0.000
  14      3.000  25      2.000   3      4.000  1   -8.000  2       -3.
u2o2cl5(    5          9.00    26.774   -93.75    0                0.000
  14      5.000  25      2.000   3      2.000  1   -4.000  2       -1.
u3o7(bet    4         14.00     1.19    -83.24    0                0.000
  25      3.000   3      7.000   1    -14.000  2   -2.000
u3o8(c)     4         16.00    20.40   -116.08    0                0.000
  25      3.000   3      8.000   1    -16.000  2   -4.000
u4o9(bet    4         18.00     8.70   -101.40    0                0.000
  25      4.000   3      9.000   1    -18.000  2   -2.000
uo2(oh)2    4          6.00    13.92    -48.00    0                0.000
  25      1.000   3      4.000   1     -6.000  2   -2.000
uo2(po3)    3          6.00   -29.20    -44.00    0                0.000
```

```
 19          2.000  25      1.000   2       -2.000
uraninit     3           4.00   -4.850     -18.62     0                   0.000
 25          1.000   3      2.000   1       -4.000
uo3(alph     4           6.00   17.675     -55.28     0                   0.000
 25          1.000   3      3.000   1       -6.000    2    -2.000
uo3(beta     4           6.00   17.346     -54.61     0                   0.000
 25          1.000   3      3.000   1       -6.000    2    -2.000
uo3(gamm     4           6.00   16.743     -53.78     0                   0.000
 25          1.000   3      3.000   1       -6.000    2    -2.000
uo3.0.9h     4           5.00   -23.40      13.78     0                   0.000
 25          1.000   3      3.000   1       -5.000    2    -1.000
schoepit     4           6.00   13.854     -46.45     0                   0.000
 25          1.000   3      5.000   1       -6.000    2    -2.000
u2f9(c)      3           9.00  -38.304     -44.20     0                   0.000
 20          9.000  25      2.000   2       -1.000
u2o3f6(c     5          12.00   15.342    -112.77     0                   0.000
 20          6.000  25      2.000   3        3.000    1    -6.000    2    -4.
u3o5f8(c     5          18.00   24.066    -164.06     0                   0.000
 20          8.000  25      3.000   3        5.000    1   -10.000    2    -6.
u4f17(c)     3          17.00  -97.905     -49.04     0                   0.000
 20         17.000  25      4.000   2       -1.000
ucl2f2(c     3           4.00   -3.615     -31.10     0                   0.000
 20          2.000  14      2.000  25        1.000
ucl3f(c)     3           4.00   10.245     -44.19     0                   0.000
 20          1.000  14      3.000  25        1.000
uclf3(c)     3           4.00  -17.650     -17.77     0                   0.000
 20          3.000  14      1.000  25        1.000
uf3(c)       3           3.00  -10.182     -22.75     0                   0.000
 20          3.000  25      1.000   2        1.000
uf4(c)       2           4.00  -29.369      -4.40     0                   0.000
 20          4.000  25      1.000
uf4.2.5h     5           3.00   -52.21      39.99     0                   0.000
 20          4.000  25      1.000   3        2.000    1     1.000    2     1.
uf5(alph     3           5.00   -5.470     -46.07     0                   0.000
 20          5.000  25      1.000   2       -1.000
uf5(beta     3           5.00   -5.804     -44.18     0                   0.000
 20          5.000  25      1.000   2       -1.000
uf6(c)       3           6.00   26.251     -97.15     0                   0.000
 20          6.000  25      1.000   2       -2.000
uo2f2(c)     5           6.00   23.318     -43.06     0                   0.000
 20          2.000  25      1.000   3        2.000    1    -4.000    2    -2.
uo2f2.3h     5           6.00    1.568     -37.46     0                   0.000
 20          2.000  25      1.000   3        5.000    1    -4.000    2    -2.
uo2foh(c     5           6.00     7.10     -44.37     0                   0.000
 20          1.000  25      1.000   3        3.000    1    -5.000    2    -2.
uo2foh.2     5           6.00    6.318     -39.54     0                   0.000
 20          1.000  25      1.000   3        5.000    1    -5.000    2    -2.
uo2foh.h     5           6.00    6.702     -41.93     0                   0.000
 20          1.000  25      1.000   3        4.000    1    -5.000    2    -2.
uof2(c)      4           4.00  -18.240     -10.31     0                   0.000
 20          2.000  25      1.000   3        1.000    1    -2.000
uof2.h2o     4           4.00  -18.802      -7.55     0                   0.000
 20          2.000  25      1.000   3        2.000    1    -2.000
uof4(c)      5           6.00  -13.464     -70.26     0                   0.000
 20          4.000  25      1.000   3        1.000    1    -2.000    2    -2.
uofoh(c)     4           4.00   -8.984     -17.10     0                   0.000
 20          1.000  25      1.000   3        2.000    1    -3.000
uofoh.0.     5           3.00   -35.74      18.63     0                   0.000
 20          1.000  25      1.000   3        2.000    1    -2.000    2     1.
uo2co3       2          10.00  -14.475      0.000     0                   0.000
 297         1.000  15      1.000
uo2oh        3           5.00     5.00      0.000     0                   0.000
 296         1.000   3      1.000   1       -1.000
nauo3        4           5.00   13.602      0.000     0                   0.000
 296         1.000   3      1.000   1       -2.000    6     1.000
na2uo4       4           6.00   30.043      0.000     0                   0.000
 297         1.000   3      2.000   1       -4.000    6     2.000
na3uo4       4           5.00   56.298      0.000     0                   0.000
 296         1.000   3      2.000   1       -4.000    6     3.000
na2u2o7      4          12.00   22.602      0.000     0                   0.000
 297         2.000   3      3.000   1       -6.000    6     2.000
cauo4        4           6.00   15.935      0.000     0                   0.000
 297         1.000   3      2.000   1       -4.000    4     1.000
mguo4        4           6.00   23.239      0.000     0                   0.000
 297         1.000   3      2.000   1       -4.000    5     1.000
uo23po42     5           6.00   -21.67      0.000     0                   0.000
 25          3.000   1    -12.000   2       -6.000    3     6.000   19     2.
h2uo2po4     5           6.00   -29.92      0.000     0                   0.000
 25          2.000   1     -6.000   2       -4.000    3     4.000   19     2.
uo2hpo4      5           6.00   -15.39      0.000     0                   0.000
 25          1.000   1     -3.000   2       -2.000    3     2.000   19     1.
uhpo42       4           4.00   -51.47      0.000     0                   0.000
 25          1.000   3      4.000   1        2.000   19     2.000
caupo4       4           4.00   -54.14      0.000     0                   0.000
 25          1.000   4      1.000   3        2.000   19     2.000
co2(g)       2           4.00    -1.47      -4.78     1                   -3.50
 65          1.000   3     -1.000
 0.10839e+03 0.19851e-01-0.69195e+04-0.40452e+02 0.66937e+06
o2(g)        1           4.00    -2.96      -1.84     0                   0.000
 62          1.000
h2(g)        1          -2.00    -3.15      -1.76     0                   0.000
 63          1.000
n2(g)        1           0.00    -3.26      -1.36     0                   0.000
 79          1.000
h2s(g)       1          -2.00    -1.00      -4.57     0                   0.000
 236         1.000
```

```
2113 ch4(g)     1        -4.00     -2.86     -3.37     0          0.000
2114   66     1.000
2115 nh3(g)     1        -3.00      1.77     -8.17     0          0.000
2116   80     1.000
2117
2118 END
```

付録　C

ＰＨＲ－ＥＱ３６　ソースプログラム

```
      program phreq3
C by: I.Puigdomenech
C     Studsvik AB
C     611 82 Nykoping, Sweden
C
C for: Swedish Nuclear Power Inspectorate
C      Report SKI-TR-89:13
C
      parameter (mxaq=1000,mstr=120)
      parameter (naq=mxaq-mstr,mastr=mstr+1)
      character*40 infil,utfil, line*80
      character*8 keywrd, name*10, nul,elektr,h2o,hpl,oxg,h2ol,h2olc
      character blank*1,cdate*10,author*20
      data cdate/'1991/01/01'/
C lkt = log equilibrium constant for the dissociation reaction
C csp = stoichiometric coeffs for association reactions for an aqueous species
C     = stoichiometric coeffs for dissociation reactions for a mineral
      real lkt0sp,lkt(8),lkEh(8),dhsp,zsp,alksp,asp(6),csp(20)
      integer inlin,index,nsp,kflag,lsp(20)
C aqucsp = stoichiometric coeffs for association reactions
C          for the aqueous species
      character*10 aqu(naq), minerl(mxaq),                  master(mastr)
      integer   aqunsp(naq),   aqulsp(naq,20)
      real      aqucsp(naq,20),aqulk0(naq,6), aquzsp(naq), mstzsp(mastr)
      integer      elem(mastr),   elm
      real        nelem(mastr,6), nelm(20)
      character*2 welem(mastr,6), welm(20)
      logical lhpl, lh2o, first
C
      data blank/' '/,nul/'*?*?*?*?'/, elektr/'E-'/,   first/.true./
     +     h2o,h2ol,h2olc,hpl,oxg/'H2O','H2O(l)','h2o','H+','o2(g)'/
C log k for Eh reaction:
C    2 H2O  =  O2(G)  +  4 H+  +  4 E-
C     data lkEh/-91.0454,-83.1028,-74.0521,-65.8632,
C    +          -57.8929,-51.6850,-46.7266,-42.6842/
      lkEh(2) = 500.
C get date (VAX)
cc      call Date (cdate)
      write (*,1) cdate
    1 format('+PHREEQE to EQ3/6 thermodynamic data base conversion',
     .         T70,A10,/)
C get command line and open files
      infil=blank
      utfil=blank
   10 write(*,12)
   11 read(*,28,err=9100) infil
   12 format(' Enter INPUT (PHREEQE-data-base) file name: ',$)
      if (infil.eq. '?' .or. infil.eq.blank) go to 9100
   15 write(*,17)
   16 read(*,28,err=9100) utfil
   17 format(' Enter OUTPUT (EQ3/6-DATA0) file name: ',$)
      if (utfil.eq.blank) go to 9100
          call UpCase (INFIL,40)
          call UpCase (UTFIL,40)
          OPEN (10,FILE=INFIL,STATUS='OLD',IOSTAT=I)
          IF (I.NE.0) GO TO 9510
          OPEN (11,FILE=UTFIL,STATUS='UNKNOWN',IOSTAT=I,
     .          carriagecontrol='LIST')
          IF (I.NE.0) GO TO 9520
          OPEN (15,FILE='HDR',STATUS='OLD',IOSTAT=I)
          IF (I.NE.0) GO TO 9530
          OPEN (20,FILE='ELEMS',STATUS='OLD',IOSTAT=I)
          IF (I.NE.0) GO TO 9540
C
      do 20 i=1,mstr
   20   master(i)=nul
      master(mastr)=oxg
      index=mastr
      call Elemnt (mastr,index,oxg,elem,nelem,welem)
      do 21 i=1,naq
        aqu(i)=nul
   21   aqunsp(i)=-1
      do 22 i=1,mxaq
   22   minerl(i)=nul
      NSQ=0
C
   26 author=blank
      write (*,27)
   27 format(' Enter your name (max. 20 letters): ',$)
      read (*,28,err=26) author
   28 format (a)
      if (author.eq.blank) go to 26
C ----------------------------------------
C  read ELEMENTS from PHREEQE data base
      inlin=1
      read(10,101,err=9800,end=9850) keywrd
  101 format(a)
      if (keywrd.ne.'ELEMENTS') go to 9200
      write(*,102)
  102 format('+ELEMENTS',/)
  109    format(A8,2X,I2,3X,F10.0)
         NCT2=2                                              O+H
  105    inlin=inlin+1
         read(10,109,err=9800,end=9850) keywrd,i,zsp
         if (keywrd.eq.blank) go to 106
         write(*,111) keywrd
```

```
 111    format('+',a)
        if (i.ge.4)  NCT2=NCT2+1
        go to 105
 106 NSQ2=NCT2+1
     rewind 10
     read(10,101) keywrd
C ----------------------------------------
C  write a EQ3/6 DATA0 header
C
     read (15,101) line
        if (line(1:5) .ne. 'data0') go to 9500
        call WrtLin (line)
           do 95 i=1,3
           read (15,101) line
           if (line(1:1) .ne. '*') go to 9500
  95       call WrtLin (line)
           read (15,101) line
           if (line(1:1) .ne. ' ') go to 9500
           write (line,96) NCT2,NSQ2
  96       format(3x,I2,3x,I2)
           call WrtLin (line)
           read (15,101) line
           if (line(1:1) .ne. '*') go to 9500
           call WrtLin (line)
C         read the old title and write a new title
           read (15,101) line
           read (15,101) line
           read (15,101) line
           read (15,101) line
           write (11,98) UTFIL, CDATE, INFIL
  98       format('Data File ',A,2X,'(for EQ3/6 Version 3245)'/10x,
     .             '1 atm Steam Saturation Curve data',/,'Created ',A,
     .             /5x,'from PHREEQE data base ',A)
     i=0
  99 read (15,101) line
     call WrtLin (line)
     if (line(1: 1) .eq. '*') go to 99
     if (line(1: 8) .eq. 'elements') go to 120
     go to 99
 120 write(11,121) NCT2
 121 format('*->> There must be ',I2,' element-lines below')
 122 read (15,101,end=100) line
     if (line(1: 1) .eq. '*') go to 125
     if (line(1: 8) .eq. 'temperat') go to 125
     Call WrtLin (line)
     go to 122
 123    format(a2,7x,F9.5)
c       read elements from PHREEQE data base
 125    read(10,109) keywrd,i,zsp
        if (keywrd.eq.blank) go to 129
        write(*,111) keywrd
        call LwCase (keywrd,8)
        if (i.lt.4) go to 125
        write(11,123) keywrd,zsp
        go to 125
 129    Call WrtLin (line)
C read log K for reaction:   2 H20  =  O2(G)  +  4 H+  +  4 E-
 130 read (15,101,end=100) line
     call WrtLin (line)
     if (line(1: 1) .eq. '*') go to 130
     if (i.eq.1) read(line,131) (lkEh(j),j=1,4)
     if (i.eq.2) read(line,131) (lkEh(j),j=5,8)
 131 format(6x,f9.4,1x,f9.4,1x,f9.4,1x,f9.4)
     if (i.eq.2) i=0
     if (i.eq.1) i=2
     if (line(1:12) .eq. 'log k for eh') i=1
     go to 130
 100 continue
     if (lkEh(2).eq.500.) go to 9505
C ----------------------------------------
C  read SPECIES
     NMaster = mstr
     mxi=0
     inlin=inlin+1
     read(10,101,err=9800,end=9850) keywrd
     if (keywrd.ne.'SPECIES') go to 9300
     write(*,142)
 142 format('+SPECIES ',/)
 150    inlin=inlin+1
        read(10,151,err=9800,end=9850) index
 151    format(i3)
        if (index.eq.0) go to 500
        if (index.lt.0 .or. index.gt.mxaq) go to 9250
        inlin=inlin+1
        read(10,155,err=9800,end=9850) name,nsp,kflag,zsp,alksp
 155    format(a10,i3,i1,1x,f10.3,40x,f10.3)
        write(*,111) name
        if (nsp.le.0 .or. nsp.gt.20) go to 9350
        if (name.eq.'OH-' .or. name.eq.'oh-')  NMaster = index - 1
 156    Call CheckN (name,ierr,mxi,mastr,naq,mxaq,master,aqu,minerl)
        if (index.gt.NMaster) go to 160
C       master species
        if (name.eq.h2o .or. name.eq.h2ol) name=h2olc
        master(index) = name
        if (index.gt.3) go to 159
        if (index.eq.1 .and. name.ne.hpl)    go to 9150
```

```
193          if (index.eq.2 .and. name.ne.elektr) go to 9150
194          if (index.eq.3 .and. name.ne.h2olc)  go to 9150
195   159    call Elemnt (mastr,index,name,elem,nelem,welem)
196   160    inlin=inlin+1
197          read(10,165,err=9800,end=9850) lkt0sp,dHsp,(asp(i),i=1,6)
198   165    format(2f10.3,6e12.5)
199          inlin=inlin+1
200          read(10,181,err=9800,end=9850) (lsp(i),csp(i),i=1,nsp)
201   181    format(6(I3,f7.3))
202 C        check that the species in the reaction are "master" species
203               iadd=0
204               do 166 i=1,nsp
205               if (lsp(i).le.NMaster .and. master(lsp(i)).ne.nul)
206     .                 go to 166
207               if (lsp(i) .gt. NMaster) iadd=1
208               if (master(lsp(i)) .eq. nul) iadd=2
209               go to 167
210   166         continue
211               go to 169
212   167         j=i
213               write (*,168) name, nsp, (lsp(i),i=1,nsp)
214   168         format(2x,'Aqueous species=',a,', species in reaction=',
215     .                i4,/5x,'master-species number(s) in reaction=',7i5,
216     .                :/10x,13i5)
217               if (iadd.eq.1)
218     .           write (*,1681)
219  1681           format(6x,
220     .                '(master-species numbers must be <= index for OH-)')
221               if (iadd.eq.2)
222     .          write (*,1682) lsp(j),master(lsp(j))
223  1682          format(6x,'(unknown master species nr.',I2,
224     .                                          ', name:',A,')')
225               write (*,1683) name
226  1683          format(1x,'Aqueous species ',A,
227     .                                  ' not written to EQ3/6-file',/)
228               if (index.le.mstr) master(lsp(j)) = nul
229               go to 150
230   169         continue
231          if (index.le.NMaster) mstzsp(index) = zsp
232 C        get logKeq versus temperature for aqueous species
233            lkt0sp=-lkt0sp
234            call logKt (kflag,lkt0sp,lkt,dHsp,asp,1)
235 C ------ write EQ3/6 species block -------
236               if (name.eq.elektr .or. name.eq.h2olc)
237     .                 go to 150
238               if (.not.first .and. index.le.NMaster) write(11,203)
239   203         format('*->> ?? Move this species. It must appear before',
240     .                ' species "O2(G)" in the',/,
241     .                '*       section for strict basis aqueous species')
242               if (ierr.gt.0) write(11,211) name
243   211         format('*->> ??  Duplicate name: ',A)
244               if (ierr.gt.0) write(*,212) name
245   212         format('+Name duplicated: ',A,/)
246               if (.not.first .or. index.le.NMaster) go to 204
247 C first non-master aqueous species: write basis species "O2(G)" in EQ3/6-file
248               first=.false.
249               write(11,200)
250   200         format('o2(g)',/4x,'entered by=',25x,'date=',2x,'/',2x,'/'
251     .                ,/8x,'source=',22x,'quality=',/8x,
252     .                     'charge=',3x,'0.0',11x,'titr. factor=',3x,
253     .                                          '0.0 eq/mol',/6x,
254     .                     'ion size=',3x,'0.0 a',9x,'hydr. number=  0.0')
255               write(11,201)
256   201         format('*',71('-'),/,'* BEGINNING OF AUXILIARY BASIS ',
257     .                                  'SPECIES  (IF ANY)')
258               write(11,250)
259 C not first
260   204         write (11,205) name
261   205         format(a)
262               write (11,206) author,cdate
263   206         format(4x,'entered by=',1x,a20,4x,'date=',1x,a10,
264     .                /8x,'source= PHREEQE',14x,'quality= unknown')
265               Call ZCheck
266     .             (mastr,mstzsp,naq,aquzsp,NMaster,zsp,nsp,lsp,csp)
267               write (11,207) zsp,alksp
268   207         format(8x,'charge=',f6.1,11x,'titr. factor=',f6.1,
269     .                1x,'eq/mol',/6x,
270     .                'ion size=',3x,'3.0 a',9x,'hydr. number=',3x,'0.')
271               if (index.gt.NMaster) go to 209
272               NSQ=NSQ+1
273               write (11,208)  elem(index),
274     .             (nelem(index,i),welem(index,i),i=1,elem(index))
275   208         format(4x,i2,' chemical elements=',
276     .             5(/5x,f7.3,1x,a2,12x,f7.3,1x,a2,12x,f7.3,1x,a2,:)
277     .                /5x,f7.3,1x,a2,12x,f7.3,1x,a2,12x,f7.3,1x,a2)
278               go to 249
279   209         continue
280 C get species elements
281          call GetElm (mastr,nsp,lsp,csp,elm,elem,nelem,nelm,welem,welm)
282 C        substract elements with zero coefficient
283               call SubtrE (elm,nelm,welm)
284               write (11,208)  elm,(nelm(i),welm(i), i=1,elm)
285 C find if it is a reaction with electrons
286               do 225 i=1,nsp
287   225         if (lsp(i).eq.2) go to 226
288               go to 233
```

```
C       find if there is already H2O or H+ in the reaction
  226         iel=i
              lh2o=.false.
              lhpl=.false.
              do 227 i=1,nsp
                 if (lsp(i).eq.3) csp(i)=csp(i)+0.50*csp(iel)              H2O
                 if (lsp(i).eq.1) csp(i)=csp(i)-1.00*csp(iel)              H+
                 if (lsp(i).eq.3) lh2o=.true.
  227            if (lsp(i).eq.1) lhpl=.true.
              iadd=0
              if (.not.lh2o) then
                      iadd=iadd+1
                      csp(nsp+iadd)=+0.50*csp(iel)
                      lsp(nsp+iadd)= 3
                   endif
              if (.not.lhpl) then
                      iadd=iadd+1
                      csp(nsp+iadd)=-1.00*csp(iel)
                      lsp(nsp+iadd)= 1
                   endif
              nsp=nsp+iadd
C     add the reaction:   1/2 H2O  =  1/4 O2(G)  +  H+  +  E-
C                  for each +1 E- in the association reaction
C                                 (i.e., 1 E- in the left of the reaction)
C                        add:  -1 H+
C                              -0.25 O2(G)
C                              +0.5 H2O
              do 228 i=1,6
                if (lkt(i).eq.500.) go to 228
C                              minus: lkt = log(Keq) for dissociation reaction
                lkt(i)= lkt(i) - (lkEh(i)*0.25*csp(iel))
  228           continue
              csp(iel)=-0.25*csp(iel)
              lsp(iel)=mastr
C     substract species with zero stoichiometric coefficient
              call Substr (nsp,csp,lsp)
  233         continue
C write species in reaction, etc
              if (index.le.NMaster) go to 240
                  j=index-NMaster
                  mxi=max(mxi,j)
                  aqu(j) = name
                  aqunsp(j)=nsp
                  aquzsp(j)=zsp
                  do 234 i=1,6
  234             aqulk0(j,i)=lkt(i)
                  do 235 i=1,nsp
                  aqulsp(j,i)=lsp(i)
  235             aqucsp(j,i)=csp(i)
  240         nsp1=nsp+1
              write (11,242) nsp1
  242         format(4x,i2,1x,'species in reaction=')
              if (nsp.eq.1) write (11,243) name, csp(1), master(lsp(1))
              if (nsp.ge.2) write (11,243) name,
     .                          (csp(i), master(lsp(i)), i=1,2)
  243         format(5x,' -1.000',1x,a10,4x,f7.2,1x,a10,4x,f7.2,1x,a10)
              if (nsp.ge.3) write (11,244)
     .                          (csp(i),master(lsp(i)), i=3,nsp)
  244         format(5x,f7.2,1x,a10,4x,f7.2,1x,a10,4x,f7.2,1x,a10)
              write (11,245) (lkt(i), i=1,8)
  245         format('*',4x,'log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 ',
     .              'c) =',
     .            /6x,f9.4,1x,f9.4,1x,f9.4,1x,f9.4,
     .            /6x,f9.4,1x,f9.4,1x,f9.4,1x,f9.4)
              write (11,246) infil
  246         format('*',4x,'delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 ',
     .              'c) =',/9x,'0.',8x,'0.',8x,'0.',8x,'0.',
     .                    /9x,'0.',8x,'0.',8x,'0.',8x,'0.',
     .              /,'*',1x,'input PHREEQE data-base file: ',a)
  249         write (11,250)
  250         format('+',72('-'))
      go to 150
C ----------------------------------------
C  read LOOK MIN
  500 continue
      zsp = 0
      index=0
      mxi=0
      write(11,501)
  501 format('endit.',/,'minerals',/,'*',38(' -'),/,'*->> Gas Species',
     .' should be moved and placed after label "GASES" below',/,'*->> ',
     .'NOTE -  EQ6 needs gasses "o2(g)" and "h2(g)"',/,'*',38(' -'))
      inlin=inlin+1
      read(10,101,err=9800,end=9850) keywrd
      if (keywrd.ne.'LOOK MIN') go to 9310
      write(*,502)
  502 format('+LOOK MIN',/)
  510     inlin=inlin+1
          read(10,511,err=9800,end=9850) name,nsp,lkt0sp,dhsp,kflag
  511     format(a10,i2,13x,2f10.2,5x,i1)
          if (name.eq.blank) go to 1500
          write(*,111) name
          if (name.eq.'O2(G)' .or. name.eq.'H2(G)') call LwCase(name,5)
          if (name.eq.'O2(g)' .or. name.eq.'H2(g)') call LwCase(name,5)
          Call CheckN (name,ierr,mxi,mastr,naq,mxaq,master,aqu,mineri)
          index=index+1
```

```
385          if (index.gt.mxaq) index=1
386          minerl(index)=name
387          mxi=max(index,mxi)
388          if (nsp.le.0 .or. nsp.gt.20) go to 9350
389          inlin=inlin+1
390          read(10,515,err=9800,end=9850) (lsp(i),csp(i),i=1,nsp)
391   515    format(5(i4,f11.3))
392          if (kflag.ne.1) go to 525
393          inlin=inlin+1
394          read(10,520,err=9800,end=9850) (asp(i),i=1,6)
395   520    format(6e12.5)
396   525    Call ZCheck (mastr,mstzsp,naq,aquzsp,NMaster,zsp,nsp,lsp,csp)
397 C        get logKeq versus temperature for minerals
398            call logKt (kflag,lktOsp,lkt,dHsp,asp,2)  -
399 C        check that the species in the reaction are "master" species
400               nsp1=nsp
401               do 545 i=1,nsp
402               if(lsp(i).le.NMaster.and.master(lsp(i)).ne.nul) go to 545
403               if(lsp(i).le.NMaster.and.master(lsp(i)).eq.nul) go to 567
404               iaqu=lsp(i)-NMaster
405               if (aqu(iaqu).eq.nul)      go to 567
406 C        non-master-species in PHREEQE mineral reaction:
407 C                get new equilibrium constant
408                  do 540 ij=1,6
409                    if (lkt(ij).eq.500.) go to 540
410                    lkt(ij) = lkt(ij) + (aqulkO(iaqu,ij)*csp(i))
411                    if (aqulkO(iaqu,ij).eq.500.) lkt(ij)=500.
412   540              continue
413 C                get new stoichiometric coefficients
414                  do 544 ij=1,aqunsp(iaqu)
415                     ifound=0
416                        do 542 j=1,nsp1
417                          if (aqulsp(iaqu,ij).ne.lsp(j)) go to 542
418                          csp(j)=csp(j)+(aqucsp(iaqu,ij)*csp(i))
419                          ifound=1
420   542                    continue
421                     if (ifound.eq.1) go to 543
422                        lsp(nsp1+1)=aqulsp(iaqu,ij)
423                        csp(nsp1+1)=aqucsp(iaqu,ij)*csp(i)
424                        nsp1=nsp1+1
425   543               continue
426   544               continue
427 C            get rid off the non-master species
428               csp(i)=0.
429   545         continue
430 C             check if there has been changes (i.e., any non-master species?)
431               if (nsp.eq.nsp1) go to 569
432               nsp=nsp1
433 C             substract aqueous species with zero stoichiometric coeff
434               call Substr (nsp,csp,lsp)
435               go to 569
436 C            erroneous species in reaction
437   567         j=i
438               write (*,568) name, nsp, (lsp(i),i=1,nsp)
439   568         format(2x,'Mineral=',a,', species in reaction=',i4,/12x,
440      .                'species numbers in reaction=',7i5,
441      .                :/10x,13i5)
442               write (*,*) '     (unknown species:',lsp(j),')'
443               write (*,*) ' Mineral ',name,' not written to EQ3/6-file'
444               write (*,*)
445               go to 510
446   569         continue
447 C -------- write EQ3/6 mineral block -------
448              if (ierr.gt.0) write(*,212) name
449              if (ierr.gt.0) write(11,211) name
450              write (11,205) name
451              write (11,206) author,cdate
452              write (11,601)
453   601        format(8x,'volume=',4x,'0.',4x,'cc/mol')
454 C get the mineral's elements
455       call GetElm (mastr,nsp,lsp,csp,elm,elem,nelem,nelm,welem,welm)
456 C     substract elements with zero coefficient
457              call SubtrE (elm,nelm,welm)
458              write (11,208) elm,(nelm(i),welm(i), i=1,elm)
459 C find if it is a reaction with electrons
460              do 625 i=1,nsp
461   625        if (lsp(i).eq.2) go to 626
462              go to 635
463 C      find if there is already H20 or H+ in the reaction
464   626        iel=i
465              lh2o=.false.
466              lhpl=.false.
467              do 627 i=1,nsp
468                 if (lsp(i).eq.3) csp(i)=csp(i)+0.50*csp(iel)            H20
469                 if (lsp(i).eq.1) csp(i)=csp(i)-1.00*csp(iel)            H+
470                 if (lsp(i).eq.3) lh2o=.true.
471   627           if (lsp(i).eq.1) lhpl=.true.
472              iadd=0
473              if (.not.lh2o) then
474                      iadd=iadd+1
475                      csp(nsp+iadd)=+0.50*csp(iel)
476                      lsp(nsp+iadd)= 3
477                   endif
478              if (.not.lhpl) then
479                      iadd=iadd+1
480                      csp(nsp+iadd)=-1.00*csp(iel)
```

```
481                     lsp(nsp+iadd)= 1
482                  endif
483              nsp=nsp+iadd
484 C     add the reaction:   1/4 O2(G) + H+ + E- = 1/2 H2O
485 C             (reaction:   1/2 H2O = 1/4 O2(G) + H+ + E-  for association)
486 C                  for each +1 E- in the dissociation reaction
487 C                                (i.e., 1 E- in the right of the reaction)
488 C                       add:  -1 H+
489 C                             -0.25 O2(G)
490 C                             +0.5 H2O
491              do 628 i=1,6
492                if (lkt(i).eq.500.) go to 628
493                lkt(i)= lkt(i) + (-lkEh(i)*0.25*csp(iel))
494   628          continue
495 C     check if there is already "O2(G)" (from a non-master species)
496              do 629 i=1,nsp
497   629            if (lsp(i).eq.mastr) go to 630
498              csp(iel)=-0.25*csp(iel)
499              go to 634
500   630        csp(i)=csp(i)-(0.25*csp(iel))
501              csp(iel)=0.
502   634        lsp(iel)=mastr
503 C     substract species with zero stoichiometric coefficient
504              call Substr (nsp,csp,lsp)
505 C write species in reaction, etc
506   635        nsp1=nsp+1
507              write (11,242) nsp1
508              if (nsp.eq.1) write (11,243) name, csp(1), master(lsp(1))
509              if (nsp.ge.2) write (11,243) name,
510      .                           (csp(i), master(lsp(i)), i=1,2)
511              if (nsp.ge.3) write (11,244)
512      .                           (csp(i),master(lsp(i)), i=3,nsp)
513              write (11,245) (lkt(i), i=1,8)
514              write (11,246) infil
515              write (11,250)
516           go to 510
517 C ----------------------------------------
518 C  read END
519  1500 continue
520       write (11,1501)
521       write (11,1502)
522       write (11,1503)
523  1501 format('endit.',/,'gases',/,'*->> NOTE -  EQ6 needs "O2(G)"',
524      .' and "H2(G)" in this section',/,'*->> You should place all ',
525      .'gas species after this line',/,'endit.',/,'solid solutions',/,
526      .'endit.')
527  1502 format(21x,'references',///,'Wolery, T.J. 1983. EQ3NR'
528      .       ,', a computer program for geochemical aqueous',/,'  speci'
529      .       ,'ation-solubility calculations: Users''s guide and documen'
530      .       ,'tation.',/,'  Lawrence Livermore Nat.Lab.; Livermore, CA'
531      .       ,' 94550; Report UCRL-53414',/)
532  1503 format( 'Parkhurst, D.L., Thorstenson, D.C., and Plum'
533      .       ,'mer, L.N. 1980 (revised 1985).',/,'  PHREEQE - a computer'
534      .       ,' program for geochemical calculations. U.S.Geological',/
535      .       ,'  Survey, report Water-Resources Investigations 80-96'
536      .       ,//,'stop.')
537       close (unit=11)
538       inlin=inlin+1
539       read(10,101,err=9800,end=9850) keywrd
540       if (keywrd.ne.'END') go to 9320
541 C number of elements (NCT) is number of basis aqueous species written
542 C  plus one (for H2O)
543       NCT=NSQ+1
544 C number of strict aqueous basis species is NCT+1 (for O2(AQ))
545       NSQ=NCT+1
546       write(*,1504) NCT,NSQ
547  1504 format('+No. of elements (NCT) =',I3,/1x,
548      .         'No. of EQ3/6 "strict" aqueous basis species (NSQ) =',I3,
549      .   //1x,'All Done')
550       go to 9999
551 C------------ error reporting ------------------
552  9100 write(*,9101)
553  9101 FORMAT(1x,'Usage:',/5X,
554      + 'PHR-EQ36  PHREEQE-data-base-name  EQ36-data-base-name',//1X
555      +,'Auxiliary input files are:',/10x,'ELEMS',2X,'(elements ',
556      +'contained in each master species)',/10x,'HDR',4X,'(header info '
557      +,'for EQ3/6 DATA0-file)'
558      + ,//1x,'VAX-info: make  $assign NEA0:[Puigdomenech]HDR. HDR'
559      + , /12x,'and  $assign NEA0:[Puigdomenech]ELEMS. ELEMS')
560       go to 9999
561  9150 write(*,9801) inlin
562       write(*,9151) index,name
563  9151 format(/1x,'-- Error in PHREEQE-data-base:',5x,'species',i3,
564      .  5x,'name=',a,/1x,
565      .'(1st species must be H+, 2nd must be E-, and 3rd must be H2O)')
566       go to 9999
567  9200 write(*,9801) inlin
568       write(*,*)
569      + '-- Error: 1st keyword must be "ELEMENTS" in PHREEQE-data-base'
570       go to 9850
571  9250 write(*,9801) inlin
572       write(*,*)
573      + '-- Error: Aqueous species index=',index,' in PHREEQE-data-base'
574       write(*,9252) mxaq
575  9252 format(10x,'(must be >0 and <=',i4,')')
576       go to 9999
```

```
 9300 write(*,9801) inlin
      write(*,*)
     + '-- Error: 2nd keyword must be "SPECIES" in PHREEQE-data-base'
      go to 9999
 9310 write(*,9801) inlin
      write(*,*)
     + '-- Error: 3rd keyword must be "LOOK MIN" in PHREEQE-data-base'
      go to 9999
 9320 write(*,9801) inlin
      write(*,*)
     + '-- Warning: 4th keyword should be "END" in PHREEQE-data-base'
      go to 9999
 9350 write(*,*) 'Input line=',inlin
      write(*,*) 'Aqueous species or mineral=',name  -
      write(*,*)
     + '-- Error: Number of reaction species=',nsp
     +            ,' in PHREEQE-data-base'
      write(*,*) '            (must be >0 and <=20)'
      go to 9999
 9500 write(*,*) 'Reading input file "HDR", line:'
      write(*,*) line
      write(*,*)
     +        '-- Error: unexpected line in auxiliary file "HDR"'
      go to 9999
 9505 write(*,9506)
 9506 format(/1x,'log K for Eh reaction:',3x,
     .            '2 H20  =  O2(G)  +  4 H+  +  4 E-',/1x,
     .          'not found in file "HDR"')
      go to 9999
 9510 write(*,9511) I,INFIL
 9511 format(1x,'-- Error #',I5,/4x,
     .          'opening file: ',A,/4X,'(or file not found)',/)
      go to 9100
 9520 write(*,9511) I,UTFIL
      go to 9100
 9530 write(*,9511) I,'HDR'
      go to 9100
 9540 write(*,9511) I,'ELEMS'
      go to 9100
 9800 write(*,9801) inlin
 9801 format(1x,'Input line=',I6)
      write(*,*) 'Current species name is=',name
      write(*,*) 'FORTRAN-Read-Error in PHREEQE-data-base'
      go to 9999
 9850 write(*,9801) inlin
      write(*,*)
     +        '-- Error: unexpected end-of-file, in PHREEQE-data-base'
 9999 continue
      end
C     -----------------
      subroutine Elemnt (mastr,index,name,elem,nelem,welem)
C find what elements of EQ3/6 are in each of the master species of PHREEQE
C   elems = number of elements in master species of file "ELEMS"
C   nelems(i,j) = how many of element "welems(j)" are there
C                                 in master species of file "ELEMS"
C
C   elem(i) = number of elements in master species "i"
C   nelem(i,j) = how many of element "welem(j)" are there
C                                 in master species "i"
      integer       elem(mastr),    elems
      real         nelem(mastr,6), nelems(3)
      character*2  welem(mastr,6), welems(3)
      character*10  name, basis, nname
      save
         if (index.le.0 .or. index.gt.mastr) go to 1500
         if (index.eq.mastr) go to 90
         rewind 20
C
C        read master species name, number of elements in the master species,
C        what are the names of the elements in the EQ3/6 data base,
C        and how many of each
  15     read (20,20,err=26,end=1100) basis,elems
         if (elems.lt.0 .or. elems.gt.3) go to 1000
         if (elems.gt.0) read (20,25) (welems(i),nelems(i), i=1,elems)
         do 16 i=1,elems
  16        call LwCase (welems(i),2)
  20     format(a10,10x,i2)
  25     format(20x,6(a2,F2.0,2x))
  26     continue
         nname = name
         call UpCase (nname,10)
         call UpCase (basis,20)
         if (nname.ne.basis) go to 15
              elem(index)=elems
              do 30 i=1,elems
                welem(index,i)=welems(i)
  30            nelem(index,i)=nelems(i)
  50          return
C
  90     if (index.ne.mastr) go to 1100
            elem(mastr)=1                                          o2(g)
            welem(mastr,1)='o'
            nelem(mastr,1)=2.
            go to 50
C
 1000 write (*,1001) basis,elems
```

```
 1001 format(1x,'-- Error in auxiliary file "ELEMS", ',
     .'master species: ',a,', nr of elements=',I2,/11x,
     .'number of elements for each master species must be >=0 and <=3',
     ./11x,'(only one element (with H and/or O))')
      go to 1900
 1100 write (*,1101) index,nname
      write (*,1102)
 1101 format(1x,'-- Error: master species in PHREEQE data base: ',/11x,
     .          'index=',i3,', name=',a)
 1102 format(11x,'(master species name not found in file "ELEMS")')
      go to 1900
 1500     write (*,1101) index,nname
          write (*,1501) mastr
 1501     format(11x,'(index should be >0 and <=',I2,_
     .                ' in subroutine "Elemnt")')
 1900 stop
      end
C     -----------------
      subroutine GetElm
     .            (mastr,nsp,lsp,csp,elm,elem,nelem,nelm,welem,welm)
C get the species' elements
C   elm = number of elements in species
C   nelm(j) = how many of element "welm(j)" are there in species
C   elem(i) = number of elements in master species "i"
C   nelem(i,j) = how many of element "welem(j)" are there
C                                  in master species "i"
      integer      elem(mastr),    elm,       lsp(nsp)
      real        nelem(mastr,6), nelm(20),   csp(nsp)
      character*2 welem(mastr,6), welm(20)
         if (nsp.le.0 .or. nsp.gt.20) go to 100
             elm=elem(lsp(1))
             do 611 i=1,elm
               welm(i)=welem(lsp(1),i)
  611          nelm(i)=nelem(lsp(1),i)*csp(1)
             iadd=0
             do 614 i=2,nsp
               do 613 ij=1,elem(lsp(i))
               ifound=0
                  do 612 j=1,elm
                    if (welem(lsp(i),ij) .ne. welm(j)) go to 612
                    nelm(j)=nelm(j)+(nelem(lsp(i),ij)*csp(i))
                    ifound=1
  612               continue
               if (ifound.eq.1) go to 613
                  welm(elm+1)=welem(lsp(i),ij)
                  nelm(elm+1)=nelem(lsp(i),ij)*csp(i)
                  elm=elm+1
  613          continue
  614          continue
          return
  100     write (*,*) 'Fatal error, NSP=',nsp
          write (*,*) '(should be >0 and <=20) in routine "GetElm"'
          stop
          end
C     -----------------
      subroutine ZCheck
     .      (mastr,mstzsp,naq,aquzsp,NMaster,zsp,nsp,lsp,csp)
C check charge balance in species reaction
      integer                          lsp(nsp)
      real        mstzsp(mastr),aquzsp(naq), csp(nsp)
         if (nsp.le.0 .or. nsp.gt.20) go to 100
             ztot = -zsp
             do 600 i=1,nsp
               if (lsp(i).le.NMaster) go to 550
                  iaqu = lsp(i) - NMaster
                  zzz = aquzsp(iaqu)
               go to 555
  550            zzz = mstzsp(lsp(i))
  555          ztot = ztot + (csp(i) * zzz)
  600          continue
          if (abs(ztot) .lt. 5.e-4) go to 999
             write(11,605) ztot
             write( *,605) ztot
  605        format(1x,'?? Serious error, ',
     .            'electric charge inbalance =',3x,1pE15.5,/)
  999     return
  100     write (*,*) 'Fatal error, NSP=',nsp
          write (*,*) '(should be >0 and <=20) in routine "ZCheck"'
          stop
          end
C     -----------------
      subroutine SubtrE (elm,nelm,welm)
C substract elements with zero coefficient
C   elm = number of elements in species
C   nelm(j) = how many of element "welm(j)" are there in species
      integer      elm
      real         nelm(elm)
      character*2  welm(elm)
      if (elm.le.1) return
      if (elm.gt.20) go to 100
             i=0
             newelm=elm
  616        i=i+1
  617          if (nelm(i).lt.0.) write(*,618)  i,welm(i),nelm(i)
               if (nelm(i).lt.0.) write(11,618) i,welm(i),nelm(i)
  618            format(1x,'?? Serious error,',3x,
```

```
     .            'Element=',i3,' (',a2,'), stoichiometry=',F6.1,/)
                if (nelm(i).gt.0. .or. i.gt.newelm) go to 620
                newelm=newelm-1
                if (newelm.le.0) go to 620
                   j=i
619                welm(j)=welm(j+1)
                   nelm(j)=nelm(j+1)
                   j=j+1
                   if (j.le.elm-1) go to 619
                   go to 617
620             if (i.le.newelm) go to 616
                elm=newelm
                if (elm.gt.0) go to 625
                write(*,621)
                write(11,621)
621             format(1x,'?? Serious error, nr of elements <=0')
625             return
100          write (*,*) 'Fatal error,  ELM=',elm
             write (*,*) '(ELM should be <=20 in routine "SubtrE")'
             stop
             end
C        -----------------
         subroutine Substr (nsp,csp,lsp)
C        substract aqueous species with zero stoichiometric coeff
         integer lsp(nsp)
         real    csp(nsp)
         if (nsp.le.1) return
         if (nsp.gt.20) go to 100
            i=0
            newsp=nsp
549         i=i+1
550         if (csp(i).ne.0. .or. i.gt.newsp) go to 552
                newsp=newsp-1
                if (newsp.le.0) go to 552
                  j=i
551               csp(j)=csp(j+1)
                  lsp(j)=lsp(j+1)
                  j=j+1
                  if (j.le.nsp-1) go to 551
                  go to 550
552             if (i.le.newsp) go to 549
                nsp=newsp
                if (nsp.gt.0) go to 555
                write(*,553)
                write(11,553)
553             format(1x,'?? Serious error, nr of species',
     .                                        ' in reaction <=0')
555             return
100          write (*,*) 'Fatal error, NSP=',nsp
             write (*,*) '(NSP should be <=20 in routine "Substr")'
             stop
             end
C            ----------------
             subroutine logKt (kflag,lkt0sp,lkt,dHsp,asp,iaqmin)
C            get logKeq versus temperature
             real lkt0sp, lkt(8), dHsp, asp(6), temp(6)
             save
C                                                        1/298.15
             data temp/0.,25.,60.,100.,150.,200./, temp1/3.3540164E-3/
             Rln10= 4.57565106
             do 170 i=1,8
               lkt(i)=500.
170            if (i.le.3) lkt(i)=lkt0sp
             if (kflag.ne.0) go to 175
C use Van't Hoff expresion
             if (dHsp.eq.0.) go to 180
             do 171 i = 1, 6
                temp2 = 1. / (273.15 + temp(i))
171             lkt(i) = lkt0sp - 1000.*((dHsp/Rln10)*(temp1-temp2))
             go to 180
C use polynomial expresion
175          if (kflag.ne.1) go to 180
             do 176 i=1,6
                tempe = 273.15 + temp(i)
                lkt(i) = asp(1) + (asp(2)*tempe) + (asp(3)/tempe)
     .                 + (asp(4)*alog10(tempe)) + (asp(5)/(tempe*tempe))
                if (iaqmin.eq.1) lkt(i) = -lkt(i)                    aqueous
176             continue
             if (abs(lkt(2)-lkt0sp) .lt. 0.01) go to 180
             write(11,177) lkt0sp, lkt(2)
177          format('*->> ?? ERROR:',1x,
     .          'log K (25"C) =',F8.3,' in input PHREEQE-file',/,
     .          '*',22x,'and  =',F8.3,' from polynomial eqn.')
C
180       return
          end
C        -----------------
          Subroutine CheckN
     .              (name,ierr,mxi,mastr,naq,mxaq,master,aqu,minerl)
Check for repeated names
          character*10 name, master(mastr), aqu(naq), minerl(mxaq)
          ierr = 0
          do 10 i =1,mastr
10        if (name.eq.master(i)) ierr=1
          do 20 i =1,mxi
20        if (name.eq.aqu(i)) ierr=1
```

```
865          do 30 i =1,mxi
866    30    if (name.eq.minerl(i)) ierr=1
867          return
868          end
869 C        -----------------
870          subroutine WrtLin (line)
871          character*80 line
872              do 10 i=1,80
873                 k=81-i
874                 if (line(k:k) .ne. ' ') go to 11
875     10          continue
876     11      if (k.eq.1) go to 20
877                 write(11,100) line(1:k)
878                 go to 50
879     20              if (line(1:1).ne.' ') write(11,100) line(1:1)
880                     if (line(1:1).eq.' ') write(11,*)
881     50 return
882    100 format(a)
883         end
884 C        -----------------
885          Subroutine UpCase (i1,nchr)
886          character i1*(*), ch*1
887            do 10 i=1,nchr
888              ch=i1(i:i)
889     10       if ((ch.ge.'a') .and. (ch.le.'z')) i1(i:i)=char(ichar(ch)-32)
890          return
891          end
892 C        -----------------
893          Subroutine LwCase (i1,nchr)
894          character i1*(*), ch*1
895            do 10 i=1,nchr
896              ch=i1(i:i)
897     10       if ((ch.ge.'A') .and. (ch.le.'Z')) i1(i:i)=char(ichar(ch)+32)
898          return
899          end
```

付録 D

EQPT 計算結果

```
 1
 2
 3
 4
 5
 6
 7  eeee   qqq   pppp   ttttt
 8  e     q   q  p   p    t
 9  eeee  q   q  pppp     t
10  e     q   q  p        t
11  eeee   qqq   p        t
12           q
13
14
15
16  eq6.3245R72
17   supported by eqlib.3245R136
18
19
20            no. of elements on the data file =    47
21               the dimensioned limit =   100
22            no. of aqueous species in the master set =    48
23               the dimensioned limit =   200
24
25
26
27  data file eq3600.tdb                                (for eq3/6 version 3245)
28            1 atm steam saturation curve data
29  created 1991/01/01
30       from phreeqe data base phreeqe00.tdb
31
32
33
34
35  element = o       , atwt =   15.99940
36  element = h       , atwt =    1.00790
37  element = ca      , atwt =   40.00000
38  element = mg      , atwt =   24.00000
39  element = na      , atwt =   23.00000
40  element = k       , atwt =   39.00000
41  element = fe      , atwt =   56.00000
42  element = mn      , atwt =   55.00000
43  element = al      , atwt =   27.00000
44  element = ba      , atwt =  137.00000
45  element = sr      , atwt =   88.00000
46  element = si      , atwt =   96.00000
47  element = cl      , atwt =   35.00000
48  element = c       , atwt =   60.00000
49  element = s       , atwt =   96.00000
50  element = n       , atwt =   62.00000
51  element = b       , atwt =   62.00000
52  element = p       , atwt =   95.00000
53  element = f       , atwt =   19.00000
54  element = li      , atwt =    7.00000
55  element = br      , atwt =   80.00000
56  element = i       , atwt =  127.00000
57  element = tc      , atwt =  115.00000
58  element = u       , atwt =  238.00000
59  element = co      , atwt =   59.00000
60  element = am      , atwt =  243.00000
61  element = pu      , atwt =  239.00000
62  element = cs      , atwt =  133.00000
63  element = ni      , atwt =   59.00000
64  element = se      , atwt =  143.00000
65  element = zr      , atwt =   91.00000
66  element = sn      , atwt =  119.00000
67  element = sm      , atwt =  150.00000
68  element = pb      , atwt =  207.00000
69  element = ra      , atwt =  226.00000
70  element = th      , atwt =  232.00000
71  element = pa      , atwt =  231.00000
72  element = np      , atwt =  237.00000
73  element = nb      , atwt =  141.00000
74  element = pd      , atwt =  106.00000
75  element = nd      , atwt =  144.00000
76  element = z       , atwt =  999.99999
77  element = sb      , atwt =  154.00000
78  element = bi      , atwt =  209.00000
79  element = po      , atwt =  209.00000
80  element = ac      , atwt =  227.00000
81  element = cm      , atwt =  247.00000
82
83
84 aqueous species
85      1  h2o                h+                ca+2
86      4  mg+2               na+               k+
87      7  fe+2               mn+2              al+3
88     10  ba+2               sr+2              h4sio4(a
89     13  cl-                co3-2             so4-2
90     16  no3-               b(oh)3(a          po4-3
91     19  f-                 li+               br-
92     22  i-                 tco+2             u+4
93     25  co+2               am+3              pu+4
94     28  cs+                ni+2              seo4-2
95     31  zr+4               sn+2              sm+3
96     34  pb+2               ra+2              th+4
```

97	37	pa+4	np+4	nbo3-
98	40	pd+2	nd+3	z-
99	43	sbo2-	bi+3	po+4
100	46	ac+3	cm+3	o2(g)
101	49	oh-	o2 aq	h2 aq
102	52	hco3-	h2co3	ch4 aq
103	55	hso4-	s-2	hs-
104	58	no2-	n2 aq	nh3(aq)
105	61	nh4+	nh4so4-	bfoh3-
106	64	hpo4-2	h2po4-	hf aq
107	67	hf2-	caoh+	caco3
108	70	cahco3+	caso4	capo4-
109	73	cahpo4	cah2po4+	caf+
110	76	mgoh+	mgco3	mghco3+
111	79	mgso4	mgpo4-	mghpo4
112	82	mgh2po4+	mgf+	naco3-
113	85	nahco3	naso4-	nahpo4-
114	88	kso4-	khpo4-	feoh+
115	91	feoh2	feoh3-	feso4
116	94	fe(hs)2	fe(hs)3-	fehpo4
117	97	feh2po4+	fe+3	feoh+2
118	100	feoh2+	feoh3	feoh4-
119	103	fe2oh2+4	fe3oh4+5	fecl+2
120	106	fecl2+	fecl3	feso4+
121	109	feso42-	fehpo4+	feh2p+2
122	112	fef+2	fef2+	fef3
123	115	mnoh+	mnoh3-	mncl+
124	118	mncl2	mncl3-	mnhco3+
125	121	mnso4	mn(no3)2	mnf+
126	124	mn+3	mno4-2	mno4-
127	127	aloh+2	aloh2+	aloh3
128	130	aloh4-	also4+	also42-
129	133	alf+2	alf2+	alf3
130	136	alf4-	baoh+	sroh+
131	139	srhco3+	srco3	srso4
132	142	liso4-	io3-	(uo2)3(c
133	145	(uo2)3(o	co2(aq)	u(co3)4-
134	148	u(co3)5-	uo2(co3)	uo2(co3)
135	151	uo2(co3)	uo2co3(a	h2s(aq)
136	154	h2so3(aq	hs2o3-	hso3-
137	157	s2o3-2	so3-2	u(so4)2(
138	160	uo2(so3)	uo2(so4)	uo2s2o3(
139	163	uo2so3(a	uo2so4(a	uso4+2
140	166	clo-	clo2-	clo3-
141	169	clo4-	hclo(aq)	hclo2(aq
142	172	ucl+3	uo2cl+	uo2cl2(a
143	175	uo2clo3+	pu+3	puo2+
144	178	puo2+2	(uo2)2(o	(uo2)2oh
145	181	(uo2)3(o	(uo2)3(o	(uo2)3(o
146	184	(uo2)4(o	u(oh)4(a	u(oh)5-
147	187	u+3	uo2(oh)2	uo2(oh)3
148	190	uo2(oh)4	uo2+	uo2+2
149	193	uo2oh+	uoh+3	(tco(oh)
150	196	h2tco4(a	htco4-	tc+3
151	199	tco(oh)2	tco4-	tco4-2
152	202	tco4-3	tcooh+	uf+3
153	205	uf2+2	uf3+	uf4(aq)
154	208	uf5-	uf6-2	uo2f(aq)
155	211	uo2f+	uo2f2(aq	uo2f3-
156	214	uo2f4-2	puo2oh+	puo2oh2
157	217	puo2oh3-	puoh+3	puoh2+2
158	220	puoh3+	pu(oh)4	pu(oh)5-
159	223	puoh+2	puoh2+	pu(oh)3
160	226	puoh4-	amoh+2	am(oh)2+
161	229	am(oh)3	ndoh+2	nd(oh)2+
162	232	nd(oh)3	nd(oh)4-	nd2(oh)2
163	235	ni(oh)2	ni(oh)3-	nioh+
164	238	ni2(oh)+	ni4(oh)+	niso4
165	241	se-2	hse-	seo3-2
166	244	hseo3-	hseo4-	h2seo3
167	247	h2se	sr(oh)2	srcl+1
168	250	srcl2	srno3+	srpo4-
169	253	zroh+3	zr(oh)4	zr(oh)5-
170	256	zr3(oh)4	zr4(oh)8	zrso4+2
171	259	zrcl+3	sn+4	snoh+
172	262	sn(oh)2	sn(oh)3-	sn(oh)22
173	265	sn(oh)3+	sncl+	sncl2
174	268	sncl3-	i3-	hi
175	271	io-	io4-	i2o-2
176	274	hio	h2oi-	i2oh-
177	277	hio3	i2cl-	icl-
178	280	icl2-	i2	pboh+
179	283	pb(oh)2	pb(oh)3-	pb2(oh)
180	286	pb3(oh)4	pb6(oh)8	pbco3
181	289	pb(co3)2	pbso4	pb(so4)2
182	292	pbcl+	pbcl2	pbcl3-
183	295	pb4(oh)+	raoh+	raso4
184	298	thoh+3	th(oh)2+	th(oh)3+
185	301	th(oh)4	th4(oh)8	th2(oh)2
186	304	thco3+2	thhpo4+2	th(hpo4)
187	307	thhpo43-	thh2po4+	thh2po42
188	310	thh3po4+	thso4+2	th(so4)2
189	313	th(so4)3-	th(so4)4	thcl4
190	316	thcl3+	thcl2+2	thcl+3
191	319	thf4	th(no3)+	th(no3)2
192	322	th4(no3)	th(no3)4	pa+3

193	325	pao2+	pa(oh)+3	pa(oh)2+
194	328	pa(oh)3+	pao(oh)+	pao2(oh)
195	331	npo2+	npo2+2	np+3
196	334	npoh+2	np(oh)2+	np(oh)3
197	337	np(oh)4-	np2(oh)2	npco3+
198	340	np(co3)2	np(co3)3	npcl+2
199	343	npcl2+	npoh+3	npoh2+2
200	346	np(oh)3+	np(oh)4	np(oh)5-
201	349	np2oh2+6	npoh3co3	npso4+2
202	352	np(so4)2	npcl+3	npcl2+2
203	355	npcl3+	npo2oh	npo2oh2-
204	358	npo2cl	npo2hco3	npo2co3-
205	361	npo2co32	npo2co33	npo2oh
206	364	npo2oh2	npo2oh3-	npo2oh2+
207	367	npo23oh5	npo22oh+	npo2co3
208	370	npo2co32	npo2co33	npo2so4
209	373	npo2so42	npo2so43	npo2cl+
210	376	npo2cl2	npo2f	npf+3
211	379	npf2+2	npf3+	npf4
212	382	puo22oh2	puo23oh5	puo23oh4
213	385	puo2co3	puo2co32	puo2co33
214	388	puo2ohco	puo2oh2c	puo2hco3
215	391	puo2cl+	puo2cl2	puo2so4
216	394	puo2oh	puo2oh2-	puo2cl
217	397	pu2oh2+6	pu2oh3+5	pu2oh4+4
218	400	pu2oh5+3	puso4+2	puso42
219	403	puso43-2	pucl+3	pucl2+2
220	406	pucl3+	pu3oh5+4	pu2oh2+4
221	409	puco3+	puco32-	puco33-3
222	412	puso4+	puhso42+	puhso4+2
223	415	puso42-	pucl+2	pucl2+
224	418	puo2h2po	puo2hpo4	puhpo4+2
225	421	puh2po42	puh3po43	puh4po44
226	424	puh2po4+	puco3+2	puco32
227	427	puco33-2	puco34-4	puco35-6
228	430	puno3+3	puno32+2	puno33+
229	433	puo2no3+	puf+3	puf2+2
230	436	puf3+	puf4	puo2f+
231	439	amco3+	amco32-	amco33-3
232	442	zna	zk	z2mg
233	445	z2ca	pdoh+	pd(oh)2(
234	448	snf+	snf+++	snf2
235	451	snf2+	snf3+	snf3-
236	454	snf4	snoh+++	sn(oh)4
237	457	sn(so4)2	sn(so4++	acoh+2
238				
239				
240	minerals			
241	1	u(oh)2so	uo2(am)	na2u2o7(
242	4	na2uo4(a	(uo2)2co	u(co3)2(
243	7	uc2(c)	rutherfo	u(so3)2(
244	10	u(so4)2(	uo2so3(c	uo2so4(c
245	13	uo2so4.2	uo2so4.3	uo2so4.3
246	16	(uo2)2cl	u2o2cl5(	u5o12cl(
247	19	ucl3(c)	ucl4(c)	ucl5(c)
248	22	ucl6(c)	uo2cl(c)	uo2cl2(c
249	25	uo2cl2.3	uo2cl2.h	uo2cloh.
250	28	uocl(c)	uocl2(c)	uocl3(c)
251	31	(uo2)2cl	u2o2cl5(	u3o7(bet
252	34	u3o8(c)	u4o9(bet	uo2(oh)2
253	37	uo2(po3)	uraninit	uo3(alph
254	40	uo3(beta	uo3(gamm	uo3.0.9h
255	43	schoepit	u2f9(c)	u2o3f6(c
256	46	u3o5f8(c	u4f17(c)	ucl2f2(c
257	49	ucl3f(c)	uclf3(c)	uf3(c)
258	52	uf4(c)	uf4.2.5h	uf5(alph
259	55	uf5(beta	uf6(c)	uo2f2(c)
260	58	uo2f2.3h	uo2foh(c	uo2foh.2
261	61	uo2foh.h	uof2(c)	uof2.h2o
262	64	uof4(c)	uofoh(c)	uofoh.0.
263	67	uo2co3	uo2oh	nauo3
264	70	na2uo4	na3uo4	na2u2o7
265	73	cauo4	mguo4	uo23po42
266	76	h2uo2po4	uo2hpo4	uhpo42
267	79	caupo4		
268				
269				
270	gases			
271	1	co2(g)	o2(g)	h2(g)
272	4	n2(g)	h2s(g)	ch4(g)
273	7	nh3(g)		
274				
275				
276	solid solutions			

付録　E

ＥＱ３６　熱力学データベース（ＤＡＴＡ０）

```
data0
*
* nct  no. of elements nsq  no. of basis (strict + auxiliary) species
*- check next line  nct in columns 4-5  nsq in columns 9-10
   47   48
*
data file eq3600.tdb                                  —    (for eq3/6 version 3245)
        1 atm steam saturation curve data
created 1991/01/01
       from phreeqe data base phreeqe00.tdb
*
******************************************************************************
**   this file is to be used with the program phr-eq36 to help you to       **
**   convert an input phreeqe data base to an data0-format output file      **
**   (eq3/6 version 3245) which after some changes may be used as input     **
**   to the program eqpt of the eq3/6 package.                              **
**                                                                          **
**   once you have made a run with the program phr-eq36 you must do the     **
**   following changes to the output data file                              **
**       - check for any                                                   **
**       - change the lines indicated by the comments beginning with *-     **
******************************************************************************
*
*    elements
*- check the following
*          - strict aqueous basis species must have a one to one correlation
*            with the chemical elements listed below (except basis species
*            o2(g) which ends the strict basis species set)
*          - you must rearrange the elements below to be in the same order as
*            the strict basis species
*
elements atomic weights oxides and gravimetric factors
*- there must be 48 element-lines below
o          15.99940      none               0.00000
h           1.00790      h2o                8.93645
ca         40.00000
mg         24.00000
na         23.00000
k          39.00000
fe         56.00000
mn         55.00000
al         27.00000
ba        137.00000
sr         88.00000
si         96.00000
cl         35.00000
c          60.00000
s          96.00000
n          62.00000
b          62.00000
p          95.00000
f          19.00000
li          7.00000
br         80.00000
i         127.00000
tc        115.00000
u         238.00000
co         59.00000
am        243.00000
pu        239.00000
cs        133.00000
ni         59.00000
se        143.00000
zr         91.00000
sn        119.00000
sm        150.00000
pb        207.00000
ra        226.00000
th        232.00000
pa        231.00000
np        237.00000
nb        141.00000
pd        106.00000
nd        144.00000
z         999.99999
sb        154.00000
bi        209.00000
po        209.00000
ac        227.00000
cm        247.00000
*
temperatures
           0.0000    25.0000    60.0000   100.0000
         150.0000   200.0000   250.0000   300.0000
pressures
           1.0134     1.0134     1.0134     1.0134
           4.7600    15.5490    39.7760    85.9270
debye huckel a (adh)
            .4913      .5092      .5450      .5998
            .6898      .8099      .9785     1.2555
debye huckel b (bdh)
            .3247      .3283      .3343      .3422
            .3533      .3655      .3792      .3965
bdot
            .0174      .0410      .0440      .0460
            .0470      .0470      .0340     0.0000
c co2 1
```

```
      1.224e-1  1.127e-1  9.341e-2  8.018e-2
      8.427e-2  9.892e-2  1.371e-1  1.967e-1
c co2 2
     -4.679e-3 -1.049e-2 -3.600e-3 -1.503e-3
     -1.184e-2 -1.040e-2 -7.086e-3 -1.809e-2
c co2 3
     -4.114e-4  1.545e-3  9.609e-5  5.009e-4
      3.118e-3  1.386e-3 -2.887e-3 -2.497e-3
c co2 4
      0.        0.        0.        0.
      0.        0.        0.        0.
c h2o 1
          500.   1.45397      500.   1.55510
        1.6225      500.      500.      500.
c h2o 2
          500. 2.2357e-2      500. 3.6478e-2
     4.5891e-2      500.      500.      500.
c h2o 3
          500. 9.3804e-3      500. 6.4366e-3
     4.5221e-3      500.      500.      500.
c h2o 4
          500. -5.362e-4      500. -7.132e-4
    -3.312e-4       500.      500.      500.
log k for eh reaction
*  2 h2o    o2(g)  +  4 h+  +  4 e-
      -91.0454  -83.1028  -74.0521  -65.8632
      -57.8929  -51.6850  -46.7266  -42.6842
log k for o2 gas solubility
       -2.6610   -2.8990   -3.0580   -3.1250
       -3.0630   -2.9140   -2.6600   -2.4100
log k for h2 gas solubility
       -3.0240   -3.1120   -3.1440   -3.1120
       -3.0520   -2.9420   -2.7300   -2.4400
log k for n2 gas solubility
       -2.9740   -3.1830   -3.3210   -3.3330
       -3.1740   -2.9960   -2.7480   -2.4530
* - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - -
*- check the following
*          - strict aqueous basis species listed below must have a one to one
*            correlation with the chemical elements listed below (except basis
*            species o2(g))
*          - you must rearrange the elements below to be in the same order as
*            the strict basis species
*          - 1st strict basis aqueous species must be h2o
*          - last strict basis aqueous species must be o2(g)
*          - there must be one (and only one) strict basis species for
*            each element listed in the table at the beginning of the file.
*            the remaining basis species must be considered as auxiliary .
*            auxiliary basis species usually (but not necessarily) have a
*            different oxidation state than the strict basis species for
*            that element.
*          - auxiliary basis species have to be moved to their place
*            (see below). examples of auxiliary basis species are
*            oh- o2(aq) h2(aq) ch4(aq) fe+++ hs-  no2- nh4+ etc
*          - the number of (strict + auxiliary) basis species must be
*            equal to the value of nsq in line 5
* - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - - -
* beginning of strict aqueous basis species
aqueous species
h2o
    entered by                          date   /  /
        source                        quality
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   0.0 a          hydr. number  0.0
     2 chemical elements
        1.000 o                2.000 h
+-----------------------------------------------------------------------
h+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
        1.000 h
+-----------------------------------------------------------------------
ca+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
        1.000 ca
+-----------------------------------------------------------------------
mg+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
        1.000 mg
+-----------------------------------------------------------------------
na+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
```

```
   1.000 na
+------------------------------------------------------------------------
k+
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   1.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 k
+------------------------------------------------------------------------
fe+2
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   2.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 fe
+------------------------------------------------------------------------
mn+2
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   2.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 mn
+------------------------------------------------------------------------
al+3
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   3.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 al
+------------------------------------------------------------------------
ba+2
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   2.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 ba
+------------------------------------------------------------------------
sr+2
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   2.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 sr
+------------------------------------------------------------------------
h4sio4(a
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   0.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 si                     4.000 h                 4.000 o
+------------------------------------------------------------------------
cl-
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge  -1.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 cl
+------------------------------------------------------------------------
co3-2
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge  -2.0                titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 c                      3.000 o
+------------------------------------------------------------------------
so4-2
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge  -2.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 s                      4.000 o
+------------------------------------------------------------------------
no3-
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge  -1.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 n                      3.000 o
+------------------------------------------------------------------------
b(oh)3(a
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   0.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 b                      3.000 o                 3.000 h
```

```
+-----------------------------------------------------------------------
po4-3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -3.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.-
     2 chemical elements
       1.000 p                4.000 o
+-----------------------------------------------------------------------
f-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 f
+-----------------------------------------------------------------------
li+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 li
+-----------------------------------------------------------------------
br-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 br
+-----------------------------------------------------------------------
i-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 i
+-----------------------------------------------------------------------
tco+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 tc               1.000 o
+-----------------------------------------------------------------------
u+4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 u
+-----------------------------------------------------------------------
co+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 co
+-----------------------------------------------------------------------
am+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 am
+-----------------------------------------------------------------------
pu+4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 pu
+-----------------------------------------------------------------------
cs+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 cs
+-----------------------------------------------------------------------
ni+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 ni
+-----------------------------------------------------------------------
```

```
seo4-2
    entered by a.neyama                     date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge  -2.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 se                   4.000 o
+--------------------------------------------------------------------------
zr+4
    entered by a.neyama                     date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   4.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 zr
+--------------------------------------------------------------------------
sn+2
    entered by a.neyama                     date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   2.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 sn
+--------------------------------------------------------------------------
sm+3
    entered by a.neyama                     date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   3.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 sm
+--------------------------------------------------------------------------
pb+2
    entered by a.neyama                     date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   2.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 pb
+--------------------------------------------------------------------------
ra+2
    entered by a.neyama                     date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   2.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 ra
+--------------------------------------------------------------------------
th+4
    entered by a.neyama                     date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   4.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 th
+--------------------------------------------------------------------------
pa+4
    entered by a.neyama                     date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   4.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 pa
+--------------------------------------------------------------------------
np+4
    entered by a.neyama                     date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   4.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 np
+--------------------------------------------------------------------------
nbo3-
    entered by a.neyama                     date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge  -1.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 nb                   3.000 o
+--------------------------------------------------------------------------
pd+2
    entered by a.neyama                     date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   2.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 pd
+--------------------------------------------------------------------------
nd+3
    entered by a.neyama                     date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   3.0                titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a              hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 nd
+--------------------------------------------------------------------------
 z-
```

```
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 z                                  -
+-----------------------------------------------------------------------
sbo2-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 sb              2.000 o
+-----------------------------------------------------------------------
bi+3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 bi
+-----------------------------------------------------------------------
po+4
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 po
+-----------------------------------------------------------------------
ac+3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 ac
+-----------------------------------------------------------------------
cm+3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 cm
+-----------------------------------------------------------------------
o2(g)
    entered by                         date  /  /
        source                      quality
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   0.0 a          hydr. number  0.0
*-----------------------------------------------------------------------
* beginning of auxiliary basis species  (if any)
+-----------------------------------------------------------------------
oh-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 h               1.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 oh-              1.00 h2o              -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       14.8953   14.0000   12.9723   12.0339
       11.1103   10.3820  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
o2 aq
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       2.000 o
     2 species in reaction
      -1.000 o2 aq              1.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        4.0775    2.9772    1.6479    0.3582
       -0.9996   -2.1484  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
h2 aq
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       2.000 h
     3 species in reaction
```

```
     -1.000 h2 aq            -0.50 o2(g)            1.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        48.5547   44.7014   40.3115   36.3408
        32.4773   29.4694  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
hco3-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 c                3.000 o                1.000 h
     3 species in reaction
      -1.000 hco3-            1.00 co3-2             1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -10.5286  -10.3289  -10.1438  -10.1552
       -10.3870  -10.7817  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
h2co3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 c                3.000 o                2.000 h
     3 species in reaction
      -1.000 h2co3            1.00 co3-2             2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -17.2072  -16.6807  -16.4341  -16.5819
       -17.1565  -18.0143  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
ch4 aq
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 c                4.000 h
     5 species in reaction
      -1.000 ch4 aq           1.00 co3-2             2.00 h+
       -2.00 o2(g)            1.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       136.9248  125.1346  111.7337   99.6482
        87.9319   78.8475  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
*-  error log k (25c)   -2.000 in input phreeqe-file
*                   and    -1.987 from polynomial eqn.
hso4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 s                4.000 o                1.000 h
     3 species in reaction
      -1.000 hso4-            1.00 so4-2             1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -1.6995   -1.9869   -2.4325   -2.9869
        -3.7275   -4.5054  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
s-2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 s
     3 species in reaction
      -1.000 s-2              1.00 so4-2            -2.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       159.4746  145.4706  129.5285  115.1225
       101.1224   90.2370  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
```

```
hs-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 s                1.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 hs-                1.00 so4-2            1.00 h+
       -2.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       145.7458  132.5536  117.5433  103.9882
        90.8255   80.6005  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
no2-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 n                2.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 no2-               1.00 no3-            -0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        14.0169   12.9814   11.8260   10.8087
         9.8520    9.1364  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
n2 aq
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       2.000 n
     5 species in reaction
      -1.000 n2 aq              2.00 no3-             2.00 h+
       -2.50 o2(g)             -1.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -0.4070    0.6770    2.0870    3.5640
         5.2393    6.7552  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
nh3(aq)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 n                3.000 h
     5 species in reaction
      -1.000 nh3(aq)            1.00 no3-             1.00 h+
       -2.00 o2(g)              1.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        60.5484   56.3756   51.7184   47.6172
        43.7585   40.8710  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
nh4+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 n                4.000 h
     5 species in reaction
      -1.000 nh4+               1.00 no3-             2.00 h+
       -2.00 o2(g)              1.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        50.4715   47.1356   43.4391   40.2151
        37.2197   35.0132  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
nh4so4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 n                4.000 o                4.000 h
       1.000 s
```

```
    6 species in reaction
     -1.000 nh4so4-          1.00 no3-              2.00 h+
      -2.00 o2(g)            1.00 so4-2             1.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        49.3515   46.0156   42.3191   39.0951
        36.0997   33.8932  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
bfoh3-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 b                3.000 o                3.000 h
       1.000 f
    3 species in reaction
     -1.000 bfoh3-           1.00 b(oh)3(a          1.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.5241    0.4000    0.2575    0.1274
        -0.0006   -0.1016  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
hpo4-2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 p                4.000 o                1.000 h
     3 species in reaction
     -1.000 hpo4-2           1.00 po4-3             1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -12.5868  -12.3500  -12.0782  -11.8299
       -11.5856  -11.3930  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
h2po4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 p                4.000 o                2.000 h
     3 species in reaction
     -1.000 h2po4-           1.00 po4-3             2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -19.8532  -19.5500  -19.2019  -18.8841
       -18.5713  -18.3246  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
hf aq
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 h                1.000 f
     3 species in reaction
     -1.000 hf aq            1.00 h+                1.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -2.9379   -3.1700   -3.4365   -3.6798
        -3.9192   -4.1081  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
hf2-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 h                2.000 f
     3 species in reaction
     -1.000 hf2-             1.00 h+                2.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -3.4437   -3.7490   -4.0994   -4.4193
        -4.7342   -4.9826  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
```

```
caoh+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0             titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 ca               1.000 h                1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 caoh+             1.00 ca+2              1.00 h2o
       -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        13.5731   12.5980   11.4787   10.4566
         9.4507    8.6574  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
caco3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0             titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 ca               1.000 c                3.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 caco3             1.00 ca+2              1.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -3.1353   -3.2252   -3.6503   -4.1693
       -4.4829   -4.2064  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
cahco3+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0             titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 ca               1.000 c                3.000 o
       1.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 cahco3+           1.00 ca+2              1.00 co3-2
       1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -11.4487  -11.4347  -11.3730  -11.5111
      -12.2518  -13.7525  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
caso4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 ca               1.000 s                4.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 caso4             1.00 ca+2              1.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -2.2104   -2.3090   -2.4222   -2.5256
       -2.6273   -2.7075  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
capo4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0             titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 ca               1.000 p                4.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 capo4-            1.00 ca+2              1.00 po4-3
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -6.2510   -6.4590   -6.6977   -6.9157
       -7.1303   -7.2995  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
cahpo4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0             titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 ca               1.000 h                1.000 p
       4.000 o
     4 species in reaction
```

```
    -1.000 cahpo4          1.00 ca+2              1.00 h+
      1.00 po4-3
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -15.1004  -15.0850  -15.0673  -15.0511
      -15.0352  -15.0226  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
cah2po4+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
      1.000 ca               2.000 h                1.000 p
      4.000 o
     4 species in reaction
     -1.000 cah2po4+         1.00 ca+2              2.00 h+
      1.00 po4-3
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -21.0361  -20.9610  -20.8748  -20.7960
      -20.7185  -20.6574  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
caf+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
      1.000 ca               1.000 f
     3 species in reaction
     -1.000 caf+             1.00 ca+2              1.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -0.6852   -0.9400   -1.2325   -1.4996
      -1.7624   -1.9697  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mgoh+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
      1.000 mg               1.000 h                1.000 o
     4 species in reaction
     -1.000 mgoh+            1.00 mg+2              1.00 h2o
      -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      12.8284   11.7940   10.6066    9.5223
       8.4552    7.6137  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mgco3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
      1.000 mg               1.000 c                3.000 o
     3 species in reaction
     -1.000 mgco3            1.00 mg+2              1.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -2.8328   -2.9811   -3.2092   -3.4839
      -3.8325   -4.1766  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mghco3+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
      1.000 mg               1.000 h                1.000 c
      3.000 o
     4 species in reaction
     -1.000 mghco3+          1.00 mg+2              1.00 h+
      1.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -11.6799  -11.3971  -11.3265  -11.5518
      -12.1227  -12.8986  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
```

```
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mgso4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 mg               1.000 s                4.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 mgso4             1.00 mg+2              1.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -2.1561   -2.2500   -2.3578   -2.4563
        -2.5531   -2.6296  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mgpo4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 mg               1.000 p                4.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 mgpo4-            1.00 mg+2              1.00 po4-3
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -6.3810   -6.5890   -6.8277   -7.0457
        -7.2603   -7.4295  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mghpo4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 mg               1.000 h                1.000 p
       4.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 mghpo4            1.00 mg+2              1.00 h+
       1.00 po4-3
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -15.2314  -15.2160  -15.1983  -15.1821
       -15.1662  -15.1536  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mgh2po4+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 mg               2.000 h                1.000 p
       4.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 mgh2po4+          1.00 mg+2              2.00 h+
       1.00 po4-3
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -21.1411  -21.0660  -20.9797  -20.9010
       -20.8235  -20.7624  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mgf+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 mg               1.000 f
     3 species in reaction
      -1.000 mgf+              1.00 mg+2              1.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -1.5064   -1.8200   -2.1799   -2.5086
        -2.8321   -3.0872  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
naco3-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
```

```
    3 chemical elements
      1.000 na                1.000 c                 3.000 o
    3 species in reaction
     -1.000 naco3-            1.00 na+                1.00 co3-2
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c) _
       -0.6702   -1.2680   -1.9542   -2.5809
       -3.1975   -3.6839  500.0000  500.0000
*   delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
nahco3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    4 chemical elements
      1.000 na                1.000 h                 1.000 c
      3.000 o
    4 species in reaction
     -1.000 nahco3            1.00 na+                1.00 h+
      1.00 co3-2
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -10.3218  -10.0800   -9.8025   -9.5490
       -9.2996   -9.1029  500.0000  500.0000
*   delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
naso4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 na                1.000 s                 4.000 o
    3 species in reaction
     -1.000 naso4-            1.00 na+                1.00 so4-2
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -0.6249   -0.7000   -0.7862   -0.8650
       -0.9425   -1.0036  500.0000  500.0000
*   delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
nahpo4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    4 chemical elements
      1.000 na                1.000 h                 1.000 p
      4.000 o
    4 species in reaction
     -1.000 nahpo4-           1.00 na+                1.00 h+
      1.00 po4-3
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -12.8728  -12.6360  -12.3642  -12.1159
      -11.8716  -11.6790  500.0000  500.0000
*   delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
kso4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 k                 1.000 s                 4.000 o
    3 species in reaction
     -1.000 kso4-             1.00 k+                 1.00 so4-2
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -0.6990   -0.8500   -1.0233   -1.1815
       -1.3372   -1.4600  500.0000  500.0000
*   delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
khpo4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    4 chemical elements
      1.000 k                 1.000 h                 1.000 p
      4.000 o
    4 species in reaction
     -1.000 khpo4-            1.00 k+                 1.00 h+
      1.00 po4-3
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -12.8728  -12.6360  -12.3642  -12.1159
```

```
      -11.8716  -11.6790  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
feoh+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 fe              1.000 h                1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 feoh+            1.00 fe+2              1.00 h2o
       -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       10.3856    9.5000    8.4835    7.5552
        6.6417    5.9213  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
feoh2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 fe              2.000 h                2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 feoh2            1.00 fe+2              2.00 h2o
       -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       22.4864   20.5700   18.3702   16.3615
       14.3847   12.8256  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
feoh3-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   3.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 fe              3.000 h                3.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 feoh3-           1.00 fe+2              3.00 h2o
       -3.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       33.0328   31.0000   28.6666   26.5359
       24.4390   22.7853  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
feso4
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 fe              1.000 s                4.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 feso4            1.00 fe+2              1.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -2.0333   -2.2500   -2.4987   -2.7259
       -2.9494   -3.1257  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
fe(hs)2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 fe              2.000 s                2.000 h
     5 species in reaction
      -1.000 fe(hs)2          1.00 fe+2              2.00 so4-2
       2.00 h+               -4.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      279.8622  256.1612  229.2210  204.9236
      181.3664  163.0996  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
fe(hs)3-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
```

```
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   3.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 fe              3.000 s                3.000 h
     5 species in reaction
      -1.000 fe(hs)3-          1.00 fe+2              3.00 so4-2
        3.00 h+               -6.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       422.2312  386.6798  346.2696  309.8234
       274.4876  247.0874  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
fehpo4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 fe              1.000 h                1.000 p
       4.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 fehpo4            1.00 fe+2              1.00 h+
        1.00 po4-3
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -16.1828  -15.9460  -15.6742  -15.4259
       -15.1816  -14.9890  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
feh2po4+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 fe              2.000 h                1.000 p
       4.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 feh2po4+          1.00 fe+2              2.00 h+
        1.00 po4-3
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -22.5562  -22.2530  -21.9049  -21.5871
       -21.2743  -21.0276  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
fe+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 fe
     5 species in reaction
      -1.000 fe+3              1.00 fe+2              0.25 o2(g)
       -0.50 h2o               1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -9.0585   -7.7437   -6.2511   -4.9071
        -3.6066   -2.6004  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
feoh+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 fe              1.000 h                1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 feoh+2            1.00 fe+2              0.50 h2o
        0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -6.1727   -5.5557   -4.8640   -4.2513
        -3.6705   -3.2320  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
feoh2+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 fe              2.000 h                2.000 o
```

```
    5 species in reaction
     -1.000 feoh2+            1.00 fe+2              1.50 h2o
      -1.00 h+                0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -3.3905    -2.0757    -0.5831     0.7609
        2.0614     3.0676   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
feoh3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   1.0 eq/mol
     ion size   3.0 a           hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 fe               3.000 h                3.000 o
    5 species in reaction
     -1.000 feoh3             1.00 fe+2              2.50 h2o
      -2.00 h+                0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        4.5395     5.8543     7.3469     8.6909
        9.9914    10.9976   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
feoh4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   2.0 eq/mol
     ion size   3.0 a           hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 fe               4.000 h                4.000 o
    5 species in reaction
     -1.000 feoh4-            1.00 fe+2              3.50 h2o
      -3.00 h+                0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       12.5395    13.8543    15.3469    16.6909
       17.9914    18.9976   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
fe2oh2+4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
     ion size   3.0 a           hydr. number   0.
    3 chemical elements
      2.000 fe               2.000 h                2.000 o
    4 species in reaction
     -1.000 fe2oh2+4          2.00 fe+2              1.00 h2o
      0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -14.2652   -12.5414   -10.5958    -8.8571
       -7.1904    -5.9148   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
fe3oh4+5
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   5.0            titr. factor   0.0 eq/mol
     ion size   3.0 a           hydr. number   0.
    3 chemical elements
      3.000 fe               4.000 h                4.000 o
    5 species in reaction
     -1.000 fe3oh4+5          3.00 fe+2              2.50 h2o
      -1.00 h+                0.75 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -19.9120   -16.9271   -13.5506   -10.5241
       -7.6122    -5.3741   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
fecl+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
     ion size   3.0 a           hydr. number   0.
    2 chemical elements
      1.000 fe               1.000 cl
    6 species in reaction
     -1.000 fecl+2            1.00 fe+2              1.00 cl-
      0.25 o2(g)             -0.50 h2o               1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -10.1648    -9.2257    -8.1644    -7.2141
       -6.3012    -5.6006   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
```

```
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
fecl2+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 fe               2.000 cl
     6 species in reaction
      -1.000 fecl2+            1.00 fe+2              2.00 cl-
       0.25 o2(g)             -0.50 h2o               1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -11.1905   -9.8757   -8.3831   -7.0391
        -5.7386   -4.7324  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
fecl3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 fe               3.000 cl
     6 species in reaction
      -1.000 fecl3             1.00 fe+2              3.00 cl-
       0.25 o2(g)             -0.50 h2o               1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -10.1905   -8.8757   -7.3831   -6.0391
        -4.7386   -3.7324  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
feso4+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 fe               1.000 s                4.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 feso4+            1.00 fe+2              1.00 so4-2
       0.25 o2(g)             -0.50 h2o               1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -12.7181  -11.6657  -10.4742   -9.4052
        -8.3752   -7.5824  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
feso42-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 fe               2.000 s                8.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 feso42-           1.00 fe+2              2.00 so4-2
       0.25 o2(g)             -0.50 h2o               1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -14.1719  -13.1657  -12.0274  -11.0068
       -10.0246   -9.2695  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
fehpo4+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 fe               1.000 h                1.000 p
       4.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 fehpo4+           1.00 fe+2              2.00 h+
       1.00 po4-3              0.25 o2(g)            -0.50 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -26.6809  -25.5157  -24.1948  -23.0076
       -21.8614  -20.9770  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
feh2p+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
```

```
       source phreeqe              quality unknown
       charge   2.0           titr. factor   0.0 eq/mol
     ion size   3.0 a         hydr. number   0.
    4 chemical elements
      1.000 fe              2.000 h                1.000 p
      4.000 o
    6 species in reaction
     -1.000 feh2p+2          1.00 fe+2              3.00 h+
       1.00 po4-3            0.25 o2(g)            -0.50 h2o
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -34.3437  -32.7257  -30.8850  -29.2232
      -27.6098  -26.3570  500.0000  500.0000
*   delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+------------------------------------------------------------------------
fef+2
    entered by a.neyama              date 1991/01/01
       source phreeqe              quality unknown
       charge   2.0           titr. factor   0.0 eq/mol
     ion size   3.0 a         hydr. number   0.
    2 chemical elements
      1.000 fe              1.000 f
    6 species in reaction
     -1.000 fef+2            1.00 fe+2              1.00 f-
       0.25 o2(g)           -0.50 h2o               1.00 h+
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -15.1093  -13.9757  -12.6910  -11.5369
      -10.4232   -9.5644  500.0000  500.0000
*   delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+------------------------------------------------------------------------
fef2+
    entered by a.neyama              date 1991/01/01
       source phreeqe              quality unknown
       charge   1.0           titr. factor   0.0 eq/mol
     ion size   3.0 a         hydr. number   0.
    2 chemical elements
      1.000 fe              2.000 f
    6 species in reaction
     -1.000 fef2+            1.00 fe+2              2.00 f-
       0.25 o2(g)           -0.50 h2o               1.00 h+
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -19.5751  -18.5757  -17.4451  -16.4315
      -15.4563  -14.7066  500.0000  500.0000
*   delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+------------------------------------------------------------------------
fef3
    entered by a.neyama              date 1991/01/01
       source phreeqe              quality unknown
       charge   0.0           titr. factor   0.0 eq/mol
     ion size   3.0 a         hydr. number   0.
    2 chemical elements
      1.000 fe              3.000 f
    6 species in reaction
     -1.000 fef3             1.00 fe+2              3.00 f-
       0.25 o2(g)           -0.50 h2o               1.00 h+
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -22.6982  -21.7457  -20.5690  -19.7047
      -18.7779  -18.0664  500.0000  500.0000
*   delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+------------------------------------------------------------------------
mnoh+
    entered by a.neyama              date 1991/01/01
       source phreeqe              quality unknown
       charge   1.0           titr. factor   1.0 eq/mol
     ion size   3.0 a         hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 mn              1.000 h                1.000 o
    4 species in reaction
     -1.000 mnoh+            1.00 mn+2              1.00 h2o
      -1.00 h+
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       11.5561   10.5900    9.4811    8.4685
        7.4719    6.6860  500.0000  500.0000
*   delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+------------------------------------------------------------------------
mnoh3-
    entered by a.neyama              date 1991/01/01
       source phreeqe              quality unknown
       charge  -1.0           titr. factor   3.0 eq/mol
     ion size   3.0 a         hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 mn              3.000 h                3.000 o
    4 species in reaction
```

```
     -1.000 mnoh3-            1.00 mn+2              3.00 h2o
      -3.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       34.8000   34.8000   34.8000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mncl+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 mn               1.000 cl
     3 species in reaction
      -1.000 mncl+             1.00 mn+2              1.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -0.6070   -0.6070   -0.6070  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mncl2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 mn               2.000 cl
     3 species in reaction
      -1.000 mncl2             1.00 mn+2              2.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -0.0410   -0.0410   -0.0410  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mncl3-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 mn               3.000 cl
     3 species in reaction
      -1.000 mncl3-            1.00 mn+2              3.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.3050    0.3050    0.3050  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mnhco3+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 mn               1.000 c                3.000 o
       1.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 mnhco3+           1.00 mn+2              1.00 co3-2
       1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -11.8418  -11.6000  -11.3225  -11.0690
      -10.8196  -10.5229  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mnso4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 mn               1.000 s                4.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 mnso4             1.00 mn+2              1.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -2.1144   -2.2600   -2.4271   -2.5797
       -2.7299   -2.8483  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
```

```
mn(no3)2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 mn              2.000 n                6.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 mn(no3)2          1.00 mn+2              2.00 no3-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -0.6266   -0.6000   -0.5695   -0.5417
        -0.5143   -0.4926  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mnf+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 mn              1.000 f
     3 species in reaction
      -1.000 mnf+              1.00 mn+2              1.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -0.8500   -0.8500   -0.8500  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mn+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 mn
     5 species in reaction
      -1.000 mn+3              1.00 mn+2              0.25 o2(g)
      -0.50 h2o                1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         4.4739    4.7313    5.0102    5.2460
         5.4558    5.6019  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mno4-2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 mn              4.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 mno4-2            1.00 mn+2              2.00 h2o
      -4.00 h+                 1.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        37.4593   35.3372   32.8350   30.4744
        28.0625   26.0825  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mno4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 mn              4.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 mno4-             1.00 mn+2              1.50 h2o
      -3.00 h+                 1.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        25.8665   23.9455   21.6576   19.4736
        17.2135   15.3336  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
aloh+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 al              1.000 h                1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 aloh+2            1.00 al+3              1.00 h2o
```

```
      -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        5.7884     4.9900     4.0736     3.2368
        2.4132     1.7637   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c) _
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
aloh2+
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   1.0              titr. factor    0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number    0.
     3 chemical elements
       1.000 al                 2.000 h                  2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 aloh2+              1.00 al+3                2.00 h2o
      -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       10.1000    10.1000    10.1000   500.0000
      500.0000   500.0000   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
aloh3
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   0.0              titr. factor    1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number    0.
     3 chemical elements
       1.000 al                 3.000 h                  3.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 aloh3               1.00 al+3                3.00 h2o
      -3.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       16.0000    16.0000    15.0000   500.0000
      500.0000   500.0000   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
aloh4-
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge  -1.0              titr. factor    2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number    0.
     3 chemical elements
       1.000 al                 4.000 h                  4.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 aloh4-              1.00 al+3                4.00 h2o
      -4.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       25.9559    23.0000    19.6070    16.5087
       13.4595    11.0547   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
also4+
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   1.0              titr. factor    0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number    0.
     3 chemical elements
       1.000 al                 1.000 s                  4.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 also4+              1.00 al+3                1.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -2.8758    -3.0200    -3.1856    -3.3368
       -3.4856    -3.6029   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
also42-
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge  -1.0              titr. factor    0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number    0.
     3 chemical elements
       1.000 al                 2.000 s                  8.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 also42-             1.00 al+3                2.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -4.7295    -4.9200    -5.1387    -5.3384
       -5.5350    -5.6900   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
```

```
alf+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a         hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 al              1.000 f
     3 species in reaction
      -1.000 alf+2            1.00 al+3             1.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -7.0100   -7.0100   -7.0100  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
alf2+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a         hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 al              2.000 f
     3 species in reaction
      -1.000 alf2+            1.00 al+3             2.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -11.4082  -12.7500  -14.2902  -15.6966
       -17.0807  -18.1723  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
alf3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a         hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 al              3.000 f
     3 species in reaction
      -1.000 alf3             1.00 al+3             3.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -16.8523  -17.0200  -17.2125  -17.3883
       -17.5613  -17.6978  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
alf4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a         hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 al              4.000 f
     3 species in reaction
      -1.000 alf4-            1.00 al+3             4.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -19.7200  -19.7200  -19.7200  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
baoh+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a         hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 ba              1.000 h               1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 baoh+            1.00 ba+2             1.00 h2o
      -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        14.3707   13.3580   12.1956   11.1341
        10.0894    9.2655  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
sroh+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a         hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 sr              1.000 h               1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 sroh+            1.00 sr+2             1.00 h2o
      -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
```

```
      14.1505   13.1780   12.0618   11.0425
      10.0393    9.2482  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
srhco3+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 sr               1.000 c                3.000 o
       1.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 srhco3+           1.00 sr+2              1.00 co3-2
       1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -11.4413  -11.5132  -11.8486  -12.4547
      -13.4298  -14.5679  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
srco3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 sr               1.000 c                3.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 srco3             1.00 sr+2              1.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -2.4844   -2.8051   -3.2540   -3.7670
       -4.4083   -5.0496  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
srso4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 sr               1.000 s                4.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 srso4             1.00 sr+2              1.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -2.4427   -2.5500   -2.6732   -2.7857
       -2.8965   -2.9838  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
liso4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 li               1.000 s                4.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 liso4-            1.00 li+               1.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -0.6400   -0.6400   -0.6400  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
io3-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 i                3.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 io3-              1.00 i-                1.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -26.2111  -14.2972   -0.7212  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
(uo2)3(c
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
```

```
        charge  -6.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       6.000 c              24.000 o                3.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 (uo2)3(c          6.00 co3-2             3.00 u+4
        3.00 h2o              -6.00 h+                1.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -157.6415 -151.5492 -144.6555 -138.4742
      -132.5240 -127.9481  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
(uo2)3(o
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 c              13.000 o                3.000 u
       5.000 h
     6 species in reaction
      -1.000 (uo2)3(o          1.00 co3-2             3.00 u+4
        7.00 h2o              -9.00 h+                1.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -110.2401  -98.3262  -84.7502  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
co2(aq)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 c               2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 co2(aq)           1.00 co3-2            -1.00 h2o
        2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -17.0637  -16.6810  -16.2417  -15.8405
       -15.4457  -15.1343  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u(co3)4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge  -4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       4.000 c              12.000 o                1.000 u
     3 species in reaction
      -1.000 u(co3)4-          4.00 co3-2             1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -35.1320  -35.1320  -35.1320  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u(co3)5-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge  -6.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       5.000 c              15.000 o                1.000 u
     3 species in reaction
      -1.000 u(co3)5-          5.00 co3-2             1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -34.3368  -34.0160  -33.6477  -33.3115
       -32.9805  -32.7195  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2(co3)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 c               8.000 o                1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 uo2(co3)          2.00 co3-2             1.00 u+4
        1.00 h2o              -2.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
```

```
      -50.8856  -49.4564  -47.8490  -46.4191
      -45.0562  -44.0203  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+----------------------------------------------------------------------
*-   duplicate name uo2(co3)
uo2(co3)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       3.000 c              11.000 o                1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 uo2(co3)         3.00 co3-2             1.00 u+4
        1.00 h2o             -2.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -56.3953  -54.1174  -51.5356  -49.2163
      -46.9780  -45.2517  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+----------------------------------------------------------------------
*-   duplicate name uo2(co3)
uo2(co3)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -5.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       3.000 c              11.000 o                1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 uo2(co3)         3.00 co3-2             1.00 u+4
        1.50 h2o             -3.00 h+                0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -22.6133  -20.6277  -18.3650  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+----------------------------------------------------------------------
uo2co3(a
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 c               5.000 o                1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 uo2co3(a         1.00 co3-2             1.00 u+4
        1.00 h2o             -2.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -43.7767  -42.1934  -40.4092  -38.8178
      -37.2960  -36.1348  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+----------------------------------------------------------------------
h2s(aq)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 s               2.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 h2s(aq)          1.00 so4-2             2.00 h+
      -2.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      137.0370  125.5246  112.4426  100.6482
       89.2183   80.3599  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+----------------------------------------------------------------------
h2so3(aq
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 s               3.000 o                2.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 h2so3(aq         1.00 so4-2             2.00 h+
      -0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       39.8597   35.8884   31.3631  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
```

```
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
hs2o3-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 s                3.000 o                1.000 h
     5 species in reaction
      -1.000 hs2o3-            2.00 so4-2            -1.00 h2o
        3.00 h+               -2.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       142.4858  126.6006  108.4992  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
hso3-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 s                3.000 o                1.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 hso3-             1.00 so4-2             1.00 h+
       -0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        41.6997   37.7284   33.2030  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
s2o3-2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       2.000 s                3.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 s2o3-2            2.00 so4-2            -1.00 h2o
        2.00 h+               -2.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       144.0758  128.1906  110.0892  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
so3-2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 s                3.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 so3-2             1.00 so4-2            -0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        48.9197   44.9484   40.4230  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u(so4)2(
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 s                8.000 o                1.000 u
     3 species in reaction
      -1.000 u(so4)2(          2.00 so4-2             1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -9.9884  -10.5130  -11.1151  -11.6650
       -12.2061  -12.6328  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2(so3)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 s                8.000 o                1.000 u
```

```
     6 species in reaction
      -1.000 uo2(so3)          2.00 so4-2            1.00 u+4
        -0.50 o2(g)            1.00 h2o             -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        53.7097   49.7384   45.2131  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2(so4)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 s              10.000 o                1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 uo2(so4)          2.00 so4-2            1.00 u+4
        1.00 h2o              -2.00 h+               0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -37.7528  -36.6524  -35.4225  -34.3373
       -33.3136  -32.5453  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2s2o3(
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 s                5.000 o                1.000 u
     4 species in reaction
      -1.000 uo2s2o3(          2.00 so4-2            1.00 u+4
       -1.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       104.7821   92.8682   79.2922  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2so3(a
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 s                5.000 o                1.000 u
     5 species in reaction
      -1.000 uo2so3(a          1.00 so4-2            1.00 u+4
        1.00 h2o              -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         5.8370    5.8370    5.8370  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2so4(a
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 s                6.000 o                1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 uo2so4(a          1.00 so4-2            1.00 u+4
        1.00 h2o              -2.00 h+               0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -37.0120  -35.6614  -34.1442  -32.7967
       -31.5150  -30.5430  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uso4+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 s                4.000 o                1.000 u
     3 species in reaction
      -1.000 uso4+2            1.00 so4-2            1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -6.4537   -6.5820   -6.7293   -6.8638
        -6.9962   -7.1006  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
```

```
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
clo-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 cl               1.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 clo-              1.00 cl-                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        12.4123   16.3836   20.9090  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
clo2-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 cl               2.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 clo2-             1.00 cl-                1.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        16.8316   24.7742   33.8249  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
clo3-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 cl               3.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 clo3-             1.00 cl-                1.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        24.4420   21.5878   18.2121   15.0160
        11.7375    9.0351  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
clo4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 cl               4.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 clo4-             1.00 cl-                2.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        24.6671   21.5854   17.9155   14.4128
        10.7882    7.7739  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
hclo(aq)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 cl               1.000 h                1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 hclo(aq)          1.00 cl-                1.00 h+
        0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         4.9923    8.9636   13.4889  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
hclo2(aq
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 cl               1.000 h                2.000 o
     4 species in reaction
```

```
     -1.000 hclo2(aq          1.00 cl-                1.00 h+
        1.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        14.8706    22.8132    31.8639   500.0000
       500.0000   500.0000   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
ucl+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 cl                1.000 u
     3 species in reaction
      -1.000 ucl+3             1.00 cl-                1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -2.0258    -1.7210    -1.3711    -1.0517
        -0.7373    -0.4893   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2cl+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 cl                1.000 u                 2.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 uo2cl+            1.00 cl-                1.00 u+4
       1.00 h2o               -2.00 h+                 0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -34.2155   -32.6804   -30.9515   -29.4106
       -27.9385   -26.8165   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2cl2(a
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 cl                1.000 u                 2.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 uo2cl2(a          2.00 cl-                1.00 u+4
       1.00 h2o               -2.00 h+                 0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -32.8332   -31.4104   -29.8104   -28.3872
       -27.0310   -26.0003   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2clo3+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 cl                1.000 u                 5.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 uo2clo3+          1.00 cl-                1.00 u+4
       1.00 h2o               -2.00 h+                 2.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -10.2524   -11.3806   -12.8082   -14.2633
       -15.8728   -17.2978   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pu+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 pu
     5 species in reaction
      -1.000 pu+3              1.00 pu+4              -0.25 o2(g)
       0.50 h2o               -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         5.8614     3.8757     1.6130   500.0000
       500.0000   500.0000   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
```

```
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2+
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   1.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 pu                 2.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 puo2+               1.00 pu+4                1.50 h2o
       -3.00 h+                  0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -1.0598   -2.1757   -3.4731   -4.6768
        -5.8836   -6.8548  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2+2
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   2.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 pu                 2.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 puo2+2              1.00 pu+4                1.00 h2o
       -2.00 h+                  0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -10.6227   -6.5514   -2.1260  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
(uo2)2(o
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   2.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 u                  2.000 h                  6.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 (uo2)2(o            2.00 u+4                 4.00 h2o
       -6.00 h+                  1.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -62.1217  -59.3988  -56.3396  -53.6219
       -51.0360  -49.0745  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
(uo2)2oh
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   3.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 u                  1.000 h                  5.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 (uo2)2oh            2.00 u+4                 3.00 h2o
       -5.00 h+                  1.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -70.2624  -62.3198  -53.2691  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
*-   duplicate name (uo2)3(o
(uo2)3(o
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   2.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     3 chemical elements
       3.000 u                  4.000 h                 10.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 (uo2)3(o            3.00 u+4                 7.00 h2o
       -10.00 h+                 1.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -97.5421  -85.6282  -72.0522  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
*-   duplicate name (uo2)3(o
(uo2)3(o
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
```

```
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       3.000 u                5.000 h                11.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 (uo2)3(o          3.00 u+4                8.00 h2o
      -11.00 h+                1.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -85.4095  -81.9772  -78.1368  -74.7437
       -71.5373  -69.1255  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
*-   duplicate name (uo2)3(o
(uo2)3(o
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge  -1.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       3.000 u                7.000 h                13.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 (uo2)3(o          3.00 u+4               10.00 h2o
      -13.00 h+                1.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -78.4361  -66.5222  -52.9462  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
(uo2)4(o
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       4.000 u                7.000 h                15.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 (uo2)4(o          4.00 u+4               11.00 h2o
      -15.00 h+                2.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -124.0208 -108.1356  -90.0342  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0..       0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u(oh)4(a
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   0.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 u                4.000 h                4.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 u(oh)4(a          1.00 u+4               4.00 h2o
      -4.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         4.5420    4.5420    4.5420  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u(oh)5-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge  -1.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 u                5.000 h                5.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 u(oh)5-           1.00 u+4               5.00 h2o
      -5.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        16.5460   16.5460   16.5460  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u+3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   3.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 u
     5 species in reaction
      -1.000 u+3               1.00 u+4               -0.25 o2(g)
```

```
        0.50 h2o                -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        33.7553   30.1317   25.9889   22.2249
        18.5427   15.6583  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2(oh)2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 u                 2.000 h                 4.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 uo2(oh)2           1.00 u+4                3.00 h2o
       -4.00 h+                 0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -26.1777  -22.2064  -17.6811  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2(oh)3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 u                 3.000 h                 5.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 uo2(oh)3           1.00 u+4                4.00 h2o
       -5.00 h+                 0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -17.2757  -13.3044   -8.7791  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2(oh)4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 u                 4.000 h                 6.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 uo2(oh)4           1.00 u+4                5.00 h2o
       -6.00 h+                 0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -3.4717    0.4996    5.0249  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 u                 2.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 uo2+               1.00 u+4                1.50 h2o
       -3.00 h+                 0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -12.9960  -13.2197  -13.4931  -13.7617
       -14.0482  -14.2936  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 u                 2.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 uo2+2              1.00 u+4                1.00 h2o
       -2.00 h+                 0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -34.1738  -32.5104  -30.6342  -28.9587
       -27.3542  -26.1278  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
```

```
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2oh+
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   1.0                 titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a               hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 u                     1.000 h                    3.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 uo2oh+                 1.00 u+4                   2.00 h2o
       -3.00 h+                     0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -28.2803  -27.3094  -26.2281  -25.2786
       -24.3885  -23.7255  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uoh+3
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   3.0                 titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a               hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 u                     1.000 h                    1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 uoh+3                  1.00 u+4                   1.00 h2o
       -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         1.2925    0.5400   -0.3238   -1.1125
        -1.8889   -2.5011  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
(tco(oh)
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   0.0                 titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a               hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 tc                    6.000 o                    4.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 (tco(oh)               2.00 tco+2                 -4.00 h+
       4.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.1330    0.1330    0.1330  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
h2tco4(a
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   0.0                 titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a               hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 tc                    4.000 o                    2.000 h
     5 species in reaction
      -1.000 h2tco4(a               1.00 tco+2                 -2.00 h+
       2.00 h2o                     0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -11.2127   -7.2414   -2.7160  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
htco4-
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge  -1.0                 titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a               hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 tc                    4.000 o                    1.000 h
     5 species in reaction
      -1.000 htco4-                 1.00 tco+2                 -3.00 h+
       2.00 h2o                     0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -10.9147   -6.9434   -2.4180  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
tc+3
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   3.0                 titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a               hydr. number   0.
```

```
     1 chemical elements
       1.000 tc
     5 species in reaction
      -1.000 tc+3              1.00 tco+2              1.00 h+
       -0.50 h2o              -0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        17.3703   15.3847   13.1220  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
tco(oh)2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 tc               3.000 o                2.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 tco(oh)2          1.00 tco+2            -2.00 h+
        2.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         3.3250    3.3250    3.3250  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
tco4-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 tc               4.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 tco4-             1.00 tco+2            -3.00 h+
        1.50 h2o               0.75 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -28.4407  -29.3341  -30.4094  -31.4481
       -32.5368  -33.4539  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
tco4-2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 tc               4.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 tco4-2            1.00 tco+2            -4.00 h+
        2.00 h2o               0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -2.2077    1.7636    6.2889  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
tco4-3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 tc               4.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 tco4-3            1.00 tco+2            -5.00 h+
        2.50 h2o               0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        30.5256   32.5113   34.7740  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
tcooh+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 tc               2.000 o                1.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 tcooh+            1.00 tco+2             1.00 h2o
       -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         1.1370    1.1370    1.1370  500.0000
```

```
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uf+3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 f                1.000 u
     3 species in reaction
      -1.000 uf+3              1.00 f-                1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -9.2702   -9.2830   -9.2977   -9.3111
       -9.3244   -9.3348  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uf2+2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       2.000 f                1.000 u
     3 species in reaction
      -1.000 uf2+2             2.00 f-                1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -16.5606  -16.2350  -15.8613  -15.5200
      -15.1842  -14.9193  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uf3+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       3.000 f                1.000 u
     3 species in reaction
      -1.000 uf3+              3.00 f-                1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -22.0295  -21.6070  -21.1221  -20.6793
      -20.2435  -19.8998  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uf4(aq)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       4.000 f                1.000 u
     3 species in reaction
      -1.000 uf4(aq)           4.00 f-                1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -26.1785  -25.6080  -24.9531  -24.3551
      -23.7666  -23.3024  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uf5-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       5.000 f                1.000 u
     3 species in reaction
      -1.000 uf5-              5.00 f-                1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -27.0190  -27.0190  -27.0190  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uf6-2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
```

```
      6.000 f                1.000 u
    3 species in reaction
     -1.000 uf6-2             6.00 f-                1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -29.0890  -29.0890  -29.0890  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000  -
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2f(aq)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 f                1.000 u                2.000 o
    6 species in reaction
     -1.000 uo2f(aq)          1.00 f-                1.00 u+4
      1.50 h2o               -3.00 h+                0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -17.1544  -15.1687  -12.9060  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2f+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 f                1.000 u                2.000 o
    6 species in reaction
     -1.000 uo2f+             1.00 f-                1.00 u+4.
      1.00 h2o               -2.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       21.1865  -37.5574 -105.0203 -166.6622
     -227.3706 -275.2872  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2f2(aq
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      2.000 f                1.000 u                2.000 o
    6 species in reaction
     -1.000 uo2f2(aq          2.00 f-                1.00 u+4
      1.00 h2o               -2.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -42.7905  -41.1334  -39.2645  -37.5957
       -35.9978  -34.7766  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2f3-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      3.000 f                1.000 u                2.000 o
    6 species in reaction
     -1.000 uo2f3-            3.00 f-                1.00 u+4
      1.00 h2o               -2.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -45.0738  -43.4144  -41.5428  -39.8716
       -38.2712  -37.0481  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2f4-2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      4.000 f                1.000 u                2.000 o
    6 species in reaction
     -1.000 uo2f4-2           4.00 f-                1.00 u+4
      1.00 h2o               -2.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -45.9109  -44.2144  -42.3002  -40.5901
       -38.9515  -37.6982  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
```

```
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2oh+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               1.000 h                3.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 puo2oh+           1.00 pu+4             -3.00 h+
        0.50 o2(g)             2.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -5.0227   -1.0514    3.4739  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2oh2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               2.000 h                4.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 puo2oh2           1.00 pu+4             -4.00 h+
        0.50 o2(g)             3.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -0.2227    3.7486    8.2739  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2oh3-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               3.000 h                5.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 puo2oh3-          1.00 pu+4             -5.00 h+
        0.50 o2(g)             4.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         9.3773   13.3486   17.8740  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puoh+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               1.000 h                1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 puoh+3            1.00 pu+4             -1.00 h+
        1.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        1.1900    1.1900    1.1900  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puoh2+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               2.000 h                2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 puoh2+2           1.00 pu+4             -2.00 h+
        2.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        1.7900    1.7900    1.7900  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puoh3+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
```

```
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu              3.000 h                3.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 puoh3+           1.00 pu+4             -3.00 h+
        3.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         4.7500    4.7500    4.7500  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pu(oh)4
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu              4.000 h                4.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pu(oh)4          1.00 pu+4              4.00 h2o
       -4.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        10.5400   10.5400   10.5400  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pu(oh)5-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu              5.000 h                5.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pu(oh)5-         1.00 pu+4              5.00 h2o
       -5.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        99.0000   99.0000   99.0000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puoh+2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu              1.000 h                1.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 puoh+2           1.00 pu+4             -2.00 h+
       -0.25 o2(g)            1.50 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        12.8614   10.8757    8.6130  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puoh2+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu              2.000 h                2.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 puoh2+           1.00 pu+4             -3.00 h+
       -0.25 o2(g)            2.50 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        22.8614   20.8757   18.6130  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pu(oh)3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu              3.000 h                3.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 pu(oh)3          1.00 pu+4             -4.00 h+
       -0.25 o2(g)            3.50 h2o
```

```
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       32.3614   30.3757   28.1130  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puoh4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               4.000 h                4.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 puoh4-            1.00 pu+4             -5.00 h+
       -0.25 o2(g)             4.50 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       42.8614   40.8757   38.6130  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
amoh+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 am               1.000 h                1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 amoh+2            1.00 am+3              1.00 h2o
       -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        8.2000    8.2000    8.2000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
am(oh)2+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 am               2.000 h                2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 am(oh)2+          1.00 am+3              2.00 h2o
       -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       17.1000   17.1000   17.1000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
am(oh)3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 am               3.000 h                3.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 am(oh)3           1.00 am+3              3.00 h2o
       -3.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       28.5000   28.5000   28.5000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
ndoh+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 nd               1.000 h                1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 ndoh+2            1.00 nd+3              1.00 h2o
       -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        8.0000    8.0000    8.0000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
```

```
+-----------------------------------------------------------------------
nd(oh)2+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 nd               2.000 h                2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 nd(oh)2+          1.00 nd+3              2.00 h2o
       -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        16.9000   16.9000   16.9000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
nd(oh)3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 nd               3.000 h                3.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 nd(oh)3           1.00 nd+3              3.00 h2o
       -3.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        26.5000   26.5000   26.5000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
nd(oh)4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 nd               4.000 h                4.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 nd(oh)4-          1.00 nd+3              4.00 h2o
       -4.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        37.1000   37.1000   37.1000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
nd2(oh)2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 nd               2.000 h                2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 nd2(oh)2          2.00 nd+3              2.00 h2o
       -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        13.9000   13.9000   13.9000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
ni(oh)2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 ni               2.000 h                2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 ni(oh)2           1.00 ni+2              2.00 h2o
       -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        19.0000   19.0000   19.0000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
ni(oh)3-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   3.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
```

```
      1.000 ni                3.000 h                 3.000 o
    4 species in reaction
     -1.000 ni(oh)3-          1.00 ni+2               3.00 h2o
      -3.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       30.0000   30.0000   30.0000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
nioh+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 ni                1.000 h                 1.000 o
    4 species in reaction
     -1.000 nioh+             1.00 ni+2               1.00 h2o
      -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        9.9000    9.9000    9.9000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
ni2(oh)+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      2.000 ni                1.000 h                 1.000 o
    4 species in reaction
     -1.000 ni2(oh)+          2.00 ni+2               1.00 h2o
      -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       10.7000   10.7000   10.7000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
ni4(oh)+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   4.0            titr. factor   4.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      4.000 ni                4.000 h                 4.000 o
    4 species in reaction
     -1.000 ni4(oh)+          4.00 ni+2               4.00 h2o
      -4.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       27.7000   27.7000   27.7000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
niso4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 ni                1.000 s                 4.000 o
    3 species in reaction
     -1.000 niso4             1.00 ni+2               1.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -2.3000   -2.3000   -2.3000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
se-2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    1 chemical elements
      1.000 se
    3 species in reaction
     -1.000 se-2              1.00 seo4-2            -2.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      115.7908   99.9056   81.8042  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
```

```
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
hse-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 se              1.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 hse-              1.00 seo4-2           1.00 h+
       -2.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       100.8908   85.0056   66.9042  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
seo3-2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 se              3.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 seo3-2            1.00 seo4-2          -0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        16.5227   12.5514    8.0261  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
hseo3-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 se              3.000 o               1.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 hseo3-            1.00 seo4-2           1.00 h+
       -0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         9.2227    5.2514    0.7261  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
hseo4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 se              4.000 o               1.000 h
     3 species in reaction
      -1.000 hseo4-            1.00 seo4-2           1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -1.9000   -1.9000   -1.9000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
h2seo3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 se              3.000 o               2.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 h2seo3            1.00 seo4-2           2.00 h+
       -0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         6.6227    2.6514   -1.8740  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
h2se
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
```

```
      1.000 se                2.000 h
    4 species in reaction
     -1.000 h2se              1.00 seo4-2            2.00 h+
      -2.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)_
       96.9908   81.1056   63.0042  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
sr(oh)2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 sr                2.000 h                2.000 o
    4 species in reaction
     -1.000 sr(oh)2           1.00 sr+2              2.00 h2o
      -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       28.5000   28.5000   28.5000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
srcl+1
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    2 chemical elements
      1.000 sr                1.000 cl
    3 species in reaction
     -1.000 srcl+1            1.00 sr+2              1.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.2000    0.2000    0.2000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
srcl2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    2 chemical elements
      1.000 sr                2.000 cl
    3 species in reaction
     -1.000 srcl2             1.00 sr+2              2.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.0000    0.0000    0.0000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
srno3+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 sr                1.000 n                3.000 o
    3 species in reaction
     -1.000 srno3+            1.00 sr+2              1.00 no3-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -0.8000   -0.8000   -0.8000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
srpo4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 sr                1.000 p                4.000 o
    3 species in reaction
     -1.000 srpo4-            1.00 sr+2              1.00 po4-3
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -4.2000   -4.2000   -4.2000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
```

```
+-----------------------------------------------------------------------
zroh+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 zr                1.000 h                1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 zroh+3            1.00 zr+4              1.00 h2o
       -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -0.3000   -0.3000   -0.3000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
zr(oh)4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   4.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 zr                4.000 h                4.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 zr(oh)4           1.00 zr+4              4.00 h2o
       -4.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         9.7000    9.7000    9.7000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
zr(oh)5-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   5.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 zr                5.000 h                5.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 zr(oh)5-          1.00 zr+4              5.00 h2o
       -5.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        16.0000   16.0000   16.0000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
zr3(oh)4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   8.0            titr. factor   4.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       3.000 zr                4.000 h                4.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 zr3(oh)4          3.00 zr+4              4.00 h2o
       -4.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.6000    0.6000    0.6000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
zr4(oh)8
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   8.0            titr. factor   8.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       4.000 zr                8.000 h                8.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 zr4(oh)8          4.00 zr+4              8.00 h2o
       -8.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -6.0000   -6.0000   -6.0000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
zrso4+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
```

```
      1.000 zr              1.000 s              4.000 o
    3 species in reaction
     -1.000 zrso4+2          1.00 zr+4            1.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -2.5000   -2.5000   -2.5000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000  -
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
zrcl+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    2 chemical elements
      1.000 zr              1.000 cl
    3 species in reaction
     -1.000 zrcl+3           1.00 zr+4            1.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -0.3000   -0.3000   -0.3000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
sn+4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    1 chemical elements
      1.000 sn
    5 species in reaction
     -1.000 sn+4             1.00 sn+2            0.50 o2(g)
      -1.00 h2o              2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -40.1427  -36.1714  -31.6460  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
snoh+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 sn              1.000 h              1.000 o
    4 species in reaction
     -1.000 snoh+            1.00 sn+2            1.00 h2o
      -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        3.8900    3.8900    3.8900  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
sn(oh)2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 sn              2.000 h              2.000 o
    4 species in reaction
     -1.000 sn(oh)2          1.00 sn+2            2.00 h2o
      -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        7.9000    7.9000    7.9000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
sn(oh)3-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 sn              3.000 h              3.000 o
    4 species in reaction
     -1.000 sn(oh)3-         1.00 sn+2            3.00 h2o
      -3.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       17.3900   17.3900   17.3900  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
```

```
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
sn(oh)22
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 sn               2.000 h                2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 sn(oh)22          1.00 sn+2              1.00 h2o
        0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -39.9627  -35.9914  -31.4661  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
sn(oh)3+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 sn               3.000 h                3.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 sn(oh)3+          1.00 sn+2              2.00 h2o
       -1.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -40.6727  -36.7014  -32.1761  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
sncl+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 sn               1.000 cl
     3 species in reaction
      -1.000 sncl+             1.00 sn+2              1.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -1.0500   -1.0500   -1.0500  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
sncl2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 sn               2.000 cl
     3 species in reaction
      -1.000 sncl2             1.00 sn+2              2.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -1.7100   -1.7100   -1.7100  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
sncl3-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 sn               3.000 cl
     3 species in reaction
      -1.000 sncl3-            1.00 sn+2              3.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -1.6900   -1.6900   -1.6900  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
i3-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       3.000 i
```

```
     5 species in reaction
      -1.000 i3-                3.00 i-                  0.50 o2(g)
       -1.00 h2o                2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -25.3107  -23.2514  -20.9208  -18.8305
       -16.8177  -15.2692  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
hi
    entered by a.neyama                  date 1991/01/01
        source phreeqe                 quality unknown
        charge   0.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 i                  1.000 h
     3 species in reaction
      -1.000 hi                 1.00 i-                  1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.0785    0.0510    0.0194   -0.0094
        -0.0378   -0.0602  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
io-
    entered by a.neyama                  date 1991/01/01
        source phreeqe                 quality unknown
        charge  -1.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 i                  1.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 io-                1.00 i-                  0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         2.2477    2.4486    2.6461    2.7885
         2.8843    2.9209  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
io4-
    entered by a.neyama                  date 1991/01/01
        source phreeqe                 quality unknown
        charge  -1.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 i                  4.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 io4-               1.00 i-                  2.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -0.2515   -1.2056   -2.4334   -3.7061
        -5.1361   -6.4195  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
i2o-2
    entered by a.neyama                  date 1991/01/01
        source phreeqe                 quality unknown
        charge  -2.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     2 chemical elements
       2.000 i                  1.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 i2o-2              2.00 i-                  0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -0.2227    3.7486    8.2739  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
hio
    entered by a.neyama                  date 1991/01/01
        source phreeqe                 quality unknown
        charge   0.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 i                  1.000 h                  1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 hio                1.00 i-                  1.00 h+
       0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -8.9421   -8.2514   -7.4918   -6.8360
        -6.2350   -5.8000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
```

```
h2oi-
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge  -1.0                 titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a               hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 i                   2.000 h                   1.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 h2oi-                 1.00 i-                   1.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        32.1000   32.1000   32.1000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
i2oh-
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge  -1.0                 titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a               hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 i                   1.000 h                   1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 i2oh-                 2.00 i-                   1.00 h+
        0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -26.1227  -22.1514  -17.6261  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
hio3
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   0.0                 titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a               hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 i                   1.000 h                   3.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 hio3                  1.00 i-                   1.00 h+
        1.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -14.2971  -13.6542  -13.0156  -12.5462
      -12.2172  -12.0746  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
i2cl-
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge  -1.0                 titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a               hydr. number   0.
     2 chemical elements
       2.000 i                   1.000 cl
     6 species in reaction
      -1.000 i2cl-                 2.00 i-                   1.00 cl-
        0.50 o2(g)                -1.00 h2o                  2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -22.4283  -20.7514  -18.8598  -17.1703
      -15.5519  -14.3146  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
icl-
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge  -1.0                 titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a               hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 i                   1.000 cl
     6 species in reaction
      -1.000 icl-                  1.00 i-                   1.00 cl-
        0.25 o2(g)                -0.50 h2o                  1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        6.2386    8.2243   10.4870  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
icl2-
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge  -1.0                 titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a               hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 i                   2.000 cl
     6 species in reaction
```

```
     -1.000 icl2-            1.00 i-                2.00 cl-
       0.50 o2(g)           -1.00 h2o               2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -18.6227  -14.6514  -10.1261  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
i2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       2.000 i
     5 species in reaction
      -1.000 i2                2.00 i-                0.50 o2(g)
       -1.00 h2o               2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -25.5179  -23.3714  -20.9407  -18.7590
      -16.6562  -15.0368  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pboh+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pb               1.000 h                1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pboh+             1.00 pb+2              1.00 h2o
       -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        7.7000    7.7000    7.7000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pb(oh)2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pb               2.000 h                2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pb(oh)2           1.00 pb+2              2.00 h2o
       -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       17.1000   17.1000   17.1000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pb(oh)3-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   3.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pb               3.000 h                3.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pb(oh)3-          1.00 pb+2              3.00 h2o
       -3.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       27.3000   27.3000   27.3000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pb2(oh)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 pb               1.000 h                1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pb2(oh)           2.00 pb+2              1.00 h2o
       -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        6.4000    6.4000    6.4000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
```

```
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pb3(oh)4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   4.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       3.000 pb               4.000 h                4.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pb3(oh)4          3.00 pb+2              4.00 h2o
       -4.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        23.9000   23.9000   23.9000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pb6(oh)8
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   4.0            titr. factor   8.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       6.000 pb               8.000 h                8.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pb6(oh)8          6.00 pb+2              8.00 h2o
       -8.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        43.6000   43.6000   43.6000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pbco3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pb               1.000 c                3.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 pbco3             1.00 pb+2              1.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -7.3000   -7.3000   -7.3000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pb(co3)2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   4.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pb               2.000 c                6.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 pb(co3)2          1.00 pb+2              2.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -10.7800  -10.7800  -10.7800  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pbso4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pb               1.000 s                4.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 pbso4             1.00 pb+2              1.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -2.5900   -2.5900   -2.5900  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pb(so4)2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pb               2.000 s                8.000 o
```

```
    3 species in reaction
     -1.000 pb(so4)2          1.00 pb+2              2.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -3.5000   -3.5000   -3.5000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pbcl+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 pb                1.000 cl
     3 species in reaction
     -1.000 pbcl+              1.00 pb+2              1.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -1.6100   -1.6100   -1.6100  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pbcl2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 pb                2.000 cl
     3 species in reaction
     -1.000 pbcl2              1.00 pb+2              2.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -2.4400   -2.4400   -2.4400  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pbcl3-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 pb                3.000 cl
     3 species in reaction
     -1.000 pbcl3-             1.00 pb+2              3.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -2.0100   -2.0100   -2.0100  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pb4(oh)+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   4.0            titr. factor   4.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       4.000 pb                4.000 h                4.000 o
     4 species in reaction
     -1.000 pb4(oh)+           4.00 pb+2              4.00 h2o
       -4.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       20.8800   20.8800   20.8800  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
raoh+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 ra                1.000 h                1.000 o
     4 species in reaction
     -1.000 raoh+              1.00 ra+2              1.00 h2o
       -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       13.6000   13.6000   13.6000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
```

```
raso4
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 ra              1.000 s                4.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 raso4            1.00 ra+2              1.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -0.0220   -0.0220   -0.0220  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
thoh+3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 th              1.000 h                1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 thoh+3           1.00 th+4              1.00 h2o
       -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         3.2000    3.2000    3.2000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
th(oh)2+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 th              2.000 h                2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 th(oh)2+         1.00 th+4              2.00 h2o
       -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         6.9000    6.9000    6.9000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
th(oh)3+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   3.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 th              3.000 h                3.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 th(oh)3+         1.00 th+4              3.00 h2o
       -3.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        11.7000   11.7000   11.7000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
th(oh)4
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   4.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 th              4.000 h                4.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 th(oh)4          1.00 th+4              4.00 h2o
       -4.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        17.1219   15.8700   14.4330   13.1208
        11.8295   10.8110  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
th4(oh)8
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   8.0            titr. factor   8.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       4.000 th              8.000 h                8.000 o
     4 species in reaction
```

```
     -1.000 th4(oh)8          4.00 th+4              8.00 h2o
      -8.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        21.1000   21.1000   21.1000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
th2(oh)2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   6.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 th               2.000 h                2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 th2(oh)2          2.00 th+4              2.00 h2o
      -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         6.1400    6.1400    6.1400  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
thco3+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 th               1.000 c                3.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 thco3+2           1.00 th+4              1.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -11.0300  -11.0300  -11.0300  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
thhpo4+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 th               1.000 p                4.000 o
       1.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 thhpo4+2          1.00 th+4              1.00 po4-3
       1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -23.1600  -23.1600  -23.1600  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
th(hpo4)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   4.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 th               2.000 p                8.000 o
       2.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 th(hpo4)          1.00 th+4              2.00 po4-3
       2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -47.4900  -47.4900  -47.4900  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
thhpo43-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   6.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 th               3.000 p               12.000 o
       3.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 thhpo43-          1.00 th+4              3.00 po4-3
       3.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -68.3000  -68.3000  -68.3000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
```

```
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
thh2po4+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 th               1.000 p                4.000 o
       2.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 thh2po4+          1.00 th+4              1.00 po4-3
        2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -24.1900  -24.1900  -24.1900  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
thh2po42
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 th               2.000 p                8.000 o
       4.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 thh2po42          1.00 th+4              2.00 po4-3
        4.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -48.0000  -48.0000  -48.0000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
thh3po4+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 th               1.000 p                4.000 o
       3.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 thh3po4+          1.00 th+4              1.00 po4-3
        3.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -23.6000  -23.6000  -23.6000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
thso4+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 th               1.000 s                4.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 thso4+2           1.00 th+4              1.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -5.4410   -5.4410   -5.4410  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
th(so4)2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   4.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 th               2.000 s                8.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 th(so4)2          1.00 th+4              2.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -9.7500   -9.7500   -9.7500  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
th(so4)3-
```

```
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge  -2.0               titr. factor   6.0 eq/mol
      ion size   3.0 a             hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 th                 3.000 s              -  12.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 th(so4)3-          1.00 th+4                3.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -10.4600  -10.4600  -10.4600  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
th(so4)4
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge  -4.0               titr. factor   8.0 eq/mol
      ion size   3.0 a             hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 th                 4.000 s                 16.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 th(so4)4           1.00 th+4                4.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -8.4400   -8.4400   -8.4400  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
thcl4
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   0.0               titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a             hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 th                 4.000 cl
     3 species in reaction
      -1.000 thcl4              1.00 th+4                4.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -1.2400   -1.2400   -1.2400  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
thcl3+
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   1.0               titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a             hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 th                 3.000 cl
     3 species in reaction
      -1.000 thcl3+             1.00 th+4                3.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -1.6700   -1.6700   -1.6700  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
thcl2+2
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   2.0               titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a             hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 th                 2.000 cl
     3 species in reaction
      -1.000 thcl2+2            1.00 th+4                2.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -0.7600   -0.7600   -0.7600  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
thcl+3
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   3.0               titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a             hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 th                 1.000 cl
     3 species in reaction
      -1.000 thcl+3             1.00 th+4                1.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -1.3800   -1.3800   -1.3800  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
```

```
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
thf4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 th               4.000 f
     3 species in reaction
      -1.000 thf4              1.00 th+4              4.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -23.2000  -23.2000  -23.2000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
th(no3)+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 th               1.000 n                3.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 th(no3)+          1.00 th+4              1.00 no3-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -1.6000   -1.6000   -1.6000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
th(no3)2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 th               2.000 n                6.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 th(no3)2          1.00 th+4              2.00 no3-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -2.8400   -2.8400   -2.8400  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
th4(no3)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 th               3.000 n                9.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 th4(no3)          1.00 th+4              3.00 no3-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -2.0000   -2.0000   -2.0000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
th(no3)4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 th               4.000 n               12.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 th(no3)4          1.00 th+4              4.00 no3-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -1.0000   -1.0000   -1.0000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pa+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 pa
     5 species in reaction
```

```
     -1.000 pa+3              1.00 pa+4            -0.25 o2(g)
       0.50 h2o              -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       20.7313   18.7457   16.4830  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000  -
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pao2+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 pa               2.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 pao2+             1.00 pa+4             1.50 h2o
       -3.00 h+                0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -30.5513  -28.5657  -26.3030  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pa(oh)+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pa               1.000 h               1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pa(oh)+3          1.00 pa+4             1.00 h2o
       -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -0.8400   -0.8400   -0.8400  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pa(oh)2+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pa               2.000 h               2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pa(oh)2+          1.00 pa+4             2.00 h2o
       -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.0200    0.0200    0.0200  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pa(oh)3+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   3.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pa               3.000 h               3.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pa(oh)3+          1.00 pa+4             3.00 h2o
       -3.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        1.5000    1.5000    1.5000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pao(oh)+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pa               1.000 h               2.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 pao(oh)+          1.00 pa+4             1.50 h2o
       0.25 o2(g)             -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -30.0513  -28.0657  -25.8030  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
```

```
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pao2(oh)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pa             1.000 h                3.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 pao2(oh)         1.00 pa+4             2.50 h2o
        0.25 o2(g)           -4.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -26.0513  -24.0657  -21.8030  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npo2+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 np             2.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 npo2+            1.00 np+4             1.50 h2o
       -3.00 h+               0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -8.9943   -9.4057   -9.8946  -10.3599
       -10.8400  -11.2381  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npo2+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 np             2.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 npo2+2           1.00 np+4            -2.00 h+
        0.50 o2(g)            1.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -13.2327   -9.2614   -4.7360  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
np+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     1 chemical elements
       1.000 np
     5 species in reaction
      -1.000 np+3             1.00 np+4            -0.25 o2(g)
        0.50 h2o             -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        19.7313   17.7457   15.4830  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npoh+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np             1.000 h                1.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 npoh+2           1.00 np+4             1.50 h2o
       -2.00 h+              -0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        27.1314   25.1457   22.8830  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
np(oh)2+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
```

```
     ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 np              2.000 h                2.000 o
    5 species in reaction
     -1.000 np(oh)2+         1.00 np+4             -3.00 h+
      -0.25 o2(g)            2.50 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       36.7313   34.7457   32.4830  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
np(oh)3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
     ion size   3.0 a           hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 np              3.000 h                3.000 o
    5 species in reaction
     -1.000 np(oh)3          1.00 np+4             -4.00 h+
      -0.25 o2(g)            3.50 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       46.7313   44.7457   42.4830  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
np(oh)4-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
     ion size   3.0 a           hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 np              4.000 h                4.000 o
    5 species in reaction
     -1.000 np(oh)4-         1.00 np+4             -5.00 h+
      -0.25 o2(g)            4.50 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       57.7314   55.7457   53.4830  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
np2(oh)2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
     ion size   3.0 a           hydr. number   0.
    3 chemical elements
      2.000 np              2.000 h                2.000 o
    5 species in reaction
     -1.000 np2(oh)2         2.00 np+4             -4.00 h+
      -0.50 o2(g)            3.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       52.9527   48.9814   44.4561  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npco3+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
     ion size   3.0 a           hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 np              1.000 c                3.000 o
    6 species in reaction
     -1.000 npco3+           1.00 np+4             -0.25 o2(g)
      1.00 co3-2             0.50 h2o              -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       13.2314   11.2457    8.9830  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
np(co3)2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
     ion size   3.0 a           hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 np              2.000 c                6.000 o
    6 species in reaction
     -1.000 np(co3)2         1.00 np+4             -0.25 o2(g)
      2.00 co3-2             0.50 h2o              -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
```

```
        8.7314    6.7457    4.4830  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
np(co3)3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np               3.000 c                9.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 np(co3)3          1.00 np+4             -0.25 o2(g)
        3.00 co3-2             0.50 h2o              -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        5.2313    3.2457    0.9830  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npcl+2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 np               1.000 cl
     6 species in reaction
      -1.000 npcl+2            1.00 np+4             -0.25 o2(g)
        1.00 cl-               0.50 h2o              -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       22.1314   20.1457   17.8830  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npcl2+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 np               2.000 cl
     6 species in reaction
      -1.000 npcl2+            1.00 np+4             -0.25 o2(g)
        2.00 cl-               0.50 h2o              -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       25.1114   23.1257   20.8630  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npoh+3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np               1.000 h                1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 npoh+3            1.00 np+4             -1.00 h+
        1.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        1.5000    1.5000    1.5000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npoh2+2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np               2.000 h                2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 npoh2+2           1.00 np+4             -2.00 h+
        2.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        3.0000    3.0000    3.0000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
```

```
np(oh)3+
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   1.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np                3.000 h                 3.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 np(oh)3+           1.00 np+4              -3.00 h+
       3.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        6.0000     6.0000     6.0000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
np(oh)4
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   0.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np                4.000 h                 4.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 np(oh)4            1.00 np+4              -4.00 h+
       4.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        9.0000     9.0000     9.0000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
np(oh)5-
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge  -1.0              titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np                5.000 h                 5.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 np(oh)5-           1.00 np+4               5.00 h2o
       -5.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       24.7000    24.7000    24.7000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
np2oh2+6
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   6.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 np                2.000 h                 2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 np2oh2+6           2.00 np+4              -2.00 h+
       2.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        2.0000     2.0000     2.0000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npoh3co3
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge  -1.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 np                3.000 h                 6.000 o
       1.000 c
     5 species in reaction
      -1.000 npoh3co3           1.00 np+4              -3.00 h+
       3.00 h2o                 1.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        1.0000     1.0000     1.0000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npso4+2
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        charge   2.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
```

```
      1.000 np                1.000 s                4.000 o
     3 species in reaction
     -1.000 npso4+2           1.00 np+4              1.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -3.4100   -3.4100   -3.4100  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
np(so4)2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
      1.000 np                2.000 s                8.000 o
     3 species in reaction
     -1.000 np(so4)2          1.00 np+4              2.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -5.4200   -5.4200   -5.4200  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npcl+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     2 chemical elements
      1.000 np                1.000 cl
     3 species in reaction
     -1.000 npcl+3            1.00 np+4              1.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.0400    0.0400    0.0400  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npcl2+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     2 chemical elements
      1.000 np                2.000 cl
     3 species in reaction
     -1.000 npcl2+2           1.00 np+4              2.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.2400    0.2400    0.2400  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npcl3+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     2 chemical elements
      1.000 np                3.000 cl
     3 species in reaction
     -1.000 npcl3+            1.00 np+4              3.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.5000    0.5000    0.5000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npo2oh
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0             titr. factor   1.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
      1.000 np                1.000 h                3.000 o
     5 species in reaction
     -1.000 npo2oh            1.00 np+4             -4.00 h+
       0.25 o2(g)             2.50 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        1.7386    3.7243    5.9870  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
```

```
npo2oh2-
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge  -1.0              titr. factor   2.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np                 2.000 h                 4.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 npo2oh2-            1.00 np+4              -5.00 h+
        0.25 o2(g)               3.50 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       13.3887   15.3743   17.6370  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npo2cl
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   0.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np                 2.000 o                 1.000 cl
     6 species in reaction
      -1.000 npo2cl              1.00 np+4              -3.00 h+
        0.25 o2(g)               1.50 h2o                1.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -11.0914   -9.1057   -6.8430  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npo2hco3
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   0.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 np                 1.000 h                 5.000 o
       1.000 c
     6 species in reaction
      -1.000 npo2hco3            1.00 np+4              -2.00 h+
        0.25 o2(g)               1.50 h2o                1.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -24.8113  -22.8257  -20.5630  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npo2co3-
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge  -1.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np                 5.000 o                 1.000 c
     6 species in reaction
      -1.000 npo2co3-            1.00 np+4              -3.00 h+
        0.25 o2(g)               1.50 h2o                1.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -16.2814  -14.2957  -12.0330  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npo2co32
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge  -3.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np                 8.000 o                 2.000 c
     6 species in reaction
      -1.000 npo2co32            1.00 np+4              -3.00 h+
        0.25 o2(g)               1.50 h2o                2.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -18.5014  -16.5157  -14.2530  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npo2co33
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge  -5.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     3 chemical elements
```

```
      1.000 np              11.000 o                3.000 c
     6 species in reaction
     -1.000 npo2co33          1.00 np+4             -3.00 h+
       0.25 o2(g)             1.50 h2o               3.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c) _
      -18.7313  -15.7457  -14.4830  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+----------------------------------------------------------------------
*-   duplicate name npo2oh
npo2oh
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
      1.000 np               1.000 h                3.000 o
     5 species in reaction
     -1.000 npo2oh            1.00 np+4             -3.00 h+
       0.50 o2(g)             2.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -8.1327   -4.1614    0.3639  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+----------------------------------------------------------------------
npo2oh2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
      1.000 np               2.000 h                4.000 o
     5 species in reaction
     -1.000 npo2oh2           1.00 np+4             -4.00 h+
       0.50 o2(g)             3.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -1.7127    2.2586    6.7840  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+----------------------------------------------------------------------
npo2oh3-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
      1.000 np               3.000 h                5.000 o
     5 species in reaction
     -1.000 npo2oh3-          1.00 np+4             -5.00 h+
       0.50 o2(g)             4.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        8.4673   12.4386   16.9640  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+----------------------------------------------------------------------
npo2oh2+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
      2.000 np               2.000 h                6.000 o
     5 species in reaction
     -1.000 npo2oh2+          2.00 np+4             -6.00 h+
       1.00 o2(g)             4.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -20.0654  -12.1228   -3.0721  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+----------------------------------------------------------------------
npo23oh5
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
      3.000 np               5.000 h               11.000 o
     5 species in reaction
     -1.000 npo23oh5          3.00 np+4            -11.00 h+
       1.50 o2(g)             8.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -22.1981  -10.2842    3.2918  500.0000
```

```
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npo22oh+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 np               1.000 h                5.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 npo22oh+          2.00 np+4             -5.00 h+
        1.00 o2(g)             3.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -22.4654  -14.5228   -5.4721  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npo2co3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np               5.000 o                1.000 c
     6 species in reaction
      -1.000 npo2co3           1.00 np+4             -2.00 h+
        0.50 o2(g)             1.00 h2o               1.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -23.2327  -19.2614  -14.7360  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
*-   duplicate name npo2co32
npo2co32
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np               8.000 o                2.000 c
     6 species in reaction
      -1.000 npo2co32          1.00 np+4             -2.00 h+
        0.50 o2(g)             1.00 h2o               2.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -30.2327  -26.2614  -21.7360  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
*-   duplicate name npo2co33
npo2co33
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np              11.000 o                3.000 c
     6 species in reaction
      -1.000 npo2co33          1.00 np+4             -2.00 h+
        0.50 o2(g)             1.00 h2o               3.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -34.2327  -30.2614  -25.7360  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npo2so4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np               6.000 o                1.000 s
     6 species in reaction
      -1.000 npo2so4           1.00 np+4             -2.00 h+
        0.50 o2(g)             1.00 h2o               1.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -16.5027  -12.5314   -8.0061  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
```

```
+-----------------------------------------------------------------------
npo2so42
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np             10.000 o                2.000 s
     6 species in reaction
      -1.000 npo2so42          1.00 np+4             -2.00 h+
        0.50 o2(g)             1.00 h2o               2.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -17.3327  -13.3614   -8.8361  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npo2so43
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np             14.000 o                3.000 s
     6 species in reaction
      -1.000 npo2so43          1.00 np+4             -2.00 h+
        0.50 o2(g)             1.00 h2o               3.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -18.2327  -14.2614   -9.7360  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npo2cl+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np              2.000 o                1.000 cl
     6 species in reaction
      -1.000 npo2cl+           1.00 np+4             -2.00 h+
        0.50 o2(g)             1.00 h2o               1.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -12.9327   -8.9614   -4.4361  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npo2cl2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np              2.000 o                2.000 cl
     6 species in reaction
      -1.000 npo2cl2           1.00 np+4             -2.00 h+
        0.50 o2(g)             1.00 h2o               2.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -14.2327  -10.2614   -5.7360  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npo2f
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 np              2.000 o                1.000 f
     6 species in reaction
      -1.000 npo2f             1.00 np+4              1.50 h2o
       -3.00 h+                0.25 o2(g)             1.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -12.3814  -10.3957   -8.1330  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npf+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
```

```
      1.000 np                1.000 f
     2 species in reaction
     -1.000 npf+3             1.00 np+4              1.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -8.3300   -8.3300   -8.3300  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npf2+2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
      1.000 np                2.000 f
     3 species in reaction
     -1.000 npf2+             1.00 np+4              2.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -14.5900  -14.5900  -14.5900  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npf3+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
      1.000 np                3.000 f
     3 species in reaction
     -1.000 npf3+             1.00 np+4              3.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -20.3000  -20.3000  -20.3000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
npf4
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
      1.000 np                4.000 f
     3 species in reaction
     -1.000 npf4              1.00 np+4              4.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -25.1000  -25.1000  -25.1000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo22oh2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
      2.000 pu                2.000 h                6.000 o
     5 species in reaction
     -1.000 puo22oh2          2.00 pu+4             -6.00 h+
      1.00 o2(g)              4.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -12.8454   -4.9028    4.1479  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo23oh5
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
      3.000 pu                5.000 h               11.000 o
     5 species in reaction
     -1.000 puo23oh5          3.00 pu+4            -11.00 h+
      1.50 o2(g)              8.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -10.2681    1.6458   15.2218  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
```

```
+-----------------------------------------------------------------------
puo23oh4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       3.000 pu               4.000 h               10.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 puo23oh4          3.00 pu+4            -10.00 h+
        1.50 o2(g)             7.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -26.8681  -14.9542   -1.3782  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2co3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               5.000 o                1.000 c
     5 species in reaction
      -1.000 puo2co3           1.00 pu+4            -2.00 h+
        0.50 o2(g)             1.00 h2o              1.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -22.6227  -18.6514  -14.1261  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2co32
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               8.000 o                2.000 c
     6 species in reaction
      -1.000 puo2co32          1.00 pu+4            -2.00 h+
        0.50 o2(g)             1.00 h2o              2.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -25.6227  -21.6514  -17.1261  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2co33
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu              11.000 o                3.000 c
     6 species in reaction
      -1.000 puo2co33          1.00 pu+4            -2.00 h+
        0.50 o2(g)             1.00 h2o              3.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -31.5227  -27.5514  -23.0261  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2ohco
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
       1.000 pu               1.000 h                6.000 o
       1.000 c
     6 species in reaction
      -1.000 puo2ohco          1.00 pu+4            -3.00 h+
        0.50 o2(g)             2.00 h2o              1.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -20.4727  -16.5014  -11.9761  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2oh2c
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
```

```
    4 chemical elements
      1.000 pu              2.000 h                7.000 o
      1.000 c
    6 species in reaction
     -1.000 puo2oh2c         1.00 pu+4             -4.00 h+
      0.50 o2(g)             3.00 h2o               1.00 co3-2
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -5.6227   -1.6514    2.8740  500.0000
     500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*   delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       0.        0.        0.        0.
       0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2hco3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    4 chemical elements
      1.000 pu              1.000 h                8.000 o
      2.000 c
    6 species in reaction
     -1.000 puo2hco3         1.00 pu+4             -1.00 h+
      0.50 o2(g)             1.00 h2o               2.00 co3-2
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
     -32.9227  -28.9514  -24.4261  500.0000
     500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*   delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       0.        0.        0.        0.
       0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2cl+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 pu              2.000 o                1.000 cl
    6 species in reaction
     -1.000 puo2cl+          1.00 pu+4             -2.00 h+
      0.50 o2(g)             1.00 h2o               1.00 cl-
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
     -10.3227   -6.3514   -1.8260  500.0000
     500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*   delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       0.        0.        0.        0.
       0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2cl2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 pu              2.000 o                2.000 cl
    6 species in reaction
     -1.000 puo2cl2          1.00 pu+4             -2.00 h+
      0.50 o2(g)             1.00 h2o               2.00 cl-
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
     -10.3727   -6.4014   -1.8760  500.0000
     500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*   delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       0.        0.        0.        0.
       0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2so4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 pu              6.000 o                1.000 s
    6 species in reaction
     -1.000 puo2so4          1.00 pu+4             -2.00 h+
      0.50 o2(g)             1.00 h2o               1.00 so4-2
*   log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
     -13.8227   -9.8514   -5.3260  500.0000
     500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*   delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       0.        0.        0.        0.
       0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2oh
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
    3 chemical elements
      1.000 pu              1.000 h                3.000 o
    5 species in reaction
     -1.000 puo2oh           1.00 pu+4             -4.00 h+
      0.25 o2(g)             2.50 h2o
```

```
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        5.5386    7.5243    9.7870  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2oh2-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               2.000 h                4.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 puo2oh2-          1.00 pu+4             -5.00 h+
        0.25 o2(g)             3.50 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       14.8386   16.8243   19.0870  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2cl
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               2.000 o                1.000 cl
     6 species in reaction
      -1.000 puo2cl            1.00 pu+4             -3.00 h+
        0.25 o2(g)             1.50 h2o               1.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -3.9914   -2.0057    0.2570  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pu2oh2+6
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   6.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 pu               2.000 h                2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pu2oh2+6          2.00 pu+4             -2.00 h+
        2.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        1.0000    1.0000    1.0000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pu2oh3+5
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   5.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 pu               3.000 h                3.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pu2oh3+5          2.00 pu+4             -3.00 h+
        3.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        2.0000    2.0000    2.0000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pu2oh4+4
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 pu               4.000 h                4.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pu2oh4+4          2.00 pu+4             -4.00 h+
        4.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        3.0000    3.0000    3.0000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
```

```
+-----------------------------------------------------------------------
pu2oh5+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 pu                5.000 h                 5.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pu2oh5+3          2.00 pu+4               -5.00 h+
        5.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         7.0000     7.0000     7.0000   500.0000
       500.0000   500.0000   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puso4+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu                1.000 s                 4.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 puso4+2           1.00 pu+4               1.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -5.7200    -5.7200    -5.7200   500.0000
       500.0000   500.0000   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puso42
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu                2.000 s                 8.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 puso42            1.00 pu+4               2.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -10.2500   -10.2500   -10.2500   500.0000
       500.0000   500.0000   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puso43-2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu                3.000 s                12.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 puso43-2          1.00 pu+4               3.00 so4-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -11.5000   -11.5000   -11.5000   500.0000
       500.0000   500.0000   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pucl+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 pu                1.000 cl
     3 species in reaction
      -1.000 pucl+3            1.00 pu+4               1.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -0.9300    -0.9300    -0.9300   500.0000
       500.0000   500.0000   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pucl2+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 pu                2.000 cl
     3 species in reaction
      -1.000 pucl2+2           1.00 pu+4               2.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
```

```
        0.1700    0.1700    0.1700  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pucl3+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 pu               3.000 cl
     3 species in reaction
      -1.000 pucl3+            1.00 pu+4              3.00 cl-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        1.0000    1.0000    1.0000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pu3oh5+4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       3.000 pu               5.000 h                5.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 pu3oh5+4          3.00 pu+4             -8.00 h+
       -0.75 o2(g)             6.50 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       50.5840   44.6271   37.8391  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pu2oh2+4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       2.000 pu               2.000 h                2.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 pu2oh2+4          2.00 pu+4             -4.00 h+
       -0.50 o2(g)             3.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       25.7227   21.7514   17.2261  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puco3+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               1.000 c                3.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 puco3+            1.00 pu+4             -0.25 o2(g)
       1.00 co3-2              0.50 h2o              -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -0.6386   -2.6243   -4.8870  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puco32-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               2.000 c                6.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 puco32-           1.00 pu+4             -0.25 o2(g)
       2.00 co3-2              0.50 h2o              -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -5.1386   -7.1243   -9.3870  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puco33-3
```

```
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -3.0            titr. factor    0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number    0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               3.000 c                9.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 puco33-3          1.00 pu+4             -0.25 o2(g)
        3.00 co3-2             0.50 h2o              -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -8.6386  -10.6243  -12.8870  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puso4+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor    0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number    0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               1.000 s                4.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 puso4+            1.00 pu+4             -0.25 o2(g)
        1.00 so4-2             0.50 h2o              -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         2.3614    0.3757   -1.8870  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puhso42+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor    0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number    0.
     4 chemical elements
       1.000 pu               2.000 h                2.000 s
       8.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 puhso42+          1.00 pu+4             -0.25 o2(g)
        1.00 h+                2.00 so4-2             0.50 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -1.0386   -3.0243   -5.2870  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puhso4+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor    0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number    0.
     4 chemical elements
       1.000 pu               1.000 h                1.000 s
       4.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 puhso4+2          1.00 pu+4             -0.25 o2(g)
        1.00 so4-2             0.50 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         4.8614    2.8757    0.6130  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puso42-
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor    0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number    0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               2.000 s                8.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 puso42-           1.00 pu+4             -0.25 o2(g)
        2.00 so4-2             0.50 h2o              -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.6614   -1.3243   -3.5870  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pucl+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor    0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number    0.
     2 chemical elements
```

```
      1.000 pu                1.000 cl
     6 species in reaction
     -1.000 pucl+2            1.00 pu+4              -0.25 o2(g)
       1.00 cl-               0.50 h2o               -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        5.9614    3.9757    1.7130  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pucl2+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     2 chemical elements
      1.000 pu                2.000 cl
     6 species in reaction
     -1.000 pucl2+            1.00 pu+4              -0.25 o2(g)
       2.00 cl-               0.50 h2o               -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       10.8614    8.8757    6.6130  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2h2po
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     4 chemical elements
      1.000 pu                2.000 h                6.000 o
      1.000 p
     5 species in reaction
     -1.000 puo2h2po          1.00 pu+4               1.00 h2o
       1.00 po4-3             0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -34.0627  -30.0914  -25.5661  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2hpo4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge  -1.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     4 chemical elements
      1.000 pu                1.000 h                6.000 o
      1.000 p
     6 species in reaction
     -1.000 puo2hpo4          1.00 pu+4               1.50 h2o
       1.00 po4-3             0.25 o2(g)             -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -19.3113  -17.3257  -15.0630  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puhpo4+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   2.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     4 chemical elements
      1.000 pu                1.000 h                1.000 p
      4.000 o
     4 species in reaction
     -1.000 puhpo4+2          1.00 pu+4               1.00 h+
       1.00 po4-3
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -25.2800  -25.2800  -25.2800  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puh2po42
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   0.0             titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a           hydr. number   0.
     4 chemical elements
      1.000 pu                2.000 h                2.000 p
      8.000 o
     4 species in reaction
     -1.000 puh2po42          1.00 pu+4               2.00 h+
```

```
        2.00 po4-3
*     log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -48.4400  -48.4400  -48.4400  500.0000
        500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*     delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)_
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puh3po43
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
      1.000 pu                3.000 h                3.000 p
     12.000 o
     4 species in reaction
     -1.000 puh3po43          1.00 pu+4              3.00 h+
       3.00 po4-3
*     log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -70.4200  -70.4200  -70.4200  500.0000
        500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*     delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puh4po44
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
      1.000 pu                4.000 h                4.000 p
     16.000 o
     4 species in reaction
     -1.000 puh4po44          1.00 pu+4              4.00 h+
       4.00 po4-3
*     log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -92.5300  -92.5300  -92.5300  500.0000
        500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*     delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puh2po4+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     4 chemical elements
      1.000 pu                2.000 h                1.000 p
      4.000 o
     6 species in reaction
     -1.000 puh2po4+          1.00 pu+4              1.00 h+
       1.00 po4-3            -0.25 o2(g)             0.50 h2o
*     log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -16.1686  -18.1543  -20.4170  500.0000
        500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*     delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puco3+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
      1.000 pu                1.000 c                3.000 o
     3 species in reaction
     -1.000 puco3+2           1.00 pu+4              1.00 co3-2
*     log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -19.1000  -19.1000  -19.1000  500.0000
        500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*     delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puco32
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
      1.000 pu                2.000 c                6.000 o
     3 species in reaction
     -1.000 puco32            1.00 pu+4              2.00 co3-2
*     log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -33.1000  -33.1000  -33.1000  500.0000
        500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*     delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
```

```
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puco33-2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               3.000 c                9.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 puco33-2          1.00 pu+4              3.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -42.3000  -42.3000  -42.3000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puco34-4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -4.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               4.000 c               12.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 puco34-4          1.00 pu+4              4.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -45.1000  -45.1000  -45.1000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puco35-6
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge  -6.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               5.000 c               15.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 puco35-6          1.00 pu+4              5.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -44.5000  -44.5000  -44.5000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puno3+3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               1.000 n                3.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 puno3+3           1.00 pu+4              1.00 no3-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -1.8000   -1.8000   -1.8000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puno32+2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               2.000 n                6.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 puno32+2          1.00 pu+4              2.00 no3-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -2.4000   -2.4000   -2.4000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puno33+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               3.000 n                9.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 puno33+           1.00 pu+4              3.00 no3-
```

```
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -2.3000   -2.3000   -2.3000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2no3+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu               5.000 o                1.000 n
     6 species in reaction
      -1.000 puo2no3+          1.00 pu+4             -2.00 h+
        0.50 o2(g)             1.00 h2o               1.00 no3-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -10.0227   -6.0514   -1.5261  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puf+3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 pu               1.000 f
     3 species in reaction
      -1.000 puf+3             1.00 pu+4              1.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -8.4400   -8.4400   -8.4400  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puf2+2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 pu               2.000 f
     3 species in reaction
      -1.000 puf2+2            1.00 pu+4              2.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -15.0800  -15.0800  -15.0800  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puf3+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 pu               3.000 f
     3 species in reaction
      -1.000 puf3+             1.00 pu+4              3.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -19.8000  -19.8000  -19.8000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puf4
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 pu               4.000 f
     3 species in reaction
      -1.000 puf4              1.00 pu+4              4.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -23.2000  -23.2000  -23.2000  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
puo2f+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
```

```
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pu              2.000 o                1.000 f
     6 species in reaction
      -1.000 puo2f+           1.00 pu+4              1.00 h2o
        0.50 o2(g)           -2.00 h+                1.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -14.8327  -10.9614   -6.3361  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
amco3+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 am              1.000 c                3.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 amco3+           1.00 am+3              1.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -7.6000   -7.6000   -7.6000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
amco32-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 am              2.000 c                6.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 amco32-          1.00 am+3              2.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -12.3000  -12.3000  -12.3000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
amco33-3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge  -3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 am              3.000 c                9.000 o
     3 species in reaction
      -1.000 amco33-3         1.00 am+3              3.00 co3-2
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -15.2300  -15.2300  -15.2300  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
zna
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 na              1.000 z
     3 species in reaction
      -1.000 zna              1.00 na+               1.00  z-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -20.0000  -20.0000  -20.0000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
zk
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 k               1.000 z
     3 species in reaction
      -1.000 zk               1.00 k+                1.00  z-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -20.6000  -20.6000  -20.6000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
```

```
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
z2mg
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 mg              2.000 z
     3 species in reaction
      -1.000 z2mg              1.00 mg+2              2.00  z-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -40.4000  -40.4000  -40.4000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
z2ca
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 ca              2.000 z
     3 species in reaction
      -1.000 z2ca              1.00 ca+2              2.00  z-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -41.2000  -41.2000  -41.2000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pdoh+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pd              1.000 h               1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pdoh+             1.00 pd+2              1.00 h2o
       -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        2.1200    2.1200    2.1200  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
pd(oh)2(
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 pd              2.000 h               2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 pd(oh)2(          1.00 pd+2              2.00 h2o
       -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        4.6200    4.6200    4.6200  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
snf+
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 sn              1.000 f
     3 species in reaction
      -1.000 snf+              1.00 sn+2              1.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -4.0800   -4.0800   -4.0800  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
snf+++
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        charge   3.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 sn              1.000 f
```

```
     6 species in reaction
      -1.000 snf+++            1.00 sn+2              1.00 f-
        0.50 o2(g)            -1.00 h2o               2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -38.9527  -34.9814  -30.4561  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
snf2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 sn               2.000 f
     3 species in reaction
      -1.000 snf2              1.00 sn+2              2.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -6.6800   -6.6800   -6.6800  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
snf2++
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   2.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 sn               2.000 f
     6 species in reaction
      -1.000 snf2++            1.00 sn+2              2.00 f-
        0.50 o2(g)            -1.00 h2o               2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -40.9227  -36.9514  -32.4261  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
snf3+
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 sn               3.000 f
     6 species in reaction
      -1.000 snf3+             1.00 sn+2              3.00 f-
        0.50 o2(g)            -1.00 h2o               2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -39.2127  -35.2414  -30.7161  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
snf3-
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge  -1.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 sn               3.000 f
     3 species in reaction
      -1.000 snf3-             1.00 sn+2              3.00 f-
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -9.4600   -9.4600   -9.4600  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
snf4
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        charge   0.0            titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a          hydr. number   0.
     2 chemical elements
       1.000 sn               4.000 f
     6 species in reaction
      -1.000 snf4              1.00 sn+2              4.00 f-
        0.50 o2(g)            -1.00 h2o               2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -41.1827  -37.2114  -32.6861  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
          0.        0.        0.        0.
          0.        0.        0.        0.
```

```
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
snoh+++
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   3.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 sn                1.000 h                 1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 snoh+++            1.00 sn+2               1.00 h+
        0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -40.7527  -36.7814  -32.2561  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
sn(oh)4
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   0.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 sn                4.000 h                 4.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 sn(oh)4            1.00 sn+2               3.00 h2o
       -2.00 h+                 0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -40.9927  -37.0214  -32.4961  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
sn(so4)2
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   0.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 sn                2.000 s                 8.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 sn(so4)2           1.00 sn+2               2.00 so4-2
        0.50 o2(g)             -1.00 h2o                2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -39.3827  -35.4114  -30.8861  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
sn(so4++
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   2.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 sn                1.000 s                 4.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 sn(so4++           1.00 sn+2               1.00 so4-2
        0.50 o2(g)             -1.00 h2o                2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -25.9227  -21.9514  -17.4261  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
acoh+2
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
        charge   2.0              titr. factor   0.0 eq/mol
      ion size   3.0 a            hydr. number   0.
     3 chemical elements
       1.000 ac                1.000 h                 1.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 acoh+2             1.00 ac+3               1.00 h2o
       -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        10.4000   10.4000   10.4000  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
endit.
minerals
u(oh)2so
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                   quality unknown
```

```
        volume     0.     cc/mol
     4 chemical elements
       2.000 h                6.000 o                1.000 s
       1.000 u
     5 species in reaction
      -1.000 u(oh)2so         -2.00 h+                2.00 h2o
        1.00 so4-2             1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -3.1680    -3.1680    -3.1680   500.0000
       500.0000   500.0000   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2(am)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     2 chemical elements
       2.000 o                1.000 u
     4 species in reaction
      -1.000 uo2(am)          -4.00 h+                2.00 h2o
        1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.1000     0.1000     0.1000   500.0000
       500.0000   500.0000   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
na2u2o7(
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     3 chemical elements
       2.000 na               2.000 u                7.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 na2u2o7(          2.00 na+               2.00 u+4
        5.00 h2o             -10.00 h+                1.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -57.7425   -42.4188   -24.8956    -8.9700
         6.6143    18.8269   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
na2uo4(a
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     3 chemical elements
       2.000 na               1.000 u                4.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 na2uo4(a          2.00 na+               1.00 u+4
        3.00 h2o               -6.00 h+               0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -11.5113    -2.4674     7.8806    17.2920
        26.5098    33.7404   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
(uo2)2co
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     3 chemical elements
       1.000 c                7.000 o                2.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 (uo2)2co          1.00 co3-2             2.00 u+4
        3.00 h2o               -6.00 h+               0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -68.2363   -61.3714   -53.5247   -46.3973
       -39.4273   -33.9694   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u(co3)2(
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     3 chemical elements
       2.000 c                6.000 o                1.000 u
     3 species in reaction
      -1.000 u(co3)2(          2.00 co3-2             1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -15.4763   -13.2100   -10.6086    -8.2332
        -5.8955    -4.0518   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
```

```
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uc2(c)
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     2 chemical elements
       2.000 c                  1.000 u
     4 species in reaction
      -1.000 uc2(c)              2.00 co3-2              1.00 u+4
       -3.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       284.0199  262.4584  237.9077  215.7164
       194.1432  177.3632  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
rutherfo
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     3 chemical elements
       1.000 c                  5.000 o                 1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 rutherfo            1.00 co3-2              1.00 u+4
       1.00 h2o                 -2.00 h+                 0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -50.9527  -46.9814  -42.4561  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u(so3)2(
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     3 chemical elements
       2.000 s                  6.000 o                 1.000 u
     4 species in reaction
      -1.000 u(so3)2(            2.00 so4-2              1.00 u+4
       -1.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        62.1059   53.4448   43.5693   34.6273
        25.9158   19.1234  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u(so4)2(
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     3 chemical elements
       2.000 s                  8.000 o                 1.000 u
     3 species in reaction
      -1.000 u(so4)2(            2.00 so4-2              1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -13.2898  -11.6810   -9.8343   -8.1480
       -6.4885   -5.1797  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2so3(c
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     3 chemical elements
       1.000 s                  5.000 o                 1.000 u
     5 species in reaction
      -1.000 uo2so3(c            1.00 so4-2              1.00 u+4
       1.00 h2o                 -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -5.4053   -3.3940   -1.0853    1.0229
        3.0977    4.7340  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2so4(c
    entered by a.neyama                    date 1991/01/01
        source phreeqe                  quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     3 chemical elements
       1.000 s                  6.000 o                 1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 uo2so4(c            1.00 so4-2              1.00 u+4
       1.00 h2o                 -2.00 h+                 0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -38.2350  -30.6214  -21.9152  -14.0031
```

```
        -6.2608   -0.1937  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2so4.2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     4 chemical elements
       1.000 s                8.000 o                1.000 u
       5.000 h
     6 species in reaction
      -1.000 uo2so4.2          1.00 so4-2             1.00 u+4
        3.50 h2o              -2.00 h+                0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -36.7144  -34.1457  -31.2138  -28.5555
      -25.9615  -23.9353  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2so4.3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     4 chemical elements
       1.000 s                9.000 o                1.000 u
       7.000 h
     6 species in reaction
      -1.000 uo2so4.3          1.00 so4-2             1.00 u+4
        4.50 h2o              -2.00 h+                0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -36.5822  -34.1457  -31.3655  -28.8457
      -26.3881  -24.4694  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
*-   duplicate name uo2so4.3
uo2so4.3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     4 chemical elements
       1.000 s                9.000 o                1.000 u
       6.000 h
     6 species in reaction
      -1.000 uo2so4.3          1.00 so4-2             1.00 u+4
        4.00 h2o              -2.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -40.7843  -34.0154  -26.2788  -19.2520
      -12.3809   -7.0011  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
(uo2)2cl
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       3.000 cl               2.000 u                4.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 (uo2)2cl          3.00 cl-               2.00 u+4
        2.50 h2o              -5.00 h+                0.75 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -45.7644  -33.0301  -18.4626   -5.2172
        7.7517   17.9212  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u2o2cl5(
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       5.000 cl               2.000 u                2.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 u2o2cl5(          5.00 cl-               2.00 u+4
        1.50 h2o              -3.00 h+                0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -2.2769    5.9983   15.4806   24.1204
       32.6009   39.2697  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u5ol2cl(
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
```

```
        source phreeqe                quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     3 chemical elements
       1.000 cl                5.000 u                12.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 u5ol2cl(          1.00 cl-                5.00 u+4
        9.50 h2o             -19.00 h+                 1.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -106.0446  -84.9085  -60.7300  -38.7461
       -17.2218   -0.3440  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
ucl3(c)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     2 chemical elements
       3.000 cl                1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 ucl3(c)           3.00 cl-                1.00 u+4
       -0.25 o2(g)             0.50 h2o               -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        41.4585   43.1037   45.0087   46.7673
        48.5201   49.9219  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
ucl4(c)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     2 chemical elements
       4.000 cl                1.000 u
     3 species in reaction
      -1.000 ucl4(c)           4.00 cl-                1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        18.0714   21.9330   26.3656   30.4133
        34.3968   37.5383  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
ucl5(c)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     2 chemical elements
       5.000 cl                1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 ucl5(c)           5.00 cl-                1.00 u+4
        0.25 o2(g)            -0.50 h2o                1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        16.1678   24.0573   33.0967   41.3322
        49.4148   55.7698  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
ucl6(c)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     2 chemical elements
       6.000 cl                1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 ucl6(c)           6.00 cl-                1.00 u+4
        0.50 o2(g)            -1.00 h2o                2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        13.0153   25.0346   38.7979   51.3281
        63.6151   73.2663  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2cl(c)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     3 chemical elements
       1.000 cl                1.000 u                2.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 uo2cl(c)          1.00 cl-                1.00 u+4
        1.50 h2o              -3.00 h+                 0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -18.2988  -13.7477   -8.5402   -3.8039
         0.8351    4.4741  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
```

```
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2cl2(c
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       2.000 cl              1.000 u                2.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 uo2cl2(c          2.00 cl-              1.00 u+4
        1.00 h2o              -2.00 h+               0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -28.4293  -20.3924  -11.2003   -2.8444
         5.3346   11.7460  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2cl2.3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     4 chemical elements
       2.000 cl              1.000 u                6.000 h
       5.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 uo2cl2.3          2.00 cl-              1.00 u+4
        4.00 h2o              -2.00 h+               0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -33.9539  -26.9394  -18.9209  -11.6367
        -4.5124    1.0672  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2cl2.h
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     4 chemical elements
       2.000 cl              1.000 u                2.000 h
       3.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 uo2cl2.h          2.00 cl-              1.00 u+4
        2.00 h2o              -2.00 h+               0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -31.8022  -24.2524  -15.6194   -7.7740
        -0.0975    5.9177  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2cloh.
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     4 chemical elements
       1.000 cl              1.000 u                5.000 h
       5.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 uo2cloh.          1.00 cl-              1.00 u+4
        4.00 h2o              -3.00 h+               0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -30.7726  -23.9614  -16.1763   -9.1051
        -2.1905    3.2237  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uocl(c)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       1.000 cl              1.000 u                1.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 uocl(c)           1.00 cl-              1.00 u+4
        1.50 h2o              -3.00 h+              -0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        39.0994   40.5017   42.1280   43.6319
        45.1342   46.3385  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uocl2(c)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       2.000 cl              1.000 u                1.000 o
     5 species in reaction
```

```
     -1.000 uocl2(c)          2.00 cl-              1.00 u+4
       1.00 h2o              -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        3.1104    5.4250    8.0818   10.5079
       12.8955   14.7784  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uocl3(c)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       3.000 cl              1.000 u                1.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 uocl3(c)          3.00 cl-              1.00 u+4
       0.50 h2o              -1.00 h+               0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -6.0481   -0.6087    5.6184   11.2857
       16.8410   21.2027  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
*-   duplicate name (uo2)2cl
(uo2)2cl
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       3.000 cl              2.000 u                4.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 (uo2)2cl          3.00 cl-              2.00 u+4
       2.50 h2o              -5.00 h+               0.75 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -45.7644  -33.0301  -18.4626   -5.2172
        7.7517   17.9212  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
*-   duplicate ,name u2o2cl5(
u2o2cl5(
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       5.000 cl              2.000 u                2.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 u2o2cl5(          5.00 cl-              2.00 u+4
       1.50 h2o              -3.00 h+               0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -2.2769    5.9983   15.4806   24.1204
       32.6009   39.2697  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u3o7(bet
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       3.000 u               7.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 u3o7(bet          3.00 u+4              6.00 h2o
      -12.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -49.9172  -40.3614  -29.4258  -19.4779
       -9.7321   -2.0850  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u3o8(c)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       3.000 u               8.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 u3o8(c)           3.00 u+4              6.00 h2o
      -12.00 h+                1.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -78.4331  -62.7028  -44.7129  -28.3612
      -12.3575    0.1859  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
```

```
u4o9(bet
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       4.000 u                 9.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 u4o9(bet          4.00 u+4              8.00 h2o
      -16.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -43.6255  -32.8514  -20.5174   -9.2924
         1.7102   10.3484  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2(oh)2
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       1.000 u                 2.000 h               4.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 uo2(oh)2          1.00 u+4              3.00 h2o
       -4.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -34.8230  -27.6314  -19.4096  -11.9398
        -4.6328    1.0910  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2(po3)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       2.000 p                 8.000 o               1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 uo2(po3)          2.00 po4-3            1.00 u+4
       0.50 o2(g)             -1.00 h2o              2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -77.6746  -70.7514  -62.8377  -55.6491
       -48.6189  -43.1135  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uraninit
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       1.000 u                 2.000 o
     4 species in reaction
      -1.000 uraninit          1.00 u+4              2.00 h2o
       -4.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -6.0992   -4.8500   -3.4161   -2.1067
        -0.8181    0.1981  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo3(alph
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       1.000 u                 3.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 uo3(alph          1.00 u+4              2.00 h2o
       -4.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -31.5564  -23.8764  -15.0940   -7.1122
         0.6986    6.8197  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo3(beta
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       1.000 u                 3.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 uo3(beta          1.00 u+4              2.00 h2o
       -4.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -31.8404  -24.2054  -15.4746   -7.5399
         0.2245    6.3090  500.0000  500.0000
```

```
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo3(gamm
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       1.000 u                 3.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 uo3(gamm          1.00 u+4              2.00 h2o
       -4.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -32.3877  -24.8084  -16.1415   -8.2652
       -0.5582    5.4810  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo3.0.9h
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       1.000 u                 1.000 h                3.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 uo3.0.9h          1.00 u+4               2.50 h2o
       -4.00 h+                0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -45.2369  -44.1757  -42.9742  -41.8960
      -40.8571  -40.0572  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
schoepit
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       1.000 u                 4.000 h                5.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 schoepit          1.00 u+4               4.00 h2o
       -4.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -34.7850  -27.6974  -19.5950  -12.2341
       -5.0344    0.6047  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u2f9(c)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       9.000 f                 2.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 u2f9(c)           9.00 f-               2.00 u+4
       0.25 o2(g)             -0.50 h2o              1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -64.0307  -59.0797  -53.4132  -48.2578
      -43.2064  -39.2420  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u2o3f6(c
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       6.000 f                 2.000 u                3.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 u2o3f6(c          6.00 f-               2.00 u+4
       1.00 h2o               -2.00 h+               1.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -83.2690  -67.7608  -50.0258  -33.9068
      -18.1323   -5.7695  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u3o5f8(c
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       8.000 f                 3.000 u                5.000 o
     6 species in reaction
```

```
     -1.000 u3o5f8(c          8.00 f-                3.00 u+4
       2.00 h2o              -4.00 h+                1.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
     -123.5087 -100.5882  -74.3781  -50.5579
      -27.2486   -8.9826  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c) —
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
u4f17(c)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
      17.000 f                4.000 u
     6 species in reaction
     -1.000 u4f17(c)         17.00 f-                4.00 u+4
       0.25 o2(g)            -0.50 h2o               1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
     -123.9564 -118.6807 -112.6415 -107.1458
     -101.7594  -97.5308  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
ucl2f2(c
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       2.000 f                2.000 cl               1.000 u
     4 species in reaction
     -1.000 ucl2f2(c          2.00 f-                2.00 cl-
       1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -5.7015   -3.6150   -1.2200    0.9670
         3.1192    4.8166  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
ucl3f(c)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       1.000 f                3.000 cl               1.000 u
     4 species in reaction
     -1.000 ucl3f(c)          1.00 f-                3.00 cl-
       1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         7.2803   10.2450   13.6480   16.7555
        19.8137   22.2255  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uclf3(c)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       3.000 f                1.000 cl               1.000 u
     4 species in reaction
     -1.000 uclf3(c)          3.00 f-                1.00 cl-
       1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -18.8422  -17.6500  -16.2816  -15.0320
       -13.8022  -12.8323  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uf3(c)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       3.000 f                1.000 u
     6 species in reaction
     -1.000 uf3(c)            3.00 f-                1.00 u+4
       -0.25 o2(g)            0.50 h2o              -1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        11.0531   10.5937   10.0830    9.6355
         9.2174    8.9071  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.         0.         0.         0.
        0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uf4(c)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
```

```
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       4.000 f                  1.000 u
     3 species in reaction
      -1.000 uf4(c)             4.00 f-                1.00 u+4
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -29.6642  -29.3690  -29.0302  -28.7207
       -28.4162  -28.1761  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uf4.2.5h
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     4 chemical elements
       4.000 f                  1.000 u                5.000 h
       2.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 uf4.2.5h           4.00 f-                1.00 u+4
        2.50 h2o               -0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -26.7658  -31.4343  -36.7766  -41.6359
       -46.3960  -50.1306  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uf5(alph
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       5.000 f                  1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 uf5(alph           5.00 f-                1.00 u+4
        0.25 o2(g)             -0.50 h2o               1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -31.3221  -26.2457  -20.4352  -15.1483
        -9.9675   -5.9010  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uf5(beta
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       5.000 f                  1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 uf5(beta           5.00 f-                1.00 u+4
        0.25 o2(g)             -0.50 h2o               1.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -31.5293  -26.5797  -20.9148  -15.7608
       -10.7107   -6.7474  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uf6(c)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       6.000 f                  1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 uf6(c)             6.00 f-                1.00 u+4
        0.50 o2(g)             -1.00 h2o               2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -25.7894  -15.3004   -3.2936    7.6325
        18.3409   26.7472  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2f2(c)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       2.000 f                  1.000 u                2.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 uo2f2(c)           2.00 f-                1.00 u+4
        1.00 h2o               -2.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -25.0936  -18.2334  -10.3920   -3.2696
         3.6955    9.1497  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
```

```
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2f2.3h
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     4 chemical elements
       2.000 f                1.000 u                6.000 h
       5.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 uo2f2.3h          2.00 f-                1.00 u+4
        4.00 h2o              -2.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -46.4679  -39.9834  -32.5733  -25.8446
       -19.2671  -14.1186  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2foh(c
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     4 chemical elements
       1.000 f                1.000 u                1.000 h
       3.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 uo2foh(c          1.00 f-                1.00 u+4
        2.00 h2o              -3.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -41.3994  -34.4514  -26.5092  -19.2946
       -12.2388   -6.7132  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2foh.2
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     4 chemical elements
       1.000 f                1.000 u                5.000 h
       5.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 uo2foh.2          1.00 f-                1.00 u+4
        4.00 h2o              -3.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -41.8574  -35.2334  -27.6631  -20.7882
       -14.0667   -8.8047  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2foh.h
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     4 chemical elements
       1.000 f                1.000 u                3.000 h
       4.000 o
     6 species in reaction
      -1.000 uo2foh.h          1.00 f-                1.00 u+4
        3.00 h2o              -3.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -41.6337  -34.8494  -27.0951  -20.0521
       -13.1651   -7.7727  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uof2(c)
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       2.000 f                1.000 u                1.000 o
     5 species in reaction
      -1.000 uof2(c)           2.00 f-                1.00 u+4
        1.00 h2o              -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -18.9317  -18.2400  -17.4460  -16.7210
       -16.0075  -15.4448  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uof2.h2o
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe              quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     4 chemical elements
```

```
      2.000 f                1.000 u                2.000 h
      2.000 o
    5 species in reaction
     -1.000 uof2.h2o          2.00 f-                1.00 u+4
       2.00 h2o              -2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -19.3085  -18.8020  -18.2206  -17.6897
      -17.1672  -16.7551  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uof4(c)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
    3 chemical elements
      4.000 f                1.000 u                1.000 o
    4 species in reaction
     -1.000 uof4(c)           4.00 f-                1.00 u+4
       0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -63.7004  -55.0154  -45.0794  -36.0442
      -27.1967  -20.2581  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uofoh(c)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
    4 chemical elements
      1.000 f                1.000 u                1.000 h
      2.000 o
    5 species in reaction
     -1.000 uofoh(c)          1.00 f-                1.00 u+4
       2.00 h2o              -3.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -10.1312   -8.9840   -7.6671   -6.4647
       -5.2813   -4.3480  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uofoh.0.
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
    4 chemical elements
      1.000 f                1.000 u                2.000 h
      2.000 o
    6 species in reaction
     -1.000 uofoh.0.          1.00 f-                1.00 u+4
       2.50 h2o              -3.00 h+               -0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -11.7288  -14.9643  -18.6616  -22.0190
      -25.3008  -27.8696  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2co3
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
    3 chemical elements
      1.000 c                5.000 o                1.000 u
    6 species in reaction
     -1.000 uo2co3            1.00 co3-2             1.00 u+4
       1.00 h2o              -2.00 h+                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -48.6488  -46.9854  -45.1092  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
         0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2oh
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume    0.    cc/mol
    3 chemical elements
      1.000 h                3.000 o                1.000 u
    5 species in reaction
     -1.000 uo2oh             2.50 h2o              -4.00 h+
       1.00 u+4               0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -7.9960   -8.2197   -8.4931  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.        0.        0.        0.
```

```
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
nauo3
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       3.000 o                1.000 na                1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 nauo3             2.50 h2o               -5.00 h+
        1.00 na+               1.00 u+4                0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.6060    0.3823    0.1089  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
na2uo4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       4.000 o                2.000 na                1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 na2uo4            3.00 h2o               -6.00 h+
        2.00 na+               1.00 u+4                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -4.1308   -2.4674   -0.5912  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
na3uo4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       4.000 o                3.000 na                1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 na3uo4            3.50 h2o               -7.00 h+
        3.00 na+               1.00 u+4                0.25 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       43.3020   43.0783   42.8049  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
na2u2o7
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       7.000 o                2.000 na                2.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 na2u2o7           5.00 h2o              -10.00 h+
        2.00 na+               2.00 u+4                1.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -45.7457  -42.4188  -38.5663  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
cauo4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       4.000 o                1.000 ca                1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 cauo4             3.00 h2o               -6.00 h+
        1.00 ca+2              1.00 u+4                0.50 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -18.2388  -16.5754  -14.6992  500.0000
      500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
mguo4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       4.000 o                1.000 mg                1.000 u
     6 species in reaction
      -1.000 mguo4             3.00 h2o               -6.00 h+
        1.00 mg+2              1.00 u+4                0.50 o2(g)
```

```
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -10.9348    -9.2714    -7.3952   500.0000
       500.0000   500.0000   500.0000   500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo23po42
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                 quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     3 chemical elements
       3.000 u              14.000 o                2.000 p
     6 species in reaction
      -1.000 uo23po42          3.00 u+4              -6.00 h+
       1.50 o2(g)              3.00 h2o               2.00 po4-3
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -158.2381 -146.3242 -132.7482  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
h2uo2po4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                 quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     4 chemical elements
       2.000 u                2.000 h               12.000 o
       2.000 p
     6 species in reaction
      -1.000 h2uo2po4          2.00 u+4              -2.00 h+
       1.00 o2(g)              2.00 h2o               2.00 po4-3
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
      -120.9654 -113.0228 -103.9721  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uo2hpo4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                 quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     4 chemical elements
       1.000 u                1.000 h                6.000 o
       1.000 p
     6 species in reaction
      -1.000 uo2hpo4           1.00 u+4              -1.00 h+
       0.50 o2(g)              1.00 h2o               1.00 po4-3
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -60.9127  -56.9414  -52.4160  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
uhpo42
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                 quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     4 chemical elements
       1.000 u               10.000 h               12.000 o
       2.000 p
     5 species in reaction
      -1.000 uhpo42            1.00 u+4               4.00 h2o
       2.00 h+                 2.00 po4-3
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -51.4700  -51.4700  -51.4700  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
caupo4
    entered by a.neyama                 date 1991/01/01
        source phreeqe                 quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     5 chemical elements
       1.000 u                1.000 ca               4.000 h
      10.000 o                2.000 p
     5 species in reaction
      -1.000 caupo4            1.00 u+4               1.00 ca+2
       2.00 h2o                2.00 po4-3
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -54.1400  -54.1400  -54.1400  500.0000
       500.0000  500.0000  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
```

```
endit.
gases
co2(g)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       2.000 o                1.000 c
     4 species in reaction
      -1.000 co2(g)           -1.00 h2o              1.00 co3-2
       2.00 h+
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       -18.3129  -18.1461  -18.2155  -18.5585
       -19.2275  -20.0751  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
o2(g)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     1 chemical elements
       2.000 o
     2 species in reaction
      -1.000 o2(g)            1.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.9941    0.0172   -1.1704   -2.3307
        -3.5612   -4.6096  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
h2(g)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     1 chemical elements
       2.000 h
     3 species in reaction
      -1.000 h2(g)            -0.50 o2(g)            1.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        45.2866   41.5514   37.2970   33.4501
        29.7084   26.7965  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
n2(g)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     1 chemical elements
       2.000 n
     5 species in reaction
      -1.000 n2(g)             2.00 no3-             2.00 h+
      -2.50 o2(g)             -1.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        -3.7582   -2.5830   -1.0683    0.5044
         2.2738    3.8639  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
h2s(g)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       1.000 s                2.000 h
     4 species in reaction
      -1.000 h2s(g)            1.00 so4-2            2.00 h+
      -2.00 o2(g)
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       135.7304  124.5246  111.7945  100.3215
        89.2079   80.5989  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
         0.         0.         0.         0.
         0.         0.         0.         0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
ch4(g)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe                quality unknown
        volume    0.    cc/mol
     2 chemical elements
       1.000 c                4.000 h
     5 species in reaction
      -1.000 ch4(g)            1.00 co3-2            2.00 h+
      -2.00 o2(g)              1.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
       133.8387  122.2746  109.1333   97.2847
        85.8016   76.9012  500.0000  500.0000
```

```
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
nh3(g)
    entered by a.neyama                date 1991/01/01
        source phreeqe               quality unknown
        volume     0.     cc/mol
     2 chemical elements
       1.000 n                3.000 h
     5 species in reaction
      -1.000 nh3(g)            1.00 no3-              1.00 h+
       -2.00 o2(g)             1.00 h2o
*    log k grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        61.7703   58.1456   54.1176   50.5909
        47.2976   44.8560  500.0000  500.0000
*    delvr grid (0-25-60-100/150-200-250-300 c)
        0.        0.        0.        0.
        0.        0.        0.        0.
* input phreeqe data-base file phreeqe00.tdb
+-----------------------------------------------------------------------
endit.
solid solutions
endit.
```

references

wolery t.j. 1983. eq3nr a computer program for geochemical aqueous speciation-solubility calculations userss guide and documentation. lawrence livermore nat.lab. livermore ca 94550 report ucrl-53414

parkhurst d.l. thorstenson d.c. and plummer l.n. 1980 (revised 1985). phreeqe - a computer program for geochemical calculations. u.s.geological survey report water-resources investigations 80-96

stop.