

高速炉燃料ピンのFCCI(燃料一被覆管化学的相互作用) に関する調査報告(I)

Review of FCCI (fuel-cladding chemical interaction)
in LMFBR fuel pins (I)

燃料ピン内の化学とFCCIの機構

Chemistry in fuel pins and mechanism of FCCI

January 1980

動力炉・核燃料開発事業団
東海事業所

TOKAI WORKS

POWER REACTOR & NUCLEAR FUEL DEVELOPMENT CORPORATION

複製あるいは入手については、下記にお問い合わせください。

茨城県那珂郡東海村 〒 319-11

動力炉・核燃料開発事業団

東海事業所技術部研究管理課 ☎ 東海 (02928) 2-1111

Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation.

Enquiries about copyright and reproduction should be addressed to ;

Tokai Works, Power Reactor and Nuclear Fuel Development

Corporation,

Tokai, Ibaraki, Post No.319-11, Japan.

高速炉燃料ピンのFCCI (燃料—被覆管化学的相互作用)
に関する調査報告 (I)

Review of FCCI (fuel-cladding chemical interaction)
in LMFBR fuel pins (I)

燃料ピン内の化学とFFCIの機構

Chemistry in fuel pins and mechanism of FCCI

実施責任者	本田 裕 *
報告者	八登 唯夫 *
	小無 健司 *
	金子 洋光 *

要 旨

燃料ピン内の化学において最も重要な因子は、温度と酸素ポテンシャルである。典型的なLMFBR燃料の酸素ポテンシャルは、燃料表面で約-100Kcal/molである。Csは燃料との反応により $Cs_2(U, Pu)O_4$ を生成する。また、軸方向に移動してブランケット UO_2 との反応により Cs_2UO_4 を生成する。被覆管内面では Cs_xCrO_4 (x=3, 4)および $CsOH$ が生成する可能性があり、これらは被覆管の腐食において特に重要である。被覆管成分のヨウ化物 MI_2 (M=Fe, Cr, Ni)およびテルル化物 MTe_n は被覆管成分の質量移行に関連して重要である。

FCCIの機構としては、今までに報告されている $CsOH$, $Cs-Te$, Cs による粒界腐食のモデルと I , $Cs-Te$ による被覆管成分の質量移行のモデルの紹介を行った。

Review of FCCI (fuel-cladding chemical interaction)
in LMFBR fuel pins (I)

Chemistry in fuel pins and mechanism of FCCI

Yutaka HONDA*
Tadao YATO*
Kendhi KONASHI*
Hiromitsu KANEKO*

Abstract

Temperature and oxygen potential are the most important factors in determining chemical states within fuel pins. Oxygen potential at the fuel surface is about -100 kcal/mol in the typical LMFBR fuels. $Cs_2(U, Pu)O_4$ is produced by reaction of cesium with the fuel. Cesium migrates axially to the blanket and Cs_2UO_4 is formed by reaction of cesium with the blanket UO_2 . It is possible that Cs_xCrO_4 ($x=3, 4$) and/or $CsOH$ are produced at the cladding inner surface, and these compounds are especially important with regard to cladding corrosion. Cladding components iodides MI_2 ($M=Fe, Cr, Ni$) and tellurides $MTen$ are important in a viewpoint of mass transport of cladding components.

For the mechanism of FCCI, some models which are currently reported are reviewed. The models are for intergranular attack by $CsOH$, Cs-Te and Cs, and for cladding component mass transport by I and Cs-Te.

* Plutonium Fuel Division, Research and Development Section Tokai Works,
Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corp.

目 次

まえがき	1
第1章 燃料ピン内の化学	2
1. 燃料に関するデータ	2
1.1 燃料の酸素ポテンシャル	2
1.2 酸素再分布	3
2. FPに関するデータ	5
2.1 Cs化合物	6
(1) Cesium oxides	6
(2) Cesium uranates (urano-plutonates)	6
(3) Cesium chromates	7
(4) Cesium molybdates	8
(5) Cesium hydroxides	8
2.2 I 化合物	9
2.3 Te 化合物	10
第2章 FCCIの機構	33
1. 被覆管の粒界腐食	33
1.1 CsOHによる腐食	34
1.2 Cs-Teによる腐食	37
1.3 Csによる腐食	41
1.4 まとめ	44
2. 被覆管成分の燃料表面への移動	45
2.1 Iによる輸送	45
2.2 Cs-Te mixtureによる輸送	46
2.3 まとめ	50
あとがき	51
参考文献	52
付録A. 热力学データ	A.1
付録B. 热力学関係式	A.27
付録C. 燃烧度とFP収率	A.30

まえがき

高速増殖炉用ステンレス鋼被覆管は、照射下でF Pが介在した燃料との化学的相互作用(F C C I)により内面腐食を受ける事が知られている。この様な被覆管の内面腐食は、燃料ピンの寿命低下の大きな原因となるため、現在までに数多くの研究が行われてきた。

F C C Iの研究には、次の4つの面が存在する。

- ① 照射データの調査、解析
- ② 炉外試験による温度、酸素ポテンシャル等のパラメータによる特性評価
- ③ 腐食機構の解明およびモデル化
- ④ 腐食低減法の確立

ここで、F C C Iの機構については、最近幾つかのまとまったモデルが報告されている。それらの多くは燃料ピン内の化学的状態を熱力学データを用いて解析を行っている。そこで本報告の第1章では、それらの熱力学基礎データを統一的にまとめ、さらに、それらのデータを用いてF C C Iに関連するF Pの挙動を推定する場合の基礎となる取扱いを示す。第2章ではF C C Iの機構として報告されている幾つかの代表的なモデルの紹介を行う。

第1章 燃料ピン内の化学

FCC1を評価する上で、燃料ピン内、特に被覆管内面の化学的状態を把握する事が基本的に重要である。

本章では、FCC1を決定する主要な因子である燃料の酸素ポテンシャルとCs, I, Te等のFCC1に関与すると考えられるFPについての熱力学データをレビュー、合わせて若干の考察を行う。

1. 燃料に関するデータ

FCC1の最も重要な因子は、燃料表面-被覆管内面での温度と酸素ポテンシャルである。典型的なLMFBR燃料では、燃料カラム方向の温度は燃料表面で675~1000°C被覆管内面で450~675°Cである。酸素ポテンシャルは燃料の組成(O/M, Pu含量)と温度により一義的に決まるが、照射下では急激な温度勾配により径方向に酸素再分布が起り、初期O/Mは低くとも燃料表面のO/Mはほぼ2に近い値となる。

1.1 燃料の酸素ポテンシャル

混合酸化物燃料(U, Pu)O₂の酸素ポテンシャルは多くの研究者により測定が行われている。それらの主要なものとしてはMarkin-McIver⁽¹⁾によるEMF法による測定、Javed et al.⁽²⁾, Woodley⁽³⁾, Swanson⁽⁴⁾, Chilton et al.⁽⁵⁾, Tetenbaum⁽⁶⁾などのH₂/H₂OあるいはCO/CO₂ガス平衡法による測定があげられる。データ間の一一致は必ずしも良くなく10~20Kcal/mol O₂のバラツキが存在する。Woodley et al.⁽⁷⁾は最近、熱重量法(TGA)とEMF法の両方を用いた測定によりかなり信頼性の高いデータを報告している。酸素ポテンシャルの評価には、上記の実測定の他に幾つかの理論に基づくモデルが報告されている。

Blackburn et al.^(8,9)は固相中に金属イオンとしてU²⁺, U⁴⁺, U⁶⁺, Pu²⁺, Pu³⁺, Pu⁴⁺が存在し、それらがある酸素分圧下でO²⁻と平衡していると仮定して、質量作用則、固相酸化物の生成自由エネルギー、相境界データを基にしたモデルを提出している。Blackburn et al.のモデルによる計算値は図1-1に示すが、実測データに比べてやや大きい。

Breitung⁽¹⁰⁾, Catlow⁽¹¹⁾らは亜化学量論組成の燃料(U_{1-y}Pu_y)O_{2-x}について、格子欠陥のモデルより

$$\frac{2x}{y-2x} = K P_{O_2}^{-1/4} \quad (1-1)$$

を導いた。BreitungはさらにMarkin-McIver等の実測値を(1-1)式にフィッティングする事により酸素ポテンシャルの半経験式

$$\Delta \bar{G}_{O_2} (x, y, T) = 2.3 RT \left[-4 \log \frac{2x}{y-2x} - 5.89 - 3.514 \cdot 10^4 T + 5.44 \cdot 10^{-3} T \right] \quad (1-2)$$

を導いた。Breitungは同様に $(U_{1-y} Pu_y) O_{2+x}$, $(U_{1-y} Pu_y) O_{2.0}$ に対し

$$\Delta \bar{G}_{O_2} (x, y, T) = 2.3 RT \left[2 \log \frac{2x}{1-y-2x} - 1.675 \cdot 10^4 T + 6.95 \right] \quad (1-3)$$

$$\Delta \bar{G}_{O_2} (x=0, y, T) = 2.3 RT \left[\frac{4}{3} \log \frac{y}{1-y} + 2.67 - 2.288 \cdot 10^4 T + 1.813 \cdot 10^{-3} T \right] \quad (1-4)$$

を求めており。これらの式からの計算値は最近のWoodley et al.⁽⁷⁾のデータと良く一致し酸素ポテンシャルを求める場合に非常に有用である。図1-2に計算結果を示す。

1.2 酸素再分布

酸化物燃料は照射の比較的初期に燃料中心（約2000°C）から表面（約1000°C）にかけての急激な温度勾配により、酸素の再分布を起し、O/M<2の燃料では中心から表面に、O/M>2の燃料では、逆に表面から中心に酸素が移動する。酸素再分布を評価するモデルは大きく分けて3つがあげられる。第1のモデルはMarkin-Rand-Roberts^(12, 13)による気相輸送機構モデルである。彼らは燃料ピン内に存在する不純物CとH₂から生成するCO-CO₂あるいはH₂-H₂Oが酸素の輸送媒体として働くと考えた。定常状態では径方向のCO-CO₂比あるいはH₂/H₂O比が一定になるとして図1-3に示す計算結果を得ている。この結果は定性的には炉内挙動と良く一致する。しかし、O/M<2の燃料については、CO₂またはH₂Oの分在が低く、これらを輸送媒体とする機構は考えにくい。第2のモデルは温度勾配下の熱拡散にもとづくAitken⁽¹⁴⁾のモデルである。彼は酸素輸送が固相と気相の両方で起こると考え不可逆過程の熱力学を用いる事により現象論的な関係式として次式を導いた。

$$\ln X = Q^*/RT + C \quad (1-5)$$

ここで、Xは化学量論組成からのずれ、Q*は酸素の輸送熱、Cは定数である。Aitkenの機構はO/M<2では気相中のCO₂あるいはH₂Oの流れと固相中の酸素の流れが動的な均衡にあり、O/M≥2では気相輸送が支配的となり、Markin-Rand-Robertsのモデルと一致する。輸送熱Q*として炉外温度勾配実験より求めた値

$$Q^* = -2.25/\bar{x}^2 \text{ cal/mol} \quad \text{for } O/M < 1.98$$

$$Q^* = -30 \text{ Kcal/mol} \quad \text{for } O/M = 1.98 - 2.00 \quad (1-6)$$

を用いて計算を行った結果を図 1-4 に示す。また、Bober-Schumacher^{(15), (16)}は燃料の高密度（柱状晶）領域では固相拡散が支配的であると仮定して $O/M < 2$, $O/M > 2$ 各々に対して酸素空孔、格子間酸素の熱拡散を考え Aitken と同等な式を導いている。第 3 のモデルは Blackburn-Johnson⁽¹⁸⁾の拡散モデルである。彼らは径方向の酸素活量（原子状酸素分圧）の勾配により酸素が固相拡散するとして計算を行った。このモデルでは酸素輸送の駆動力として濃度勾配しか考えていない点で Aitken のモデルと異なる。図 1-5⁽¹⁹⁾には Aitken モデルと Blackburn-Johnson モデルの計算結果の比較を示す。

2. FPに関するデータ

FCClに関するFPとしてはCs, Te, Iなどが知られている。これらのFPの燃料ピン内での化学形態および挙動は熱力学的考察によりある程度推定する事が可能である。従って、ここではCs, IおよびTe化合物について報告されている熱力学データをまとめ、さらにそれらのデータを用いてFCClを評価する上での基礎となる熱力学的取扱いを示す。

Cs化合物の中では、ステンレス鋼被覆管に対する腐食作用の点から酸化物（および酸素を含む固溶体）、水酸化物、ウラン酸塩、モリブデン酸塩が重要であり、被覆管との反応生成物の点からクロム酸塩が重要である。

IおよびTeはいずれもCsと安定な化合物を作るが、被覆管成分の質量移行に関連してFe, Cr, Niとの反応も考える必要がある。

これらのFP化合物の融点と沸点を表1-1に示す。Cs化合物の熱力学データは元素状態、水酸化物についてはJANAF熱力学関数表から⁽²⁰⁻²²⁾、酸化物、ウラン酸塩、クロム酸塩、モリブデン酸塩についてはANLのChem. Eng. Div.とChem. Div.の研究者らによる一連の熱量測定結果から得る事ができる。一方、IおよびTe化合物に関するデータは、その多くをBarin et al.⁽²³⁻³⁹⁾による熱力学関数表から得る事ができる。これらのデータは付録Aに示す。Cs化合物については最近、高橋、Fee et al.^(40, 41)、Götzmann et al.⁽⁴²⁻⁴⁶⁾らがそれぞれこれらのデータをまとめているが、データ間にはわずかな不一致も存在するので、付録Aのデータから再計算を行った結果を標準生成自由エネルギーとして表1-2に示す。

IおよびTe化合物については、Barin et al.のデータは標準自由エネルギーとして与えられているので、次の関係式

$$\Delta G_f^\circ(MX_n) = G^\circ(MX_n) - G^\circ(M) - nG^\circ(X)$$

から標準生成自由エネルギーに変換を行い表1-2にまとめた。

次に、これらのデータを用いた熱力学的取扱い例を示す。

2.1 Cs 化合物

(1) Cesium oxides

Knights et al.⁽⁴⁹⁾ は、最近 EMF 法による研究から図 1-6 に示す Cs-O 系状態図を報告している。

Cs(l) 中への酸素の溶解度は非常に大きく、室温で約 18 at.%, 400°C では、約 30 at.% にも達する。この値は以前に Maiya et al.⁽⁵⁰⁾ が報告した式

$$\log \underline{O}_{Cs} (\text{w t. \%}) = 0.9382 - 179.5/T \quad (1-7)$$

\underline{O}_{Cs} = oxygen concentration in cesium

からの計算値と良く一致する。Knights et al. は、また、溶存酸素量が 3.3-16.7 at.% の Cs(l) の酸素ポテンシャル測定結果を Henry の法則を用いる事により、

$$\Delta G_{O_2} (J/mol) = -583,800 + 156T + 2RT (2140/T - \frac{1}{3}) \ln No \quad (1-8)$$

No = atomic fraction of oxygen

と求めた。さらに、Duhem-Margules の関係を応用した次式

$$\Delta G_f^\circ (Cs_2O) = 2 \int_0^{1/2} \frac{1/2 \Delta \bar{G}_{O_2}}{N_{Cs}^2} d No \quad (1-9)$$

$$\Delta \bar{G}_{Cs} = - \int_{-\infty}^{1/2 \Delta G_{O_2}} \frac{No}{N_{Cs}} d (1/2 \Delta \bar{G}_{O_2}) \quad (1-10)$$

$$\Delta G_f^\circ (Cs_2O) = 2 \Delta \bar{G}_{Cs} + (1/2 \Delta \bar{G}_{O_2}) \quad (1-11)$$

から、Cs-Cs₂O 領域での $\Delta \bar{G}_{O_2}$ の外挿値および $\Delta \bar{G}_{Cs}$ を求め、500°C の場合の結果を図 1-7 の通り報告している。

(2) Cesium uranates (urano-plutonates)

Cesium uranates は 10 種類の化合物が存在する事が Cordfunk et al.^(51, 52) の相研究により知られている。ここで燃料ピン内で存在する化合物は Cs₂U₄O₁₂ とされていたが、最近、Fee et al.⁽⁴³⁻⁴⁵⁾ は Cs と UO₂ の反応を調べ、合わせて熱力学的評価により Cs₂UO₄ が安定相であると報告している。10 種類の uranates は図 1-8 に示すが、これらの中で UO₂ と共存しうる相は Cs₂UO₄, Cs₂U₂O₇, Cs₂U₄O₁₂ の 3 つである。従って、図 1-9 に示す各相領域における平衡式より温度、酸素分圧（ポテンシャル）、Cs 分圧の関係を求め事ができる。^{*} 例えば、Cs₂UO₄-UO_{2+x} 2 相領域では、

* 表 1-2 から計算を行った結果を付録 B に示す。

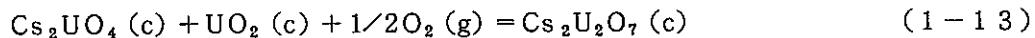


より、平衡 Cs 分圧は温度と酸素ポテンシャルから求められる。

$$2RT\ell nP_{\text{Cs}} = \Delta G_f^\circ(\text{Cs}_2\text{UO}_4, \text{c}) - \Delta G_f^\circ(\text{UO}_2, \text{c}) - 2\Delta G_f^\circ(\text{Cs}, \text{g})$$

$$-RT\ell nP_{\text{O}_2} \quad (1-12\text{a})$$

同様の式は $\text{Cs}_2\text{U}_2\text{O}_7-\text{UO}_{2+\infty}$ 及び $\text{Cs}_2\text{U}_4\text{O}_{12}-\text{UO}_{2+\infty}$ 2 相領域についても得られる。次に 3 相領域については、例えば $\text{Cs}_2\text{UO}_4-\text{Cs}_2\text{U}_2\text{O}_7-\text{UO}_{2+\infty}$ 領域では、



$$1/2RT\ell nP_{\text{O}_2} = \Delta G_f^\circ(\text{Cs}_2\text{U}_2\text{O}_7, \text{c}) - \Delta G_f^\circ(\text{Cs}_2\text{UO}_4, \text{c}) - \Delta G_f^\circ(\text{UO}_2, \text{c})$$

$$(1-13\text{a})$$

より、酸素ポテンシャル及び Cs 分圧を温度の関数として求める事ができる。他の 3 相領域についても同様である。図 1-10 には Fee et al.⁽⁴⁵⁾ の計算結果を示す。図 1-10 より通常の燃料ピン内では Cs_2UO_4 が生成する事がわかる。以上は Cs と UO_2 との反応について見て来たが混合酸化物 (U, Pu) O_2 との反応の場合は urano-plutonates が生成すると考えられる。urano-plutonates に関する熱力学データは存在しないが、今、生成自由エネルギーの値が UO_2 と (U, Pu) O_2 で、また、uranates と urano-plutonates で変わらないと仮定すれば、図 1-10 は Cs と (U, Pu) O_2 の反応の場合にも変わらない。

図 1-10 より燃料ピン内の Cs の挙動を考えると、燃料内から放出された Cs は燃料表面で $\text{Cs}_2(\text{U, Pu})\text{O}_2$ を生成する。燃料と UO_2 ブランケットの境界付近では、燃料より UO_2 の酸素ポテンシャルが高い事により、平衡 Cs 圧は UO_2 より燃料側で高い。従って、Cs は燃料から UO_2 ブランケットへと移動し、そこで UO_2 と反応する事により UO_2 部に蓄積してゆく。Cs 移動は温度勾配に沿って燃料カラム全長にわたっても起こるが、低 O/M 燃料程 Cs 圧は高いために移動は顕著となる。次に、平衡 Cs 分圧を計算すると $\Delta \bar{G}_{\text{O}_2} = -100 \text{ kcal/mol}$ 、 $T = 1,273 \text{ K}$ では $P_{\text{Cs}} = 2 \times 10^{-2} \text{ atm}$ であり、この条件では Cs は、液相としては存在しない。

(3) Cesium chromates

cesium chromates は FCC I の腐食生成物としての可能性から重要であり、幾つかの熱力学的取扱いがなされて来た。しかし、そこでの解析に用いられた熱力データは十分

信頼性の高いものであるとは言えなかった。これに対し、最近、Fee et al.⁽⁴⁶⁾ は Lyon et al.⁽³¹⁾ O'Hare et al.^(32, 37) のデータから比較的信頼度の高い解析を行っている。

図 1-11 と図 1-12 には Fee et al. の報告による状態図と $\Delta\bar{G}_{O_2}$ -T-P_{Cs} 関係図を示す。彼らはこの結果をもとに燃料の O/M が 2.0 付近では Cs₄CrO₄ の生成が有利であるとしている。一方、Götzmann⁽⁴⁸⁾ は同じデータに基づく計算から Cs₄CrO₄ の生成を示唆しているが、この見解の差は Götzmann の想定した $\Delta\bar{G}_{O_4}$ が Fee et al. より低いためと考えられる。

(4) Cesium molybdates

cesium molybdates で重要なもののとしては Cs₂MoO₄ と Cs₂Mo₂O₇ の 2 つがあげられる。これらについて表 1-2 のデータより $\Delta\bar{G}_{O_2}$ -T-P_{Cs} 関係を求めた結果を図 1-13 に示す。Mo は固体 FP として燃料内部で元素状態あるいは酸化物で存在するが、図より Cs(g) は燃料内部で Mo あるいは MoO₂ との反応により Cs₂MoO₄ (c) を生成する事が推定できる。⁽⁵⁶⁾ また、Cs₂MoO₄ は蒸気圧が高く、Johnson によれば

$$\log P_{Cs_2MoO_4} \text{ (atm)} = 6.58 - 1.40 \times 10^4 / T \quad (1-14)$$

(1070 - 1170 °K)

である。2000 °Kまで (1-14) 式を外挿すると蒸気圧は 0.38 atm にもなる。従って Cs₂MoO₄ は燃料内からの Cs, Mo の移行に重要な役割を果たす事が考えられる。⁽⁵⁷⁾

(5) Cs hydroxides

CsOH は被覆管に対する腐食性が強く、幾つかの熱力学的評価により燃料ピン内での存在の可能性が指摘されている。^(47, 48, 58) CsOH の生成には有意な量の水素が必要であるが、Na 冷却材中の水素濃度が 0.5 ppm (by weight) では燃料ピン内の水素圧は約 10⁻⁶ atm である。^(47, 48) 今、Cs(g) と O₂, H₂ の反応により CsOH(g) が生成する場合



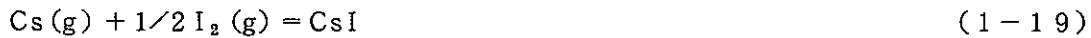
$$RT \ln P_{CsOH} = \Delta G_f^\circ(Cs, g) - \Delta G_f^\circ(CsOH, g) \\ + RT \ln P_{Cs} + 1/2 RT \ln P_{O_2} + 1/2 RT \ln P_{H_2} \quad (1-15a)$$

である。CsOH(l) が生成する場合及び Cs(l) からの反応の場合についても同様の式が得られる。図 1-14 には CsOH(l) が生成する場合の $\Delta\bar{G}_{O_2}$ -T-P_{Cs} 関係図を示す。但し、P_{H2} = 10⁻⁶ atm である。図 1-14 より例えば、 $\Delta\bar{G}_{O_2} = -100 \text{ kcal/mol}$,

$P_{Cs} = 10^{-2}$ atm の条件下では、900°K 以下の温度で CsOH(l) が生成する事が予想できる。次に、 $P_{H_2} = 10^{-6}$ atm, $\Delta \bar{G}_{O_2} = -100 \text{ kcal/mol}$ における CsOH の蒸気圧を図 1-15 に示す。1273°K, $P_{Cs} = 10^{-2}$ atm では $P_{CsOH} = 10^{-4}$ atm で、900°K, $P_{Cs} = 10^{-6}$ atm では $P_{CsOH} = 10^{-6}$ atm である。

2.2 I 化合物

I は Cs に比べて核分裂収率が小さく（約 1/10），また，Cs と容易に反応して安定な CsI を生成すると考えられる。しかし，I は軽水炉の S C C において重要である事が知られているほか，⁽⁵⁹⁾ F B R においても被覆管成分の質量移行 ^(48, 60, 61) に関連して I の挙動は重要である。燃料内から放出された I は，被覆管内面で Cs と反応して固相ないし液相の CsI を生成する。



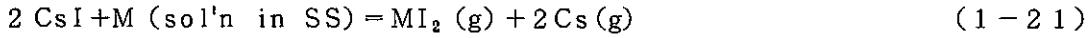
この時の平衡 I_2 分圧は

$$1/2 RT \ln P_{I_2} = \Delta G_f^\circ(CsI) - \Delta G_f^\circ(Cs, g) - RT \ln P_{Cs} \quad (1-20)$$

から求める事ができる。表 1-2 のデータを用いて $P_{I_2}-T-P_{Cs}$ の関係を求めた結果を図 1-16 に示す。1273°K, $P_{Cs} = 10^{-2}$ atm では $P_{I_2} = 10^{-15}$ atm と極めて小さい。

次に，I と被覆管との反応の可能性について見てゆく。

ステンレス鋼成分が CsI との反応



により，蒸発性のヨウ化物を生成する場合，その蒸気圧は

$$\begin{aligned} RT \ln P_{MI_2} &= 2 \Delta G_f^\circ(CsI) - \Delta G_f^\circ(MI_2, g) - 2 \Delta G_f^\circ(Cs, g) \\ &\quad + RT \ln a_M - 2 RT \ln P_{Cs} \end{aligned} \quad (1-22)$$

で与えられる。ここで， a_M はステンレス鋼成分の活量であり，濃度に等しいと仮定すると 316 ステンレス鋼では $a_{Fe} = 0.67$, $a_{Cr} = 0.18$, $a_{Ni} = 0.13$ である。表 1-2 のデータから P_{Cs} の関数として幾つかの温度における P_{MI_2} を求めた結果を図 1-17, 18, 19 に示す。900°K, $P_{Cs} = 10^{-2}$ atm では $P_{FeI_2} = 10^{-27}$ atm, $P_{CrI_2} = 10^{-28}$ atm, $P_{NiI_2} = 10^{-33}$ atm と極めて小さい。Cs 分圧が小さいと MI_2 分圧は大きくなるが，それでも 900°K, $P_{Cs} = 10^{-8}$ atm で $P_{FeI_2} = 10^{-15}$ atm, $P_{CrI_2} = 10^{-16}$ atm, $P_{NiI_2} = 10^{-21}$ atm と小さい。従って，熱力学的には I による被覆管成分の質量移行は可能性が少ないと考えられる。

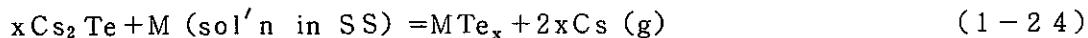
* 核分裂収率は付録 C に示す。

2.3 Te 化合物

TeはIと同様にCsと比べて核分裂収率が小さく(約1/6), また, Csとの反応により安定な化合物 Cs_2Te を生成する。



Cs_2Te はCsIと同様に, 被覆管成分の質量移行に関連して重要である。^(48, 62, 63) Cs_2Te とステンレス鋼の反応



により, MTe_x が生成して Cs_2Te 中に溶解する場合, その活量 a_{MTe_x} は

$$\begin{aligned} RT\ln a_{MTe_x} &= x\Delta G_f^\circ(Cs_2Te) - \Delta G_f^\circ(MTe_x) - 2x\Delta G_f^\circ(Cs, g) \\ &\quad + RT\ln a_M + xRT\ln a_{Cs_2Te} - 2xRT\ln P_{Cs} \end{aligned} \quad (1-25)$$

で与えられる。ここで, Cs_2Te 中の MTe_x の濃度は非常に小さいと考えられるので, Cs_2Te の活量を1と仮定して表1-2のデータから a_{MTe} を P_{Cs} の関数として求めた結果を図1-20, 21, 22に示す。900°K, $P_{Cs} = 10^{-2}$ atmでは $a_{FeTe09} = a_{OrTe11} = 10^{-9}$, $a_{NiFe} = 10^{-10}$ と非常に小さく, Cs_2Te とステンレス鋼の反応の可能性は少ない。これに対し, P_{Cs} が小さい場合には a_{MTe} は1に近づき, 反応の可能性も考えられる。但し, この場合には a_{Cs_2Te} の変化も考慮に入れたより厳密な解析が必要である。

Table 1-1. Melting points and boiling points
of cesium, iodine and tellurium
and their compounds.

	M.P. (K)	B.P. (K)	Ref.
Cs	302	952	20
Cs ₂ O	763	-	24
CsOH	588	1263	21
Cs ₂ UO ₄	-	-	
Cs ₂ U ₂ O ₇	-	-	
Cs ₂ U ₄ O ₁₂	-	-	
Cs ₂ Cr ₂ O ₇	658	-	46
Cs ₂ CrO ₄	1293	-	46
Cs ₃ CrO ₄	>1273	-	46
Cs ₄ CrO ₄	-	-	
Cs ₅ CrO ₄	-	-	
Cs ₂ MoO ₄	1213	-	23
Cs ₂ Mo ₂ O ₇	737	-	23
I ₂	387	458	40
CsI	894	1553	40
FeI ₂	860	1306	40
CrI ₂	1066	-	41
NiI ₂	1070	-	41
Te	723	1282	41
Cs ₂ Te	953	-	62
FeTe _{0.9}	1200	-	41
CrTe _{1.1}	-	-	
NiTe	800	-	41

Table 1-2. Standard free energies of formation of compounds related to cesium chemistry.

	ΔG_f° cal/mol	Temp. Range K	Ref.
Cs(1)	-15510+16.4T	950-1500	20
Cs(g)	16700-17.6T	600-950	20
Cs ₂ O(c)	-83570+33.14T	298-763	25
CsOH(c)	-99740+37.4T	298-588	21
CsOH(1)	-95440+29.41T	588-950	21
	-108810+43.55T	950-1500	21
CsOH(g)	-63470+3.32T	588-950	21
	-80010+20.74T	950-1500	21
Cs ₂ UO ₄ (c)	-460400+98.25T	298-950	39
	-491420+131.05T	>950	
Cs ₂ U ₂ O ₇ (c)	-764600+157T	298-950	39
	-795620+189.8T	>950	
Cs ₂ U ₄ O ₁₂ (c)	-1331000+260.5T	298-950	43
	-1362000+293.3T	>950	
Cs ₂ Cr ₂ O ₇ (c)	-499790+144.62T	298-950	37
	-530810+177.42T	>950	
Cs ₂ CrO ₄ (c)	-341780+89.7T	298-950	31, 32
	-372800+122.5T	>950	
Cs ₃ CrO ₄ (c)	-368710+93.93T	298-950	46
	-415240+143.13T	>950	
Cs ₄ CrO ₄ (c)	-379450+98.23T	298-950	46
	-441490+163.83T	>950	
Cs ₅ CrO ₄ (c)	-383840+102.53T	298-950	46
	-461390+184.53T	>950	
Cs ₂ MoO ₄ (c)	-362000+86.19T	298-950	24
	-393020+119.0T	>950	
Cs ₂ Mo ₂ O ₇ (c)	-550300+144.7T	298-950	29
	-581320+177.5T	>950	
CsI(c)	-88910+23.33T	458-894	40
CsI(1)	-75800+9.31T	894-950	40
	-94560+28.92T	950-1400	40
FeI ₂ (c)	-41150+28.77T	700-860	40

	ΔG_f° cal/mol	Temp. Range K	Ref.
FeI ₂ (g)	4880-12.93T 590-9.13T	700-1184 1184-1306	40 40
CrI ₂ (c)	-51320+24.84T	700-1066	40
CrI ₂ (g)	15030-24.9T	943-1054	40, 65
NiI ₂ (c)	-34950+34.14T	700-1070	40
NiI ₂ (g)	20100-9.25T		48
Cs ₂ Te	-75000+14T		48
FeTe _{0.9} (c)	-11820+6.26T	723-1200	41
CrTe _{1.1}	-22600+5.4T		48
NiTe(c)	-17170+10.02T	723-800	41
H ₂ O(g)	-58940+13.0T	600-1200	20
UO ₂ (c)	-259300+42.54T	298-1400	45
Cr ₂ O ₃ (c)	-269130+60.93T	298-2100	22
MoO ₂ (c)	-139530+41.46T	298-1500	20

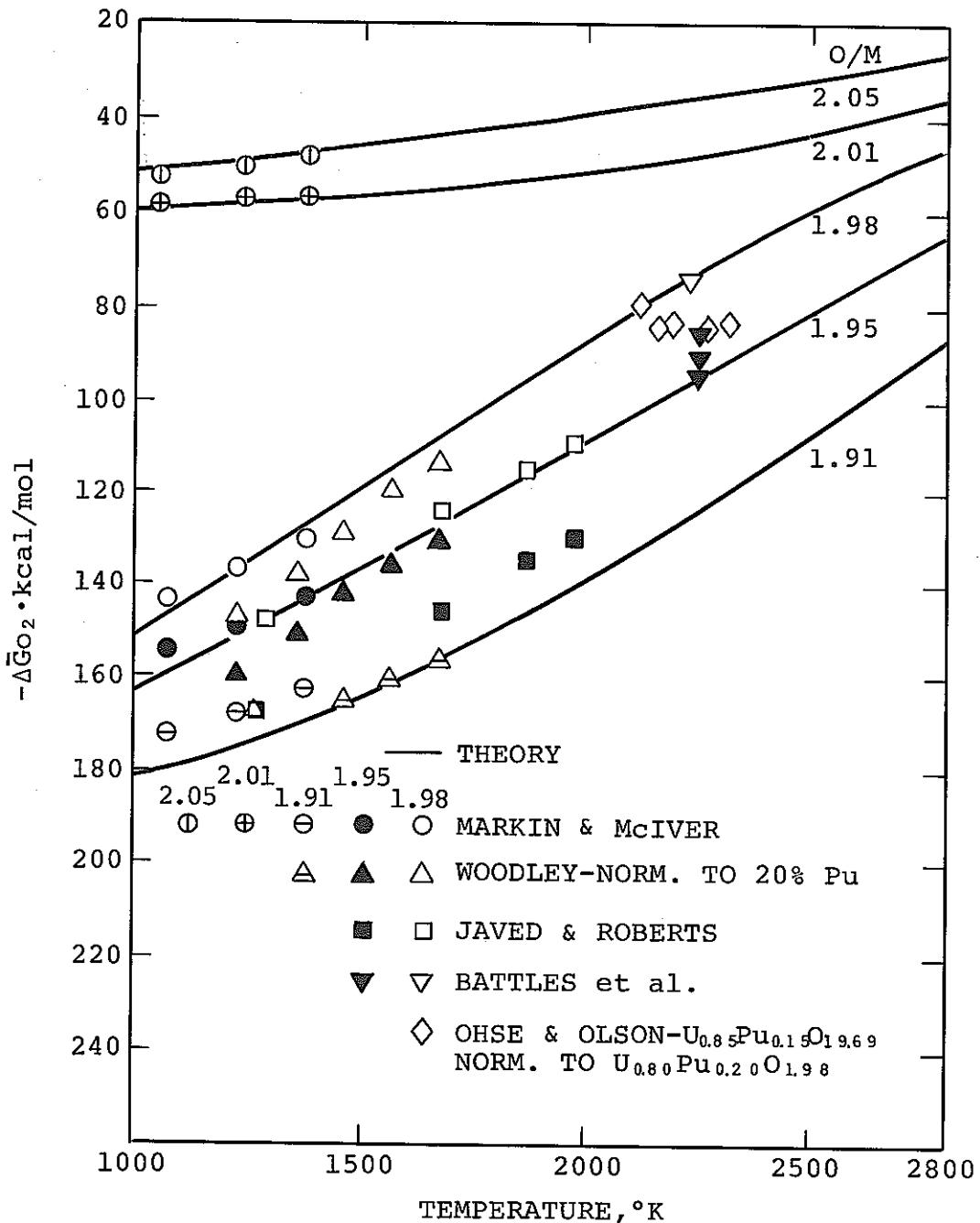


Fig. 1-1. Calculated and Measured Oxygen Potential vs Temperature for $U_{0.80}Pu_{0.20}O_{2\pm x}$. (9)

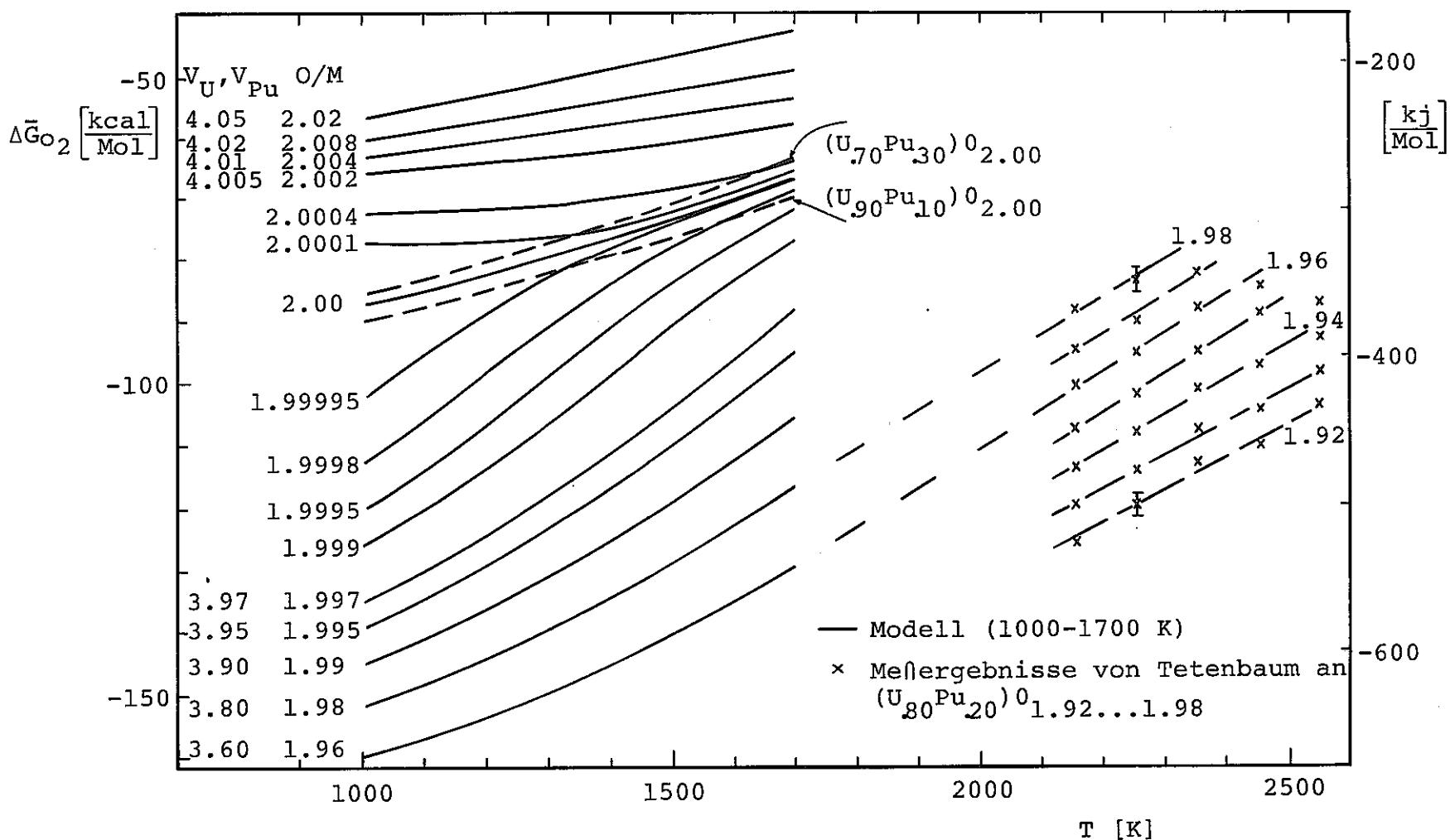


Fig. 1-2. Calculated oxygen potentials for $(U_{0.80}Pu_{0.20})O_2 \pm x$ as a function of temperature (1000-1700 K) compared with the results from the work of Tetenbaum (2150-2550 K).⁽¹⁰⁾

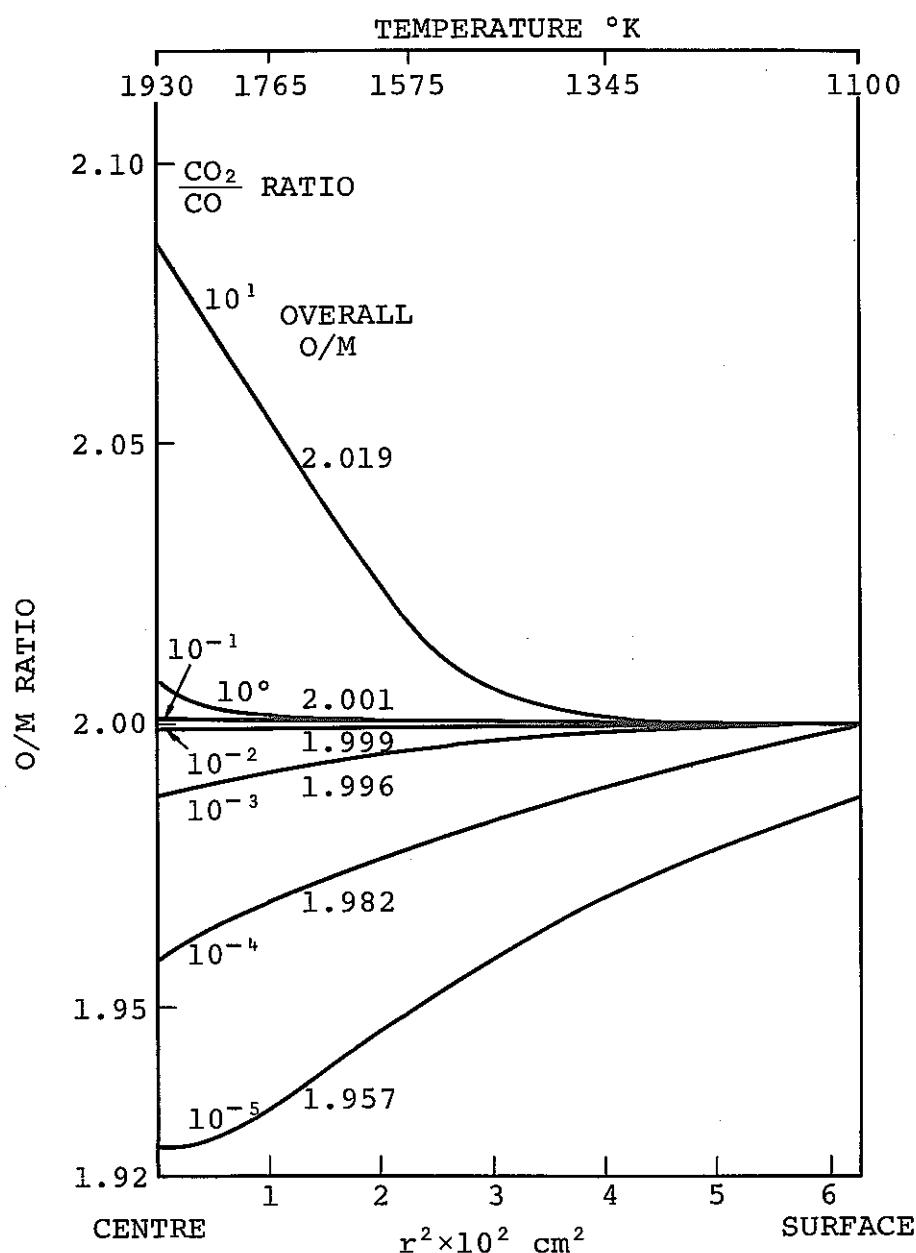


Fig. 1-3. Oxygen distribution across a $U_{0.85}Pu_{0.15}O_{2+y}$ fuel pin,
for various $\frac{CO_2}{CO}$ ratios.⁽¹³⁾

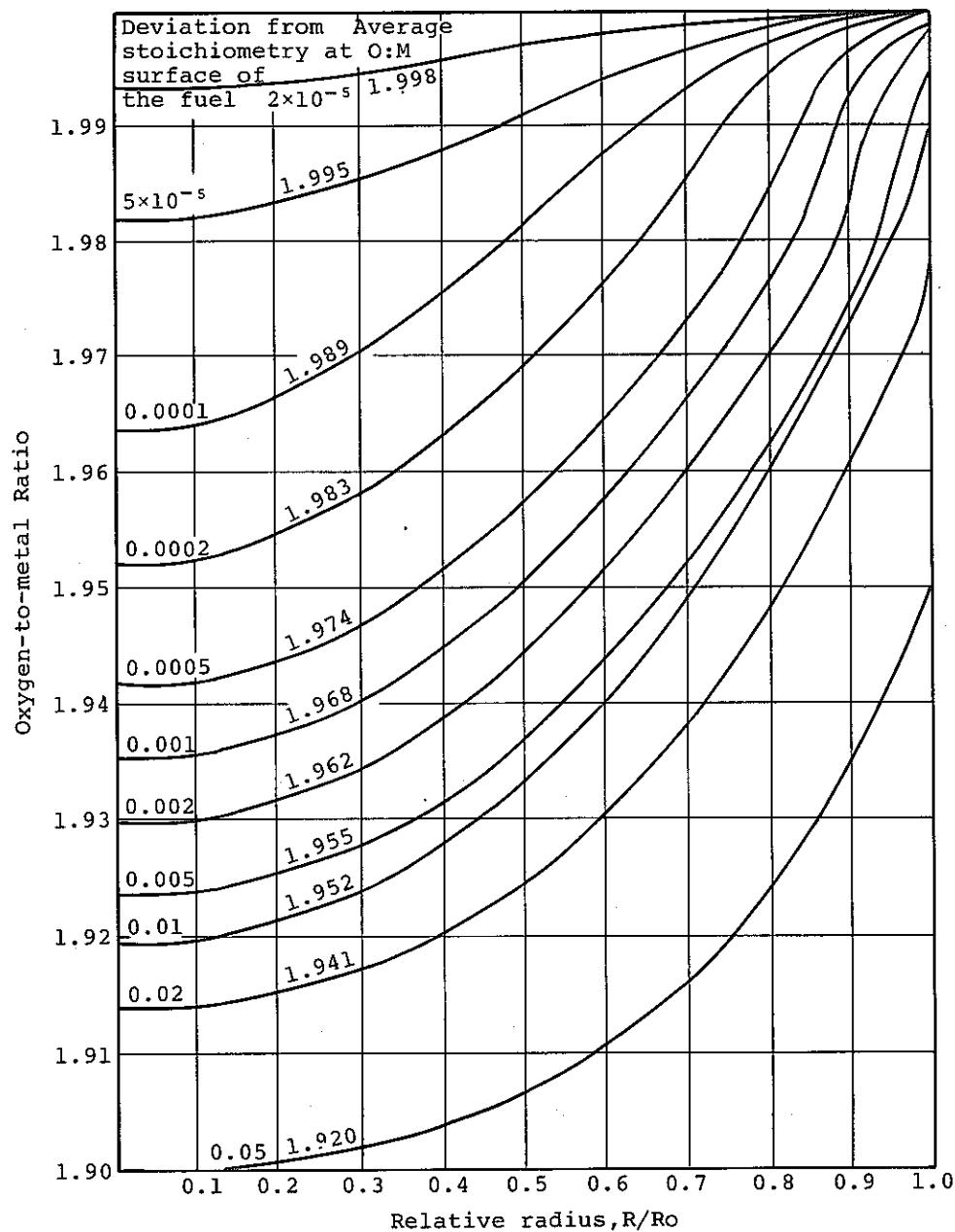


Fig. 1-4. Stoichiometry profiles for 15 kW/ft irradiation with 1100°C fuel surface temperature using heat of transport from experiment without artificial barriers.⁽¹⁶⁾

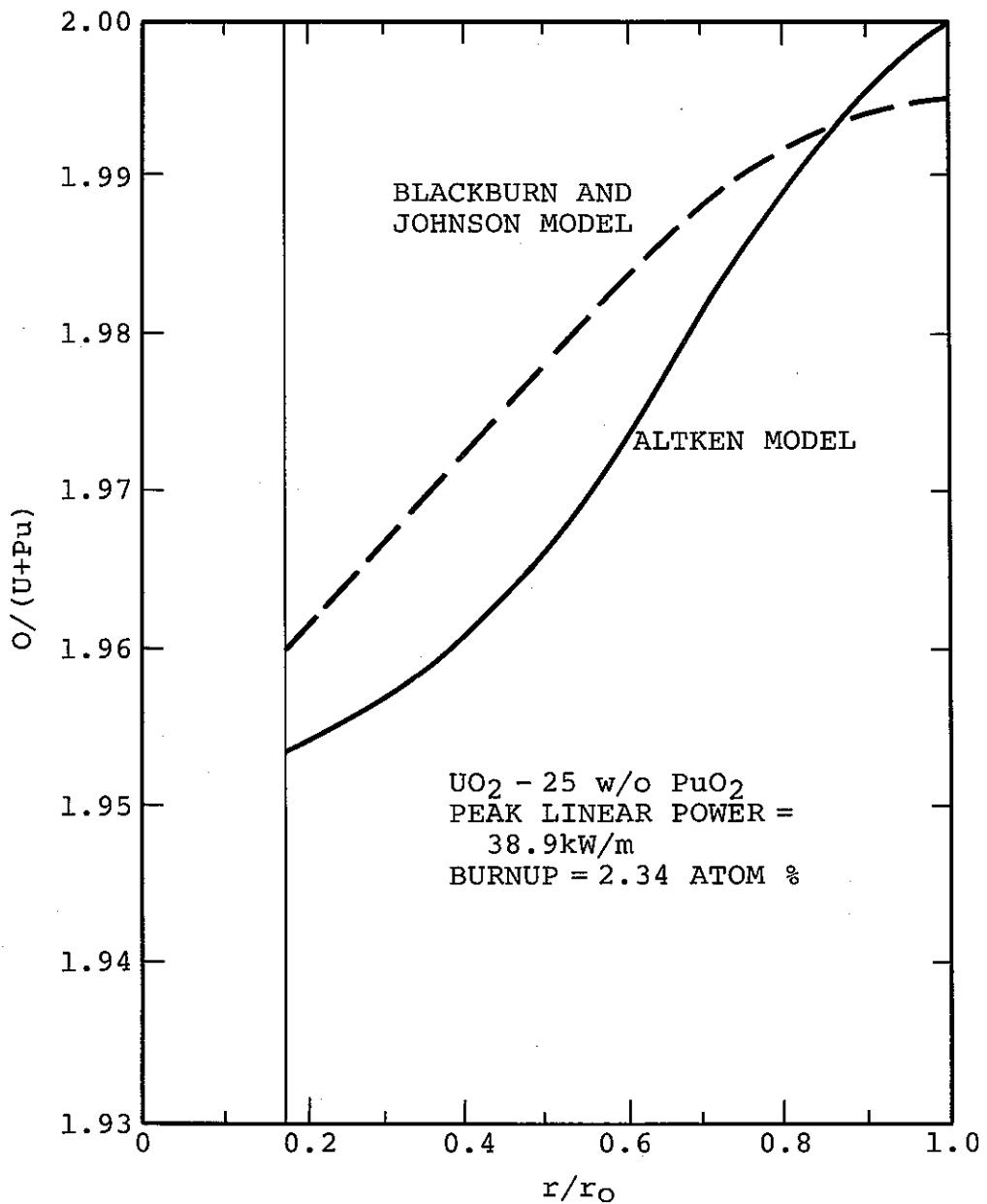


Fig. 1-5. A comparison of two U.S. models for predicting the radial oxygen-to-metal profile for a $\text{U}_{.75}\text{Pu}_{.25}\text{O}_{1.984}$ fuel at beginning of life.⁽¹⁹⁾

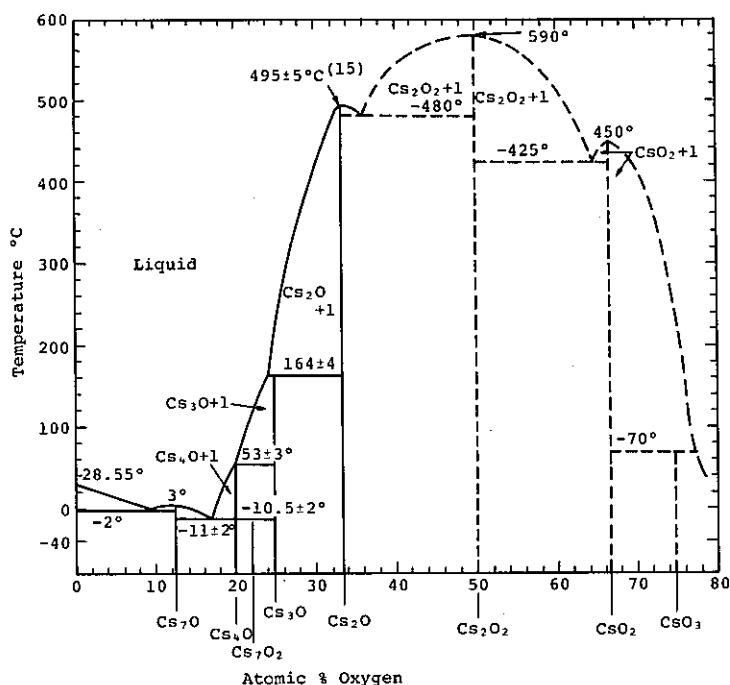


Fig. 1-6. The Cs-O phase diagram (0-80 at% oxygen); (-----) approximate phase diagram given by Bell based upon Berardinelli's thesis.⁽⁴⁹⁾

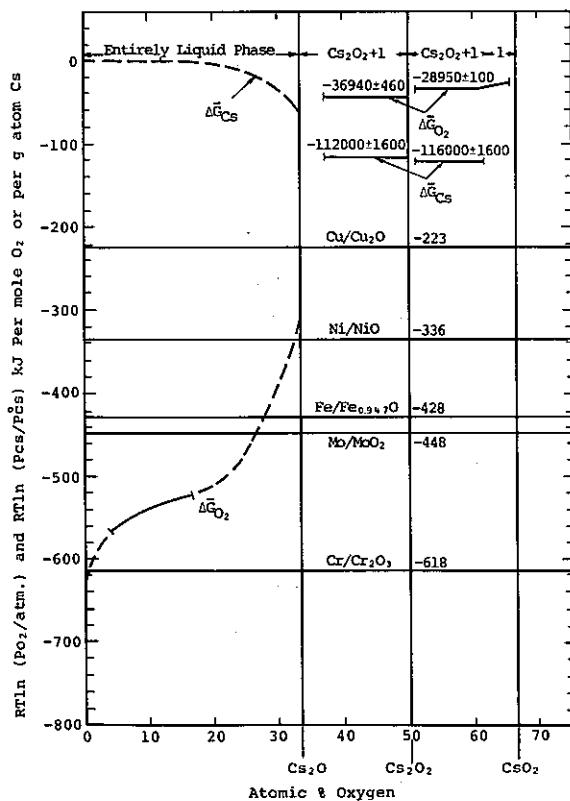


Fig. 1-7. Partial oxygen and caesium potentials in the Cs-O system at 500°C (I—I) Experimental data, (-----) estimated from the duhem-Margules equations.⁽⁴⁹⁾

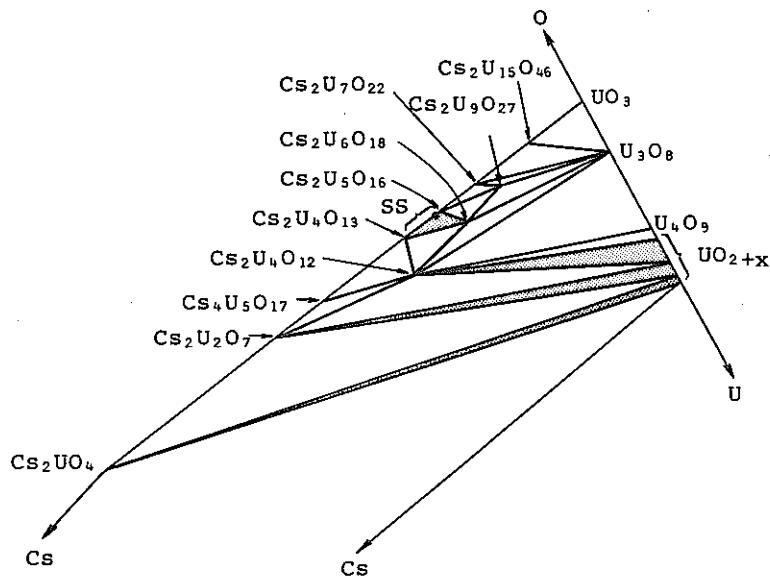


Fig. 1-8. Selected Portions of the Cesium-Uranium-Oxygen Phase Diagram; Isothermal Sections from 873 to 1273 K. (The solid areas show the width of two-phase regions at 1273 K. The compound UO_3 exists only below 930 K. The $\text{Cs}-\text{UO}_{2+x}$ and $\text{Cs}-\text{Cs}_2\text{UO}_4$ tie lines exist only below 950 K. Phase regions containing cesium uranates with a higher U/Cs atom ratio than $\text{Cs}_2\text{U}_4\text{O}_{12}$ may not exist over the entire temperature range; see text. SS = $\text{Cs}_2\text{U}_4\text{O}_{13}-\text{Cs}_2\text{U}_5\text{O}_{16}$ solid solution.)^(4,3)

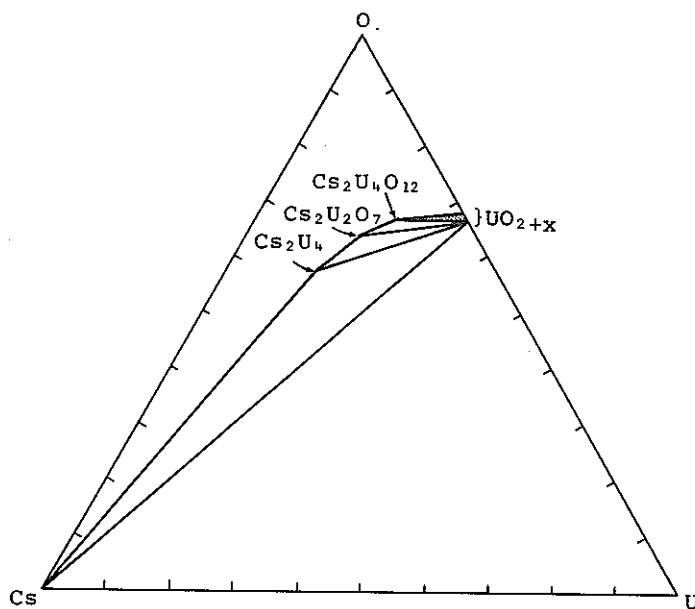


Fig. 1-9. Selected Portions of the Cesium-Uranium-Oxygen Phase Diagram Showing Tie Lines to UO_{2+x} ; Isothermal Sections from 873 to 1273 K. (The solid area shows the extent of the two-phase region at 873 K. The $\text{Cs}-\text{UO}_{2+x}$ and $\text{Cs}-\text{Cs}_2\text{UO}_4$ tie lines exist only below 950 K.)^(4,3)

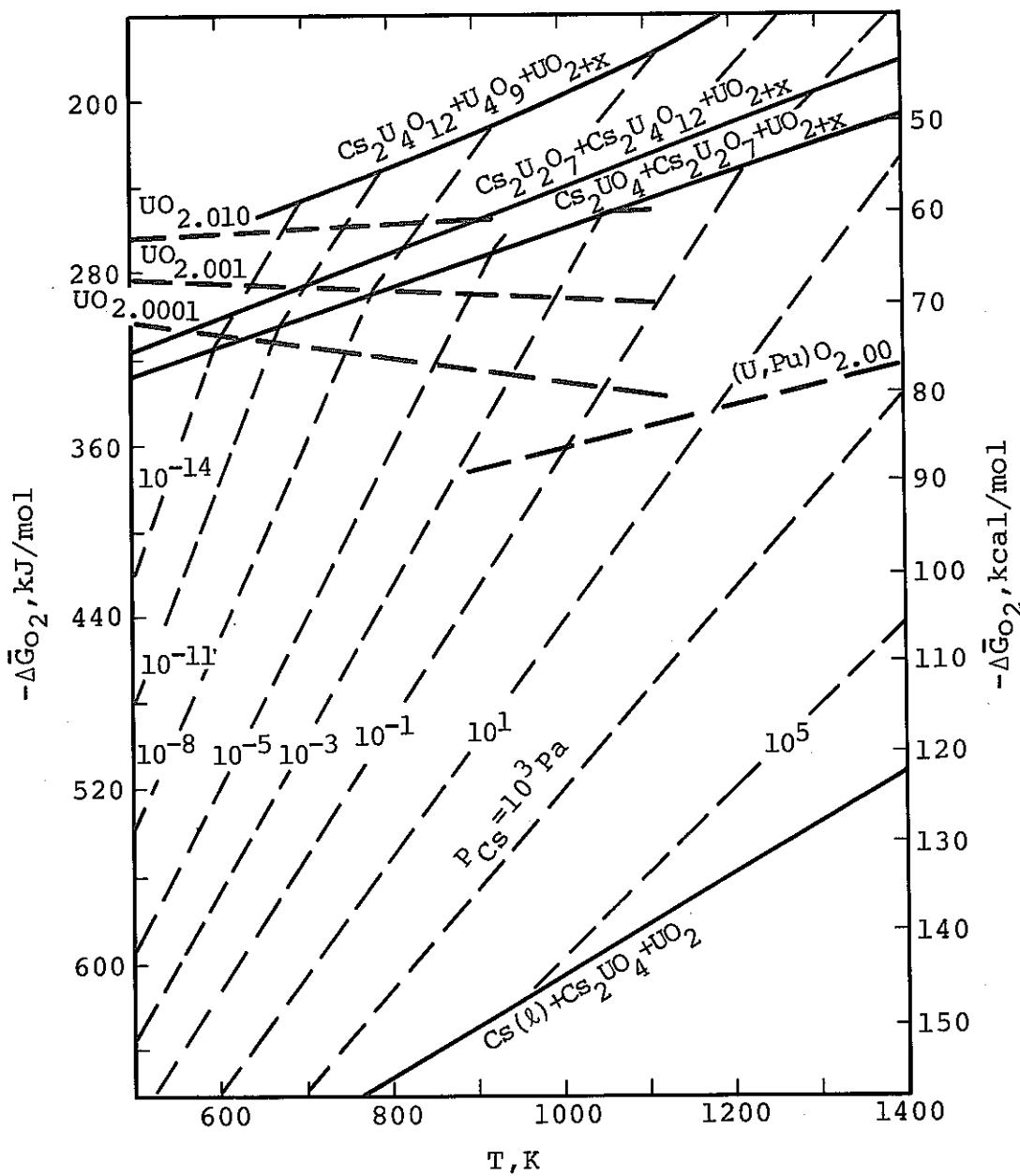


Fig. 10 Selected Portions of the Cs-U-O System, the U-O System and the $(U_{0.80}Pu_{0.20})-O$ System.
(The numerically labeled dashed lines are cesium isobars in Pascals.)^(4,5)

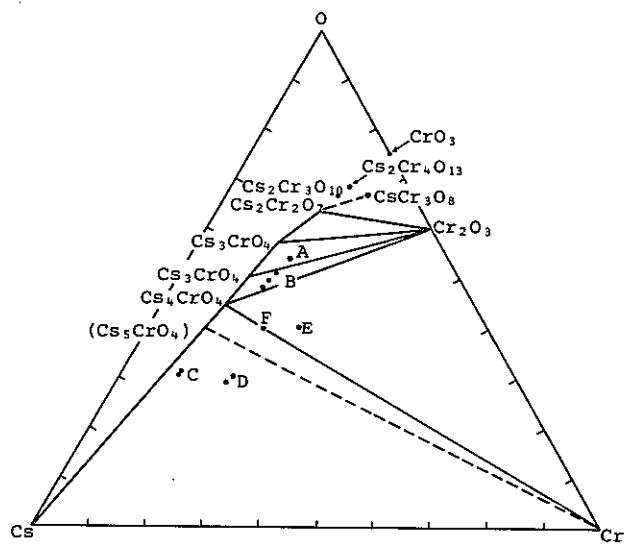


Fig. 1-11. Selected portions of the cesium-chromium-oxygen phase-diagram, isothermal section, 298-1100K. The compounds CsCr_3O_8 , $\text{Cs}_2\text{Cr}_3\text{O}_{10}$ and probably $\text{Cs}_2\text{Cr}_4\text{O}_{13}$ exist only below 674K. The compound $\text{Cs}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ melts at 658K. The existence of Cs_5CrO_4 is tentative.⁽⁴⁶⁾

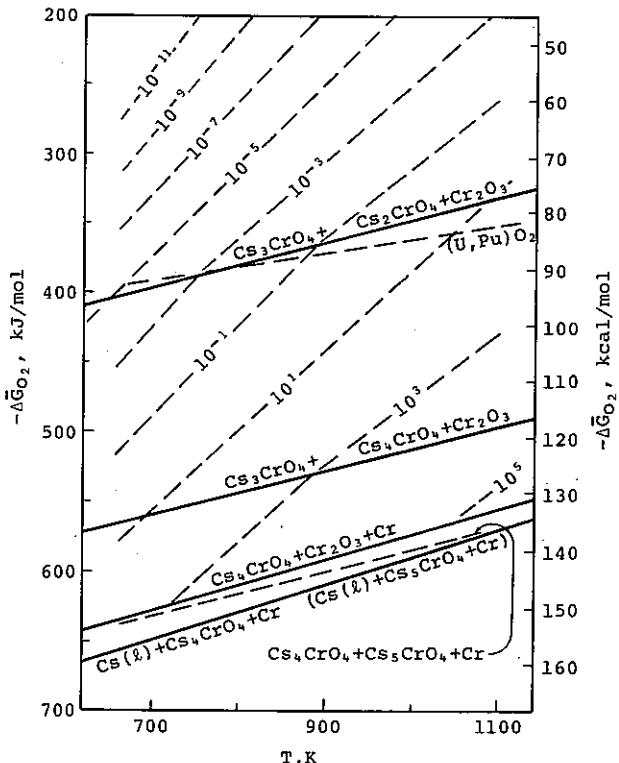


Fig. 1-12. Oxygen potentials in the cesium-chromium-oxygen system from 700 to 1100K. The dashed lines are cesium isobars (in Pa). If a Cs_5CrO_4 -Cr tie line exists, the lowest solid line represents a region containing $\text{Cs}(l)$ and Cr in equilibrium with Cs_5CrO_4 instead of Cs_4CrO_4 . Also shown is the oxygen potential of $(\text{U}_{0.80} \text{Pu}_{0.20})\text{O}_{2.000}$.⁽⁴⁶⁾

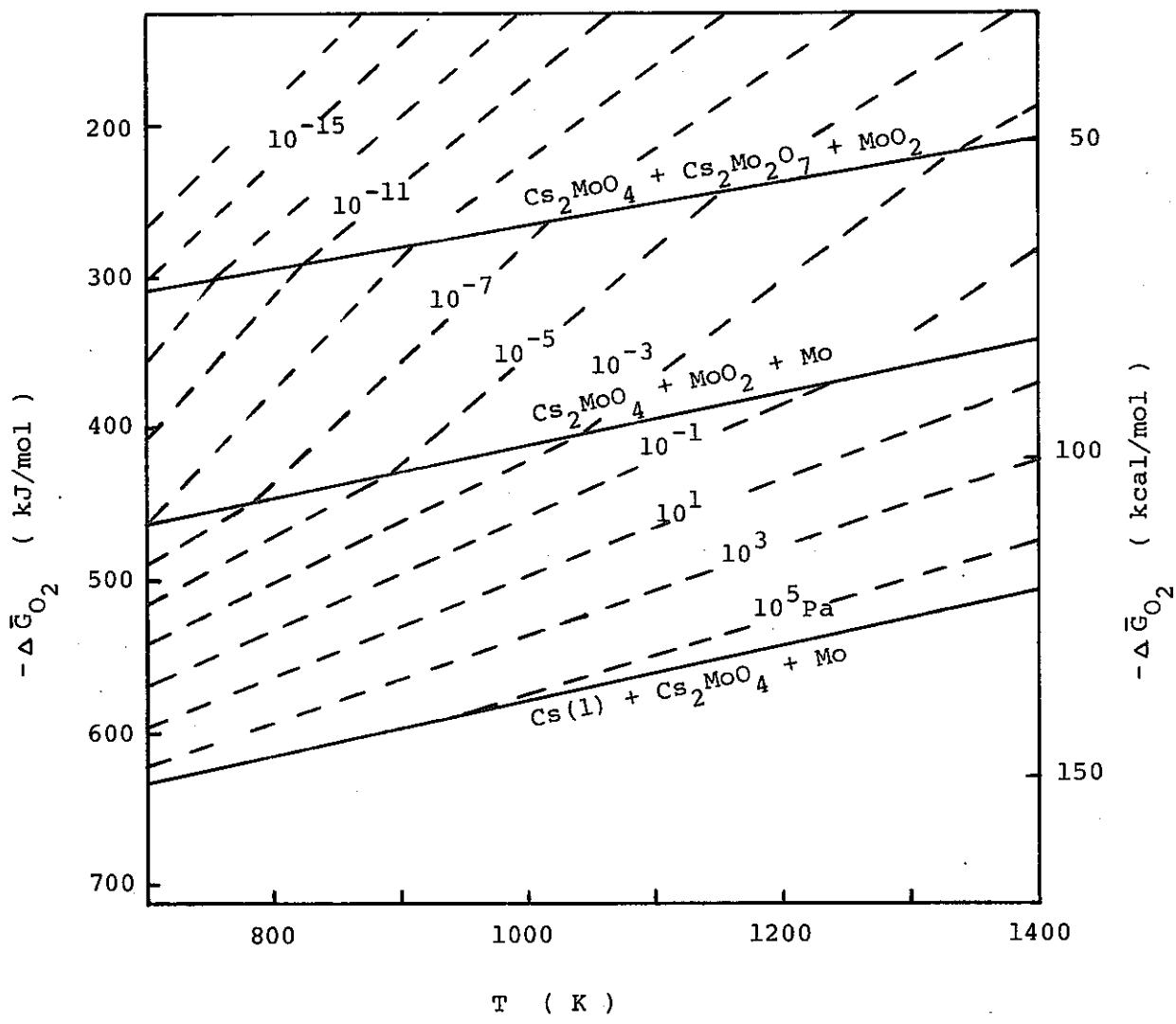


Fig. 1-13. Oxygen potentials in the Cs - Mo - O system

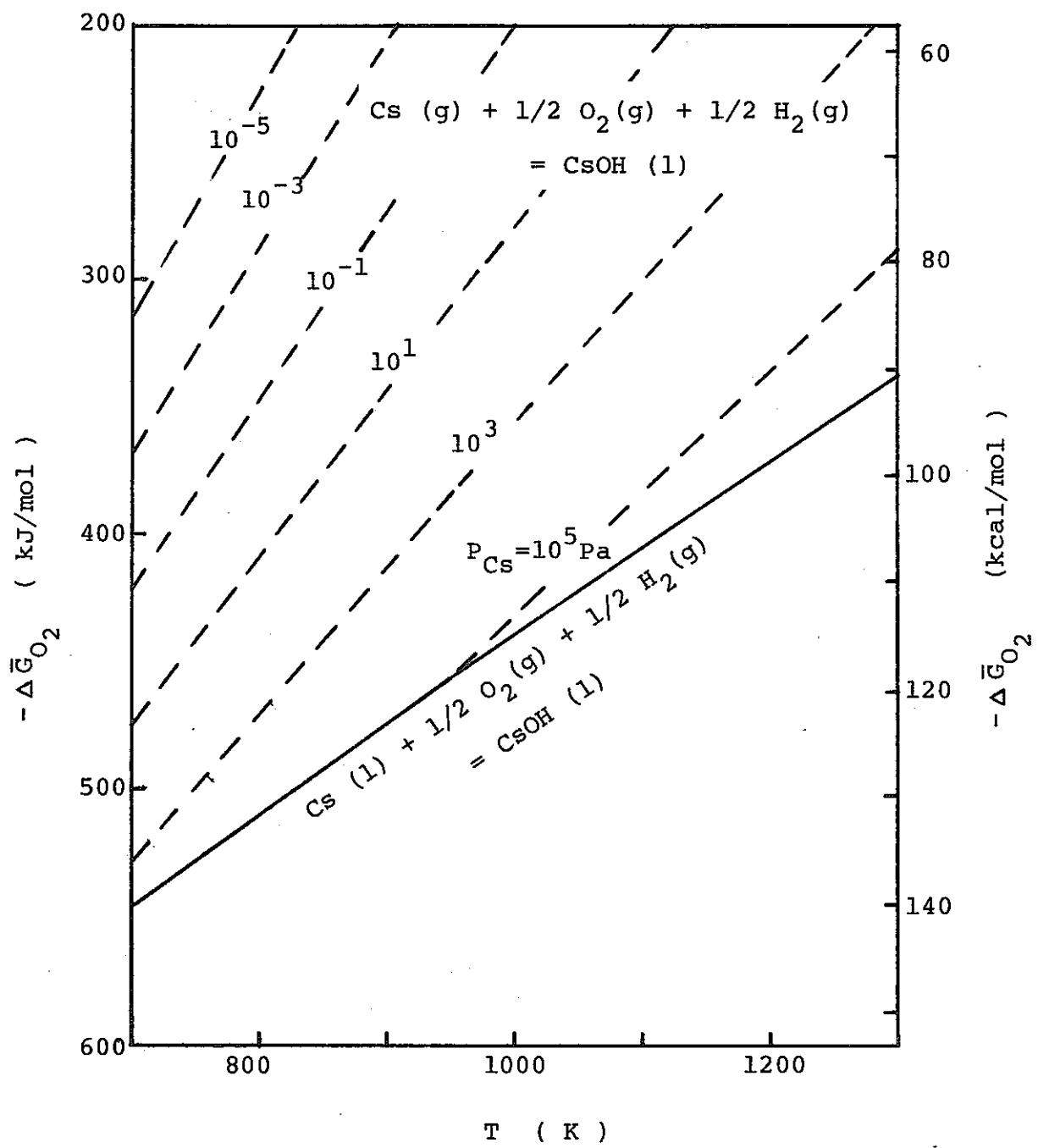


Fig. 1-14. Oxygen potentials over $\text{CsOH}(1)$ at $P_{\text{H}_2} = 10^{-6} \text{ atm}$

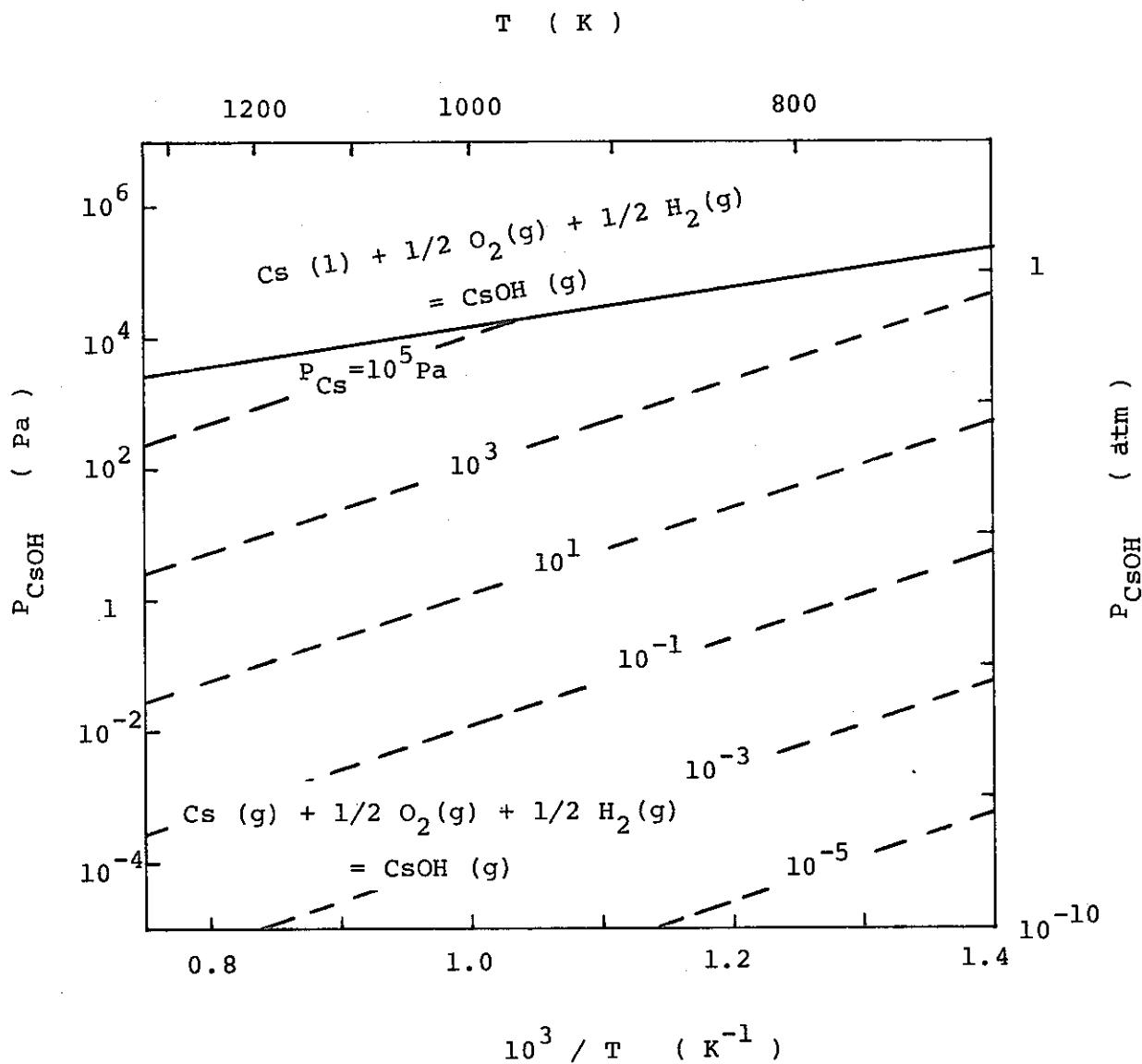


Fig. 1-15. CsOH partial pressures in the Cs-O-H system at
 $P_{\text{H}_2} = 10^{-6} \text{ atm}$ and $\Delta \bar{G}_{\text{O}_2} = -100 \text{ kcal/mol}$

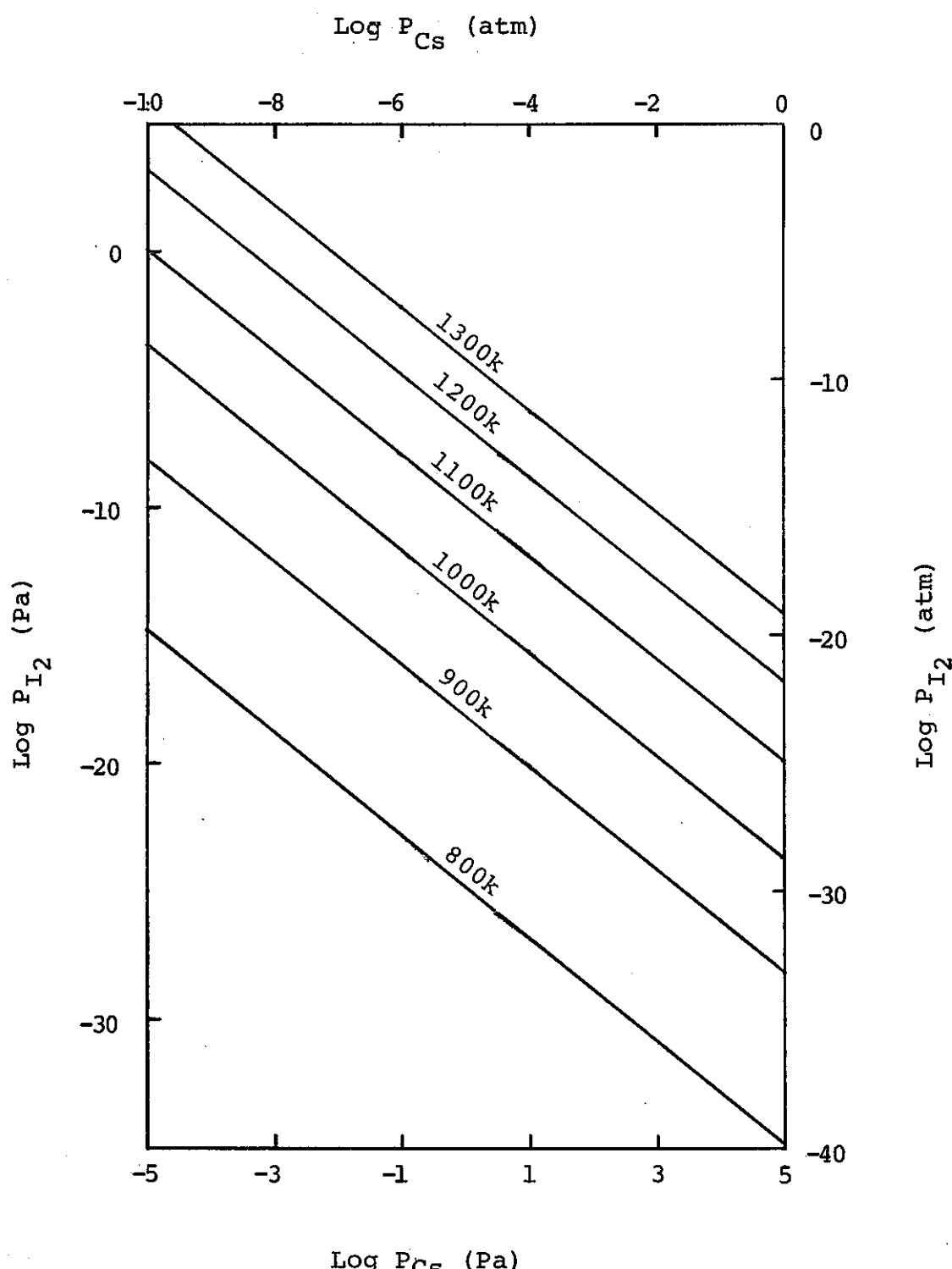


Fig. 1-16. I_2 partial pressures over CsI as a function of Cs partial pressure at various temperatures

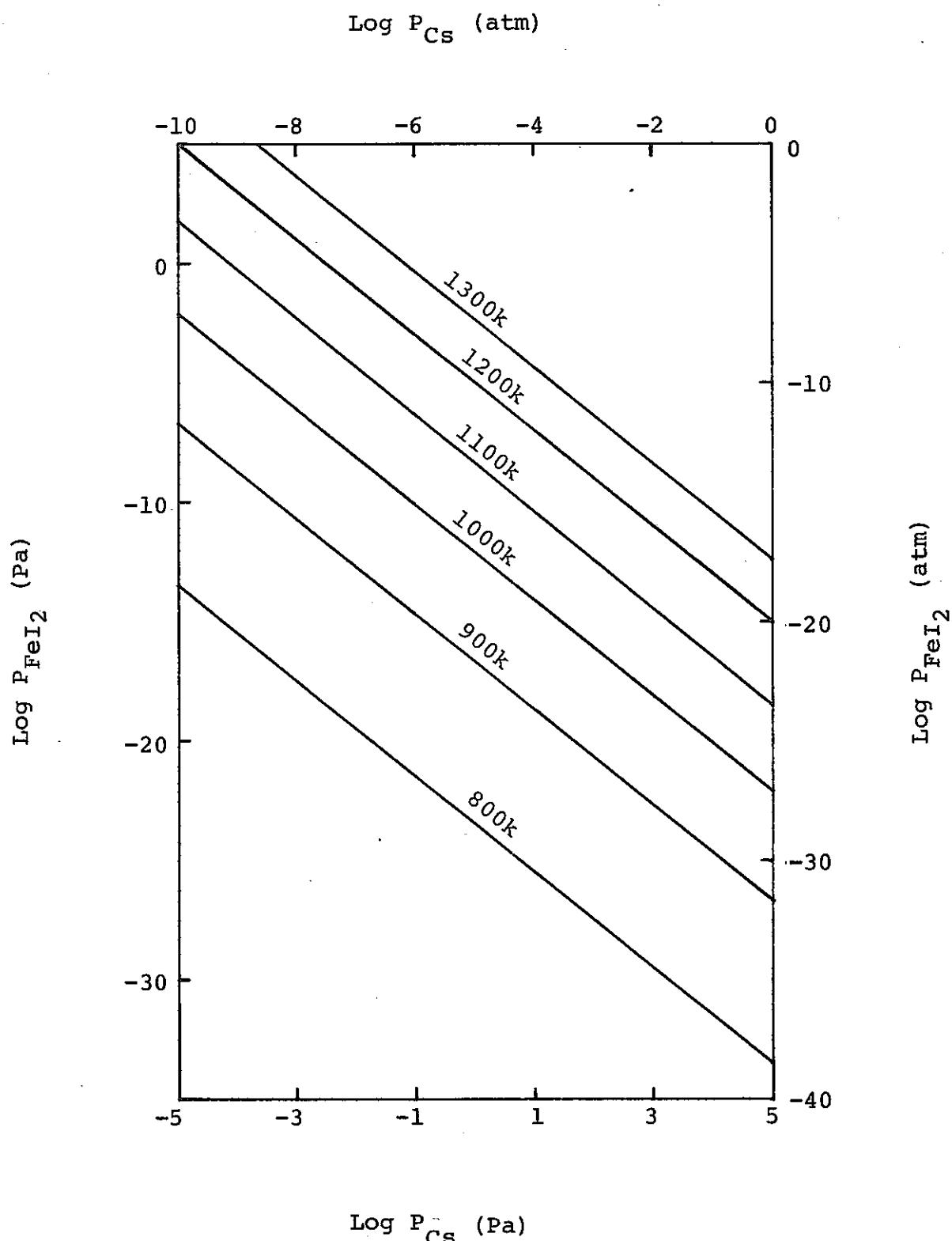


Fig.1-17. FeI_2 partial pressures as a function of C_s
partial pressure at various temperatures

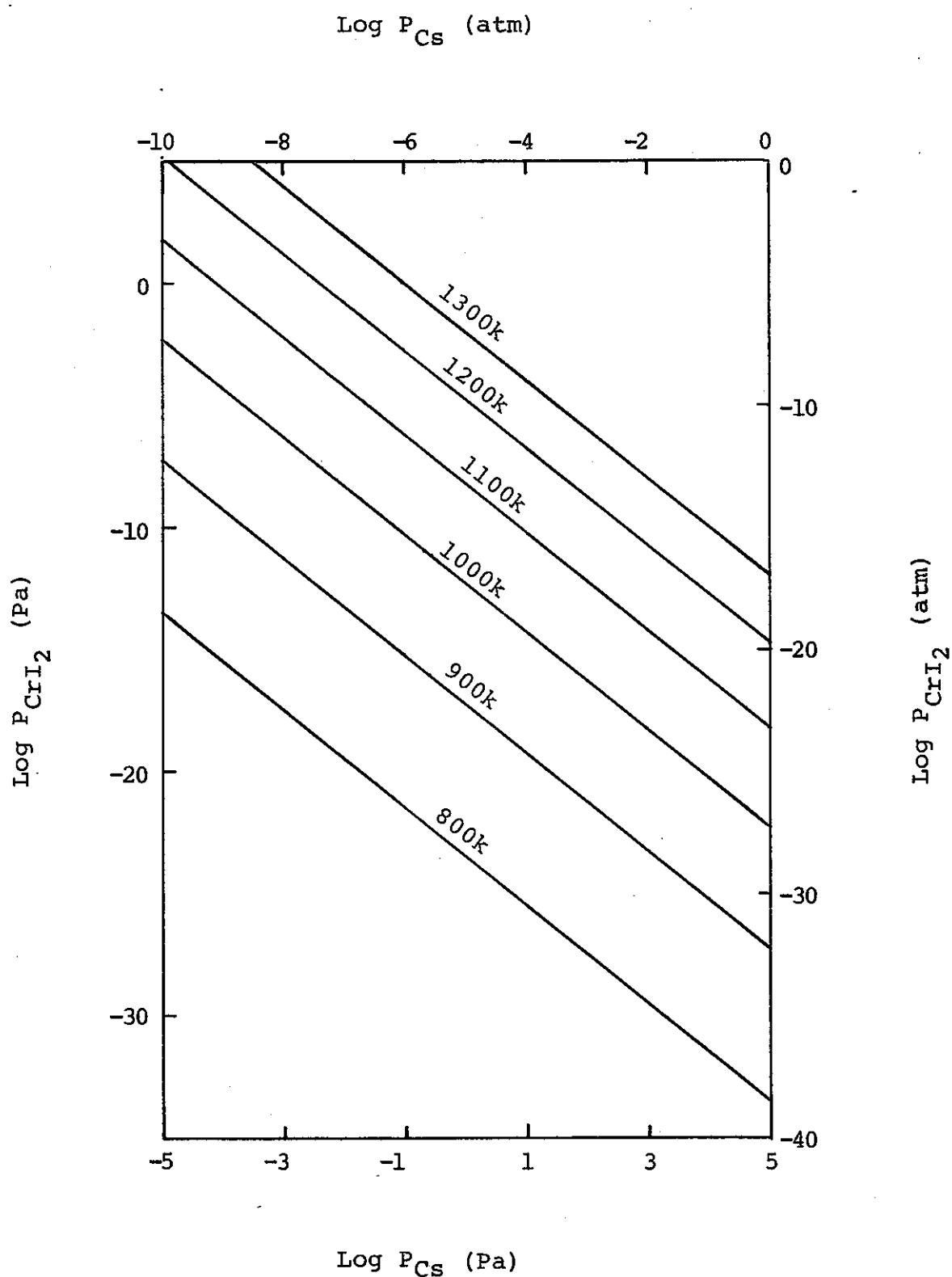


Fig.1-18. CrI_2 partial pressures as a function of C_s
partial pressure at various temperatures

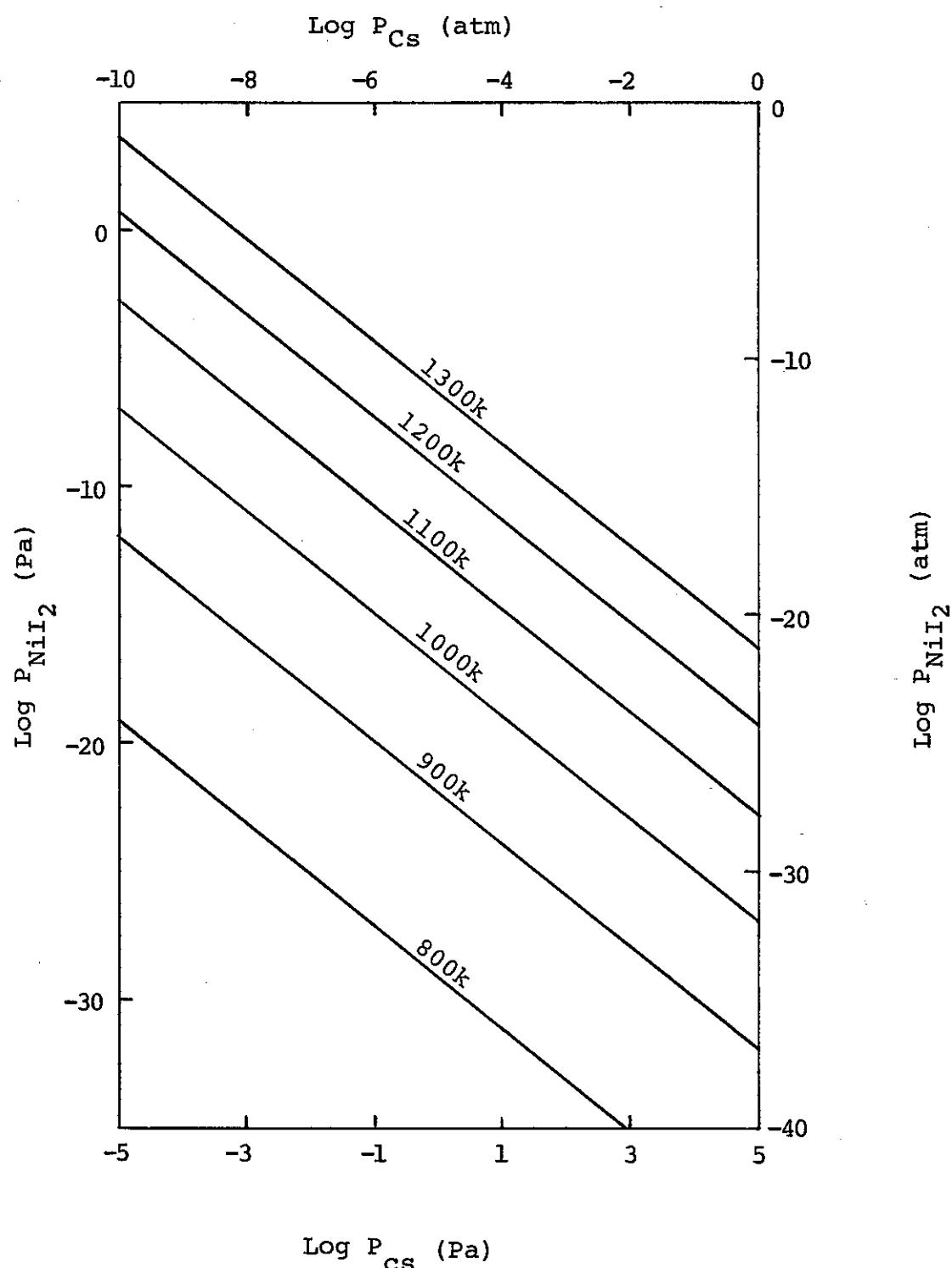


Fig.1-19. NiI_2 partial pressures as a function of C_s
partial pressure at various temperatures

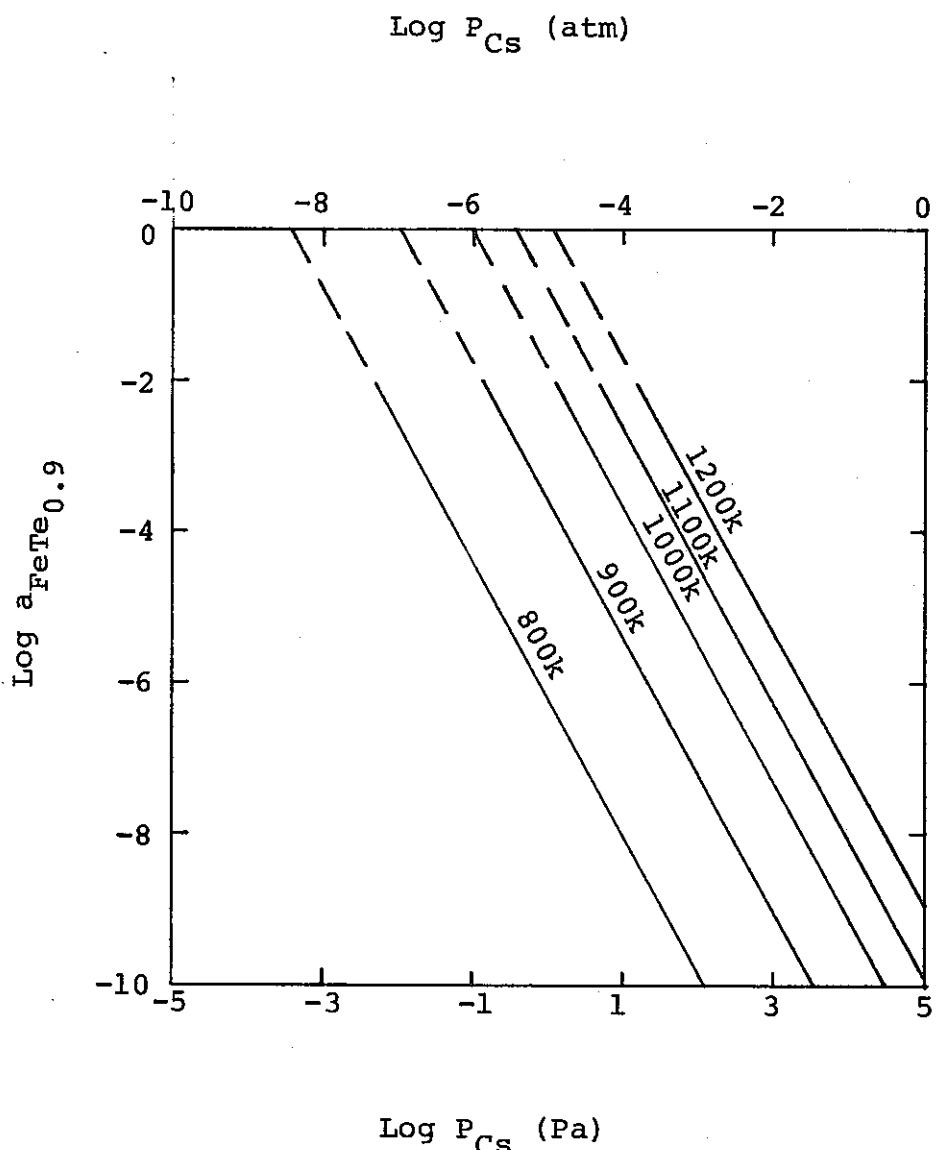


Fig.1-20. FeTe_{0.9} activities as a function of Cs partial pressure at various temperatures

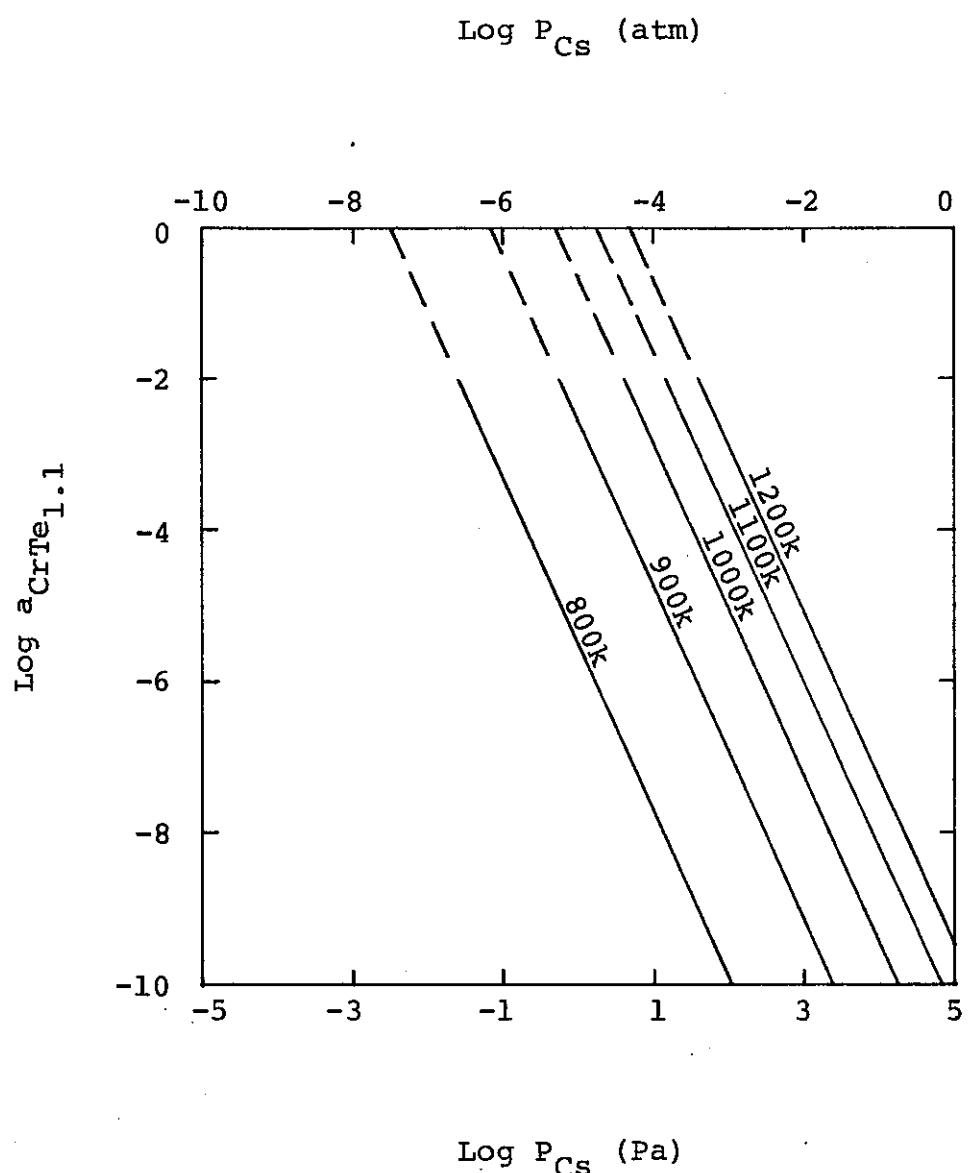


Fig.1-21. $CrTe_{1.1}$ activities as a function of Cs
partial pressure at various temperatures

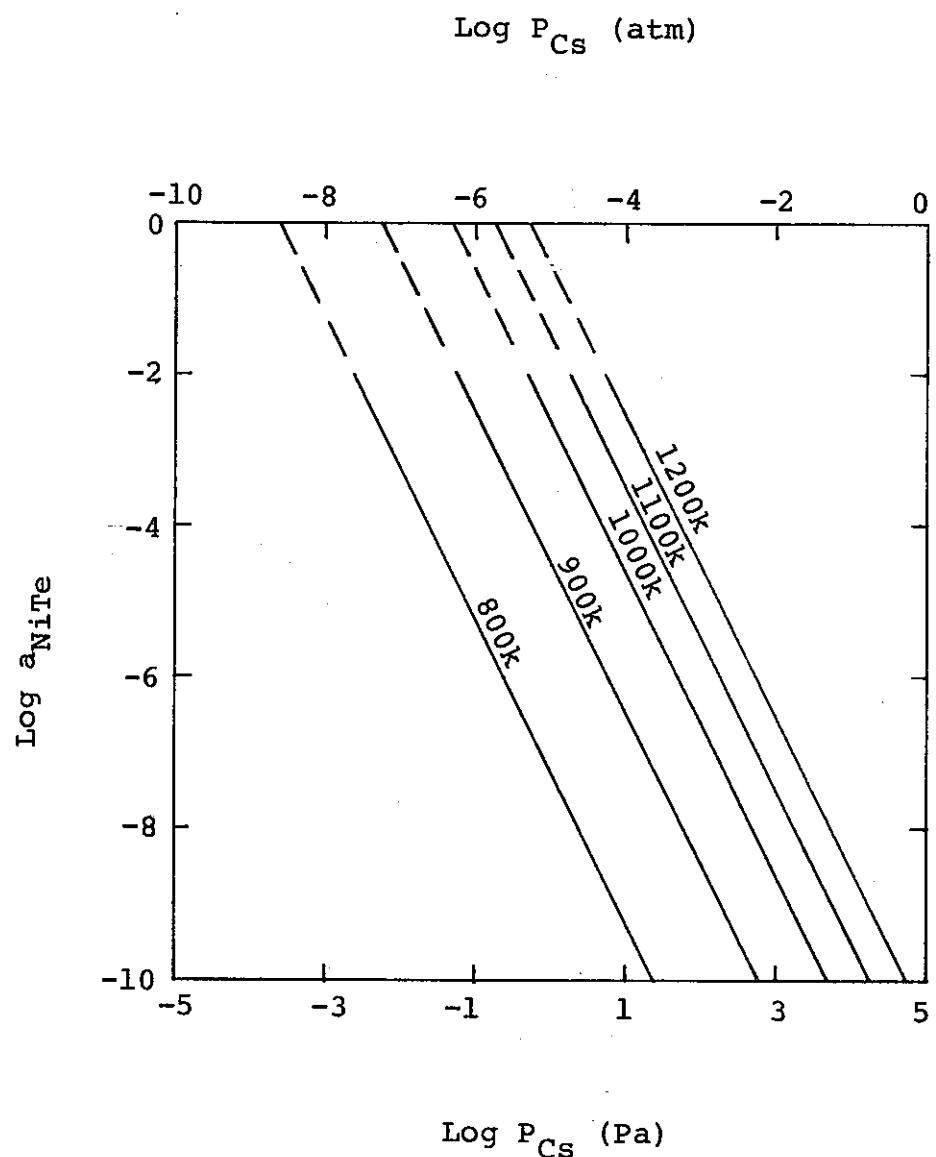


Fig. 1-22. NiTe activities as a function of C_s
partial pressure at various temperatures

第2章 FCCIの機構

被覆管内面で起る FCCI は、現象面から見て大きく次の 2 につ分類される。

- A. 被覆管の粒界腐食 (IGA) 及び全面腐食 (Matrix Attack)
- B. 被覆管成分の燃料表面への移動

照射後試験の結果、実際の炉内ではこの 2 つの現象は、両方とも起っている場合もあれば、一方しか起っていないものも見られる。

ここではこれらの現象のメカニズムを A, B それぞれについて考えることとする。但し、A の被覆管の腐食に関しては、粒界腐食に重点を置いて考える。

1. 被覆管の粒界腐食

FCCI による被覆管内面での粒界腐食過程を考える場合に、この現象を次の 2 つの面から考える事ができる。

1. 被覆管表面での現象 (つまり F.P. 及びその化合物と被覆管成分との反応に関するもの)
2. 被覆管内部での現象 (つまり結晶粒界での腐食反応及び腐食の進行に関するもの)

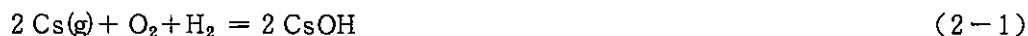
1においては主に FCCI が発生するか否か、という問題について議論を行ない、2においては、発生した FCCI により被覆管内面での粒界腐食がどの程度進行するかという問題について議論を行なう。1 のメカニズムを考える場合に重要になってくるパラメーターとしては、被覆管内面温度、燃料表面温度、又はこの両者間の温度勾配被覆管内面での酸素ポテンシャル、水素分圧、及び燃焼に伴って生成する F.P. 量等が考えられる。又、2 のメカニズムを考える場合には、ステンレス鋼の酸化速度、ステンレス鋼中での各成分の拡散、結晶粒界中への炭化物折出といった現象が重要になってくる。

現在、FCCI に対するメカニズムとして、提出されているものには、Götzman の CsOH による腐食⁽⁴⁸⁾、Admison et al. の Cs-Te mixture による腐食⁽⁶⁶⁾、Bradbury et al. の Cs による腐食⁽⁵⁵⁾の 3 つがある。このうち O. Gotzman は 1 に重点を置いたメカニズムであり Adamson et al. 及び Bradbury et al. のものは、1, 2 の両方を含むものである。IGA に対するモデルとしては、上記の 3 つのモデルの他に当初 Johnson et al. による Cs-Mo-O 系の腐食が考えられていて⁽⁹⁾いたが、実際にこの系を用いて行った腐食実験では、粒界腐食は生じなかったとの報告があり、又 C.E. Johnson 自ら近年否定しているのでここでは、このモデルは省略することにした。⁽⁶⁷⁾

1.1 CsOHによる腐食

Götzman et al.⁽⁴⁸⁾ FCCIの原因をCsOHによるステンレス鋼の腐食と考え、その可能性を熱力学データに基づき議論した。

CsOHの生成は次の化学反応式で表わされる。



ここでCs(g)は、燃料表面に形成される Cs_2UO_4 の平衡Cs分圧により供給されると考える。又、 O_2 は燃料によってきまるとき、 H_2 は冷却材中の水素活量と平衡する分圧であるとする。

又、この反応は、Fig. 2-1のように被覆管内面でCsOHが生成し、酸素はギャップ中の CO_2/CO 、 $\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2$ 、 CsOH/Cs 等によって燃料表面から被覆管内面に運ばれると考える。

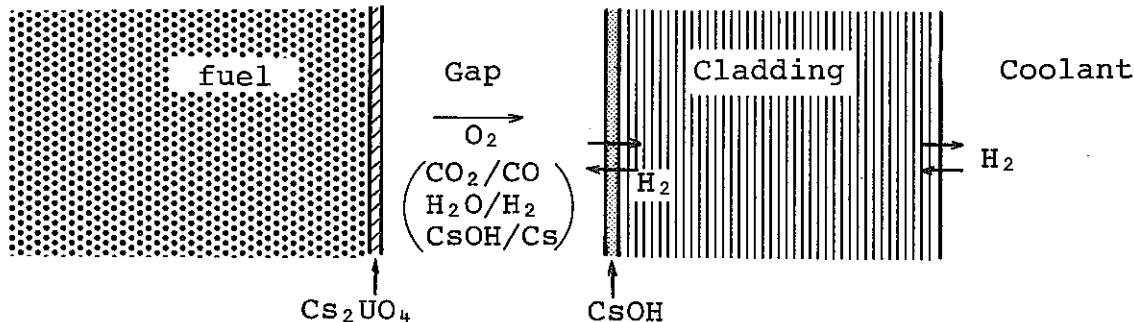


Fig. 2-1 CsOHによる腐食の考え方

以上のような仮定の下に、CsOHが形成する可能性を検討する。

まずCesium Urinateの生成反応は次のようになる。



従って、燃料表面での平衡Cs分圧 $P_{\text{Cs}}(\text{fs})$ は

$$2 \text{RT} \ln P_{\text{Cs}}(\text{fs}) = \Delta G_f^\circ(\text{Cs}_2\text{UO}_4) - \Delta G_f^\circ(\text{UO}_2) - 2 \Delta G^\circ(\text{Cs, g}) - \text{RT} \ln P_{\text{O}_2} \quad (2-3)$$

となる。これにTable 1-2のデータを適用すれば平衡Cs分圧は

$$\ln P_{\text{Cs}}(\text{fs}) = -58274/T + 22.65 - \frac{1}{2} \ln P_{\text{O}_2} \quad (2-4)$$

と表わせる。

次にCesium hydroxideの生成反応を考えると、被覆管内面での平衡Cs分圧は $P_{\text{Cs}}(\text{ci})$ は

$$2 \text{RT} \ln P_{\text{Cs}}(\text{ci}) = 2 \Delta G_f^\circ(\text{CsOH}) - 2 \Delta G^\circ(\text{Cs, g}) - \text{RT} \ln P_{\text{H}_2} - \text{RT} \ln P_{\text{O}_2} - 2 \text{RT} \ln P_{\text{CsOH}} \quad (2-5)$$

となる。これに被覆管内面でCsOHが液相であるとしてTable 2-1より

$T \leq 950\text{K}$

$$\ln P_{Cs}(\text{ci}) = -56230/T + 23.65 - \frac{1}{2}\ln P_{H_2} - \frac{1}{2}\ln P_{O_2}$$

 $T > 950\text{K}$

$$\ln P_{Cs}(\text{ci}) = -55230/T + 22.34 - \frac{1}{2}\ln P_{H_2} - \frac{1}{2}\ln P_{O_2}$$

と表わせる。

この 2-4, 2-6 式を用いて、燃料カラムに対しての $P_{Cs}(fs)$, $P_{Cs}(ci)$ を求めたものが Fig 2-2 である。但し、これ以後の計算は Rapsodie Bundle Irradiation を想定したものである。

Fig 2-2 において

reaction potential $\sim \{P_{Cs}(fs) - P_{Cs}(ci)\}$ と考えられこれが正の値をとるとき CsOH の生成が可能と考えられる。Fig 2-2 によれば、被覆管内面温度が高い場所であっても腐食が起こらない場合があることを示している。

つまり reaction potential は被覆管内面温度ではなく、燃料表面～被覆管内面温度差に依存している。

次に Fig 2-2 同じ条件で酸素ポテンシャルを変化させた時の影響を示したものが Fig 2-3 である。

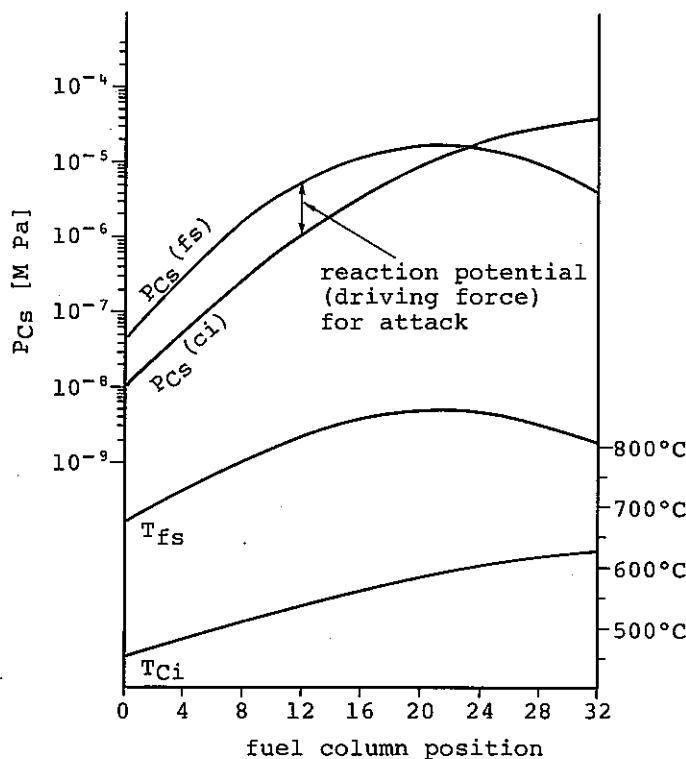


Fig 2-2 fuel column position

による reaction potential の変化

$$\Delta G_{O_2} = -377 \text{ kJ/mol} (\sim -90 \text{ Kcal/mol})$$

$$\text{rod power} = 465 \text{ W/cm}$$

$$\text{水素分圧} = 10 \text{ Pa} (10^{-4} \text{ atm})$$

gap 中の酸素輸送は H_2O/H_2 による

$$\text{gap conductance} = 1 \text{ W/cm}^2$$

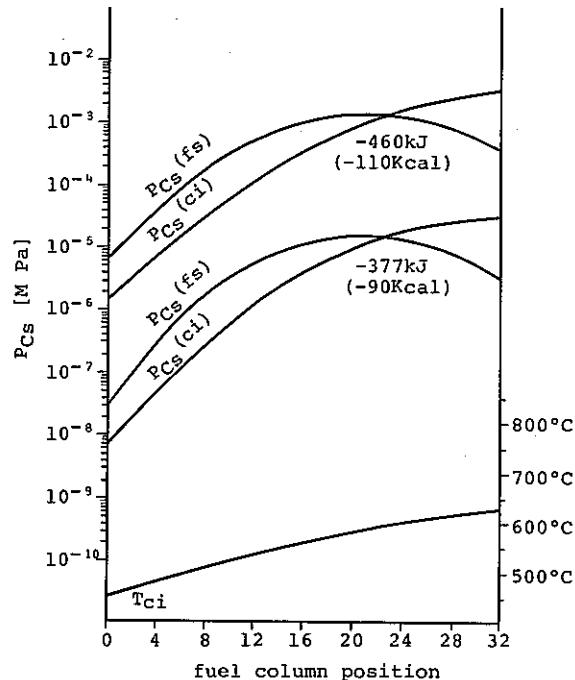


Fig 2-3 酸素ポテンシャルによる
reaction potential の変化
rodpower Xmax = 400 W/cm
他は、Fig 2-2 と同じ条件

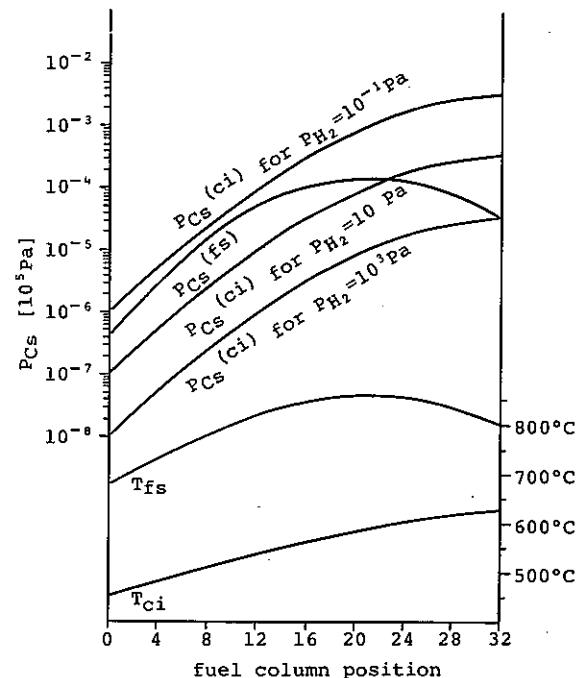
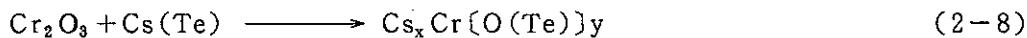
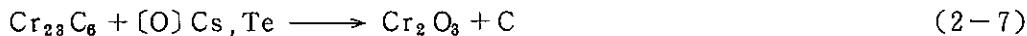


Fig 2-4 水素分圧による reaction
potential の変化
他の条件は、Fig 2-2 と同じ

Fig 2-4は、水素分圧を変化させた時の $P_{O_2}(fs)$, $P_{O_2}(ci)$ の変化を示したものである。Fig 4によると、この条件では He⁻ cooling に対応する 10 Pa (10^{-4} atm)では腐食が起こるが、Na cooling に対応する 10^{-1} Pa (10^{-6} atm)では、CsOH による腐食が起こらないことが示されている。reaction potential に関する上記以外のパラメータとしては、燃料表面～被覆管内面間の温度差に影響を及ぼす線出力、ギャップコンダクタンスが重要であり、燃料密度も再焼結によりギャップ間隔を変えることを考えれば同様に重要である。

1.2 Cs-Teによる腐食

Adamson et al. FCCIの原因をCs-Teによるステンレス鋼の腐食と考え、out-of-pile及びin-pile実験結果からメカニズムを推定し、FCIIの速度論的議論を行った。ここでは、ステンレス鋼成分とF.P.との反応を次のように考えている。



つまり、ステンレス鋼結晶粒界に折出した Cr_{23}C_6 とCs, Te中に溶け込んだ酸素が反応し Cr_2O_3 を形成する。これにCs(Te)が反応 $\text{Cs}_x\text{Cr}[\text{O}(\text{Te})]_y$ を形成することによりIGAが進行する。但し(2-8)式のようにTeが関係するかどうかは、不明であるとしている。

次に、この腐食過程の速度論を考える。腐食は初期酸化膜の形成→Teによる保護膜の破壊→粒界腐食進行→停止の段階で進行すると考えている。

(1) 初期酸化膜の形成

ステンレス鋼の酸化は

$$W (\text{mg/cm}^2) = 510 [t(\text{h})]^{\frac{1}{2}} e^{-16000/RT} \quad (2-9)$$

で表わされる。⁽⁶⁷⁾これをO/Mで表わし $[(\text{O:M})_{\text{initial}}^{-1.96}]$ との比 F_i を求める

$$F_i = \frac{(0.011)(510)t^{\frac{1}{2}}e^{-16000/RT}}{(\text{O:M})_i - 1.96} \quad (2-10)$$

となる。

(2) Teによる保護膜の破壊

初期酸化により形成された保護膜の破壊機構は、イオウによるN基超合金の腐食からの類推により考えられている。つまり保護膜中のアニオンサイトの1 atm%が、Teに置き変わった時点で保護膜が破壊するとしている。

この時刻を $t_B(\text{h})$ とすれば(2-10)式を用いて

$$t_B(\text{h}) = \frac{(0.2\%) \times \frac{F_i[(\text{O:M})_i - 1.96]}{0.01}}{\text{Burnup Rate}} \quad (2-11)$$

のように表わせる。ここでBurnup Rateは(at%/h)で表わされる。

(3) 粒界腐食進行

粒界腐食には、低酸素ポテンシャルで直線則、高酸素ポテンシャルで放物線則が考えられるが、ここでは直線則⁽⁶⁸⁾

$$R (\text{cm/sec}) = 8.3 \times 10^4 t (\text{sec}) \exp(-21500/RT) \quad (2-12)$$

を用いた。但しこれは、不純物 C により Cr_7C_3 , Cr_3C_2 のような高次炭化物が生成される条件での直線則である。

(4) 停止

粒界腐食が進むにつれて腐食された結晶粒が isolate してくる。このことにより酸素と反応できる Cr の availability が増加してくる。そしてこの Cr の availability が O の availability より大きくなつた時点で粒界腐食は停止し、全面腐食へと変わる。

この粒界腐食に伴つて isolate した結晶粒から拡散によって出てくる Cr 量は、次のように表わせる。

$$C_T = \pi d C_M R \left(\frac{\tilde{D}_{Cr}}{a^2} \right)^{\frac{1}{2}} t^{\frac{3}{2}} \quad (2-13)$$

C_T ; total gram atoms of Cr available at time t (sec)

C_M ; concentration of Cr in the alloy (gram atoms/cm³)

πd ; internal surface area of fuel pin of diameter d per unit length (cm²)

R ; linear intergranular penetration rate (cm/sec)

a ; effective grain radius (cm)

つまりこの C_T が酸素供給量と等しくなつた時が、粒界腐食が停止する時刻である。

以上の腐食過程を用いて、(O:M)_i = 2.00, 1.98 について計算した例が次の表である。

Table 2-1 SUMMARY OF AMOUNT AND TYPE OF ATTACK AT VARIOUS INITIAL O:M

Cladding Temperature (°C)	Onset of ¹ Intergranular Attack (h)	Amount Oxidized ² Prior to Breakaway (O:M Units)	Period of ³ Intergranular Attack (h)	Amount Oxidized ⁴ at 10% BU (8800h) (O:M Units)	Depth of ⁵ Intergranular Attack (mils)	Depth of ⁶ Uniform Attack (mils)
A. Initial O:M = 2.00 (EBR-II Irradistion)						
550	6	<0.001	>8800 (1 yr)	0.03	20.2	0
600	100	0.0056	3550	0.05	17.6	0.3
650	276	0.0154	1000	0.05	9.6	1.0
700	645	0.037	90	0.05	1.5	2.3
750	337 ⁷	0.04	0	0.05	0	2.5
B. Initial O:M = 1.97 (EBR-II Irradiation)						
550	6	0.001	6607	0.02	15	0
600	100	0.0056	794	0.02	3.5	0.3
650	115 ⁷	0.01	0	0.02	0	0.6
700	47 ⁷	0.01	0	0.02	0	0.6
750	21 ⁷	0.01	0	0.02	0	0.6

¹ Intergranular attack is assumed to begin after scale breakdown. T_B

² Extent of Oxygen Uptake (O:M Units) prior to scale breakdown. Remaining oxygen will be absorbed during intergranular attack period.

³ Intergrandar attack is assumed to terminate whan the chromium available exceeds that needed to absorb remaining oxygen available from the fuel.

⁴ Extent of Oxygen Uptake after 10% BU includes that released due to buinup (EBR-II irradiation).

⁵ Depth of attack is obtained from product of the penetration rate and the period of intergranular attack

⁶ Depth is determined by chromium needed to taks up oxygen dunng prebreakway period. Additional depth to absorb oxygen released from burn up not included. For EBR-II irradistions, additional depth of uniform attack is ~0.6 mils.

⁷ Limited by oxygen available.

この計算結果を EBRⅡでの照射結果（最大腐食量は、600～650°Cで起り、約 9 milである）と一致させる為に（2-12）式の不純物 C 存在下での粒界腐食速度 R の代りに $R/10$ を用いて計算した結果を次に示す。但しここでは、全面腐食に粒界腐食を加えた全腐食量の燃焼度による変化を示している。

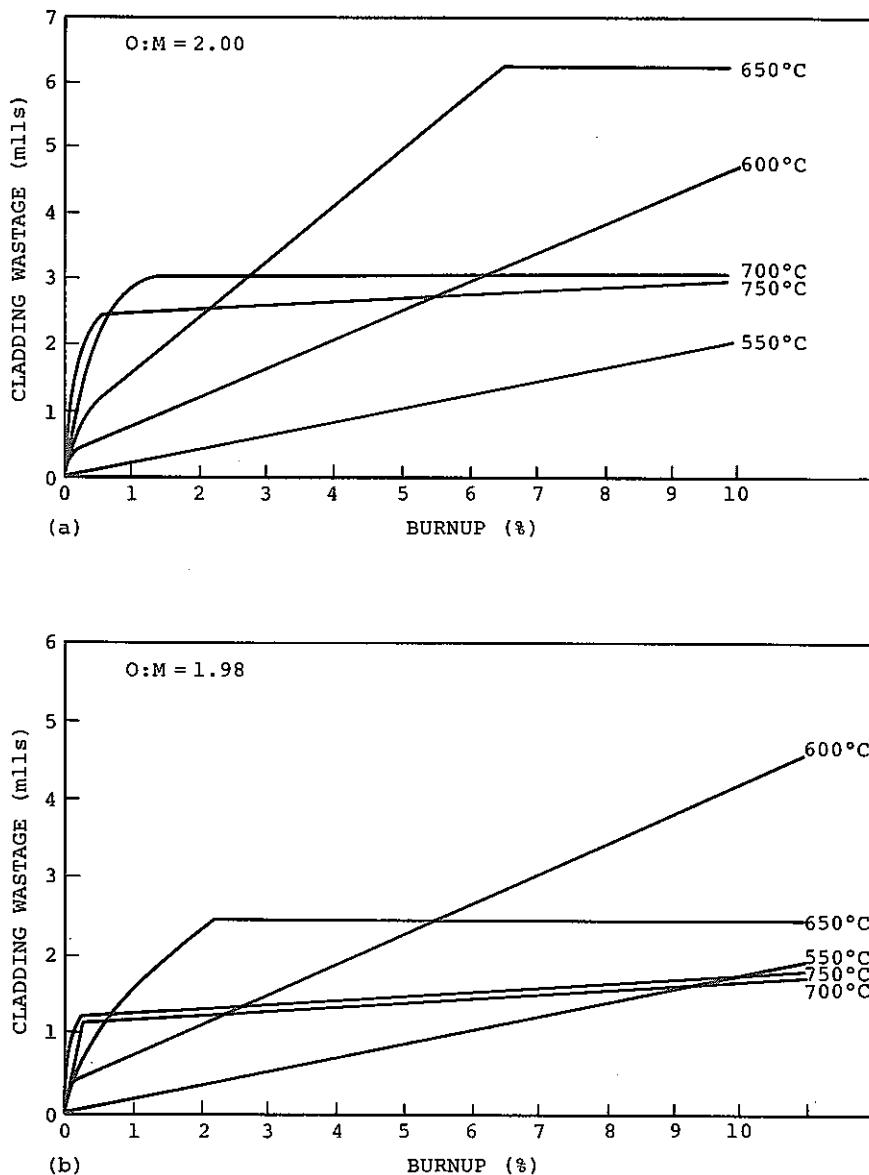
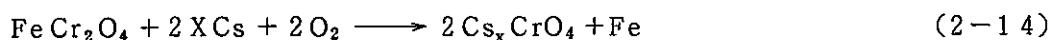


Fig. 2-5. Calculated Relationship Between Cladding Wastage and Burnup at Various Temperatures and O:M

Table 2-1, Fig 2-5 に示されているように腐食量は温度と共に単純に増加するではなく高温では逆に減少していくことがわかる。

1.3 Csによる腐食

Bradbury et al.⁽⁵⁵⁾は、反応機構をCs単体による腐食によって説明している。FCCIが起こる反応開始において、ステンレス鋼表面の酸化保護膜の破壊が必要であるが、Csは実際の炉内での温度酸素ポテンシャル条件では、 Cr_2O_3 とは反応しないことが炉外実験によって確かめられている。従って、ここではCsは Cr_2O_3 と反応するのではなく、保護膜中に局所的に生成したスピネル(Fig. 2-6)つまり、 FeCr_2O_4 と次のように反応している。(Fig. 2-7)



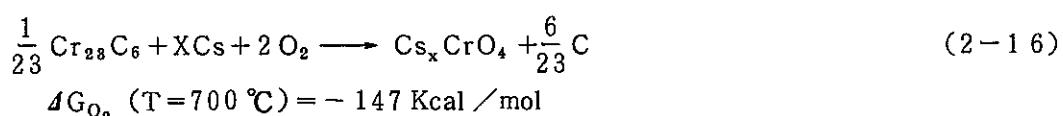
このスピネルが生成する部分は、ステンレス鋼表面の引っかきキズなどの欠陥がある部分で、局所的に燃料と接触し温度が高くなる部分があるとしている。

このようにして、保護膜が破壊した後、Csはステンレス鋼成分と直接反応する。(Fig. 2-8)

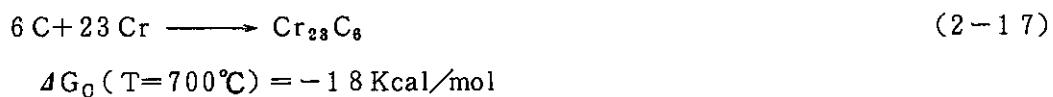


この反応により、被覆管内面近く及び粒界近傍のCr濃度が減少する。(Fig. 2-9) FCCオーステナイトのCr量が5~10 wt%以下に低下すると、FCCオーステナイトからBCCフェライトへの相変態が起こる。この相変態による粒界腐食への効果は次の2つが考えられる。まず第1番目は、Fe, Cr, Ni, Uの拡散速度がフェライト相中ではオーステナイト相中に比べ大きくなる事である。

次に第2番目には、フェライト相中のCの溶解度がオーステナイト相中よりも小さくなることである。ステンレス鋼の鋭敏化とこの第2番目の効果により粒界に Cr_{23}C_6 が生成する。この炭化物が粒界でCrと反応し



遊離Cが粒界に沿って内部に拡散し、次の反応により再び炭化物を形成する。(Fig. 2-10)



このように2-16, 2-17の反応はくり返えし、Cは触媒として作用し、粒界に沿って Cs_xCrO_4 が生成することにより粒界腐食が進行してゆく。

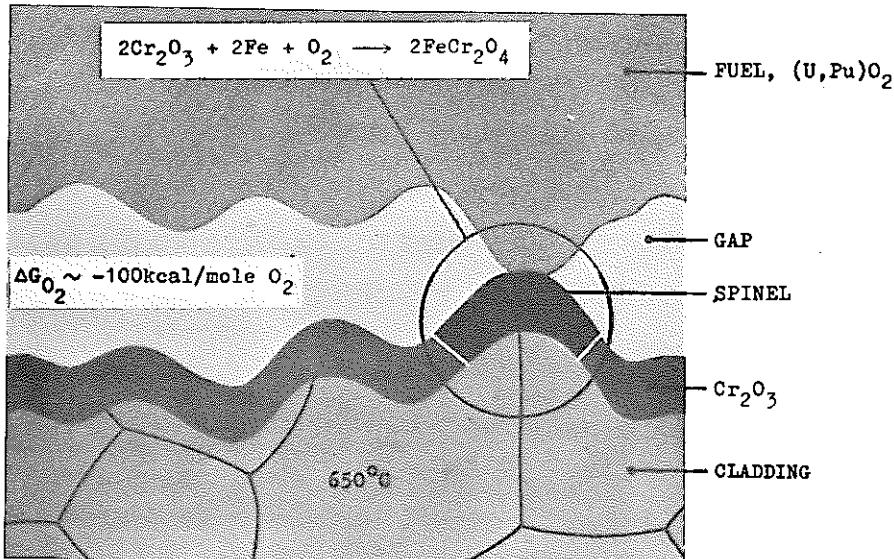


Fig. 2-6 Formation of spinel.

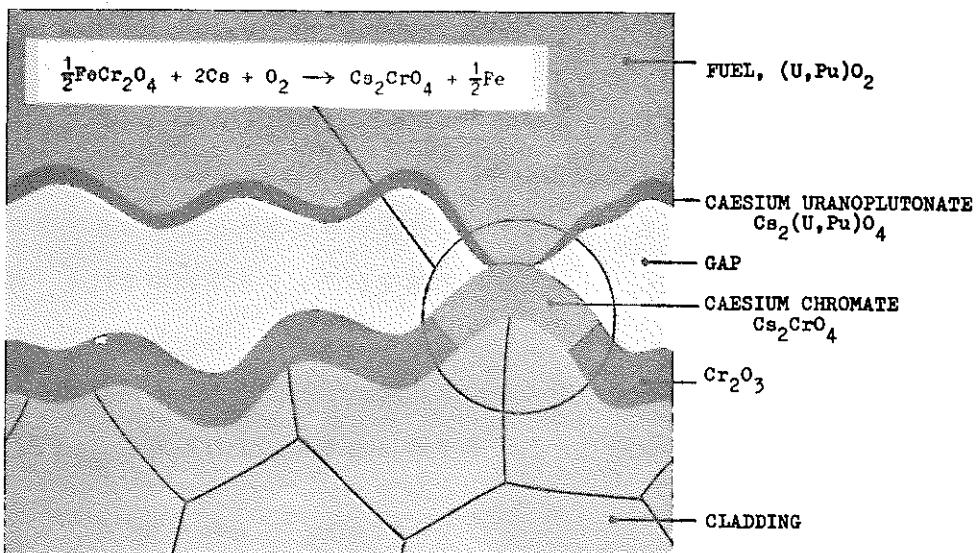


Fig. 2-7 Decomposition of spinel.

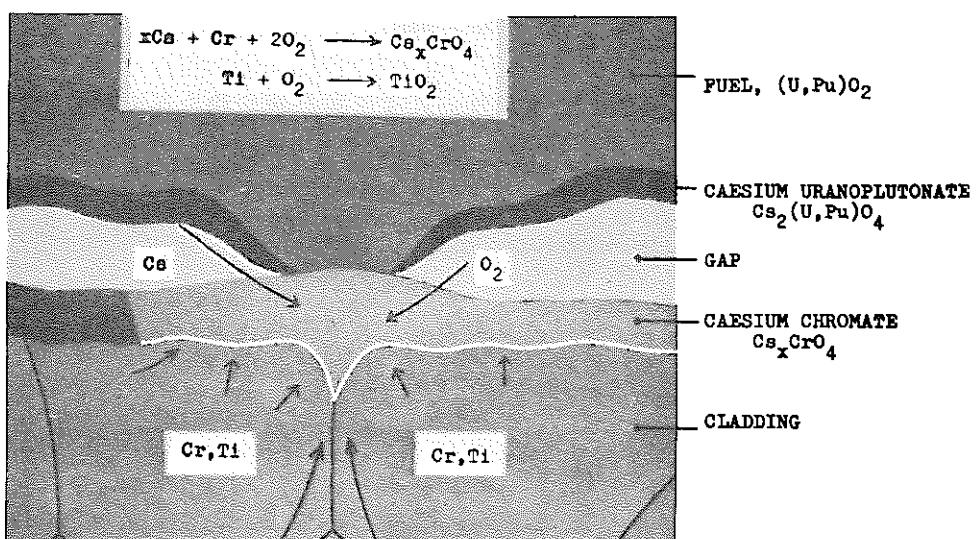


Fig. 2-8 Direct reaction of caesium with the cladding.

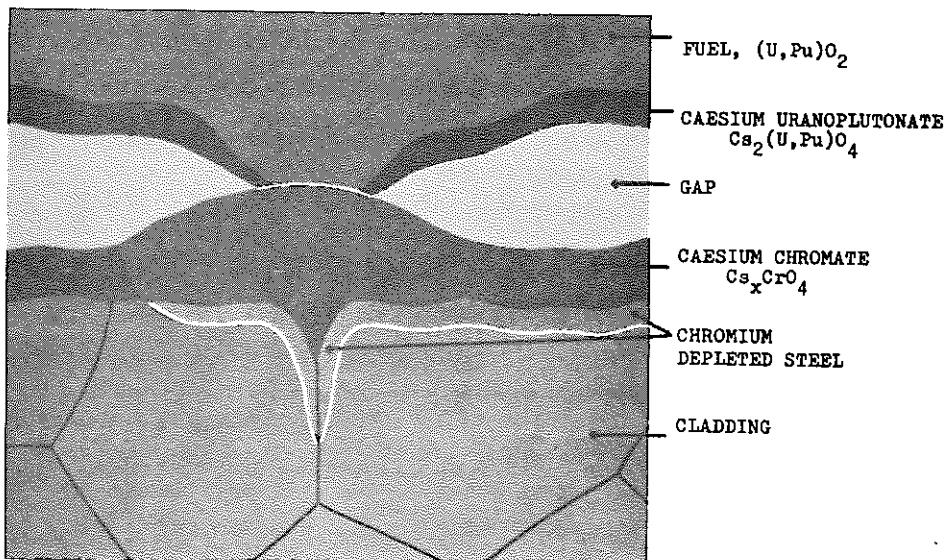


Fig. 2-9 Depletion of chromium in the cladding steel.

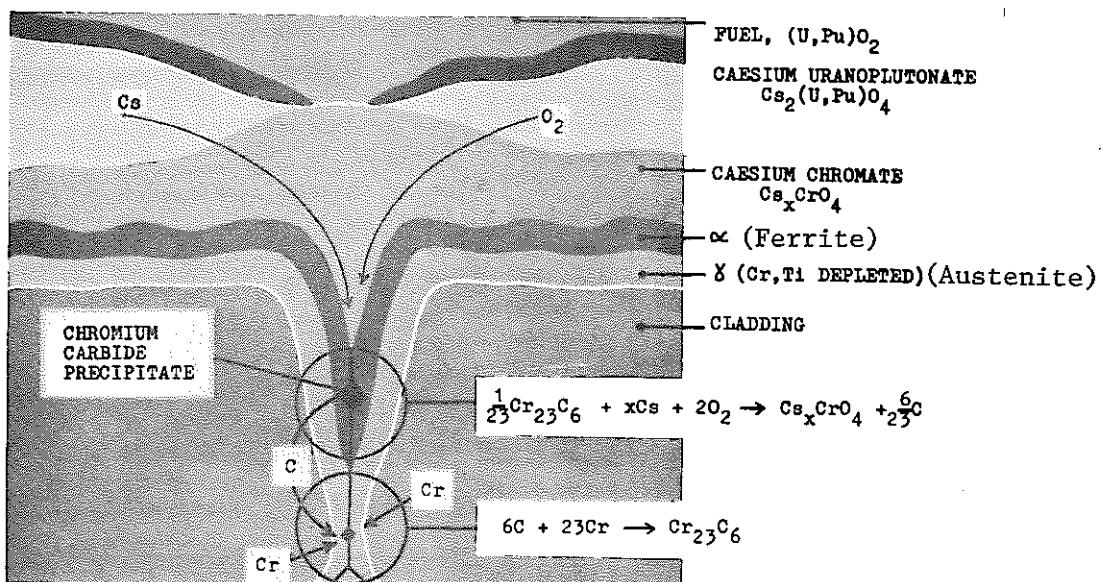


Fig. 2-10 Caesium attack on grain boundary carbides.

1.4 まとめ

以上が粒界腐食に対するモデルであるが、腐食現象のバラツキという観点からこの3つのモデルの間の考え方の違いを比べてみる。実際の炉内における照射後試験では、温度、酸素ポテンシャル等の条件が同じと考えられる場合でも、あるものは腐食が起り、又、あるものは腐食が起らないという結果のバラツキが見られる。Gotzmanモデルでは腐食現象のバラツキは、燃料表面一被覆管内面間の温度差のバラツキであるとしている。つまり、一見被覆管内面での条件（温度、酸素ポテンシャル等）が同じように考えられる場合でも、線出力燃料密度、ギャップコンダクタンス等の違いにより燃料表面一被覆管内面間の温度差が違ことにより reaction potential が変わるとしている。

Adamson et al. のモデルでは、この腐食現象のバラツキについては考慮せず、平均的な条件下での腐食を定量的に扱うことを目的としている。

Bradbury et al. は、被覆管表面でのスピネル生成が局所的に起こることにより、このバラツキが説明できるとしている。

2. 被覆管成分の燃料表面への移動

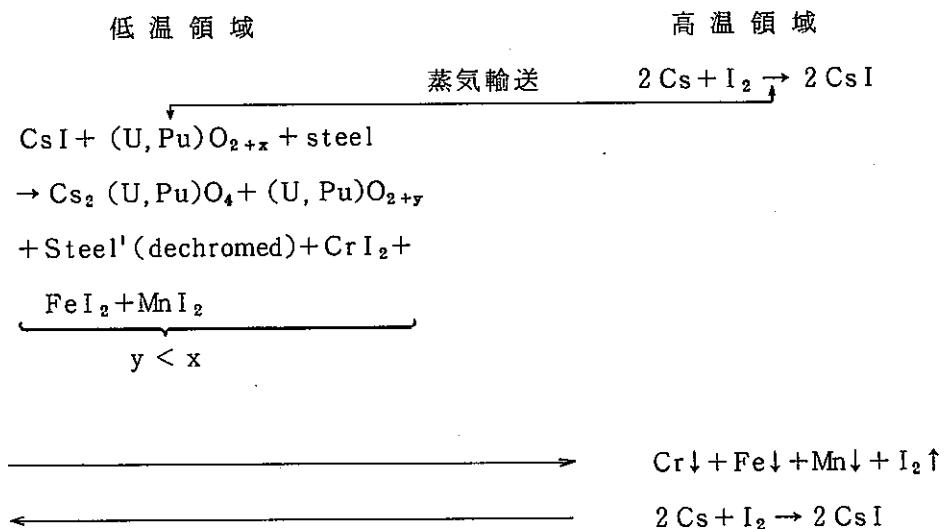
燃料の照射後試験結果で、燃料表面及びそのクラック内部に被覆管成分が検出されることがある。

この被覆管成分の輸送のメカニズムは、Calais et al.⁽⁶¹⁾のIによる蒸気輸送過程と、Adamson et al.⁽⁶²⁾⁽⁶³⁾によるCs-Te液相による輸送過程の2つが考えられている。次にこの2つの過程を紹介する。

2.1 Iによる輸送

Iによる被覆管成分の輸送機構は、蒸気輸送であると考えられる。この過程には通常 Van Arkel-de Boer過程が考えられている。

D. Calaie et al.⁽⁶¹⁾はCs, I, 被覆管成分及び燃料も含めた次のような反応を考えている。



燃料内部でCsとIが結合しCsIとなる。CsIは気体状態で燃料中クラック粒界あるいは連結した開孔を経由して、低温側に移動する。被覆管表面に到達すればそこでCsIが被覆管成分及び燃料と反応し、被覆管成分のヨウ化物を生成する。次にこれらのヨウ化物は蒸気圧により被覆管表面を離れて燃料表面あるいはクラックや開孔などを経由して燃料内部に移動しそこで解離する。Iはそこで再びCsと結合してCsIとなり、同じ過程をくり返すことになる。このようなくくり返し反応が続けられた結果、被覆管成分は燃料中に残留し、Csは被覆管中に残留することになる。

2.2 Cs-Te mixtureによる輸送

M. G. Adamson et al.⁽⁶²⁾⁽⁶³⁾は、被覆管成分の燃料への輸送を燃料-被覆管ギャップ中の液相Cs-Te mixtureによって説明している。

その過程を次に示す。

Step 1 : 被覆管表面（温度 T_1 ）で Fe, Cr, Ni の Telluride ($M Te_n$; $M=Fe, Cr, Ni$) が形成される。

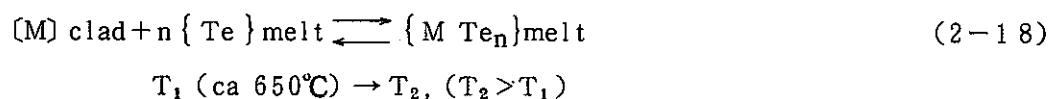
Step 2 : $M Te_n$ の Cs-Te 液相中への溶解

Step 3 : 溶解した $M Te_n$ の温度勾配による燃料表面への移動

Step 4 : 燃料表面及び燃料内部（温度 T_2 ）での $M Te_n$ の分解と M の沈着

Step 5 : Te, Cs の温度勾配による被覆管内面への移動

この1～5の過程がくり返されることによって被覆管成分が燃料表面へ移動する。これを化学反応式で表わすと次のようになる。



次にこの過程の可能性を熱力学的に考察する。

2-18式により

$$\frac{a_{M Te_n}}{a_M a_{Te}^n} = K_M = \exp\left(\frac{\Delta S}{R}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right) \quad (2-19)$$

ここで a_i ; i 成分の活量

$\Delta S_M, \Delta H_M$; 2-18式の反応のエントロピー及びエンタルピー変化

K_M ; 平衡定数

Cs-Te 液相中の $M Te_n$ について理想希薄溶液の仮定が成立するとすれば、その濃度を $C_M Te_n$ として、

$$a_M Te_n = k_M C_M Te_n \quad k_M = \text{const.} \quad (2-20)$$

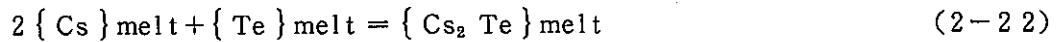
が成立つ

2-19, 2-20より a_M はステンレス中の M のモル分率 N_M に等しいとして、又 ΔS_M は、ここで扱われる温度範囲で一定であるとすれば

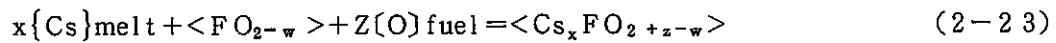
$$C_M Te_n = k_M^i \cdot N_M \cdot a_{Te}^n \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H_M}{RT}\right) \quad (2-21)$$

と表わされる。但し、 $k_M^1 = \text{Const}$

2-21式の a_{Te} は、次の反応によってきまとと考え



さらに、ここでの Cs の括量は、次の燃料表面での反応によって決まるとする。



ここで F は U, Pu を表わす。

(2-22), (2-23) の平衡関係より a_{Te} を P_{O_2} で表わし 2-20 へ代入すれば

$$C_{M,\text{melt}} = k''_M, N_H, P_{O_2}^{z_H} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H_M}{RT}\right) \quad (2-24)$$

となる。

(2-21) 及び (2-24) が被覆管表面及び燃料表面で成立するとすれば、この濃度差、 ΔC_M により被覆管成分が移動することになる。

$$\Delta C_M = C_{M,T_2} - C_{M,T_1} = K_M^1 \cdot a_{Te}^n [N_{M,T_2} \exp\left(-\frac{\Delta H_M}{RT_2}\right) - N_{M,T_1} \exp\left(\frac{\Delta H_M}{RT_1}\right)] \quad (2-25)$$

次に、Fick's First Law を用いてこの現象の速度論を考える。

$$\frac{dW_M}{dt} = \frac{D_M \Delta C_M}{l_{\text{eff}}} \quad (2-26)$$

ここで、 W_M ; 被覆管の単位表面 (1 cm^2) から単位時間 (1 hr) に輸送される成分 M の重量 (gm)

D_M ; Cs-Te 液相中の拡散係数 ($= 2.8 \times 10^{-8} \text{ cm}^2 \text{ hr}^{-1}$)

t ; 時間 (h)

ΔC_M ; 濃度差 (gm cm^{-3})

l_{eff} ; ギャップ巾, これは次の式に従うと考えられる。

$$l_{\text{eff}} (\text{cm} \times 10^{-4}) = 25.4 - 5.1 \text{ B.U. (at\%)} \quad \text{for } 0 < \text{B.U.} \leq 4 \\ = 5.1 \quad \text{for } \text{B.U.} \geq 4$$

2-26 式を積分すると

$$\Delta W_{M,t} = \left[\frac{D_M \Delta C_M}{l_{\text{eff}}} \cdot \Delta t \right]_{t=0}^{t=t'} + \left[\frac{D_M \Delta C_M}{l_{\text{eff}}} \Delta t \right]_{t=t'}^{t=t''} \quad (2-27)$$

ここで t' は、4 at% B.U. に相当する時間である。

通常の運転条件であれば、 ΔW_M は、次のように書ける。

$$\Delta W_M \cong 6.85 \times 10^{-5} \Delta C_M \cdot (t - t') \quad (2-28)$$

この式を用いて実際の炉内での現象を評価したものを Table 2-2 に示す。

TABLE 2-2 CONDITIONS AND RESULTS FOR IRRADIATION TEST PENS SHOWING CLADDING COMPONENT CHEMICAL TRANSPORT

FUEL PIN NO.	REFERENCE	FUEL COMPOSITION		CLADDING		PEAK PIN POWER (W/mm)	PEAK CLADDING I.D. TEMP. T ₁ (°C)	IRRADIATION TIME(hrs) ^a	w _{CCT} ^{max} to 4 at.%(t')	d _{FCCI} (μm)	ΣΔW _M (mg.cm ⁻²)	RATE OF WT. LOSS (μg.cm ⁻² hr ⁻¹)			ΔC _M (mg.cm ⁻³)
		(O:M)	PuO ₂	INNER DIAMETER (mm)	PEAK B.U. (at.%)							Overall	Adjusted		
WSA-2-17	5 (WARD)	0.973	25	5.08	7.2	33.1	620	(9000)	(5000)	~25	~25	20	2.2	5.0	73
P-23A-21	3,7(MEDL)	1.984	25	5.08	5.0	42.3	700	4618	(3700)	~7	33	5.6	1.2	6.1	89
P-23A-20	6,7(MEDL)	1.984	25	5.08	9.4	42.3	675	8685	(3700)	~47	~100	38	4.3	7.5	109
P23A-24	7 (MEDL)	1.966	25	5.08	9.4	42.3	675	8685	(3700)	<5	25	<4	<0.5	<0.8	<12
F-1/G-4	8 (GA)	1.983	15	6.60	13.0	43.6	680	(17,000)	(5230)	~80	109	64	3.8	5.4	79
SNR/Rapsodie	9	1.99+.01	30	5.24	10.6	~49	~620	8750	(3300)	~20	80	16	1.8	2.9	42
DFR-304(61,62)	11	1.995	20	6.27	6.3	~49	~675	(6950)	(4410)	~28	~100	22	3.2	8.7	127
CFC01-0	15 (MDL)	2.00	20	5.24	(>50)	~49	700	1030	-	~80	190	64	62	62	905
CAL-1 Series	14 (GE)	1.987	25	5.08	(>50)	44.3	~675	256	-	~110	≥380	88	344	344	5000

a) Parentheses indicate estimated irradiation times.

但し、 d_{FCCI};被覆管表面の wastage の量

2.3 まとめ

被覆管成分の燃料表面への移動に関するメカニズムは、前述のように、FCCI研究の初期に、Van Arked - de Boer過程による輸送機構が提唱されただけであったが、最近、Adamsonによる新しいメカニズムが提唱された。

しかし、現在のところ、この2つのみであり、IGAの研究に比べ熱力学的基礎データ及び炉外腐食試験のデータの蓄積が不足しており、今後この方面的研究が必要であると考えられる。

あとがき

FCCI を評価する場合に、その基礎となる燃料ピン内の化学と FCCI の機構について調査を行った。

燃料ピン内の化学において最も重要な因子は温度と共に酸素ポテンシャルである。典型的な LMFBR 燃料の場合、酸素再分派により燃料表面の O/M 比は約 2 に近い値となり酸素ポテンシャルは約 -100 kcal/mol である。FCCIにおいて主要な FP は Cs の他 I, Te であり、それらの燃料ピン内での存在形態、挙動は熱力学的条件、すなわち、温度、酸素ポテンシャル、Cs 分圧、H₂ 分圧からある程度推定する事が可能である。Cs と燃料あるいはブランケット UO₂との反応は、Cs の軸方向移動に関連して重要である。燃料ピン内では Cs₂(U, Pu)O₄ および Cs₂UO₄ が生成する事が予想され、この反応により燃料一被覆管ギャップ中の Cs 分圧は決定されると考えられる。被覆管の腐食の点からは Cs_XCrO₄ (X=3.4) と CsOH が重要であり、また、当否は別として被覆管成分の質量移行の点から被覆管成分のヨウ化物およびテルル化物も考慮に入れる必要がある。これらの化合物の生成条件は本報告に示す通りであるが、実際の燃料ピン内への適用に際しては燃料表面一被覆管内面の温度、酸素ポテンシャル、Cs 分圧等の条件を厳密に評価する必要がある。

次に、FCCI の機構としてここに紹介したモデルは I による輸送のモデルを除けば、全て最近に提出されたものばかりである。この事は、炉外、炉内を含めた FCCI の研究そのものがここ 2~3 年の間にまとまりを見せ始め、また、モデル構築に必要な FP に関する基礎的な熱力学データが最近になって出そろって来たためと考えられる。しかし、それらの基礎データ間の信頼性には差があるようである。Cs 化合物に関しては最近の多くの研究により比較的信頼性の高いデータが得られている。I および Te 化合物についてはまだまだ信頼しうるデータに乏しい。従って、今後、これらの化合物に関するデータの収集も望まれる。

参 考 文 献

- (1) T.L. Markin, E.J. McIver, Proc. 3rd. Int. Conf. Plutonium 1965(1967) 845
- (2) N.A. Javed, J.Nucl.Mat. 47(1973) 336
- (3) R.E. Woodley, J.Am.Cecam.Soc. 56(1973) 116
- (4) G.C. Swanson, LA-6083-T(1975)
- (5) G.R. Chilton et al., Plutonium 1975 and other Actinides, (1976) 171
- (6) M. Tetenbaum, Thermodynamics of Nuclear Materials, 1974, Vol. II, IAEA, Vienna(1975) 305
- (7) R.E. Woodley et al. J.Nucl.Mat. 82(1979) 65
- (8) P.E. Blackburn, ibid. 46(1973) 244
- (9) C.E. Johnson et al., React.Tech. 15(1972/73) 303
- (10) W. Breitung, KFK-2363(1976)
- (11) C.R.A. Catlow, J.Nucl.Mat. 67(1977) 236
- (12) M.H. Rand et al., Thermodynamics, 1965, IAEA, Vienna(1966) 3
- (13) M.H. Rand et al., Thermodynamics of Nuclear Materials, 1967, IAEA, Vienna(1968) 637
- (14) E.A. Aitken, J.Nucl.Mat. 30(1969) 62
- (15) E.A. Aitken, et al., GFAP-12254(1971)
- (16) S.K. Evans, et al. Behavior and Chemical State of Irradiated Ceramic Fuels, 1972, IAEA, Vienna(1974) 83
- (17) M. Bober et al. Adv.Nucl.Sci.Tech. 7(1973) 121
- (18) P.E. Blackburn et al. Thermodynamics of Nuclear Materials, 1974, Vol. II, IAEA, Vienna(1975) 17
- (19) R.L. Gibby et al. Int. Conf. Fast Breeder Reactor Fuel Performance (1979) 188
- (20) JANAF Thermochemical Tables, NSRD-NBS-37(1971)
- (21) M.W. Chase et al. "JANAF Thermochemical Tables, 1974 Supplement" J.Phys.Chem.Ref.Data, 3(1974)
- (22) M.W. Chase et al. "JANAF Thermochemical Tables, 1975 Supplement", ibid. 4(1975)
- (23) H.R. Hoekstra, Inorg.Nucl.Chem.Letters, 9(1973) 1291
- (24) P.A.G. O'Hare et al. J.Chem.Therodyn. 5(1973) 851
- (25) H.F. Flotow et al. ibid. 6(1974) 135
- (26) P.A.G. O'Hare et al. ibid. 6(1974) 251
- (27) J.L. Settle et al. ibid. 6(1974) 263
- (28) P.A.G. O'Hare et al. ibid. 6(1974) 1161

- (29) P.A.G. O'Hare et al. ANL-8121(1974)
- (30) P.A.G. O'Hare et al. J.Chem.Thermodyn. 7(1975) 831
- (31) W.G. Lyon et al. ibid. 7(1975) 1189
- (32) P.A.G. O'Hare et al. ibid. 7(1975) 1195
- (33) P.A.G. O'Hare et al. IAEA-SM-190/42(1975) 439
- (34) P.A.G. O'Hare et al. ANL-75-47(1975)
- (35) P.A.G. O'Hare et al. J.Chem.Thermodyn. 8(1976) 353
- (36) P.A.G. O'Hare et al. ibid 8(1976) 361
- (37) P.A.G. O'Hare et al. ibid 8(1976) 381
- (38) P.A.G. O'Hare et al. ANL-76-102(1976)
- (39) P.A.G. O'Hare et al. "The Chemical Thermodynamics of the Actinide Elements and Compounds, 3: Miscellaneous Actinide Compounds, IAEA, Vienna, 1978, 9, 40
- (40) I. Barin et al. "Thermochemical Properties of Inorganic Substances" (Springer Verlag, Berlin, 1973)
- (41) I. Barin et al. "Thermochemical Properties of Inorganic Substances, Supplement"(Springer Verlag, Berlin, 1977)
- (42) Y. Takahashi, J.Atom.Energ.Soc. Japan 20(1978) 400
- (43) D.C. Fee et al. ANL-76-126(1977) and J.Inorg.Nucl.Chem. 40(1978) 1375
- (44) D.C. Fee et al. J.Nucl.Mat. 78(1978) 219
- (45) D.C. Fee et al. Int. Conf. on Fast Breeder Reactor Fuel Performance (1979) 372
- (46) D.C. Fee et al. J.Nucl.Mat. 84(1979) 286
- (47) O. Götymann et al. ibid. 74(1979) 68
- (48) O. Götymann, ibid. 94(1979) 39
- (49) C.E. Knights et al. ibid. 84(1979) 189
- (50) P.S. Maiya et al. ANL-7825(1971) 5, 28
- (51) E.H.P. Cordfunke et al. J.Inorg.Nucl.Chem. 37(1975) 1433
- (52) E.H.P. Cordfunke IAEA-SM-190/6(1975) 185
- (53) J.E. Antill et al. J.Nucl.Mat. 56(1975) 47
- (54) C.F. Knights et al. "High Temperature Chemistry of Inorganic and Ceramic Metals" Special Publ. No. 30(1976) 135 Chem.Soc. (London)
- (55) M.H. Bradbury et al. IAEA-IWGFR/16(1977) 51
- (56) J. Johnson J.Phys.Chem. 79(1975) 722
- (57) J. Johnson et al. IAEA-SM-190/43(1975) 99
- (58) M. Kanno et al. IAEA-IWGFR/16(1977) 89
- (59) 燃料安全専門委「ジルカロイ被覆管の応力腐食割れ(SCC)に関する調査」

NEN-ANSEN № 2 (1978) p.191, 原安協

- (60) M. Auburt et al. J.Nucl.Mat. 58(1975) 257
- (61) D. Calais et al. IAEA-SM-190/24(1975)
- (62) M.G. Adamson et al. IAEA-SM-236/63(1979)
- (63) M.G. Adamson et al. Int. Conf. on Fast Breeder Reactor Fuel Performance (1979) 538
- (64) T.L. Allen J.Am.Soc. 78(1956) 5476
- (65) M.G. Adamson et al. GEAP-14075(1976) and IAEA-IWGFR/16(1977) 170
- (66) 核燃料挙動研究専門委員会「酸化物燃料の照射挙動」
日本原子力学会誌 19 (1977) 303.
- (67) FBR燃材専門委 FCCI ワーキンググループ「燃料－被覆管化学的相互作用」
SN241-78-01 (1978)
- (68) H.E. McCoy, Corrosion, 21(1965) 84
- (69) M.G. Adamson et al. GEAP-14136(1976)

付録A 热力学データ

表A-1 Cs化合物の標準熱力学量

表A-2 Csの化学に関連する化合物の熱力学
関数表 (20, 21, 25, 35)

表A-3 I, Teの化学に関連する化合物の標
準自由エネルギー

表A-4 I, Teの化学に関連する化合物の熱
力学関数表 (39, 40)

Table A-1. Standard thermodynamic properties of compounds
related to cesium chemistry

	S°(298) cal/mol.K	-ΔHf°(298) kcal/mol	-ΔSf°(298) cal/mol.K	-ΔGf°(298) kcal/mol	Ref.
Cs ₂ O(c)	35.10	82.69	30.10	73.72	24
CsOH(c)	23.60	99.60	36.86	88.61	21
CsOH(l)	28.31	97.04	32.15	87.45	21
CsOH(g)	60.87	62.0	- 0.41	62.12	21
Cs ₂ UO ₄ (c)	52.50	460.4	98.25	431.1	39
Cs ₂ U ₂ O ₇ (c)	79.30	764.6	157	717.8	39
Cs ₂ U ₄ O ₁₂ (c)	122.9	1331	260.5	1253.6	43
Cs ₂ Cr ₂ O ₇ (c)	78.89	499.79	144.62	456.68	37
Cs ₂ CrO ₄ (c)	54.63	341.78	89.7	315.04	31 32
Cs ₃ CrO ₄ (c)	70.75	368.71	93.93	340.71	46
Cs ₄ CrO ₄ (c)	86.52	379.45	98.23	350.16	46
Cs ₅ CrO ₄ (c)	102.77	383.84	102.53	353.27	46
Cs ₂ MoO ₄ (c)	59.36	362.0	86.19	336.30	24
Cs ₂ Mo ₂ O ₇ (c)	81.2	550.3	144.7	507.2	29

Table A-2. Thermodynamic tables of compounds related to
cesium chemistry

Cs(c), Cs(l), Cs(g)	— JANAF	Tables (20)
CsOH(c), CsOH(l), CsOH(g)	— JANAF	Tables (21)
Cs ₂ O(c)	— Flotow's results	(25)
Cs ₂ UO ₄ (c)	— O'Hare's results	(35)
O ₂ (g), H ₂ (g), H ₂ O(g)	— JANAF	Tables (20)
Cr(c), Cr ₂ O ₃ (c)	— JANAF	Tables (22)
Mo(c), MoO ₂ (c)	— JANAF	Tables (20)

Cesium (Cs)

(Crystal)

GFW = 132.905

T, °K	Cp°	gibbs/mol		H°-H°sec	kcal/mol		Log Kp
		S°	-(G°-H°sec)/T		ΔH_f°	ΔG_f°	
0	.000	.000	INFINITE	- 1.844	.000	.000	INFINITE
100	6.169	13.134	26.443	- 1.331	.000	.000	.000
200	6.645	17.556	21.007	- .690	.000	.000	.000
298	7.695	20.351	20.351	.000	.000	.000	.000
300	7.733	20.399	20.351	.014	.000	.000	.000
400	8.620	22.775	20.669	.842	- .434	.156	-.085
500	8.890	24.733	21.292	1.720	- .305	.289	-.126
600	8.970	26.361	22.005	2.614	- .153	.394	-.144
700	8.990	27.746	22.729	3.512	.005	.473	-.148
800	8.995	28.947	23.433	4.411	.164	.528	-.144
900	9.000	30.006	24.106	5.311	.325	.565	-.137
1000	9.000	30.955	24.744	6.211	- 15.596	1.404	-.307

June 30, 1968

Cesium (Cs)

(Liquid)

GFW = 132.905

T, °K	Cp°	gibbs/mol		H°-H°sec	kcal/mol		ΔG_f°	Log Kp
		S°	-(G°-H°sec)/T		ΔH_f°			
0								
100								
200								
298	7.753	22.005	22.005	.000	.499	.006	-	.004
300	7.747	22.053	22.005	.014	.499	.003	-	.002
400	7.533	24.250	22.306	.777	.000	.000		.000
500	7.446	25.920	22.869	1.526	.000	.000		.000
600	7.409	27.274	23.494	2.268	.000	.000		.000
700	7.395	28.415	24.117	3.008	.000	.000		.000
800	7.393	29.402	24.718	3.748	.000	.000		.000
900	7.399	30.273	25.287	4.487	.000	.000		.000
1000	7.409	31.053	25.826	5.228	- 16.080	.821	-	.179
1100	7.422	31.760	26.334	5.969	- 15.835	2.500	-	.497
1200	7.437	32.407	26.813	6.712	- 15.589	4.155	-	.757
1300	7.454	33.003	27.267	7.457	- 15.341	5.791	-	.974
1400	7.472	33.556	27.696	8.203	- 15.093	7.406	-	1.156
1500	7.491	34.072	28.104	8.951	- 14.842	9.005	-	1.312

June 30, 1968

Cesium (Cs)

(Ideal Gas)

GFW = 132.905

T, °K	Cp°	gibbs/mol		H°-H°sec	kcal/mol		Log Kp
		S°	-(G°-H°sec)/T		ΔH_f°	ΔG_f°	
0	.000	.000	INFINITE	- 1.481	18.689	18.689	INFINITE
100	4.968	36.515	46.359	- .984	18.667	16.328	- 35.606
200	4.968	39.959	42.397	- .488	18.527	14.042	- 15.344
298	4.968	41.942	41.942	.000	18.320	11.883	- 8.710
300	4.968	41.973	41.942	.009	18.315	11.843	- 8.628
400	4.968	43.402	42.137	.506	17.530	9.889	- 5.403
500	4.968	44.511	42.505	1.003	17.298	8.002	- 3.498
600	4.968	45.417	42.917	1.500	17.053	6.167	- 2.246
700	4.968	46.162	43.330	1.996	16.809	4.372	- 1.365
800	4.968	46.846	43.729	2.493	16.566	2.611	- .713
900	4.968	47.431	44.109	2.990	16.324	.882	.214
1000	4.968	47.954	44.468	3.487	.000	.000	.000
1100	4.968	48.428	44.806	3.984	.000	.000	.000
1200	4.969	48.860	45.127	4.480	.000	.000	.000
1300	4.971	49.258	45.429	4.977	.000	.000	.000
1400	4.975	49.627	45.716	5.475	.000	.000	.000
1500	4.981	49.970	45.988	5.972	.000	.000	.000
1600	4.992	50.292	46.247	6.471	.000	.000	.000
1700	5.008	50.595	46.494	6.971	.000	.000	.000
1800	5.031	50.882	46.730	7.473	.000	.000	.000
1900	5.062	51.154	46.956	7.977	.000	.000	.000
2000	5.102	51.415	47.172	8.485	.000	.000	.000
2100	5.154	51.665	47.380	8.998	.000	.000	.000
2200	5.218	51.906	47.581	9.517	.000	.000	.000
2300	5.295	52.140	47.774	10.042	.000	.000	.000
2400	5.385	52.367	47.960	10.576	.000	.000	.000
2500	5.491	52.589	48.141	11.120	.000	.000	.000
2600	5.613	52.807	48.316	11.675	.000	.000	.000
2700	5.752	53.021	48.487	12.243	.000	.000	.000
2800	5.908	53.233	48.652	12.826	.000	.000	.000
2900	6.085	53.444	48.814	13.425	.000	.000	.000
3000	6.282	53.653	48.972	14.043	.000	.000	.000
3100	6.502	53.863	49.126	14.682	.000	.000	.000
3200	6.747	54.073	49.278	15.345	.000	.000	.000
3300	7.018	54.285	49.426	16.033	.000	.000	.000
3400	7.317	54.498	49.572	16.749	.000	.000	.000
3500	7.647	54.715	49.716	17.497	.000	.000	.000
3600	8.008	54.936	49.858	18.280	.000	.000	.000
3700	8.403	55.160	49.998	19.100	.000	.000	.000
3800	8.831	55.390	50.137	19.961	.000	.000	.000
3900	9.294	55.625	50.275	20.867	.000	.000	.000
4000	9.790	55.867	50.411	21.821	.000	.000	.000
4100	10.318	56.115	50.548	22.826	.000	.000	.000
4200	10.876	56.370	50.683	23.886	.000	.000	.000
4300	11.461	56.633	50.818	25.003	.000	.000	.000
4400	12.069	56.903	50.954	26.179	.000	.000	.000
4500	12.694	57.182	51.089	27.417	.000	.000	.000
4600	13.331	57.468	51.224	28.718	.000	.000	.000
4700	13.972	57.761	51.360	30.083	.000	.000	.000
4800	14.612	58.062	51.497	31.513	.000	.000	.000
4900	15.242	58.370	51.634	33.005	.000	.000	.000
5000	15.855	58.684	51.772	34.560	.000	.000	.000
5100	16.440	59.004	51.910	36.176	.000	.000	.000
5200	16.999	59.328	52.050	37.848	.000	.000	.000
5300	17.516	59.657	52.190	39.574	.000	.000	.000
5400	17.989	59.989	52.332	41.350	.000	.000	.000
5500	18.411	60.323	52.474	43.170	.000	.000	.000
5600	18.780	60.658	52.617	45.030	.000	.000	.000
5700	19.091	60.994	52.761	46.924	.000	.000	.000
5800	19.343	61.328	52.908	44.846	.000	.000	.000
5900	19.536	61.660	53.052	50.791	.000	.000	.000
6000	19.668	61.990	53.190	52.751	.000	.000	.000

June 30, 1968

Cesium Hydroxide (CsOH)

(Crystal)

GFW = 149.912

T, °K	Cp°	gibbs/mol		H°-H°sec	kcal/mol		ΔG°f	Log Kp
		S°	-(G°-H°sec)/T		ΔH°f			
0								
100								
200								
298	16.220	23.600	23.600	.000	- 99.600	- 88.611	64.953	
300	16.250	23.700	23.600	.030	- 99.597	- 88.543	64.503	
400	17.780	28.589	24.257	1.733	- 99.858	- 84.727	46.292	
500	19.700	36.467	25.727	5.370	- 97.685	- 81.077	35.438	
600	20.000	40.102	27.828	7.364	- 97.161	- 77.803	28.340	
700	20.000	43.185	29.807	9.364	- 96.641	- 74.618	23.297	
800	20.000	45.855	31.650	11.364	- 96.133	- 71.508	19.535	
900	20.000	48.211	33.362	13.364	- 95.635	- 68.459	16.624	
1000	20.000	50.318	34.954	15.364	- 111.228	- 64.645	14.128	

June 30, 1971

Cesium Hydroxide (CsOH)

(Liquid)

GFW = 149.912

T, °K	Cp°	gibbs/mol			kcal/mol			Log Kp
		S°	-(G°-H°sec)/T	H°-H°sec	ΔH_f°	ΔG_f°		
0								
100								
200								
298	19.500	28.309	28.309	.000	- 97.037	- 87.452	64.104	
300	19.500	28.430	28.310	.036	- 97.028	- 87.393	63.665	
400	19.500	34.040	29.075	1.986	- 97.042	- 84.091	45.945	
500	19.500	38.391	30.519	3.936	- 96.556	- 80.910	35.366	
600	19.500	41.946	32.136	5.886	- 96.076	- 77.823	28.348	
700	19.500	44.952	33.758	7.836	- 95.606	- 74.820	23.360	
800	19.500	47.556	35.324	9.786	- 95.148	- 71.884	19.638	
900	19.500	49.853	36.813	11.736	- 94.700	- 69.002	16.756	
1000	19.500	51.908	38.221	13.686	- 110.343	- 65.350	14.282	
1100	19.500	53.766	39.551	15.636	- 109.672	- 60.882	12.096	
1200	19.500	55.463	40.808	17.586	- 109.010	- 56.476	10.288	
1300	19.500	57.024	41.996	19.536	- 108.357	- 52.125	8.763	
1400	19.500	58.469	43.122	21.486	- 107.714	- 47.824	7.466	
1500	19.500	59.814	44.190	23.436	- 107.080	- 43.567	6.348	
1600	19.500	61.073	45.206	25.386	- 106.456	- 39.355	5.376	
1700	19.500	62.255	46.175	27.336	- 105.841	- 35.179	4.523	
1800	19.500	63.369	47.099	29.286	- 105.236	- 31.040	3.769	
1900	19.500	64.424	48.984	31.236	- 104.640	- 26.934	3.098	
2000	19.500	65.424	48.831	33.186	- 104.056	- 22.860	2.498	

June 30, 1971

Cesium Hydroxide (CsOH)

(Ideal Gas)

GFW = 149.912

T, °K	Cp°	gibbs/mol			kcal/mol			Log Kp
		S°	-(G°-H° sec)/T	H°-H° sec	ΔH_f°	ΔG_f°		
0	.000	.000	INFINITE	- 2.828	- 60.935	- 60.935	INFINITE	
100	8.298	49.627	70.662	- 2.104	- 61.450	- 61.810	135.085	
200	10.899	56.301	61.928	- 1.126	- 61.762	- 62.037	67.791	
298	11.884	60.866	60.866	.000	- 62.000	- 62.122	45.537	
300	11.895	60.940	60.866	.022	- 62.005	- 62.123	45.256	
400	12.315	64.427	61.339	1.235	- 62.756	- 61.960	33.853	
500	12.529	67.200	62.243	2.478	- 62.977	- 61.735	26.984	
600	12.665	69.497	63.266	3.738	- 63.187	- 61.466	22.389	
700	12.777	71.458	64.300	5.011	- 63.394	- 61.163	19.096	
800	12.886	73.171	65.304	6.294	- 63.603	- 60.831	16.618	
900	12.999	74.695	66.264	7.588	- 63.811	- 60.471	14.684	
1000	13.116	76.071	67.177	8.894	- 80.099	- 59.268	12.953	
1100	13.234	77.326	68.044	10.211	- 80.060	- 57.187	11.362	
1200	13.350	78.483	68.866	11.540	- 80.019	- 55.109	10.037	
1300	13.462	79.556	69.648	12.881	- 79.976	- 53.035	8.916	
1400	13.568	80.557	70.391	14.232	- 79.931	- 50.965	7.956	
1500	13.667	81.497	71.101	15.594	- 79.885	- 48.896	7.124	
1600	13.759	82.382	71.778	16.966	- 79.840	- 46.833	6.397	
1700	13.844	83.219	72.427	18.346	- 79.794	- 44.771	5.756	
1800	13.921	84.012	73.049	19.734	- 79.751	- 42.712	5.186	
1900	13.992	84.767	73.646	21.130	- 79.710	- 40.655	4.676	
2000	14.057	85.486	74.220	22.532	- 79.673	- 38.601	4.218	
2100	14.116	86.173	74.773	23.941	- 79.642	- 36.548	3.804	
2200	14.169	86.831	75.306	25.355	- 79.618	- 34.497	3.427	
2300	14.218	87.462	75.821	26.775	- 79.601	- 32.446	3.063	
2400	14.263	88.068	76.319	28.199	- 79.596	- 30.395	2.768	
2500	14.304	88.651	76.801	29.627	- 79.603	- 28.348	2.478	
2600	14.341	89.213	77.267	31.059	- 79.622	- 26.295	2.210	
2700	14.376	89.755	77.720	32.495	- 79.656	- 24.244	1.962	
2800	14.407	90.278	78.159	33.934	- 79.708	- 22.192	1.732	
2900	14.436	90.785	78.586	35.376	- 79.778	- 20.134	1.517	
3000	14.462	91.274	79.001	36.821	- 79.870	- 18.077	1.317	
3100	14.467	91.749	79.404	38.269	- 79.984	- 16.015	1.129	
3200	14.509	92.209	79.797	39.719	- 80.125	- 13.950	.953	
3300	14.530	92.656	80.180	41.171	- 80.293	- 11.880	.787	
3400	14.550	93.090	80.553	42.625	- 80.492	- 9.804	.630	
3500	14.568	93.512	80.918	44.081	- 80.726	- 7.721	.482	
3600	14.584	93.923	81.273	45.538	- 80.997	- 5.632	.342	
3700	14.600	94.323	81.621	46.997	- 81.308	- 3.533	.209	
3800	14.614	98.712	81.960	48.458	- 81.662	- 1.425	.082	
3900	14.628	95.092	82.292	49.920	- 82.064	.690	-.039	
4000	14.640	95.462	82.617	51.384	- 82.516	2.817	.154	
4100	14.652	95.824	82.934	52.848	- 83.022	4.957	-.264	
4200	14.663	96.177	83.245	54.314	- 83.586	7.109	-.370	
4300	14.673	96.522	83.550	55.781	- 84.208	9.276	-.471	
4400	14.683	96.860	83.849	57.249	- 84.892	11.457	-.569	
4500	14.692	97.190	84.142	58.717	- 85.641	13.654	-.663	
4600	14.701	97.513	84.429	60.187	- 86.455	15.673	-.754	
4700	14.709	97.829	84.711	61.657	- 87.335	18.107	-.842	
4800	14.716	98.139	84.987	63.129	- 88.281	20.360	-.927	
4900	14.723	98.442	85.259	64.601	- 89.293	22.632	1.009	
5000	14.730	98.740	85.525	66.073	- 90.369	24.926	1.089	
5100	14.737	99.032	85.757	67.547	- 91.508	27.246	1.168	
5200	14.743	99.318	86.045	69.021	- 92.706	29.582	1.243	
5300	14.748	99.599	86.298	70.495	- 93.959	31.950	1.317	
5400	14.754	99.875	86.547	71.970	- 95.264	34.333	1.390	
5500	14.759	100.145	86.792	73.446	- 96.615	36.748	1.460	
5600	14.764	100.411	87.032	74.922	- 98.008	39.183	1.529	
5700	14.769	100.673	87.269	76.399	- 99.436	41.686	1.597	
5800	14.773	100.930	87.503	77.676	- 100.895	44.136	1.663	
5900	14.777	101.182	87.732	79.353	- 102.378	46.648	1.728	
6000	14.781	101.431	87.959	80.831	- 103.877	49.187	1.792	

June 30, 1971

Oxygen, Diatomic (O_2)

(Reference State - Ideal Gas)

Mol. Wt. = 31.9988

T, °K	Cp°	cal.mole ⁻¹ deg. ⁻¹			kcal.mole ⁻¹		Log Kp
		S°	-(F°-H° sec)/T	H°-H° sec	ΔH _f °	ΔF _f °	
0	.000	.000	INFINITE	- 2.075	.000	.000	.000
100	6.958	41.395	55.205	- 1.381	.000	.000	.000
200	6.961	46.218	49.643	- .685	.000	.000	.000
298	7.020	49.004	49.004	.000	.000	.000	.000
300	7.023	49.047	49.004	.013	.000	.000	.000
400	7.196	51.091	49.282	.724	.000	.000	.000
500	7.431	52.722	49.812	1.455	.000	.000	.000
600	7.670	54.098	50.414	2.210	.000	.000	.000
700	7.883	55.297	51.028	2.988	.000	.000	.000
800	8.063	56.361	51.629	3.786	.000	.000	.000
900	8.212	57.320	52.209	4.600	.000	.000	.000
1000	8.336	58.192	52.765	5.427	.000	.000	.000
1100	8.439	58.991	53.295	6.266	.000	.000	.000
1200	8.527	59.729	53.801	7.114	.000	.000	.000
1300	8.604	60.415	54.283	7.971	.000	.000	.000
1400	8.674	61.055	54.744	8.835	.000	.000	.000
1500	8.738	61.656	55.185	9.706	.000	.000	.000
1600	8.800	62.222	55.608	10.583	.000	.000	.000
1700	8.858	62.757	56.013	11.465	.000	.000	.000
1800	8.916	63.265	56.401	12.354	.000	.000	.000
1900	8.973	63.749	56.776	13.249	.000	.000	.000
2000	9.029	64.210	57.136	14.149	.000	.000	.000
2100	9.084	64.652	57.483	15.054	.000	.000	.000
2200	9.139	65.076	57.819	15.966	.000	.000	.000
2300	9.194	65.483	58.143	16.882	.000	.000	.000
2400	9.248	65.876	58.457	17.804	.000	.000	.000
2500	9.301	66.254	58.762	18.732	.000	.000	.000
2600	9.354	66.620	59.057	19.664	.000	.000	.000
2700	9.405	66.974	59.344	20.602	.000	.000	.000
2800	9.455	67.317	59.622	21.545	.000	.000	.000
2900	9.503	67.650	59.893	22.493	.000	.000	.000
3000	9.551	67.973	60.157	23.446	.000	.000	.000
3100	9.596	68.287	60.415	24.403	.000	.000	.000
3200	9.640	68.592	60.665	25.365	.000	.000	.000
3300	9.682	68.889	60.910	26.331	.000	.000	.000
3400	9.723	69.179	61.149	27.302	.000	.000	.000
3500	9.762	69.461	61.383	28.276	.000	.000	.000
3600	9.799	69.737	61.611	29.254	.000	.000	.000
3700	9.835	70.006	61.834	30.236	.000	.000	.000
3800	9.869	70.269	62.053	31.221	.000	.000	.000
3900	9.901	70.525	62.267	32.209	.000	.000	.000
4000	9.932	70.776	62.476	33.201	.000	.000	.000
4100	9.961	71.022	62.682	34.196	.000	.000	.000
4200	9.988	71.262	62.863	35.193	.000	.000	.000
4300	10.015	71.498	63.081	36.193	.000	.000	.000
4400	10.039	71.728	63.275	37.196	.000	.000	.000
4500	10.062	71.954	63.465	38.201	.000	.000	.000
4600	10.084	72.176	63.652	39.208	.000	.000	.000
4700	10.104	72.393	63.836	40.218	.000	.000	.000
4800	10.123	72.606	64.016	41.229	.000	.000	.000
4900	10.140	72.814	64.194	42.242	.000	.000	.000
5000	10.156	73.019	64.368	43.257	.000	.000	.000
5100	10.172	73.221	64.540	44.274	.000	.000	.000
5200	10.187	73.418	64.708	45.292	.000	.000	.000
5300	10.200	73.613	64.875	46.311	.000	.000	.000
5400	10.213	73.803	65.038	47.332	.000	.000	.000
5500	10.225	73.991	65.199	48.353	.000	.000	.000
5600	10.237	74.175	65.358	49.377	.000	.000	.000
5700	10.247	74.356	65.514	50.401	.000	.000	.000
5800	10.258	74.535	65.668	51.426	.000	.000	.000
5900	10.267	74.710	65.820	52.452	.000	.000	.000
6000	10.276	74.883	65.970	53.479	.000	.000	.000

Dec. 31, 1960; Mar. 31, 1961; Sept. 30, 1965

Hydrogen (H_2)

(Ideal Gas - Reference State)

Mol. Wt. = 2.016

T, °K	cal.mole ⁻¹ deg. ⁻¹			kcal.mole ⁻¹			Log Kp
	Cp°	S°	-(F°-H°sec)/T	H°-H°sec	ΔH _f °	ΔF _f °	
0	.000	.000	INFINITE	- 2.024	.000	.000	.000
100	5.393	24.387	37.035	- 1.265	.000	.000	.000
200	6.518	28.520	31.831	- .662	.000	.000	.000
298	6.892	31.208	31.208	.000	.000	.000	.000
300	6.894	31.251	31.208	.013	.000	.000	.000
400	6.975	33.247	31.480	.707	.000	.000	.000
500	6.993	34.806	31.995	1.406	.000	.000	.000
600	7.004	36.082	32.573	2.106	.000	.000	.000
700	7.036	37.165	33.153	2.808	.000	.000	.000
800	7.087	38.107	33.715	3.514	.000	.000	.000
900	7.148	38.946	34.250	4.226	.000	.000	.000
1000	7.219	39.702	34.758	4.944	.000	.000	.000
1100	7.300	40.394	35.240	5.670	.000	.000	.000
1200	7.390	41.033	35.696	6.404	.000	.000	.000
1300	7.490	41.628	36.130	7.148	.000	.000	.000
1400	7.600	42.147	36.543	7.902	.000	.000	.000
1500	7.720	42.716	36.937	8.668	.000	.000	.000
1600	7.823	43.217	37.314	9.446	.000	.000	.000
1700	7.921	43.695	37.676	10.233	.000	.000	.000
1800	8.016	44.150	38.022	11.030	.000	.000	.000
1900	8.108	44.586	38.356	11.836	.000	.000	.000
2000	8.195	45.004	38.678	12.651	.000	.000	.000
2100	8.279	45.406	38.989	13.475	.000	.000	.000
2200	8.358	45.793	39.290	14.307	.000	.000	.000
2300	8.434	46.166	39.581	15.146	.000	.000	.000
2400	8.506	46.527	39.863	15.993	.000	.000	.000
2500	8.575	46.875	40.136	16.848	.000	.000	.000
2600	8.639	47.213	40.402	17.708	.000	.000	.000
2700	8.700	47.540	40.660	18.575	.000	.000	.000
2800	8.757	47.857	40.912	19.448	.000	.000	.000
2900	8.810	48.166	41.157	20.326	.000	.000	.000
3000	8.859	48.865	41.395	21.210	.000	.000	.000
3100	8.911	48.756	41.628	22.098	.000	.000	.000
3200	8.962	49.040	41.855	22.992	.000	.000	.000
3300	9.012	49.317	42.077	23.891	.000	.000	.000
3400	9.061	49.586	42.294	24.794	.000	.000	.000
3500	9.110	49.850	42.506	25.703	.000	.000	.000
3600	9.158	50.107	42.714	26.616	.000	.000	.000
3700	9.205	50.359	42.917	27.535	.000	.000	.000
3800	9.252	50.605	43.116	28.457	.000	.000	.000
3900	9.297	50.846	43.311	29.385	.000	.000	.000
4000	9.342	51.082	43.502	30.317	.000	.000	.000
4100	9.386	51.313	43.690	31.253	.000	.000	.000
4200	9.429	51.540	43.874	32.198	.000	.000	.000
4300	9.472	51.782	44.055	33.189	.000	.000	.000
4400	9.514	51.980	44.233	34.088	.000	.000	.000
4500	9.555	52.194	44.407	35.042	.000	.000	.000
4600	9.525	52.405	44.579	35.999	.000	.000	.000
4700	9.634	52.612	44.745	36.961	.000	.000	.000
4800	9.673	52.815	44.914	37.926	.000	.000	.000
4900	9.711	53.015	45.077	38.895	.000	.000	.000
5000	9.748	53.211	45.238	39.868	.000	.000	.000
5100	9.785	53.405	45.396	40.845	.000	.000	.000
5200	9.822	53.595	45.552	41.825	.000	.000	.000
5300	9.859	53.783	45.705	42.809	.000	.000	.000
5400	9.895	53.987	45.857	43.797	.000	.000	.000
5500	9.930	54.149	46.006	44.788	.000	.000	.000
5600	9.965	54.328	46.153	45.783	.000	.000	.000
5700	10.000	54.505	46.298	46.781	.000	.000	.000
5800	10.014	54.679	46.441	47.783	.000	.000	.000
5900	10.067	54.851	46.582	48.788	.000	.000	.000
6000	10.100	55.020	46.721	49.796	.000	.000	.000

March 31, 1961

Water (H_2O)

(Ideal Gas)

Mol. Wt. = 18.016

T, °K	Cp°	cal.mole ⁻¹ deg. ⁻¹		H°-H°sec	kcal.mole ⁻¹		Log Kp
		S°	-(F°-H°sec)/T		ΔH _f °	ΔF _f °	
0	.000	.000	INFINITE	- 2.367	- 57.103	- 57.103	INFINITE
100	7.961	36.396	52.202	- 1.581	- 57.433	- 56.557	123.600
200	7.969	41.916	45.837	- .784	- 57.579	- 55.635	60.792
298	8.025	45.106	45.106	.000	- 57.798	- 54.636	40.048
300	8.027	45.155	45.106	.015	- 57.803	- 54.617	39.786
400	8.186	47.484	45.422	.825	- 58.042	- 53.519	29.240
500	8.415	49.334	46.026	1.654	- 58.277	- 52.361	22.886
600	8.676	50.891	46.710	2.509	- 58.500	- 51.156	18.633
700	8.954	52.249	47.406	3.390	- 58.710	- 49.915	15.563
800	9.246	53.464	48.089	4.300	- 58.905	- 48.646	13.289
900	9.547	54.570	48.744	5.240	- 59.084	- 47.352	11.498
1000	9.851	55.592	49.382	6.209	- 59.246	- 46.040	10.062
1100	10.152	56.545	49.991	7.210	- 59.391	- 44.712	8.883
1200	10.444	57.441	50.575	8.240	- 59.519	- 43.371	7.899
1300	10.723	58.288	51.136	9.298	- 59.634	- 42.022	7.064
1400	10.987	59.092	51.675	10.384	- 59.734	- 40.663	6.347
1500	11.233	59.859	52.196	11.495	- 59.824	- 39.267	5.725
1600	11.462	60.591	52.698	12.630	- 59.906	- 37.927	5.180
1700	11.674	61.293	53.183	13.787	- 59.977	- 36.549	4.699
1800	11.869	61.965	53.652	14.964	- 60.041	- 35.170	4.270
1900	12.048	62.612	54.107	16.160	- 60.099	- 33.786	3.886
2000	12.214	63.234	54.548	17.373	- 60.150	- 32.401	3.540
2100	12.366	63.834	54.976	18.602	- 60.198	- 31.012	3.227
2200	12.505	64.412	55.392	19.846	- 60.242	- 29.621	2.942
2300	12.634	64.971	55.796	21.103	- 60.282	- 28.229	2.682
2400	12.753	65.511	56.190	22.372	- 60.321	- 26.832	2.443
2500	12.863	66.034	56.573	23.653	- 60.359	- 25.439	2.224
2600	12.965	66.541	56.947	24.945	- 60.393	- 24.040	2.021
2700	13.054	67.032	57.311	26.246	- 60.428	- 22.641	1.833
2800	13.146	67.508	57.667	27.556	- 60.462	- 21.242	1.658
2900	13.228	67.971	58.014	28.875	- 60.496	- 19.838	1.495
3000	13.304	68.421	58.354	30.201	- 60.530	- 18.438	1.343
3100	13.374	68.858	58.685	31.535	- 60.562	- 17.034	1.201
3200	13.441	69.284	59.010	32.876	- 60.596	- 15.630	1.067
3300	13.503	69.698	59.328	34.223	- 60.631	- 14.223	.942
3400	13.562	70.102	59.839	35.577	- 60.666	- 12.818	.824
3500	13.617	70.496	59.943	36.936	- 60.703	- 11.409	.712
3600	13.664	70.881	60.242	38.300	- 60.741	- 10.000	.607
3700	13.718	71.256	60.534	39.669	- 60.782	- 8.589	.507
3800	13.764	71.622	60.821	41.043	- 60.822	- 7.177	.413
3900	13.808	71.980	61.103	42.422	- 60.865	- 5.766	.323
4000	13.850	72.331	61.379	43.805	- 60.910	- 4.353	.238
4100	13.890	72.673	61.651	45.192	- 60.957	- 2.938	.157
4200	13.927	73.008	61.917	46.583	- 61.006	- 1.522	.079
4300	13.963	73.336	62.179	47.977	- 61.056	- .105	.005
4400	13.997	73.658	62.436	49.375	- 61.109	1.311	-.065
4500	14.036	73.973	62.689	50.777	- 61.164	2.729	-.133
4600	14.061	74.281	62.938	52.181	- 61.220	4.154	-.197
4700	14.091	74.588	63.182	53.589	- 61.279	5.576	-.259
4800	14.120	74.881	63.423	55.000	- 61.339	6.998	-.319
4900	14.148	75.172	63.660	56.413	- 61.401	8.422	-.376
5000	14.174	75.459	63.893	57.829	- 61.465	9.844	-.430
5100	14.201	75.740	64.122	59.248	- 61.532	11.275	-.483
5200	14.228	76.016	64.348	60.669	- 61.600	12.700	-.534
5300	14.254	76.287	64.571	62.093	- 61.669	14.135	-.563
5400	14.279	76.553	64.791	63.520	- 61.741	15.560	-.630
5500	14.303	76.816	65.007	64.949	- 61.813	16.995	-.675
5600	14.328	77.074	65.220	66.381	- 61.889	18.426	-.719
5700	14.351	77.327	65.430	67.815	- 61.965	19.862	-.762
5800	14.375	77.577	65.637	69.251	- 62.043	21.299	-.803
5900	14.398	77.823	65.842	70.690	- 62.122	22.736	-.842
6000	14.422	78.065	66.044	72.131	- 62.203	24.174	-.880

March 31, 1961

Chromium (Cr)

(Crystal)

GFW = 51.996

T, °K	Cp°	gibbs/mol		H°-H°sec	kcal/mol		Log Kp
		S°	-(G°-H°sec)/T		ΔH_f°	ΔG_f°	
0	.000	.000	INFINITE	-.970	.000	.000	.000
100	2.381	1.025	9.975	-.895	.000	.000	.000
200	4.747	3.554	6.139	-.517	.000	.000	.000
298	5.601	5.645	5.645	.000	.000	.000	.000
300	5.610	5.680	5.645	.010	.000	.000	.000
400	6.030	7.353	5.870	.593	.000	.000	.000
500	6.365	8.737	6.309	1.214	.000	.000	.000
600	6.625	9.921	6.815	1.864	.000	.000	.000
700	6.830	10.958	7.334	2.536	.000	.000	.000
800	7.035	11.882	7.846	3.229	.000	.000	.000
900	7.290	12.725	8.342	3.945	.000	.000	.000
1000	7.615	13.509	8.820	4.690	.000	.000	.000
1100	8.000	14.253	9.280	5.470	.000	.000	.000
1200	8.410	14.966	9.724	6.290	.000	.000	.000
1300	8.871	15.658	10.154	7.154	.000	.000	.000
1400	9.351	16.332	10.572	8.065	.000	.000	.000
1500	9.847	16.994	10.978	9.025	.000	.000	.000
1600	10.356	17.646	11.374	10.035	.000	.000	.000
1700	10.875	18.289	11.762	11.096	.000	.000	.000
1800	11.402	18.926	12.142	12.210	.000	.000	.000
1900	11.937	19.557	12.516	13.377	.000	.000	.000
2000	12.477	20.183	12.884	14.598	.000	.000	.000
2100	13.023	20.805	13.246	15.873	.000	.000	.000
2200	13.572	21.423	13.604	17.202	- 4.622	.157	- .016
2300	14.125	22.039	13.957	18.587	- 4.177	.364	- .035
2400	14.681	22.652	14.307	20.028	- 3.676	.551	- .050
2500	15.240	23.262	14.653	21.524	- 3.120	.716	- .063
2600	15.801	23.871	14.996	23.076	- 2.508	.857	- .072
2700	16.364	24.478	15.336	24.684	- 1.840	.974	- .079
2800	16.929	25.083	15.673	26.346	- 1.116	1.065	- .083

June 30, 1973

Dichromium Trioxide (Cr_2O_3) Cr_2O_3

(Crystal)

GFW = 151.9902

K, °K	Cp°	gibbs/mol			kcal/mol			Log Kp
		S°	-(G°-H° sec)/T	H°-H° sec	ΔH_f°	ΔG_f°		
0	.000	.000	INFINITE	- 3.653	- 269.800	- 269.800	INFINITE	
100	5.797	2.412	37.199	- 3.479	- 279.817	- 264.644	578.374	
200	11.024	10.243	21.646	- 2.271	- 271.409	- 258.181	282.127	
298	28.767	19.396	19.196	.000	- 271.200	- 251.701	184.502	
300	29.140	19.375	19.397	.054	- 271.186	- 251.580	183.276	
400	26.930	27.186	20.443	2.696	- 270.776	- 245.112	133.923	
500	28.136	33.342	22.426	5.458	- 270.352	- 238.745	104.355	
600	28.312	38.535	24.589	8.308	- 254.935	- 232.463	84.675	
700	29.408	45.016	26.495	11.215	- 269.539	- 226.248	70.638	
800	24.706	46.950	29.248	14.166	- 269.171	- 220.091	60.126	
900	30.049	50.475	31.415	17.154	- 268.836	- 213.976	51.961	
900	30.049	50.475	31.415	17.154	- 268.836	- 213.976	51.961	
1000	30.350	53.657	33.483	20.173	- 268.546	- 207.896	45.436	
1100	30.641	56.564	35.451	23.225	- 268.314	- 201.843	40.102	
1200	30.911	59.242	37.323	26.302	- 268.149	- 195.807	35.661	
1300	31.159	61.726	39.106	29.406	- 268.058	- 189.783	31.905	
1400	31.414	64.045	40.805	32.536	- 268.047	- 183.764	28.687	
1500	31.884	66.221	42.428	35.690	- 268.119	- 177.742	25.897	
1600	31.904	68.272	43.880	38.868	- 268.276	- 171.712	23.455	
1700	32.141	70.214	45.466	42.071	- 268.519	- 165.668	21.298	
1800	32.375	72.057	46.843	45.296	- 268.855	- 154.609	19.379	
1900	32.715	73.817	48.264	48.551	- 269.277	- 153.529	17.660	
2000	33.023	75.503	49.584	51.838	- 267.782	- 147.427	16.110	
2100	33.235	77.114	50.857	55.151	- 270.376	- 141.293	14.705	
2200	33.347	78.670	52.086	58.485	- 280.312	- 134.818	13.393	
2300	33.661	80.162	53.275	61.840	- 280.211	- 128.207	12.182	
2400	33.875	81.599	54.425	65.217	- 280.097	- 121.599	11.073	
2500	34.089	82.436	55.540	68.615	- 279.971	- 115.000	10.053	
2600	34.334	84.827	56.624	72.035	- 279.824	- 108.402	9.112	
2700	34.520	85.828	57.672	75.476	- 279.675	- 101.812	8.241	
2800	36.716	88.845	58.693	78.939	- 279.507	- 95.227	7.433	
2900	34.951	88.108	59.886	82.423	- 279.324	- 88.647	6.681	
3000	35.171	89.297	60.653	83.930	- 441.225	- 79.601	5.799	

Dec. 31, 1973

Molybdenum (Mo)

(Crystal)

GFW = 95.94

T, °K	Cp°	gibbs/mol		H°-H°sec	kcal/mol		Log Kp
		S°	-(G°-H°sec)/T		ΔH_f°	ΔG_f°	
0	.000	.000	INFINITE	- 1.096	.000	.000	.000
100	3.232	1.679	11.469	- .979	.000	.000	.000
200	5.131	4.655	7.345	- .538	.000	.000	.000
298	5.729	6.837	6.837	.000	.000	.000	.000
300	5.737	6.873	6.838	.011	.000	.000	.000
400	6.050	8.569	7.067	.601	.000	.000	.000
500	6.246	9.942	7.609	1.217	.000	.000	.000
600	6.380	11.093	8.013	1.848	.000	.000	.000
700	6.476	12.084	8.525	2.491	.000	.000	.000
800	6.552	12.954	9.026	3.143	.000	.000	.000
900	6.622	13.730	9.506	3.801	.000	.000	.000
1000	6.698	14.431	9.964	4.467	.000	.000	.000
1100	6.794	15.074	10.400	5.141	.000	.000	.000
1200	6.927	15.670	10.814	5.827	.000	.000	.000
1300	7.090	16.231	11.210	6.528	.000	.000	.000
1400	7.274	16.763	11.587	7.248	.000	.000	.000
1500	7.473	17.272	11.950	7.983	.000	.000	.000
1600	7.684	17.761	12.298	8.741	.000	.000	.000
1700	7.906	18.233	12.633	9.520	.000	.000	.000
1800	8.140	18.692	12.957	10.323	.000	.000	.000
1900	8.377	19.138	13.270	11.148	.000	.000	.000
2000	8.630	19.574	13.575	11.999	.000	.000	.000
2100	8.897	20.001	13.871	12.875	.000	.000	.000
2200	9.190	20.422	14.159	13.779	.000	.000	.000
2300	9.520	20.837	14.440	14.714	.000	.000	.000
2400	9.920	21.251	14.715	15.684	.000	.000	.000
2500	10.463	21.666	14.985	16.703	.000	.000	.000
2600	11.090	22.089	15.250	17.780	.000	.000	.000
2700	11.816	22.520	15.511	18.924	.000	.000	.000
2800	12.618	22.964	15.770	20.145	.000	.000	.000
2900	13.500	23.422	16.026	21.450	- 6.023	.019	-.001
3000	14.480	23.897	16.280	22.850	- 6.225	.240	-.017
3100	15.400	24.386	16.534	24.344	- 5.731	.450	-.032
3200	16.320	24.890	16.787	25.930	- 5.145	.637	-.044
3300	17.240	25.406	17.040	27.608	- 4.467	.810	-.054
3400	18.160	25.934	17.294	29.378	- 3.697	.961	-.062
3500	19.080	26.474	17.548	31.240	- 2.835	1.081	-.068
3600	20.000	27.025	17.804	33.194	- 1.881	1.179	-.072
3700	20.920	27.585	18.061	35.240	- .835	1.252	-.074
3800	21.840	28.155	18.319	37.378	.303	1.295	-.074
3900	22.760	28.734	18.579	39.608	1.533	1.307	-.073
4000	23.680	29.322	18.840	41.930	2.855	1.283	-.070

Dec. 31, 1966

Molybdenum Dioxide (MoO_2)

(Crystal)

GFW = 127.9388

T, °K	Cp°	S°	gibbs/mol -(G°-H°sec)/T	H°-H°sec	kcal/mol ΔH_f°	ΔG_f°	Log Kp
0	.000	.000	INFINITE	- 1.988	- 139.317	- 139.317	INFINITE
100	3.866	2.634	21.278	- 1.864	- 140.004	- 135.960	297.145
200	9.886	7.294	13.079	- 1.157	- 140.434	- 131.715	143.935
298	13.360	11.954	11.954	.000	- 140.500	- 127.415	93.398
300	13.407	12.037	11.954	.025	- 140.499	- 127.334	92.763
400	15.189	16.165	12.505	1.464	- 140.361	- 122.963	67.184
500	16.237	19.674	13.597	3.039	- 140.134	- 116.639	51.857
600	17.011	22.705	14.668	8.702	- 139.856	- 114.364	41.657
700	17.671	25.378	16.182	6.437	- 139.542	- 110.140	34.387
800	18.281	27.777	17.484	8.235	- 139.194	- 105.964	28.948
900	18.873	29.965	18.751	10.092	- 138.809	- 101.632	24.728
1000	19.464	31.984	19.975	12.009	- 138.385	- 97.746	21.362
1100	20.064	33.867	21.153	13.984	- 137.921	- 93.704	18.617
1200	20.597	35.639	22.287	16.022	- 137.419	- 89.707	16.338
1300	21.307	37.319	23.379	18.121	- 136.875	- 85.752	14.416
1400	21.358	38.921	24.433	20.285	- 136.296	- 81.841	12.776
1500	22.629	40.459	25.450	22.514	- 135.675	- 77.972	11.360
1600	23.324	41.942	26.435	24.811	- 135.013	- 74.147	10.128
1700	24.041	43.377	27.389	27.179	- 134.306	- 70.364	9.046
1800	24.762	44.772	28.316	29.620	- 133.557	- 66.624	8.059
1900	25.348	46.132	29.218	32.136	- 132.761	- 62.926	7.238
2000	26.338	47.463	30.098	34.731	- 131.917	- 59.275	6.477
2100	27.153	48.767	30.956	37.405	- 131.024	- 55.664	5.793
2200	27.993	50.050	31.794	40.162	- 130.083	- 52.097	5.175
2300	28.558	51.313	32.616	43.004	- 129.092	- 48.576	4.616
2400	29.749	52.560	33.421	45.934	- 128.054	- 45.098	4.106
2500	30.665	53.793	34.211	45.955	- 126.980	- 41.663	3.642
2600	31.607	55.014	34.958	52.068	- 125.876	- 34.269	3.217
2700	32.574	56.225	35.752	55.277	- 124.749	- 34.923	2.827
2800	33.566	57.427	36.505	55.584	- 123.606	- 31.615	2.468
2900	34.585	58.623	37.247	61.991	- 129.077	- 28.331	2.135
3000	35.529	59.813	37.979	65.502	- 127.519	- 24.883	1.813

June 30, 1967

Thermodynamic properties of dicesium monoxide $\text{Cs}_2\text{O}(\text{c})$ extrapolated⁽²⁵⁾
above 350K; M(Cs_2O)=281.810g mol⁻¹

T K	$C_p^\circ(T)$ $\text{JK}^{-1}\text{mol}^{-1}$	$S^\circ(T)$ $\text{Jk}^{-1}\text{mol}^{-1}$	$\{\text{H}^\circ(T)-\text{H}^\circ(0)\}$ kJ mol ⁻¹	$-\{\text{G}^\circ(T)-\text{H}^\circ(0)\}/T$ $\text{JK}^{-1}\text{mol}^{-1}$	$\Delta G_f^\circ(T)$ kJ mol ⁻¹
298.15	76.00	146.87	17.678	87.58	-308.42
400	79.4	169.7	25.59	105.7	-294.2
500	82.8	187.8	33.70	120.4	-280.2
600	86.1	203.1	42.14	132.9	-266.3
700	89.4	216.7	50.92	143.9	-252.6
763	91.6	224.5	56.62	150.3	-244.0

Thermodynamic functions of Cs_2UO_4 ⁽³⁵⁾

(cal_{th} = 4.184 J)

T K	$\text{H}^\circ(T)-\text{H}^\circ(298.15\text{K})^a$ cal _{th} mol ⁻¹	C_p° cal _{th} K ⁻¹ mol ⁻¹	$S^\circ(T)$ cal _{th} K ⁻¹ mol ⁻¹	$-\{\text{G}^\circ(T)-\text{H}^\circ(298.15\text{K})\}/T$ cal _{th} K ⁻¹ mol ⁻¹
298.15	0	36.511	52.50	52.50
300	67.6	36.57	52.73	52.50
400	3846.3	38.75	63.58	53.97
500	7787.5	39.98	72.37	56.80
600	11830.3	40.83	79.74	60.02
700	15948.5	41.51	86.09	63.30
800	20129.2	42.09	91.67	66.51
900	24365.0	42.62	96.66	69.59
1000	28651.7	43.11	101.17	72.52
1100	32986.5	43.58	105.30	75.32

Table A-3. Standard free energies of compounds related to
iodine and tellurium chemistry

	G° cal/mol	Temp. Range K	Ref.
Cs(1)	4050 - 29.13T	600 - 950	41
Cs(g)	20800 - 46.64T	600 - 950	41
	22810 - 48.74T	950 - 1400	41
I ₂ (g)	20730 - 72.93T	600 - 1400	40
Te(1)	9520 - 26.75T	723 - 1282	41
CsI(c)	-74490 - 42.27T	600 - 894	40
CsI(1)	-61380 - 56.29T	894 - 1400	40
FeI ₂ (c)	-15430 - 59.39T	650 - 860	40
FeI ₂ (1)	4300 - 81.99T	860 - 1366	40
FeI ₂ (g)	30600 - 101.09T	600 - 1400	40
CrI ₂ (c)	-25710 - 62.01T	800 - 1066	41
NiI ₂ (c)	- 8920 - 56.01T	600 - 1070	41
FeTe _{0.9} (c)	1740 - 33.05T	600 - 1200	41
NiTe(c)	- 3300 - 30.29T	600 - 800	41
Fe(c)	4990 - 15.23T	700 - 1184	41
	9280 - 19.03T	1184 - 1400	41
Cr(c)	4880 - 13.92T	700 - 1400	41
Ni(c)	5300 - 16.23T	700 - 1400	41

Table A-4. Thermodynamic tables of compounds related to
iodine and tellurium chemistry (^{40,41})

Data lists

Cs(c), Cs(l), Cs(g)
 I₂(c), I₂(l), I₂(g), I(g)
 Te(c), Te(l), Te(g), Te₂(g)
 FeI₂(c), FeI₂(l), FeI₂(g)
 CrI₂(c)
 NiI₂(c)
 CsI(c), CsI(l), CsI(g)
 FeTe_{0.9}(c)
 NiTe(c)
 Fe, Cr, Ni

Symbols

T = Temperature (K)
 CP = Standard heat capacity (cal/mol.K)
 H = Standard enthalpy (kcal/mol)
 S = Standard entropy (cal/mol.K)
 G = Standard free energy (kcal/mol)
 BT = Beta function $\beta(T) = -10^3 G(T)/4.575T$
 P = Vapor pressure (torr)

PNCT842-80-01

Cs	PHASE	T	CP	H	S	G	BT	P
SOL	298	7.705	0	20.351	-6.068	4.448		
	300	7.731	.014	20.399	-6.105	4.448		
	302	7.753	.026	20.439	-6.137	4.448		
LIQ				0.499	1.655			
	302	7.741	.525	22.093	-6.137	4.448		
	400	7.533	1.276	24.248	-8.424	4.603	.002	
	500	7.446	2.024	25.918	-10.935	4.780	.200	
	600	7.408	2.766	27.272	-13.597	4.953	3.747	
	700	7.394	3.506	28.413	-16.382	5.116	29.803	
	700	7.396	3.506	28.413	-16.382	5.116	29.803	
	800	7.396	4.246	29.400	-19.274	5.266	139.292	
	900	7.396	4.985	30.271	-22.259	5.406	457.278	
	952	7.396	5.367	30.684	-23.831	5.474	760.	
Cs (g)	PHASE	T	CP	H	S	G	BT	
GAS	298	4.968	18.515	41.942	6.010	-4.406		
	300	4.968	18.524	41.973	5.932	-4.322		
	400	4.968	19.821	43.402	1.660	-.907		
	500	4.968	19.518	44.511	-2.737	1.197		
	600	4.968	20.015	45.416	-7.235	2.636		
	700	4.968	20.511	46.182	-11.816	3.690		
	800	4.968	21.008	46.845	-16.468	4.500		
	900	4.968	21.505	47.431	-21.183	5.145		
	952	4.968	21.761	47.708	-23.637	5.429		
	952	4.968	21.761	47.708	-23.637	5.429		
	1000	4.968	22.002	47.954	-25.952	5.673		
	1100	4.968	22.499	48.428	-30.772	6.115		
	1100	4.974	22.499	48.428	-30.772	6.115		
	1200	4.962	22.995	48.868	-35.636	6.491		
	1300	4.961	23.491	49.257	-40.543	6.817		
	1400	4.967	23.988	49.625	-45.487	7.102		
	1500	4.980	24.485	49.968	-50.467	7.354		
	1600	4.997	24.984	50.290	-55.480	7.579		
	1700	5.018	25.485	50.593	-60.524	7.782		
	1800	5.041	25.987	50.881	-65.598	7.966		
	1900	5.066	26.493	51.154	-70.700	8.133		
	2000	5.093	27.001	51.414	-75.828	8.287		
Cs ₂ (g)	PHASE	T	CP	H	S	G	BT	
GAS	298	9.087	25.40	67.87	5.165	-3.786		
	300	9.088	25.417	67.926	5.039	-3.671		
	400	9.155	26.329	70.550	-1.891	1.033		
	500	9.222	27.248	72.600	-9.052	3.957		
	600	9.290	28.173	74.287	-16.399	5.974		
	700	9.357	29.106	75.725	-23.901	7.463		
	800	9.424	30.045	76.978	-31.538	8.617		
	900	9.492	30.991	78.092	-39.292	9.543		
	952	9.526	31.481	78.622	-43.336	9.954		
	952	9.526	31.481	78.622	-43.336	9.954		
	1000	9.559	31.943	79.096	-47.153	10.307		
	1100	9.626	32.902	80.010	-55.109	10.951		
	1200	9.694	33.868	80.851	-63.152	11.503		
	1300	9.761	34.841	81.629	-71.277	11.984		
	1400	9.828	35.821	82.355	-79.476	12.408		
	1500	9.895	36.807	83.035	-87.746	12.786		
	1600	9.963	37.800	83.676	-96.082	13.126		
	1700	10.030	38.799	84.282	-104.480	13.434		
	1800	10.097	39.806	84.857	-112.937	13.714		
	1900	10.165	40.819	85.405	-121.451	13.972		
	2000	10.232	41.839	85.928	-130.018	14.210		

I_2	PHASE	T	CP	H	S	G	BT	P
SOL	298	13.011		0	27.758	-8.276	6.067	.319
	300	13.027		.024	27.839	-8.327	6.067	.372
	387	15.188		1.232	31.363	-10.898	6.159	93.131
				3.71	9.587			
LIQ	387	19.281		4.942	40.949	-10.906	6.160	92.046
	400	19.281		5.192	41.586	-11.442	6.253	144.155
	458	19.281		6.311	44.197	-13.932	6.649	739.435
				10.0	21.834			
GAS	458	8.932		16.311	66.031	-13.932	6.649	

$I_2(g)$	PHASE	T	CP	H	S	G	BT
GAS	298	4.978		25.52	43.18	12.646	-9.271
	300	4.977		25.529	43.211	12.566	-9.156
	400	4.954		26.026	44.639	8.170	-4.464
	500	4.949		26.521	45.744	3.649	-1.595
	600	4.950		27.016	46.646	-.972	.354
	700	4.955		27.511	47.409	-5.676	1.772
	800	4.961		28.007	48.071	-10.451	2.855
	900	4.969		28.503	48.656	-15.287	3.713
	1000	4.977		29.000	49.180	-20.180	4.411
	1100	4.985		29.498	49.655	-25.122	4.992
	1200	4.994		29.997	50.089	-30.109	5.484
	1300	5.003		30.497	50.489	-35.138	5.908
	1400	5.012		30.998	50.860	-40.206	6.277
	1500	5.021		31.500	51.206	-45.310	6.602
	1600	5.030		32.002	51.530	-50.447	6.892
	1700	5.040		32.506	51.836	-55.615	7.151
	1800	5.049		33.010	52.124	-60.813	7.385
	1900	5.058		33.515	52.397	-66.039	7.597
	2000	5.068		34.022	52.657	-71.292	7.791

$I_2(g)$	PHASE	T	CP	H	S	G	BT
GAS	298	8.814		14.919	62.277	-3.649	2.675
	300	8.816		14.935	62.332	-3.764	2.743
	400	8.902		15.822	64.881	-10.131	5.536
	500	8.949		16.714	66.873	-16.722	7.310
	600	8.980		17.611	68.507	-23.493	8.559
	700	9.005		18.510	69.894	-30.415	9.497
	800	9.026		19.412	71.097	-37.466	10.237
	900	9.044		20.315	72.162	-44.630	10.839
	1000	9.061		21.221	73.115	-51.895	11.343
	1100	9.077		22.128	73.980	-59.250	11.774
	1200	9.093		23.036	74.770	-66.688	12.147
	1300	9.108		23.946	75.499	-74.202	12.476
	1400	9.123		24.858	76.174	-81.786	12.769
	1500	9.137		25.771	76.804	-89.436	13.033
	1600	9.152		26.685	77.394	-97.146	13.271
	1700	9.166		27.601	77.950	-104.913	13.489
	1800	9.180		28.518	78.474	-112.735	13.690
	1900	9.194		29.437	78.971	-120.607	13.875
	2000	9.208		30.357	79.443	-128.528	14.047

Te	PHASE	T	CP	H	S	G	BT	P
SOL		298	6.144	0	11.83	-3.527	2.586	
		300	6.154	.011	11.868	-3.549	2.586	
		400	6.682	.653	13.711	-4.831	2.640	
		500	7.210	1.348	15.259	-6.281	2.746	
		600	7.738	2.095	16.620	-7.877	2.869	.002
		700	8.266	2.895	17.852	-9.601	2.998	.147
		723	8.387	3.087	18.121	-10.015	3.028	.329
LIQ				4.18	5.784			
		723	9.000	7.267	23.906	-10.009	3.027	.329
		800	9.000	7.963	24.821	-11.894	3.250	.2029
		900	9.000	8.863	25.881	-14.430	3.504	12.742
		1000	9.000	9.763	26.829	-17.066	3.730	52.897
		1100	9.000	10.663	27.687	-19.793	3.933	163.354
		1200	9.000	11.563	28.470	-22.601	4.117	405.662
1282		9.000		12.305	29.068	-24.972	4.256	760.

Te (g)	PHASE	T	CP	H	S	G	BT
GAS		298	4.974	50.6	43.64	37.589	-27.557
		300	4.972	50.609	43.671	37.508	-27.328
		400	4.928	51.104	45.093	33.066	-18.069
		500	4.932	51.596	46.193	28.500	-12.459
		600	4.954	52.091	47.094	23.834	-8.683
		700	4.985	52.587	47.860	19.086	-5.960
		800	5.020	53.088	48.528	14.266	-3.898
		900	5.058	53.592	49.121	9.383	-2.279
		1000	5.098	54.099	49.656	4.443	-.971
		1100	5.139	54.611	50.144	-.547	.109
		1200	5.180	55.127	50.593	-5.584	1.017
		1282	5.215	55.556	50.938	-9.768	1.665
		1300	5.223	55.647	51.009	-10.665	1.793
		1400	5.265	56.172	51.398	-15.785	2.465
		1500	5.308	56.700	51.763	-20.943	3.052
		1600	5.351	57.233	52.106	-26.137	3.571
		1700	5.394	57.771	52.432	-31.364	4.033
		1800	5.438	58.312	52.742	-36.623	4.447
		1900	5.481	58.858	53.037	-41.912	4.822
		2000	5.524	59.408	53.319	-47.230	5.162

Te ₂ (g)	PHASE	T	CP	H	S	G	BT
GAS		298	8.683	38.03	62.283	19.460	-14.267
		300	8.687	38.046	62.337	19.345	-14.095
		400	8.874	38.924	64.862	12.980	-7.093
		500	9.046	39.820	66.861	6.390	-2.793
		600	9.212	40.733	68.525	-.382	.139
		700	9.374	41.663	69.957	-7.307	2.282
		800	9.535	42.608	71.219	-14.367	3.926
		900	9.695	43.570	72.352	-21.547	5.233
		1000	9.855	44.547	73.381	-28.834	6.303
		1100	10.014	45.541	74.328	-36.220	7.197
		1200	10.173	46.550	75.206	-43.698	7.959
		1282	10.304	47.394	75.886	-49.923	8.509
		1300	10.317	47.394	75.886	-49.923	8.509
		1400	10.345	47.575	76.027	-51.260	8.619
		1500	10.504	48.618	76.800	-58.901	9.196
		1600	10.664	49.676	77.530	-66.618	9.708
		1700	10.823	50.751	78.223	-74.406	10.165
		1800	10.983	51.841	78.884	-82.262	10.577
		1900	11.142	52.947	79.516	-90.182	10.951
		2000	11.301	54.069	80.123	-98.164	11.293
		2000	11.460	55.207	80.707	-106.206	11.607

FeI ₂	PHASE	T	CP	H	S	G	BT
SOL-1	298	20.000	-25.	40.	-36.926	27.071	
	300	20.001	-24.963	40.124	-37.000	26.958	
	400	20.060	-22.960	45.886	-41.314	22.576	
	500	20.118	-20.951	50.368	-46.135	20.168	
	600	20.177	-18.936	54.041	-51.361	18.711	
	650	20.207	-17.927	55.658	-54.104	18.194	
SOL-2			0.2	.308			
	650	20.950	-17.727	55.965	-54.104	18.194	
	700	22.800	-16.633	57.586	-56.943	17.781	
	800	26.500	-14.168	60.872	-62.865	17.176	
	860	28.720	-12.511	62.867	-66.577	16.921	
LIQ			10.7	12.442			
	860	27.000	-1.811	75.309	-66.577	16.921	
	900	27.000	-.731	76.537	-69.614	16.907	
	1000	27.000	1.969	79.381	-77.413	16.921	
	1100	27.000	4.669	81.955	-85.482	16.986	
	1200	27.000	7.369	84.304	-93.796	17.085	
	1300	27.000	10.069	86.465	-102.336	17.207	
	1366	27.000	11.851	87.802	-108.087	17.296	
FeI ₂ (g)	PHASE	T	CP	H	S	G	BT
GAS	298	14.577	21.0	83.5	-3.896	2.856	
	300	14.578	21.027	83.590	-4.050	2.951	
	400	14.642	22.488	87.792	-12.629	6.901	
	500	14.713	23.956	91.067	-21.578	9.433	
	600	14.787	25.431	93.756	-30.823	11.229	
	700	14.863	26.913	96.041	-40.316	12.589	
	800	14.940	28.403	98.031	-50.022	13.667	
	900	15.017	29.901	99.795	-59.915	14.551	
	1000	15.094	31.407	101.381	-69.975	15.295	
	1100	15.171	32.920	102.824	-80.186	15.934	
	1200	15.249	34.441	104.147	-90.536	16.491	
	1300	15.326	35.970	105.371	-101.012	16.984	
	1400	15.404	37.506	106.509	-111.607	17.425	
	1500	15.482	39.050	107.575	-122.312	17.823	
	1600	15.560	40.602	108.576	-133.120	18.186	
	1700	15.637	42.162	109.522	-144.025	18.518	
	1800	15.715	43.730	110.418	-155.022	18.825	
	1900	15.793	45.305	111.270	-166.107	19.109	
	2000	15.871	46.889	112.082	-177.275	19.374	
CrI ₂	PHASE	T	CP	H	S	G	BT
SOL	298	17.610	-37.8	40.4	-49.845	36.542	
	300	17.620	-37.767	40.509	-49.920	36.372	
	400	18.160	-35.978	45.652	-54.239	29.639	
	500	18.700	-34.135	49.762	-59.016	25.800	
	600	19.240	-32.238	53.219	-64.170	23.377	
	700	19.780	-30.287	56.226	-69.645	21.747	
	800	20.320	-28.282	58.902	-75.404	20.602	
	900	20.860	-26.223	61.327	-81.417	19.774	
	1000	21.400	-24.110	63.553	-87.663	19.161	
	1066	21.756	-22.686	64.932	-91.903	18.844	
NiI ₂	PHASE	T	CP	H	S	G	BT
SOL	298	17.479	-18.7	36.8	-29.672	21.753	
	300	17.490	-18.668	36.908	-29.740	21.669	
	400	18.070	-16.890	42.019	-33.697	18.414	
	500	18.650	-15.054	46.114	-38.110	16.660	
	600	19.230	-13.160	49.565	-42.899	15.628	
	700	19.810	-11.208	52.573	-48.009	14.991	
	800	20.390	-9.198	55.256	-53.403	14.591	
	900	20.970	-7.130	57.691	-59.052	14.342	
	1000	21.550	-5.004	59.931	-64.934	14.193	
	1070	21.956	-3.481	61.402	-69.181	14.132	

CsI	PHASE	T	CP	H	S	G	BT	P
SOL		298	12.320	-80.5	30.0	-89.444	65.573	
		300	12.312	-80.477	30.076	-89.500	65.210	
		400	12.410	-79.248	33.612	-92.693	50.652	
		500	13.012	-77.979	36.441	-96.199	42.054	
		600	13.812	-76.639	38.882	-99.968	36.418	
		700	14.706	-75.214	41.077	-103.968	32.465	
		800	15.650	-73.696	43.102	-108.178	29.557	.008
		894	16.563	-72.182	44.890	-112.314	27.460	.135
				5.7	6.376			
LIQ		894	14.037	-66.482	51.266	-112.314	27.460	.137
		900	14.160	-66.398	51.361	-112.622	27.352	.158
		1000	16.210	-64.879	52.959	-117.838	25.757	1.294
		1100	18.260	-63.156	54.600	-123.215	24.484	7.016
		1200	20.310	-61.227	56.276	-128.759	23.453	27.944
		1300	22.360	-59.094	57.983	-134.472	22.610	87.964
		1400	24.410	-56.755	59.715	-140.356	21.914	230.554
		1500	26.460	-54.212	61.469	-146.415	21.336	522.587
		1553	27.546	-52.781	62.407	-149.698	21.069	767.834
				35.9	23.117			
GAS		1553	9.300	-16.881	85.523	-149.698	21.069	
		1600	9.300	-16.443	85.801	-153.724	21.001	
		1700	9.300	-15.513	86.364	-162.333	20.872	
		1800	9.300	-14.583	86.896	-170.996	20.765	
		1900	9.300	-13.653	87.399	-179.711	20.674	
		2000	9.300	-12.723	87.876	-188.475	20.598	

FeTe _{0.9} PHASE	T	CP	H	S	G	BT
SOL-B	298	11.870	-5.55	19.14	-11.257	8.252
	300	11.885	-5.528	19.213	-11.292	8.227
	400	12.446	-4.308	22.719	-13.396	7.320
	500	12.760	-3.047	25.533	-15.813	6.913
	600	12.977	-1.759	27.879	-18.487	6.735
	700	13.148	- .453	29.893	-21.378	6.675
	800	13.294	.869	31.658	-24.457	6.682
	900	13.426	2.206	33.232	-27.703	6.728
	1000	13.549	3.554	34.653	-31.098	6.797
	1100	13.667	4.915	35.950	-34.629	6.881
	1200	13.781	6.288	37.144	-38.285	6.974

NiTe	PHASE	T	CP	H	S	G	BT
SOL		298	12.554	-8.52	19.13	-14.224	10.428
		300	12.560	-8.497	19.208	-14.259	10.389
		400	12.890	-7.224	22.866	-16.371	8.946
		500	13.220	-5.919	25.778	-18.808	8.222
		600	13.550	-4.580	28.217	-21.511	7.836
		700	13.880	-3.209	30.331	-24.440	7.632
		800	14.210	-1.804	32.206	-27.569	7.533

Fe	PHASE	T	CP	H	S	G	BT	P
	SOL-A	298	5.966	0	6.52	-1.944	1.425	
		300	5.979	.011	6.557	-1.956	1.425	
		400	6.559	.639	8.361	-2.705	1.478	
		500	7.079	1.321	9.880	-3.619	1.582	
		600	7.647	2.057	11.220	-4.675	1.703	
		700	8.301	2.853	12.446	-5.859	1.829	
		800	9.057	3.720	13.603	-7.162	1.957	
		800	9.070	3.720	13.603	-7.162	1.957	
		900	10.331	4.676	14.727	-8.578	2.083	
		1000	12.973	5.832	15.943	-10.110	2.210	
		1000	13.010	5.832	15.943	-10.110	2.210	
		1042	20.000	6.525	16.621	-10.793	2.264	
		1042	20.001	6.525	16.621	-10.793	2.264	
		1060	12.311	6.816	16.898	-11.095	2.288	
		1060	12.294	6.816	16.898	-11.095	2.288	
		1100	11.065	7.282	17.329	-11.780	2.341	
		1184	9.901	8.150	18.090	-13.268	2.450	
				0.215	.182			
	SOL-C	1184	8.100	8.365	18.272	-13.268	2.450	
		1200	8.132	8.495	18.381	-13.562	2.470	
		1300	8.331	9.318	19.039	-15.433	2.595	
		1400	8.531	10.161	19.664	-17.368	2.712	
		1500	8.731	11.024	20.260	-19.365	2.822	
		1600	8.931	11.908	20.829	-21.420	2.926	
		1665	9.061	12.492	21.188	-22.785	2.991	.003
				0.200	.120			
	SOL-D	1665	9.829	12.692	21.308	-22.785	2.991	.003
		1700	9.912	13.038	21.513	-23.535	3.026	.005
		1800	10.149	14.041	22.086	-25.715	3.123	.023
		1809	10.170	14.132	22.137	-25.914	3.131	.026
				3.300	1.824			
	LIQ	1809	11.000	17.432	23.961	-25.914	3.131	.026
		1900	11.000	18.433	24.501	-28.119	3.235	.086
		2000	11.000	19.533	25.065	-30.597	3.344	.281
		2100	11.000	20.633	25.602	-33.131	3.448	.816
		2200	11.000	21.733	26.114	-35.717	3.549	2.138
		2300	11.000	22.833	26.603	-38.353	3.645	5.127
		2400	11.000	23.933	27.071	-41.037	3.737	11.375
		2500	11.000	25.033	27.520	-43.767	3.827	23.575
		2600	11.000	26.133	27.951	-46.540	3.913	46.015
		2700	11.000	27.233	28.366	-49.356	3.996	85.165
		2800	11.000	28.333	28.767	-52.213	4.076	150.348
		2900	11.000	29.433	29.153	-55.109	4.154	254.448
		3000	11.000	30.533	29.525	-58.043	4.229	414.638
		3100	11.000	31.633	29.886	-61.014	4.302	653.068
		3135	11.000	32.018	30.010	-62.062	4.327	760.
				83.55	26.651			
	GAS	3135	6.468	115.568	56.660	-62.062	4.327	
		3200	6.468	115.989	56.793	-65.749	4.491	
		3300	6.468	116.635	56.992	-71.439	4.732	
		3400	6.468	117.282	57.185	-77.147	4.960	
		3500	6.468	117.929	57.373	-82.875	5.176	
		3600	6.468	118.576	57.555	-88.622	5.381	

Cr	PHASE	T	CP	H	S	G	BT	P
	SOL	298	5.577	0	5.65	-1.685	1.235	
		300	5.586	.010	5.685	-1.695	1.235	
		400	6.028	.592	7.354	-2.350	1.284	
		500	6.403	1.214	8.740	-3.157	1.380	
		600	6.725	1.871	9.937	-4.092	1.491	
		700	7.000	2.557	10.995	-5.139	1.605	
		800	7.229	3.269	11.945	-6.287	1.718	
		900	7.414	4.002	12.808	-7.525	1.828	
		1000	7.555	4.750	13.597	-8.846	1.934	
		1000	7.631	4.750	13.597	-8.846	1.934	
		1100	8.071	5.536	14.345	-10.244	2.035	
		1200	8.495	6.364	15.065	-11.714	2.134	
		1300	8.907	7.234	15.762	-13.256	2.229	
		1400	9.311	8.145	16.437	-14.866	2.321	
		1500	9.709	9.096	17.093	-16.542	2.411	
		1600	10.101	10.087	17.732	-18.284	2.498	.003
		1700	10.490	11.116	18.356	-20.088	2.583	.015
		1800	10.876	12.185	18.966	-21.955	2.666	.067
		1900	11.260	13.292	19.565	-23.881	2.747	.253
		2000	11.642	14.437	20.152	-25.867	2.827	.829
		2100	12.023	15.620	20.729	-27.911	2.905	2.409
		2130	12.137	15.982	20.901	-28.536	2.928	3.249
				4.047	1.900			
	LIQ	2130	9.400	20.029	22.801	-28.536	2.928	3.249
		2200	9.400	20.687	23.104	-30.142	2.995	6.127
		2300	9.400	21.627	23.522	-32.474	3.086	14.144
		2400	9.400	22.567	23.922	-34.846	3.174	30.365
		2500	9.400	23.507	24.306	-37.258	3.258	61.176
		2600	9.400	24.447	24.675	-39.707	3.338	116.532
		2700	9.400	25.387	25.030	-42.192	3.416	211.236
		2800	9.400	26.327	25.371	-44.712	3.490	366.374
		2900	9.400	27.267	25.701	-47.266	3.563	610.895
		2945	9.400	27.690	25.846	-48.426	3.594	760.
				82.28	27.939			
	GAS	2945	7.358	109.970	53.785	-48.426	3.594	
		3000	7.358	110.375	53.921	-51.388	3.744	
		3100	7.358	111.111	54.162	-56.792	4.004	

Ni	PHASE	T	CP	H	S	G	BT	P
SOL	298	6.235	0	7.14	-2.129	1.561		
	300	6.246	.012	7.179	-2.142	1.561		
	400	6.807	.664	9.052	-2.957	1.616		
	500	7.369	1.373	10.632	-3.943	1.724		
	500	7.370	1.373	10.632	-3.943	1.724		
	600	8.310	2.123	11.996	-5.075	1.849		
	631	9.300	2.395	12.438	-5.453	1.889		
	631	9.300	2.395	12.438	-5.453	1.889		
	640	7.840	2.472	12.559	-5.566	1.901		
	640	7.840	2.472	12.559	-5.566	1.901		
LIQ	700	7.371	2.920	13.229	-6.340	1.980		
	800	7.441	3.659	14.215	-7.713	2.107		
	900	7.635	4.412	15.102	-9.180	2.229		
	1000	7.876	5.187	15.919	-10.731	2.346		
	1100	8.121	5.987	16.681	-12.362	2.456		
	1200	8.343	6.811	17.397	-14.066	2.562		
	1300	8.525	7.655	18.073	-15.840	2.663		
	1400	8.658	8.514	18.710	-17.679	2.760		
	1400	8.650	8.514	18.710	-17.679	2.760		
	1500	8.650	9.379	19.306	-19.580	2.853		
GAS	1600	8.650	10.244	19.865	-21.539	2.943		
	1700	8.650	11.109	20.389	-23.552	3.028	.002	
	1726	8.650	11.334	20.520	-24.084	3.050	.003	
			4.176	2.419				
	1726	10.300	15.510	22.940	-24.084	3.050	.003	
	1800	10.300	16.272	23.372	-25.798	3.133	.010	
	1900	10.300	17.302	23.929	-28.163	3.240	.041	
	2000	10.300	18.332	24.457	-30.583	3.342	.142	
	2100	10.300	19.362	24.960	-33.054	3.440	.437	
	2200	10.300	20.392	25.439	-35.574	3.534	1.207	
GAS	2300	10.300	21.422	25.897	-38.141	3.625	3.038	
	2400	10.300	22.452	26.335	-40.753	3.712	7.052	
	2500	10.300	23.482	26.756	-43.407	3.795	15.241	
	2600	10.300	24.512	27.160	-46.103	3.876	30.927	
	2700	10.300	25.542	27.549	-48.839	3.954	59.343	
	2800	10.300	26.572	27.923	-51.612	4.029	108.335	
	2900	10.300	27.602	28.285	-54.423	4.102	189.154	
	3000	10.300	28.632	28.634	-57.269	4.173	317.315	
	3100	10.300	29.662	28.971	-60.149	4.241	513.465	
	3187	10.300	30.558	29.257	-62.682	4.299	760.	
			88.253	27.692				

付録B 热力学関係式

表B-1 Cs-U-O, Cs-Cr-O, Cs-Mo-O系
の熱力学関係式

表B-2 Cs-O-H系の熱力学関係式

表B-3 Cs-I-Metal系の熱力学関係式

表B-4 Cs-Te-Metal系の熱力学関係式

Table B-1. Thermodynamic relationships in the Cs-U-O,
Cs-Cr-O and Cs-Mo-O systems

Cs uranates		
Phases	PCs-ΔGo ₂ -T relationships	T
Cs ₂ UO ₄ -UO ₂	log PCs = -25620/T + 9.93 - ΔGo ₂ / 9.15T log PCs = -25360/T + 9.67 - ΔGo ₂ / 9.15T	<950K >950K
Cs ₂ U ₂ O ₇ -UO ₂	log PCs = -30530/T + 11.71 - ΔGo ₂ / 6.1T log PCs = -30270/T + 11.44 - ΔGo ₂ / 6.1T	<950K >950K
Cs ₂ U ₄ O ₁₂ -UO ₂	log PCs = -35750/T + 13.72 - ΔGo ₂ / 4.58T log PCs = -35490/T + 13.46 - ΔGo ₂ / 4.58T	<950K >950K
Cs(1)-Cs ₂ UO ₄ -UO ₂	ΔGo ₂ = -201100 + 55.71T log PCs = - 3650/T + 3.85 log PCs = - 3390/T + 3.58	<950K >950K
Cs ₂ UO ₄ -Cs ₂ U ₂ O ₇ -UO ₂	ΔGo ₂ = -89800 + 32.42T log PCs = -15810/T + 6.39 log PCs = -15550/T + 6.13	<950K >950K
Cs ₂ U ₂ O ₇ -Cs ₂ U ₄ O ₁₂ -UO ₂	ΔGo ₂ = -95600 + 36.84T log PCs = -14860/T + 5.67 log PCs = -14600/T + 5.40	<950K >950K
Cs chromates		
Cs ₂ Cr ₂ O ₇ -Cr ₂ O ₃	log PCs = -28850/T + 12.99 - ΔGo ₂ / 4.58T log PCs = -28590/T + 12.73 - ΔGo ₂ / 4.58T	<950K >950K
Cs ₂ CrO ₄ -Cr ₂ O ₃	log PCs = -26290/T + 10.32 - ΔGo ₂ / 7.32T log PCs = -26030/T + 10.06 - ΔGo ₂ / 7.32T	<950K >950K
Cs ₃ CrO ₄ -Cr ₂ O ₃	log PCs = -20710/T + 8.47 - ΔGo ₂ /10.98T log PCs = -20450/T + 8.21 - ΔGo ₂ /10.98T	<950K >950K
Cs ₄ CrO ₄ -Cr ₂ O ₃	log PCs = -17030/T + 7.55 - ΔGo ₂ /14.64T log PCs = -16770/T + 7.29 - ΔGo ₂ /14.64T	<950K >950K
Cs ₄ CrO ₄ -Cr	log PCs = -24380/T + 9.21 - ΔGo ₂ / 9.15T log PCs = -24120/T + 8.95 - ΔGo ₂ / 9.15T	<950K >950K
Cs ₂ Cr ₂ O ₇ -Cs ₂ CrO ₄ -Cr ₂ O ₃	ΔGo ₂ = -31260 + 32.61T log PCs = -22020/T + 5.86 log PCs = -21760/T + 5.60	<950K >950K
Cs ₂ CrO ₄ -Cs ₃ CrO ₄ -Cr ₂ O ₃	ΔGo ₂ = -122680 + 40.62T log PCs = - 9540/T + 4.77 log PCs = - 9280/T + 4.51	<950K >950K

$\Delta\bar{G}_o_2 = -161540 + 40.45T$	<950K
$\log P_{Cs} = -6000/T + 4.79$	>950K
$\log P_{Cs} = -5740/T + 4.52$	
$\Delta\bar{G}_o_2 = -179420 + 40.62T$	
$\log P_{Cs} = -4780/T + 4.77$	<950K
$\log P_{Cs} = -4520/T + 4.51$	>950K
$\Delta\bar{G}_o_2 = -189730 + 49.12T$	
$\log P_{Cs} = -3650/T + 3.85$	<950K
$\log P_{Cs} = -3390/T + 3.58$	>950K
if Cs_5CrO_4 exists	
$\log P_{Cs} = -20430/T + 8.33 - \Delta\bar{G}_o_2/11.44T$	<950K
$\log P_{Cs} = -20170/T + 8.07 - \Delta\bar{G}_o_2/11.44T$	>950K
$\Delta\bar{G}_o_2 = -180950 + 40.52T$	
$\log P_{Cs} = -4610/T + 4.79$	<950K
$\log P_{Cs} = -4350/T + 4.52$	>950K
$\Delta\bar{G}_o_2 = -191920 + 51.27T$	
$\log P_{Cs} = -3650/T + 3.85$	<950K
$\log P_{Cs} = -3390/T + 3.58$	>950K
Cs molybdates	
$\log P_{Cs} = -33290/T + 10.60 - \Delta\bar{G}_o_2/ 6.1T$	<950K
$\log P_{Cs} = -33030/T + 10.34 - \Delta\bar{G}_o_2/ 6.1T$	>950K
$\log P_{Cs} = -27960/T + 8.73 - \Delta\bar{G}_o_2/ 9.15T$	<950K
$\log P_{Cs} = -27700/T + 8.47 - \Delta\bar{G}_o_2/ 9.15T$	>950K
$\log P_{Cs} = -45210/T + 13.26 - \Delta\bar{G}_o_2/ 4.58T$	<950K
$\log P_{Cs} = -42950/T + 13.0 - \Delta\bar{G}_o_2/ 4.58T$	>950K
$\Delta\bar{G}_o_2 = -97540 + 34.1T$	
$\log P_{Cs} = -17300/T + 5.01$	<950K
$\log P_{Cs} = -17040/T + 4.75$	>950K
$\Delta\bar{G}_o_2 = -139530 + 41.46T$	
$\log P_{Cs} = -12710/T + 4.20$	<950K
$\log P_{Cs} = -12450/T + 3.94$	>950K
$\Delta\bar{G}_o_2 = -181000 + 43.1T$	
$\log P_{Cs} = -3650/T + 3.85$	<950K
$\log P_{Cs} = -3390/T + 3.58$	>950K

Table B-2. Thermodynamic relationships in the Cs-O-H systems

Reactions	$P_{CsOH}-P_{Cs}-P_{H_2}-\Delta\bar{G}_{O_2}-T$ relationships	T
$Cs(g) + 1/2 O_2 + 1/2 H_2 = CsOH(1)$	$\log P_{Cs} = -24510/T + 10.27 - 1/2 \log P_{H_2} - \Delta\bar{G}_{O_2}/9.15T$ $\log P_{Cs} = -23780/T + 9.52 - 1/2 \log P_{H_2} - \Delta\bar{G}_{O_2}/9.15T$	<950 >950
$Cs(l) + 1/2 O_2 + 1/2 H_2 = CsOH(1)$	$\Delta\bar{G}_{O_2} = -190880 + 58.82T - 4.58T \log P_{H_2}$ $\Delta\bar{G}_{O_2} = -186600 + 54.3T - 4.58T \log P_{H_2}$	<950 >950
$Cs(g) + 1/2 O_2 + 1/2 H_2 = CsOH(g)$	$\log P_{CsOH} = 17520/T - 4.57 + 1/2 \log P_{H_2} + \log P_{Cs} + \Delta\bar{G}_{O_2}/9.15T$ $\log P_{CsOH} = 17490/T - 4.53 + 1/2 \log P_{H_2} + \log P_{Cs} + \Delta\bar{G}_{O_2}/9.15T$	<950 >950
$Cs(l) + 1/2 O_2 + 1/2 H_2 = CsOH(g)$	$\log P_{CsOH} = 13870/T - 0.73 + 1/2 \log P_{H_2} + \Delta\bar{G}_{O_2}/9.15T$ $\log P_{CsOH} = 14100/T - 0.95 + 1/2 \log P_{H_2} + \Delta\bar{G}_{O_2}/9.15T$	<950 >950

Table B-3. Thermodynamic relationships in the Cs-I-Metal systems

Reactions	$P_{I_2}-P_{Cs}-P_{MI_2}-T$ relationships	T
$Cs(g) + 1/2 I_2 = CsI$	$\log P_{I_2} = -46160/T + 17.89 - 2 \log P_{Cs}$	<894
	$\log P_{I_2} = -40430/T + 11.76 - 2 \log P_{Cs}$	894- 950
	$\log P_{I_2} = -41330/T + 12.64 - 2 \log P_{Cs}$	>950
$Cs(l) + 1/2 I_2 = CsI$	$\log P_{I_2} = -38860/T + 10.20$	<894
	$\log P_{I_2} = -33130/T + 4.07$	894- 950
$2CsI + (M) = MI_2(g) + 2Cs(g)$	$\log P_{FeI_2} = -47230/T + 20.54 - 2 \log P_{Cs}$	700- 894
	$\log P_{FeI_2} = -41500/T + 14.41 - 2 \log P_{Cs}$	894- 950
	$\log P_{FeI_2} = -42400/T + 15.29 - 2 \log P_{Cs}$	950-1184
	$\log P_{FeI_2} = -41460/T + 14.46 - 2 \log P_{Cs}$	1184-1306
Cr	$\log P_{CrI_2} = -44620/T + 17.34 - 2 \log P_{Cs}$	950-1054
	$\log P_{NiI_2} = -50550/T + 19.03 - 2 \log P_{Cs}$	<894
	$\log P_{NiI_2} = -44820/T + 12.9 - 2 \log P_{Cs}$	894- 950
Ni	$\log P_{NiI_2} = -45720/T + 13.78 - 2 \log P_{Cs}$	950-1400

Table B-4. Thermodynamic relationships in the Cs-Te-Metal systems

Reactions	$a_{MTe}-P_{Cs}-T$ relationships	T
$2Cs(g) + Te = Cs_2Te$	$\log P_{Cs} = -11850/T + 5.38$	<950
	$\log P_{Cs} = -8200/T + 1.53$	>950
$Cs_2Te + (M) = MTe + 2Cs(g)$	$\log a_{FeTe} = -18740/T + 8.13 - 1.8 \log P_{Cs}$	<950
	$\log a_{FeTe} = -12170/T + 1.21 - 1.8 \log P_{Cs}$	>950
	$\log a_{CrTe} = -21120/T + 9.9 - 2.2 \log P_{Cs}$	<950
	$\log a_{CrTe} = -13090/T + 1.44 - 2.2 \log P_{Cs}$	>950
Ni	$\log a_{NiTe} = -19940/T + 7.68 - 2 \log P_{Cs}$	<950
	$\log a_{NiTe} = -12640/T - 0.02 - 2 \log P_{Cs}$	>950

付録C 燃焼度とFP収率

 $Pu/Pu+U = 20.6 \text{ (a/o)}$ (平衡炉心領域 I) Pu 同位元素比 $(239/240/241/242) = 58/24/14/14$ (W/O) ^{235}U 含有率 = 0.2 (W/O)

O/M比 = 1.98 密度 = 85% TD 123日/サイクル (各30日停止)

Burn Up (%)	EP Yield (at%) fuel 中全元素に対する比率				
	1.4	2.4 (1サイクル)	4.7 (2サイクル)	7.0 (3サイクル)	9.1 (4サイクル)
Gaseous	36 Kr	.0089	.0154	.0299	.0436
	54 Xe	.0942	.1637	.3183	.4645
Oxide	38 Sr	.0223	.0361	.0635	.0886
	39 Y	.0118	.0195	.0345	.0480
	40 Zr	.0973	.1660	.3140	.4525
	56 Ba	.0355	.0570	.1051	.1509
	57 La	.0266	.0454	.0872	.1266
	58 Ce	.0695	.1174	.2138	.2989
	59 Pr	.0161	.0297	.0638	.0965
	60 Nd	.0597	.1082	.2220	.3347
	61 Pm	.0081	.0151	.0294	.0413
	62 Sm	.0162	.0286	.0574	.0862
Non-Oxide (volatile)	63 Eu	.0037	.0062	.0117	.0168
	35 Br	.0008	.0013	.0025	.0037
	37 Rb	.0077	.0134	.0261	.0382
	47 Ag	.0083	.0142	.0271	.0391
	48 Cd	.0042	.0074	.0146	.0213
	49 In	.0004	.0007	.0013	.0019
	50 Sn	.0025	.0041	.0079	.0115
	51 Sb	.0018	.0030	.0053	.0075
	52 Te	.0150	.0252	.0477	.0691
	53 I	.0089	.0134	.0238	.0338
	55 Cs	.0840	.1482	.2905	.4245
	(Cs/Te)	(5.6)	(5.9)	(6.1)	(6.2)
Non-Oxide (solid metal)	41 Nb	.0046	.0088	.0127	.0131
	42 Mo	.0810	.1447	.3024	.4585
	43 Tc	.0254	.0451	.0891	.1307
	44 Ru	.1171	.1934	.3494	.4898
	45 Rh	.0122	.0284	.0721	.1145
	46 Pd	.0582	.1029	.2079	.3129