

第 2 版での新しい特徴

MALT for Windows マニュアルから

7章 MALT for Windows 2 版の新しい特徴

付録2 MALTデータベース構築に用いた文献 (アップデート)

CHDマニュアルより

付録2 CHD 2 版におけるプールベ線図

Gem関連

gem 2 版の新しい特徴

7章 MALT for Windows 2 版の新しい特徴

7.1 データベースの拡張

引き続きできるだけ多くの化合物/化学種を格納することに努力しました。特に次の様な化合物と化学種について収集努力を払いました。

- 1) 高温化合物および気相化学種：複合酸化物に加え、複合ハロゲン化物もデータベースでの利用範囲を広げるために、拡張しました。
- 2) この版より水溶液化学種を含めました。MALT データベースはNBS 化学熱力学表に最も大きな信頼性を置いていますので、MALTの方針と整合するようにデータの収集方法を定めました。すなわち、NBS 化学熱力学表に記載されているデータがあれば、その値を最初に採用する。NBSデータが最後に収録されたのは1982年であり、それ以来多くのデータ収集が水溶液化学種に関して行われてきた。あるものはNBSデータと両立がとれるように評価されるものの、CODATA推奨値とその値に整合するデータを基礎とするものもある。このような両立性に関する記述がある場合には、MALTデータベースではNBSデータと両立性のあるデータを採用することにした。

化合物/化学種の収録数は表7.1にまとめてあります。ここに第1版で収録されたものは、“original” および “updated”欄に 記入されている。収

表 7.1 MALT for Windows に格納されている化合物/化学種の数。第1版の収録済みと更新並びに第2版での追加

	第1版格納済み	収録値更新	新規追加	系
固体	2133	151	1397	3681
液体	272	0	25	297
水溶液	0	0	1097	1097
期待	2305	65	58	2428
系	4710	216	2577	7503

録数は4932 化学種であったので、削除したものが6 化学種あり、そのうち2 化学種は不適切であったために除外し、残りの4 化合物は化学量論数表記を変更したものである。例えば、 $\text{Sr}_3\text{Fe}_2\text{O}_6$ から $\text{Sr}_{1.5}\text{FeO}_3$ へと変更した。

7.2 水溶液化学種に関する特別な措置

元々、MALTデータベースは高温用に設計されているので、全ての化合物は298.15 Kのデータとともに高温熱容量値データを保持しています。他方、水溶液化学種に関する熱力学データは主に標準温度での値が整備されています。実際、NBS化学熱力学表では、298.15 Kでの値のみ掲載されていますが、多くの場合標準生成エンタルピー、標準生成ギブズエネルギー、標準エントロピーが掲載されていないものもあります。今回のMALTデータベースの構築においては、これらの3関数がそろっている場合のみ掲載することにしました。また、高温熱容量が利用できない場合でも、データベースに格納することにしました。従って、次の様な特別の注意が必要となります。

1) MALT のメインプログラムでは、高温熱容量値を持たない化学種に

熱力学表						
O3 [a] 分子量 47.9982 (2022/03/15)						
T	C_p	S°	$H^\circ - H^\circ(T_r)$	$\langle gsf \rangle$	$\Delta_f H^\circ$	$\Delta_f G^\circ$
K	J/K mol	J/K mol	kJ/mol	J/K mol	kJ/mol	kJ/mol
298.15	0.000	146.000	0.000	-146.000	125.900	174.100
この(これらの)化合物の温度外挿は許可されません。						
熱力学定数 単位: J						
<<< O3 [a] >>>						
保存(Y)	終了(X)					

図. 7.1 高温熱容量を持たない水溶液化学種に対する熱力学表 特別なメッセージがコメント欄に記載されています。

対しては、いくつかの機能が制限されます。データベースの管理を簡便にするために、高温熱容量のない化合物には仮の熱容量値（ゼロ値）が入れていますが、利用できる温度範囲を298.15Kに限定しています。これらの化学種に対しては、温度外挿の機能は適用できません。

- 2) 他方、鉱物学などの分野では高温水溶液データを用いることに多大な関心が払われてきています。このような要望に応えるため、MALTデータベースでは、最近の水溶液化学種の取り扱い方の進展を考慮して、より広範囲の高温熱容量値を提供しています。
- 3) MALT関連ソフトであるgemとCHでは、熱容量値を持たない水溶液化学種に対して特別な取り扱い方を採用しています。GemもCHDも、熱力学平衡に関与する多くの化合物を取り扱えることを特徴としていますので、対象とする計算に熱容量のない化合物が含まれていないか、特別な注意を払い、含まれていれば特別な警告を発します。デフォルトの設定では、このような高温熱容量のない化学種は298.15 K 以外の温度では除外されます。

7.3 ユーザーデータベースの取り扱い

熱力学データを取り扱う上で、MALTデータベースおよびユーザーデータベースに関する新たな機能を適用できるようにしました。

- 1) ユーザーデータベースの全データの読み込み: ユーザーデータベースの管理をしやすいように、この機能を加えました。全ての化合物化学種を検索できるので、どの化合物についてもMALTのデータ管理機能を用いて、組織的に編集することができます。
- 2) 対象除外: 検索はMALTのメインデータベースと指定されたユーザーデータベースを対象として、決められた方法で行われ、繰り返し同じ検索化合物の集合を提供します。とは言え、検索後に検索化合物の中のいくつかを除外することもあります。例えば、化合物の検索/除外のメニューがこの手続きを提供します。化合物表の中から、除外すべき化合物を選ぶことができます。このような場合、除外した化合物をファイルに記録しておくことができます。次の検索時に、このファイルに記載されている化合物があれば自動的に除外されます。MALTメインデータベースあるいはユーザーデータベースのいかなる化合物もこの除外の対象として指定することができます。

す。この対象除外リストは、化合物の検索の中の対象除外のメニューを選ぶことで編集できます。

Appendix 2. MALTデータベース構築に用いた文献のリスト (アップデート版)

1. Wagman, D. D. Evans, W. H., Parker, V. B., Schumm, R. H., Halow, I., Bailey, S. M., Churney, K. L., Nuttall, R. L.; The NBS tables of chemical thermodynamic properties, selected values for inorganic and C₁ and C₂ organic substances in SI units; *J. Phys. Chem. Ref. Data* Vol. 2, Supplement No. 2, 1982.
2. JANAF Thermochemical Tables:
 - (a) Stull, D. R., Prophet, H.; 2nd ed., 1971, NSRDS-NBS-37:
 - (b) Chase, M. W., Jr., Curnutt, J. L., Hu, A. T., Prophet, H., Syverud, A. N., Walker, L. C.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* 3, 311, 1974:
 - (c) Chase, M. W., Jr., Curnutt, J. L., Prophet, H., McDonald, R. A., Syverud, A. N.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* 4, 1, 1975:
 - (d) Chase, M. W., Jr., Curnutt, J. L., McDonald, R. A., Syverud, A. N.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* 7, 793, 1978:
 - (e) Chase, M. W., Jr., Curnutt, J. R., Downey, J. R., Jr., McDonald, R. A., Syverud, A. N., Valenzuela, E. A.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* 11, 695, 1982:
 - (f) Chase, M. W., Jr., Davies, C. A., Downey, J. R., Jr., Frurip, D. J., McDonald, R. A., Syverud, A. N.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* 14 Supplement No. 1, 1985.
3. Kubaschewski, O., Alcock, C. B.; Metallurgical Thermochemistry 5th ed.; 1979; Pergamon, Oxford.
4. Mills, K. C.; Thermodynamic Data for Inorganic Sulphides, Selenides and Tellurides; 1974; Butterworths, London.
5. Hultgren, R., Desai, P. D., Gleiser, M., Kelley, K. K.; Selected Values of the Thermodynamic Properties of the Elements; 1973; The American Society for Metals, Metals Park.
6. Barin, I., Knacke, O.; Thermodynamic Properties of Inorganic Substances; 1973; Verlag Stahleisen, Berlin.
7. Barin, I., Knacke, O., Kubaschewski, O.; Thermodynamic Properties of Inorganic Substances Supplement; 1977; Verlag Stahleisen, Berlin.
8. Robie, R. A., Hemingway, B. S., Fisher, J. R.; Thermodynamic Properties of Minerals and Related Substances at 298.15 K and 1 Bars (10⁵ Pascals) Pressure and at High Temperatures; 1978; US Government Printing Office, Washington.

9. Stull, D. R., Westrum, E. F., Jr., Sinke, G. C.; The Chemical Thermodynamics of Organic Compounds; 1969; John Wiley & sons, New York.
10. Stull, D. R., Sinke, G. C.; Thermodynamic Properties of the Elements; Advances in Chemistry Series 18; 1956; American Chemical Society, Washington.
11. Glushkov, V. P., Gurvich, L. V., Bergman, G. A., Veitz, I. V., Medvedev, V. A., Khachkuruzov, G. A., Yungman, V. A.; Thermodynamic Data for Individual Substances; High temperature Institute, State Institute of Applied Chemistry, National Academy of Sciences of the U. S. S. R., Moscow.
 Vol.1: The elements O, H, F, Cl, Br, I, He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn, S, N, and P and their compounds; 1978;
 Vol.2: The elements C, Si, Ge, Sn, and Pb and their compounds; 1979;
 Vol.3: The elements B, Al, Ga, In, Tl, Be, Mg, Ca, Sr, and Ba and their compounds; 1981;
 Vol.4: The elements Cr, Mo, W, V, Nb, Ta, Ti, Zr, Hf, Sc, Y, La, Th, U, Pu, Li, Na, K, Rb, and Cs and their compounds; 1982.
12. Atomic Energy Review Special issues.
 No. 1. Rand, M. H., Livey, D. T., Feshotte, P., Nowontny, H., Seifert, K., Ferro, R.; Plutonium: Physico-chemical Properties of its Compounds and Alloys; 1966; International Atomic Energy Agency, Vienna.
 No. 2. Lavrentev, V. I., Gerassimov, Ya. I., Feschotte, P., Livey, D. T., von Goldbeck, O., Nowontny, H., Seifert, K., Ferro, R., Dragoo, A. L.; Niobium: Physico-Chemical Properties of its Compounds and Alloys; 1968; International Atomic Energy Agency, Vienna.
 No. 3. Gerassimov, Ya. I., Lavrentev, V. I., von Goldbeck, O., Livey, D. T., Ferro, R., Dragoo, A. L.; Tantalum: Physico-Chemical Properties of its Compounds and Alloys; 1972; IAEA, Vienna.
 No. 4. Spencer, P. J., von Goldbeck, O., Ferro, R., Girgis, K., Dragoo, A. L.; Beryllium: Physico-Chemical Properties of its Compounds and Alloys; 1973; IAEA, Vienna.
 No. 5. Rand, M. H., von Goldbeck, O., Ferro, R., Girgis, K., Dragoo, A. L.; Thorium: Physico-Chemical Properties of its Compounds and Alloys; 1975; IAEA, Vienna.
 No. 6. Alcock, C. B., Jacob, K. T., Zador, S., Kubaschewski-von Goldbeck, Ortrud., Nowontny, H., Seifert, K., Kubaschewski, O.; Zirconium: Physico-Chemical Properties of its Compounds and Alloys; 1976; IAEA, Vienna.
 No. 7. Spencer, P. J., Kubaschewski-von Goldbeck, O., Ferro, R., Marazza, R., Girgis, K., Kubaschewski, O.; Hafnium: Physico-Chemical Properties of its Compounds and Alloys; 1981; IAEA,

Vienna.

- No. 8. Brewer, L., Lamoreaux, R. H., Ferro, R., Marazza, R., Girgis, K.; Molybdenum: Physico-Chemical Properties of its Compounds and Alloys; 1980; IAEA, Vienna.
- No. 9. Kubaschewski, O., Kubaschewski-von Goldbeck, Ortrud, Rogl, P., Franzen, K.L.; Titanium: Physico-chemical Properties of its Compounds and Alloys; 1983; IAEA, Vienna.
13. King, E. G., Mah, A. D., Pankratz, L. B.; Thermodynamic Properties of Copper and its Inorganic Compounds, INCRA monograph 2; 1973; International Copper Research Association, Inc.
14. Mah, A. D., Pankratz, L. B.; Contribution of the Data on Theoretical Metallurgy XVI. Thermodynamic Properties of Nickel and Its Inorganic Compounds; Bulletin of U. S. Bureau of Mines 668; 1976; U. S. Government Printing Office, Washington.
15. Pankratz, L. B.; Thermodynamic Properties of Elements and Oxides; Bulletin of U. S. Bureau of Mines 672; 1982; U. S. Government Printing Office, Washington: Pankratz, L. B., Stuve, J. M., Gokcen, N. A.; Thermodynamic Data for Mineral Technology, Bulletin of Bureau of Mines 677, 1984; U. S. Government Printing Office, Washington.
16. Chang, Y. Austin, Ashmad, Nazeer; Thermodynamic Data on Metal Carbonates and Related Oxides; 1982; The Metallurgical Society of AIME, Warrendale, Pa. US.
17. Chart, T. G.; *High Temp. - High Pressures*, 5, 241-252, 1973.
18. Haas, J. L., Jr., Robinson, G. R., Jr., Hemingway, B. S.; Thermodynamic Tabulations for Selected Phases in the System $\text{CaO-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2\text{-H}_2\text{O}$ at 101,325 Pa (1 atm) between 273.15 and 1800 K; *J. Phys. Chem. Ref. Data* **10**(3), 575-669, 1981.
19. The Chemical Thermodynamics of Actinide Elements and Compounds;
- Part 1: Oetting, F. L., Rand, M. H., Ackermann, R. J.; The Actinide Elements; 1976; IAEA, Vienna.
- Part 2: Fluger, J., Oetting, F. L.; The Actinide Aqueous Ions; 1976; IAEA, Vienna.
- Part 3: Cordfunke, E. H.P., O'Hare, P. A. G.; Miscellaneous Actinide Compounds; 1978; IAEA, Vienna.
- Part 4: Grnvold, F., Drowart, J., Westrum, E. F., Jr.; The Actinide Chalcogenides (Excluding Oxides); 1984; IAEA, Vienna.
- Part 5: Chiotti, P., Akhachinskij, V. V., Ansara, I., Rand, M. H.; The Actinide Binary Alloys; 1981; IAEA, Vienna.
- Part 6: Holley, C. E., Rand, M. H., Storms, E. K.; The Actinide Carbides; 1984; IAEA, Vienna.
- Part 8: Fuger, J., Parker, V. B., Hubbard, W. N., Oetting, F. L.; The Actinide Halides; 1983; IAEA, Vienna.
- Part 9: Flotow, H. E., Haschke, J. M., Yamauchi, S.; The Actinide

- Hydrides; 1984; IAEA, Vienna.
- Part 13: Hildenbrand, D. L., Gurvich, L. V., Yungman, V. S.; The Gaseous Actinide Ions; 1985; IAEA, Vienna.
20. Kelley, K. K.; Contributions to the Data on Theoretical Metallurgy XIII. High-Temperature Heat-Content, Heat-Capacity, and Entropy Data for the Elements and Inorganic Compounds; Bulletin of U. S. Bureau of Mines 584; 1960; U. S. Government Printing Office, Washington.
 21. Kubaschewski, O; *High Temp. - High Pressures* **4**, 1-12, 1972.
 22. Cox, D, J. Pilcher, G.; Thermochemistry of Organic and Organometallic Compounds; 1970; Academic Press, London.
 23. Martin, J. F.; Specialist Periodical Reports - Chemical Thermodynamics Vol. 1, pp 133-161; 1973; The Chemical Society, Burlington House, London, W1V 0BN.
 24. Pedley, J. B., Naylor, R. D., Kirby, S. P.; Thermochemical Data of Organic Compounds 2nd ed.; 1986; Chapman and Hall, London.
 25. Naumov, G. B., Ryzhenko, B. N., Khodakovsky, I. L.; Handbook of Thermodynamic Data; 1971; Moscow, Atomizdat; translated by Soleimani, G. J.; 1974; U. S. Geological Survey.
 26. Barin, I.; Thermochemical Data of Pure Substances; 1989; VCH, Weinheim.
 27. Domalski, Eugene S., Evans, William H., Hearing, Elizabeth D.; Heat Capacities and Entropies of Organic Compounds in the Condensed Phase, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **13**, Supplement No.1, 1984.
 28. Stephenson, R. M., Malanowski, S.; Handbook of the Thermodynamics of Organic Compounds; 1987; Elsevier, New York.
 29. High Temperature Vaporization Behavior of Oxides:
 - (1) Lamoreaux, R. H., Hildenbrand, D. L.; I. Alkali Metal Binary Oxides, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **13**(1), 151-173, 1984.
 - (2) Lamoreaux, R. H., Hildenbrand, D. L. Brewer, L.; II. Oxides of Be, Mg, Ca, Sr, Ba, B, Al, Ga, In, Tl, Si, Ge, Sn, Pb Zn, Cd, and Hg, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **16**(3), 419-443, 1987.
 30. Wilhoit, R. C., Zwolinski, B. J.; Physical and Thermodynamic Properties of Aliphatic Alcohols; *J. Phys. Chem. Ref. Data* Vol. 2 Suppl. 1, 1973.
 31. Cook, L. P., McMurdie, H. F. ed.; Phase Diagrams for Ceramists Vol. 7; 1989; The Am. Cera. Soc.
 32. Pedley, J. B., Rylance, J.; Sussex -N.P.L. Computer Analysed Thermochemical Data: Organic and Organometallic Compounds; 1977; University of Sussex.
 33. Cordfunke, E. H. P and Konings, R. J. M. ed.; Thermochemical Data for Reactor Materials and Fission Products; 1990; North-Holland, Amsterdam.
 34. Gurvich, L. V., Veyts, I. V., Alcock, C. B.; Thermodynamic Properties of Individual Substances Fourth Ed. (See also 11);

- Volume 1, O, H(D,T), F, Cl, Br, I, He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn, S, N, P and Their Compounds; 1989; Hemisphere, New York:
- Volume 2, C, Si, Ge, Sn, Pb and Their Compounds; 1991; Hemisphere, New York.
35. Knacke, O., Kubaschewski, O., Hesselmann, K. ed. ; "Thermochemical Properties of Inorganic Substances," 2nd ed.; 1991; Springer-Verlag, Berlin, Verlag Stahleisen m.B.H. Dusseldorf.
 36. Chase, M. W., Jr., J. Phys. Chem. Refer. Data Monograph 9 NIST-JANAF Thermodynamical Tables Fourth Edition.1998.
 37. Yokokawa H., DenkiKagaku Binran
-
101. Grønvold, F.; *J. Chem. Thermodyn.* **5**, 525-531, 1973.
 102. Motzfeldt, K., Sanberg, B.; "Chemical Investigations Concerning Carbothermic Reduction of Alumina," pp. 411-428, in Light Metals 1979, Peterson, W. S. ed.; 1979; AIME, Warrendale, Pa.
 103. Takahashi, Y., Kadokura, H., Yokokawa, H.; *J. Chem. Thermodyn.* **15**, 65-81, 1983.
 104. Margrave, J. L., Houge, R. H., Fredin, L.; *Thermophysical Properties 4* (Proceeding of The Fourth Japan Symposium on Thermophysical Properties) p 107, 1983.
 105. Grønvold, F., Samuelsen, E. J.; *J. Phys. Chem. Solids* **36**, 249-256, 1975.
 106. Grønvold, F., Sveen, A.; *J. Chem. Thermodyn.* **6**, 859-872, 1974.
 107. Flotow, H. E., Osborne, D. W.; *J. Chem. Thermodyn.* **6**, 135-140, 1974.
 108. Johnson, G. K.; *J. Chem. Thermodyn.* **16**, 295-300, 1984.
 109. O'Hare, P. A. G., Hubbard, W. N., Johnson, G. K., Flotow, H. E.; *J. Chem. Thermodyn.* **16**, 45-59, 1984.
 110. Skudlarski, K., Kapala, J.; *J. Chem. Thermodyn.* **16**, 91-100, 1984.
 111. Loewenschuss, A., Maycus, Y.; *Chemical Review* **84**(2), 89-115, 1984.
 112. Smith, J. F.; *Bull. Alloy Phase Diagrams* **2**(1), 42-48, 1981.
 113. Pamidimukkala, K. M., Rogers, D., Skinner, G. B.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* **11**(1), 83-99, 1982.
 114. Chao, J., Zwolinski, B. J.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* **7**(1), 363-377, 1978: Chen, S. S., Wilhoit, R. C. Zwolinski, B. J.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* **6**(1), 105-112, 1977: Chao, J., Zwolinski, B. J.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* **5**(2), 319-328, 1976: Chao, J., Rodgers, A. S., Wilhoit, R. C., Zwolinski, B. J.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* **3**(1), 141-162, 1974: Chao, J., Wilhoit, R. C., Zwolinski, B. J.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* **2**(2), 427-437, 1973: Chen, S. S., Wilhoit, R. C., Zwolinski, B. J.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* **4**(4), 859-869, 1975: Chao, J., Zwolinski, B. J.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* **4**(3), 251-261, 1975: Chen, S. S., Kudchadker, S. A., Zwolinski, B. J.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* **4**(3), 251-261, 1975: Kudchadker, S. A., Kudchadker, A. P., Wilhoit, R. C., Zwolinski, B. J.;

- J. Phys. Chem. Ref. Data* **7**(2), 417-456, 1978: Kudchadker, S. A., Kudchadker, A. P., Wilhoit, R. C.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* **8**(2), 519-526, 1979.
115. Tirtowidjojo, M., Pollard, R.; *J. Cryst. Growth* **77**, 200-209, 1986.
 116. Brewer, L., Ebbinghaus, E. E.; *Thermochim. Acta* **129**, 49-55, 1988.
 117. Leonov, A. I., Shvaiko-Shvaikovskii, V. E., Keler, E. K.; *Rus. J. Inorg. Chem.* **14**(3), 334-336, 1969.
 118. Yokokawa, H., Sakai, N., Kawada, T., Dokiya, M.; *J. Am. Ceram. Soc.* **73**(3), 649-658, 1990.
 119. Taylor, R. W., Schmalzried, H.; *J. Phys. Chem.* **68**(9), 2444-2449, 1964.
 120. Keneshea, F. J., Cubicciotti, D. D.; *J. Chem. Phys.* **40**, 177, 1964.
 121. Yokokawa, H., Sakai, N., Kawada, T., Dokiya, M.; *Denki Kagaku* **58**, 561-563, 1990.
 122. Yokokawa, H., Kawada, T., Dokiya, M.; *J. Am. Ceram. Soc.* **72**(11), 2104-2110, 1989.
 123. Yokokawa, H. estimated and evaluated values during 1989-1991; Yokokawa, H., Sakai, N., Kawada, T., Dokiya, M., *J. Solid State Chem.* **94**(1), 106-120, 1991.
 124. Kellogg, H. H.; *Metal. Trans.* **20B**, 77, 1989.
 125. Kuselev, A. I., Karnov, I. K.; Physicochemical modeling in geology; 1988; Academy Nauk SSSR, Siberian Branch.
 126. Hubbard, W. N., Rawlins, P. L., Connick, P. A., Stedwell, R. E., Jr., O'Hare, P. A. G.; *J. Chem. Thermodyn.* **15**, 785-798, 1983; Ohlendorf, D., Flotow, H.; *J. Less-Common Metal* **73**, 25-32, 1980.
 127. Wilhoit, R. C. Chao, J., Hall, K. R.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* **14**(1), 1 (1985). Chao, J., Hall, K. R., Marsh, K. N., Wilhoit, R. C.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* **15**(4), 1369-1436, 1986.
 128. Lyman, J.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* **18**(2), 799, 1989.
 129. Pedley, J. B., Marshall, E. M.; *J. Phys. Chem. Ref. Data* **12**(14), 967, 1983.
 130. Akila, R., Jacob, K. T., Shukla, A. K.; *Metal. Trans.* **18B**, 163, 1987; Dwivedi, R. K., Kay, D. A. R.; *Metal. Trans.* **15B**, 523, 1984; Fukatsu, N., Shidawara, N., Kozuka, Z.; *J. Electrochem. Soc.* **132**(9), 2258, 1985.
 131. Takahashi, Y., Sakamoto, R., Kamimoto, M.; *Int. J. Thermophys.* **9**(6), 1081, 1988.
 132. Robie, R. A., Russell-Robinson, S., Hemingway, B. S.; *Thermochim. Acta* **139**, 67, 1989.
 133. Filippov, V. K., Kalinkin, A. M., Vasin, S. K.; *J. Chem. Thermodyn.* **19**, 185, 1987.
 134. Abello, L., Chhor, K., Pommier, C.; *J. Chem. Thermodyn.* **19**, 797, 1987; *J. Chem. Thermodyn.* **17**, 1-23, 1985.
 135. Cordfunke, E. H. P., Cluistra, R., van Miltenburg, J. C.; *J. Chem.*

- Thermodyn.* **17**, 1079, 1985.
136. Meisingset, K. K., Gr nvoid, F.; *J. Chem. Thermodyn.* **18**, 159, 1986.
 137. Beyer, R. P., Ferrante, M. J.; *J. Chem. Thermodyn.* **18**, 365, 1986.
 138. O'Hare, P. A. G., Johnson, G. K.; *J. Chem. Thermodyn.* **17**, 593, 1985.
 139. Levitskii, V. A., Balak, G. M.; *Rus. J. Phys. Chem.* **56**(5), 668, 1982:
 Levitskii, V. A., Klimenko, A. N., Marin, V. P., Chentsov, V. N.,
 Men'shenin, Yu. V.; *Rus. J. Phys. Chem.* **58**(6), 1350-1354, 1984:
 Klimenko, A. N., Levitskii, V. A., Marin, V. P.; *Rus. J. Phys. Chem.*
60(10), 2402-2409, 1986.
 140. Lindemer, T. B., Besmann, T. M., Johnson, C. E.; *J. Nucl. Mater.* **100**,
 178-226, 1981.
 141. Yamaguchi, S., Kaneko, Y., Iguchi, Y.; *Trans. JIM*, **28**(12), 986-993,
 1987: Seetharaman, W. D. S., Staffansson, L. -I.; *Metal. Trans.* **15B**, 319-
 327, 1984.
 142. Yokokawa, H., Sakai, N., Kawada, T., Dokiya, M., Kato, S., Ota, K.;
Denki Kagaku **58**(1), 57-62, 1990: Godshall, N. A., Raistrick, I. D.,
 Huggins, R. A.; *Mater. Res. Bull.* **15**, 561, 1980: Takeshita, H., Ohmichi,
 T., Nasu, S., Watanabe, H., Sasayama, T., Maeda, A., Miyake, M., Sano,
 T.; *J. Nucl. Mater.* **78**, 281, 1978.
 143. Hsu, H. S., Devan, J. H.; *J. Electrochem. Soc.* **133**, 2078, 1986.
 144. Denielou, L., Petitet, J.-P., Tequi, C.; *J. Chem. Thermodyn.* **7**, 901-902,
 1975.
 145. Kohli, R., Lacom, W.; *Thermochim. Acta* **57**, 155-160, 1982; **81**, 327-
 333, 1984: O'Hare, P. A. G., Johnson, G. K.; *J. Chem. Thermodyn.* **17**,
 391-400, 1985: Fredrickson, D. R., Johnson, G. K., O'Hare, P. A. G.; *J.*
Chem. Thermodyn. **12**, 801-805, 1980: Venugopal, V., Iyer, V. S.,
 Agarwal, R., Roy, K. N., Prasad, R., Sood, D. D.; *J. Chem. Thermodyn.*
19, 1047-1051, 1987: Kim, K. Y., Johnson, G. K., Johnson, C. E.,
 Flotow, H. E., Appelman, E. H., O'Hare, P. A. G., Phillips, B. A.; *J.*
Chem. Thermodyn. **13**, 333-344, 1981: Kim, K. Y., Johnson, G. K.,
 O'Hare, P. A. G., Phillips, B. A.; *J. Chem. Thermodyn.* **13**, 695-698,
 1981: Brittain, R. D., Lau, K. H., Hildenbrand, D. L.; *J. Electrochem.*
Soc. **134**, 2900-2904, 1987: Sirousse-zia, D.; *Thermochim. Acta* **19**, 244-
 246, 1977.
 146. Konings, R. J. M., Cordfunke, E. H. P.; *Thermochim. Acta* **124**, 157-162,
 1988: Crouch-Baker, S., Davies, P. K., Dickens, P. G.; *J. Chem.*
Thermodyn. **16**, 273-279, 1984. Dickens, P. G., Neild, D. J.; *J. Less-*
Common Metals **54**, 273-281, 1977.
 147. Gvelesiani, G. G., Nadiradze, A. A., Abashidze, T. D.; *J. Chem.*
Thermodyn. **19**, 461-466, 1987.
 148. Knights, C. F., Phillips, B. A.; Special Publication No. 30. High
 Temperature Chemistry of Inorganic and Ceramic Materials; eds.
 Glasser, F. P, Potter, P. E.; 1977; The Chemical Society, London; 135-
 145.

149. Ito, Y., Maruyama, T., Yoshimura, M., Saito, Y.; *J. Mater. Sci. Letters* **8**, 456-458, 1989:
150. Katsura, T., Kitayama, K., Sugihara, T., Kimizuka, N.; *Bull. Chem. Soc. Japan* **48**, 1809-1811, 1975: Sugihara, T., Kimizuka, N., Katsura, T.; *Bull. Chem. Soc. Japan* **48**, 1806-1808, 1975: Kimizuka, N., Katsura, T.; *Bull. Chem. Soc. Japan* **47**, 1801-1802, 1974: Kitayama, K., Katsura, T.; *Bull. Chem. Soc. Japan* **49**, 998-1001, 1976: Kimizuka, N., Katsura, T.; *J. Solid State Chem.* **13**, 176-181, 1975; **15**, 151-157, 1975: Sekine, T., Katsura, T.; *J. Solid State Chem.* **17**, 49-54, 1976: Katsura, T., Sekine, T., Kitayama, K., Sugihara, T., Kimizuka, N.; *J. Solid State Chem.* **23**, 43-57, 1978: Kitayama, K., Nojiri, K., Sugihara, T., Katsura, T.; *J. Solid State Chem.* **56**, 1-11, 1985: Piekarczyk, W., Weppner, W., Rabenau, A.; *Mat. Res. Bull.* **13**, 1077-1083, 1978; *Z. Naturforsch.* **34a**, 430-436, 1979: Tretyakov, Yu. D., Kaul A. R., Portnoy, V. K.; *High Temp. Sci.* **9**, 61-70 1977.
151. Myers, C. E., Graves, D. T.; *J. Chem. Eng. Data* **22**(4), 436-439, 1977; 440-445, 1977: Bettonville, S., Goudiakas, J., Fuger, J.; *J. Chem. Thermodyn.* **19**, 595-604, 1987: Xiang-Yun, W., Zhu, J. T., Goudiakas, J., Fuger, J.; *J. Chem. Thermodyn.* **20**, 1195-1202, 1988: Petzel, T.; *J. Less-Common Metals* **108**, 241-247, 1985.
152. Cordefunke, E. H. P., Konings, R. J. M., Westrum, E. F., Jr.; *Thermochim. Acta* **128**, 31-38, 1988.
153. Johnson, G. K., Tasker, I. R., Howell, D. A.; *J. Chem. Thermodyn.* **19**, 617-632, 1987.
154. Kitayama, K.; *J. Solid State Chem.* **73**, 381-387, 1988: Kitayama, K.; *J. Solid State Chem.* **76**, 241-247, 1988: Kitayama, K.; *J. Solid State Chem.* **77**, 366-375, 1988: Seppänen, M., Kytö, M., Taskinen, P.; *Scand. J. Metall.* **8**, 199-204, 1979: Petrov, A. N., Cherepanov, V. A., Zuyev, A. Yu., Zhukovsky, V. M.; *J. Solid State Chem.* **77**, 1-14, 1988: Petrov, A. N., Kropanev, A. Yu, Zhukovsky, V. M.; *Rus. J. Phys. Chem.* **58**, 26, 1984: Cherepanov, V. A., Petrov, A. N., Grimova, L. Yu.; *Rus. J. Phys. Chem.* **59**, 1267, 1985.
155. Beyer, R. P., Johnson, E. A.; *J. Chem. Thermodyn.* **16**, 1025-1029, 1984: Chekhovskoy, V. Ya.; *J. Chem. Thermodyn.* **3**, 289-296, 1971: Furukawa, G. T., Douglas, T. B., Saba, W. G., Victor, A. C.; *J. Res. Natl. Bur. Stands.* **69A**, 423-438, 1965.
156. Rard, J. A.; *Chem. Rev.* **85**, 555-582, 1985.
157. Fegley, M. B. Jr.; *J. Am. Ceram. Soc.* **64**, C124, 1981: Kaufman, L.; *CALPHAD* **3**, 275-291, 1979: Moon, K. A., Kant, A., Croft, W. J.; *J. Am. Ceram. Soc.* **63**, 698, 1980.
158. Konings, R. J. M., Cordfunke, E. H. P., Shaviv, R., Westrum, E. F., Jr.; *Thermochim. Acta* **157**, 307-314, 1990.
159. Volkov, V. L.; *Rus. J. Inorg. Chem.* **23**, 98, 1978: Volkov, V. L.; *Rus. J. Inorg. Chem.* **24**, 583, 1979: Volkov, V. L.; *Rus. J. Phys. Chem.* **52**,

1411, 1978.

160. Vlach, K. C., You, Y.-Z., Chang, Y. A.; *Thermochim. Acta* **103**, 361-370, 1986; Schaefer, S. C., Gokcen, N. A.; *High Temp. Sci.* **24**, 63-69, 1987; Jacob, K. T., Kale, G. M., Iyengar, G. N. K.; *J. Mater. Sci.* **21**, 2753-2758, 1986.
161. Scolis, Yu. Ya., Levitskii, V. A., Lykova, L. N., Kalinina, T. A.; *J. Solid State Chem.* **38**, 10-18, 1981.
162. Warhus, U., Maier, J., Rabenau, A.; *J. Solid State Chem.* **72**, 113-125, 1988.
163. Asano, M., Kou, T.; *J. Chem. Thermodyn.* **20**, 1149-1156, 1988; **21**, 837-845, 1989; Kou, T., Asano, T.; *High Temp. Sci.* **24**, 1-19, 1987.
164. Wyers, G. P., Cordfunke, E. H. P., Ouweltjes, W.; *J. Chem. Thermodyn.* **21**, 1095-1100, 1989; Beyer, R. P., Bennington, O., Brown, R. R.; *J. Chem. Thermodyn.* **17**, 11-17, 1985; Kohli, R., Lacom, W.; *Thermochim. Acta* **84**, 391-395, 1985; Cordfunke, E. H. P., Ouweltjes, W., Van Vlaanderen, P.; *J. Chem. Thermodyn.* **19**, 1117-1120, 1987.
165. Vahlas, C., Chevalier, P. Y., Blanquet, E.; *CALPHAD* **13**, 273-293, 1989; Schlesinger, M. E.; *Chem. Rev.* **90**, 607-628, 1990.
166. Kale, G. M., Jacob, K. T.; *Metall. Trans.* **20B**, 687-691, 1989; Barsoum, M.; *J. Mater. Sci.* **25**, 4394-4400, 1990.
167. Chirico, R. D., Westrum, E. F. Jr.; *J. Chem. Thermodyn.* **12**, 71-85, 1980; **12**, 311-327, 1980; **13**, 519-525, 1981; **13**, 1087-1094, 1981; Chirico, R. D., Westrum, E. F. Jr., Gruber, J. B., Warmkessel, J.; *J. Chem. Thermodyn.* **11**, 835-850, 1979; Morss, L. R., Haar, C. M.; *J. Chem. Thermodyn.* **21**, 1079-1083, 1989.
168. Helgeson, H. C., Delaney, J. M., Nesbitt, H. W., Bird, D. K.; *Am. J. Sci.* **278A**, 1-220, 1978.
169. Hemingway, B. S., Barton, M. D., Robie, R. A., Haselton, H. T., Jr.; *Am. Mineralog.* **71**, 557-568, 1986.
170. Hildenbrand, D. L., Lau, K. H., Russell, T. D., Zubler, E. G., Struck, C. W.; *J. Electrochem. Soc.* **137**, 3275-3287, 1990.
171. Shaviv, R., Westrum, E. F., Jr., Gr nvoid, F., St len, S., Inaba, A., Fujii, H., Chihara, H.; *J. Chem. Thermodyn.* **21**, 631-651, 1989.
172. Lvova, A. S., Feodosev, N. N.; *Zh. Neorg. Phys.* **9**, 2251, 1964.
173. Alcock, C. B., Li, B.; *J. Am. Ceram. Soc.* **73**, 1176-1180, 1990; Shaviv, R., Westrum, E. F. Jr., Yang, T. L., Alcock, C. B., Li, B.; *J. Chem. Thermodyn.* **22**, 1025-1034, 1990; Skolis, Yu. Ya., Khramtsova, L. A.; *Rus. J. Phys. Chem.* **64**, 1681-1683, 1990; Kovba, M. L., Skolis, Yu. Ya., Khramtsova, L.A.; *Rus. J. Phys. Chem.* **64**, 1684-1686, 1990; Hwang, N. M., Roth, R. S., Rawn, C. J.; *J. Am. Ceram. Soc.* **73**, 2531-2533, 1990; Tretyakov, Yu. D., Kaul, A. R., Makukin, N. V.; *J. Solid State Chem.* **17**, 183-189, 1976; Suzuki, R. O., Okada, S., Oishi, T., Ono, K.; *Mater. Trans. JIM* **31**, 1078-1084, 1990; Skolis, Yu. Ya., Kitsenko,

- S. V.; *Rus. J. Phys. Chem.* **63**, 1132-1133, 1989; Morss, L. R., Sonnenberger, D. C., Thorn, R. J.; *Inorg. Chem.* **27**, 2106-2110, 1988; Atake, T.; unpublished work; Matsui, T., Fujita, T., Naito, K., Takeshita, T.; *J. Solid State Chem.* **88**, 579-583, 1990; Skolis, Yu. Ya., Pashin, S. F., Kovba, M. L., Kitsenko, S. V.; *Rus. J. Phys. Chem.* **65**, 13-17, 1991; Pashin, S. F., Skolis, Yu. Ya.; *Rus. J. Phys. Chem.* **65**, 256-259, 1991.
174. Yokokawa, H. estimate; 1990-2020. Yokokawa, H., "Zirconia Engineering Ceramics: Old Challenges - New Ideas," ed. Kisi, E., Trans Tech Pub. pp. 37-74, (1998).
 175. Gallagher, S. A., Dworzak, W. R., *J. Am. Ceram. Soc.* **68**, C206-C207 1985.
 176. Jacob, K. T., Kale, G. M., Iyengar, G. N. K; *J. Mater. Sci.* **22**, 4274-4280, 1987.
 177. Lvov, SN, Macdonald, DD., *J. Power Sources* **72**, 136-145 1998.
 178. Jacobson, NS., Opila, EJ., Myers, DL., Copland, EV., *J. Chem. Thermodyn.* **37**, 1130-1137 2005.
 179. Hildenbrand, DL., Lau, KH., *J. Chem. Phys.* **101**, 6076-6079 1994.
 180. Hildenbrand, DL., Lau, KH., *J. Chem. Phys.* **100**, 8373-8376 1994.
 181. Yokokawa, H. Estimation/evaluation on phosphor containing compounds.
 182. (a) Helean, KB., Navrotsky, A., *J. Therm. anal. Calorim.* **69**, 751-771 2002. (b) Ushakov, SV., Helean, KB., Navrotsky, A., *J. Mater. Res.* **16**, 2623-2633 2001.
 183. (a) LaPO₄, GdPO₄: Thiriet, C., Konings, RJM., Javorsky, P., Magnami, N., Wastin, F., *J. Chem. Thermodyn.* **37**, 131-139 2005. (b) LaPO₄ Popa, K., Sedmidubsky, D., Benes, O., Thiriet, C., Konings, RJM., *J. Chem. Thermodyn.* **38**, 825-829 2006. (c) EuPO₄ SmPO₄: Popa, K., Konings, RJM., *Thermochimica Acta* **445**, 49-52 2006. (d) LaPO₄: Gavrichev, KS., Ryumin, MA., Tyurin, AV., Gurevich, VM., Komissarova, LN., *Thermochimica Acta* **474**, 47-51, 2008. (e) SmPO₄: Gavrichev, KS., Gurevich, VM., Ryumin, MA., Tyurin, AV., Komissarova, LN., *Geochemistry International* **53**(7), 607-616 2015. (f) EuPO₄: Gavrichev, KS., Ryumin, MA., Tyurin, AV., Gurevich, VM., Komissarova, LN., *Rus. J. Phys. Chem. A* **83**(6), 901-906 2009. (g) GdPO₄: Gurevich, VM., Ryumin, MA., Tyurin, AV., Komissarova, LN., *Geochemistry International* **50** (8), 702-710 2012. (h) ErPO₄: Gavrichev, KS., Ryumin, MA., Tyurin, AV., Gurevich, VM., Khoroshilov, AV., Komissarova, LN., *Thermochimica Acta* **535**, 1-7 2012. (i) TmPO₄: Ryumin, MA., Gurevich, VM., Khoroshilov, AV., Tyurin, AV., Gavrichev, KS., *Rus. J. Phys. Chem. A* **91**(12), 2310-2316 2017. (j) YbPO₄: Gavrichev, KS., Ryumin, MA., Tyurin, AV., Gurevich, VM., Nikiforova, GE., Komissarova, LN., *Inorganic Materials* **49**(7), 701-708 2013. (k) LuPO₄: Gavrichev, KS., Smirnova, NN., Gurevich, VM., Danilov, VP., Tyurin, AV., Ryumin, MA., Komissarova, LN., *Thermochimica Acta* **448**, 63-65

- 2006.(l) YPO₄: Gavrichev, KS., Ryumin, MA., Tyurin, AV., Gurevich, VM., Komissarova, LN., *Geochemistry International* 48(9), 932-939 2010.(m) ScPO₄: Gavrichev, KS., Ryumin, MA., Tyurin, AV., Gurevich, VM., Komissarova, LN., *Geochemistry International* 48(4), 390-397 2010.(n) TbPO₄: Gavrichev, KS., Ryumin, MA., Khoroshilov, AV., Tyurin, AV., Efimov, NN., Gurevich, VM., Nikiforova, GE., Guskov, VN., Golushina, LN., Bryuhanova, KI., Kritskaya, AP., *Thermochimica Acta*, 641, 64-70 2016.(o) HoPO₄: Tyurin, AV., Ryumin, MA., Khoroshilov, AV., Gurevich, VM., Gavrichev, KS., *Thermochimica Acta* 683, 178459 2020. (p) PrPO₄: Gavrichev, KS., Gurevich, VM., Ryumin, MA., Tyurin, AV., Komissarova, LN., *Geochemistry International* 54(4), 362-368 2016. (q) NdPO₄: Popa, K., Jutier, F., Wastin, F., Konings, RJM., *J. Chem. Thermodyn.* 38, 1306-1311 2006.
184. Yokokawa, H, Estimation from ZrP₂O₇(ref 162). see also 181.
 185. (a) Olafsen, A., Fjellvag, H., Stoelen, S., Atake, T., Kawaji, H., Matsui, K., *J. Chem. Thermodyn.* 31, 433-449 1999. (b) Sjastad, AO., Fjellvag, H., Helean, KB., Navrotsky, A., *Thermochimica Acta* 550, 76-82 2012. (c) Watanabe, Y., Miyasaki, S., Maruyama, T., Saito, Y., *J. Mater. Sci. Letter* 5, 135-136 1986. (d) Irmeler, M., Koepfel, C., Pschardt, H., Warkentin, E., *Gmelin Handbook of Inorganic and Organometallic Chemistry* 8th edition, Rare earth elements C12b Compounds with Carbon, Springer-Verlag, 1994.
 186. Yokokawa, H., Sakai, N., Yamaji, K., Horita, T., Ishikawa, M., *Solid State Ionics* 113-115, 1-9 1998.
 187. Yokokawa, H., *Solid State Ionics* 285, 126-135 2016.
 188. Yokokawa, H., estimation of Cp.
 189. (a) Luff, BB., Reed, RB., *J. Chem. Eng. Data* 24, 228-229 1979. (b) Luff, BB., Reed, RB., *J. Chem. Eng. Data* 24, 227-228 1979.
 190. Gmati-Khaled, H., Khattech, I., *J. Therm. Anal. Calorim.* 118, 579-583 2014.
 191. Cordfunke, EHP., Ouweltjes, W., *J. Chem. Thermodyn.* 25, 1011-1016 1993.
 192. Cs₄P₂O₇; quoted in ref 190: Beglov BM. "Thermodynamic analysis of the reactions of formation of condensed lithium, rubidium, and cesium phosphates," *Izv Akad Nauk SSSR. Neorg Mater.* 13, 2236-2241 1977.
 193. Hudon, P., Jung, IH., *Metal. Mater. Trans. B*, 46B, 494-522 2015.
 194. (a) Modaressi, A., Kael, J.C., Malaman, B., Gerardin, R., Gleitzer, C., *Mat. Res. Bull.* 18, 101-109 1983. (b) Zhang, L., Schlesinger, M.E., Brow, R.K., *J. Am. Ceram. Soc.* 94, 1605-1610 2011. (c) Ong, S.P., Wang, L., Kang, B., Ceder, G., *Chem. Mater.* 20, 1798-1807 2008.(d1) Shi, Q., Zhang, L., Schlesinger, ME., Boerio-Goates, J., Woodfield, BF., *J. Chem. Thermodyn.* 62, 35-42 2013.(d2) Shi, Q., Zhang, L., Schlesinger, ME., Boerio-Goates, J., Woodfield, BF., *J. Chem. Thermodyn.* 61, 51-57 2013. (d3) Shi, Q., Zhang, L., Schlesinger, ME.,

- Boerio-Goates, J., Woodfield, B.F., J. Chem. Thermodyn. 62, 86-91 2013. (e) Iyer, R.G., Delacourt, C., Masquelier, C., Tarascon, J.M., Navrotsky, A., Electrochem. Solid State Lett. 9(2), A46-A48 2006. (f) Loos, S., Gruner, D., Abdel-Hafiez, M., Seidel, J., Huettl, R., Wolter, AUB., Bohmhammel, K., Merterns, F., J. Chem. Thermodyn. 85, 77-85 2015. (g) Shimizu, D., Nishimura, S., Barpanda, P., Yamada, A., Chem. Mater. 24, 2598-2603, 2012.
195. De Guire, M.R., Prasanna, T.R.S., Kalonji, G., O'Handley, R.C., J. Am. Ceram. Soc. 70(11), 831-837 1987.
 196. Rahman, M., Hudon, P., Jung, I.H., Metal. Mater. Trans. B, 44B, 837-851 2013.
 197. Macdonald, D.D., Challingsworth, M.L., J. Electrochem. Soc. 140(3), 606-609 1993.
 198. Kishimoto, H., Horita, T., Yamaji, K., Brito, M.E., Xiong, Y.-P., Yokokawa, H., J. Electrochem. Soc. 157(6), B802-B813 2010.
 199. Katayama, I., Makino, T., Iida, T., High Temper. Mater. Sci. 34(1-3), 127 1995.
 200. Hildenbrand, D.L., Lau, K.H., J. Chem. Phys. 100, 8377-8380 1994.
 201. Ebbinghaus, B.B., Combustion and Flame 93, 119-137 1993.
 202. Gindorf, C., Hilpert, K., Singheiser, L., Proc. ECS, PV 2001-16, 793-802 2001.
 203. Bolech, M., Janssen, F.J.G., Booij, A.S., Cordfunke, E.H.P., J. Chem. Thermodyn. 28, 1319-1324, 1996. Bolech, M., Cordfunke, E.H.P., van Genderen, A.C.G., van der Laan, R.R., Janssen, F.J.G., van Miltenburg, J.C., Thermochemica Acta 284, 253-261 1996.
 204. Risbud, A.S., Helean, K.B., Wilding, M.C., Lu, P., Navrotsky, A., J. Mater. Res. 16(10), 2780 2001.
 205. Cordfunke, E.H.P., Groen, C.P., Huntelaar, M.E., Alexander, C.A., Ogden, J.S., J. Chem. Thermodyn. 32, 839-845 2000.
 206. Mathews, T., Krishnamurthy, D., Gnanasekaran, T., J. Nucl. Mater. 247, 280-284 1997.
 207. Moosavi-Khoonsari, E., Jung, I.-H., Metal. Mater. Trans. B. 47B, 576-594 2016.
 208. Yokokawa, H., estimation for Cp S for water contribution in hydrates.
 209. Flotow, H.E., Osberne, D.W., Otto, K., Abraham, B.M., J. Chem. Phys. 38(11), 2620-2626 1963.
 210. Yokokawa, H., Horita, T., Sakai, N., Dokiya, M., Kawada, T., Solid State Ionics 86-88, 1161-1165 1996.
 211. Cheng, J., Navrotsky, A., J. Mater. Res. 18, 2501-2508 2003.
 212. (a) Gavrichev, K.S., Ryumin, M.A., Tyurin, A.V., Gurevich, V.M., Inorganic Materials 48(8), 845-850 2012. (b) Dorogova, M., Navotsky, A., Boatner, L.A., J. Solid State Chem. 180, 847-851 2007.

213. Shugurov, S.M., Timoshkin, A.YU., Lopatin, S.I., Phosphorus, Sulfur and Silicon 179, 2091-2098 2004
214. Shugurov, S.M., Lopatin, S.I., J. Chem. Thermodyn. 37, 715-719 2005.
215. Lopatin, S.I., Shugurov, S.M., Stolyarova, V.L., Turnina, Z.G., J. Chem. Thermodyn. 38, 1706-1710 2006.
216. Lopatin, S.I., Shugurov, S.M., Gunina, A.O., J. Phys. Chem. 113, 13469-13474 2009.
217. Emelyanova, K.A., Shugurov, S.M., Panin, A.I., Lopatin, S.I., J. Chem. Thermodyn. 101, 337-342 2016.
218. Yokokawa, H., Horita, T., Sakai, N., Kawada, T., Dokiya, M., Solid State Ionics 78, 203-210 1995.
219. (a) Konings R.J.M., Kovacs A, Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths Vol. 33, 147-247 2003. (b) Kovacs A., Konings R.J.M., J. Phys. Chem. Ref. Data 33(1),377-404 2004.
220. Rycerz, L., Gaune-Escard, M., J. Chem. Eng. Data 49, 1078-1081 2004.
221. Rycerz, L., Gaune-Escard, M., Inorg. Chem. 46, 2299-2306 2007.
222. Konings, RJM., Hildenbrand, DL., J. Alloys Compounds. 271-273, 583-386 1998.
223. (a) Konings, RJM, Benes, O., J. Phys. Chem. Ref. Data 39, 043102 2010. (b) Konings, RJM, Benes, O., Kovacs, A., Manara, D., Sedmidubsky, D., Gorakhov, L., Iorish, VS., Yungman, V., Shenyavskaya, E., Osina, E., J. Phys. Chem. Ref. Data 43, 013101 2014.
224. Benes, O., Konings, RJM., Calphad 32, 121-128 2008.
225. (a) Benes, O., van der Meer, JPM., Konings, RJM., calphad 31, 209-216 2007. (b) Beilmann, M., Benes, O., Konings, RJM., Fanghanel, Th., J. Chem. Thermodyn. 43, 1515-1524 2011.
226. dos Santos, IA., Klimm, D., Baldochi, SL., Ranieri, IM., Thermochemica Acta 552, 137-141 2013.
227. Li, X., Wang, K., Xie, L., Fluid Phase Equilibria 449, 18-27 2017.
228. Ocadiz-Flores, JA., Capelli, E., Raison, PE., Konings, RJM., Smith, AL., J. Chem. Thermodyn. 121, 17-26 2018.
229. Yin, H., Zhang, P., An, X., Cheng, J., Li, X., Wu, S., Wu, X., Liu, W., Xie, L., J. Fluorine Chem. 209, 6-13 2018.
230. Das, G., Lencka, MM., Eslamimanesh, A., Wang, P., Anderko, A., Riman, RE., Navrotsky, A., J. Chem. Thermodyn. 131, 49-79 2019.
231. Yokokawa, H., Estimation. 2019.4.
232. Rard, JA., J. Solution Chem. 45, 1332-1376 2016.
233. Diakonov, II., Ragnarsdottir, KV., Tagirov, BR., Chem. Geology 151, 327-347 1998.
234. (a) Chirkst, DE., Lobacheva, OL., Berlinskii, IV., Rus. J. Phys. Chem. A 84, 2047-2050 2010. (b) Chirkst, DE, Lobacheva, OL., Berlinskii, IV., Dzhevaga, NV., Rus. J. Inorg. Chem. 57(4), 605-609 2012.

235. Suponitsky, Y., Laptev, VI., *Rus. Chem. Bull.* 46(2), 279-283 1997.
236. Shivaramaiah, R., Anderko, A., Riman, RE., Navrotsky, A., *Am. Mineral.* 101, 1129-1134 2016.
237. Kim, P., Anderko, A., Navrotsky, A., Riman, RE., *Minerals* 8, 106 2018.
238. Merli, L., Lambert, B., Fuger, J., *J. Nucl. Mater.* 247, 172-176 1997.
239. van der Meer, JPM., Konings, RJM., Sedmidubsky, D., van Genderen, ACG., Oonk, HAJ., *J. Chem. Thermodyn.* 38, 1260-1268 2006.
240. Prien, M., Seifert, HJ., *J. Thermal Anal.* 45, 349-358 1995.
241. Seifert, HJ., *J. Thermal Anal. Calorim.* 67, 789-826 2002;
242. Seifert, HJ., *J. Thermal Anal. Calorim.* 83, 479-505 2006.
243. (a) Gaune-Escard, M., Rycerz, L., Szczepaniak, W., Bogacz, A., *J. Alloys Compnds.* 204, 189-192 1994. (b) Gaune-Escard, M., Rycerz, L., *Mon. Chem.* 134, 777-786 2003.
244. Kapala, J., Rutlowska, I., *calphad* 28, 275-279 2004.
245. Butman, MF., Motalov, VB., Kudin, LS., Rycerz, L., Gaune-Escard, M., *J. Chem. Eng. Data* 53, 2346-2350 2008.
246. Lisek, I., Kapala, J., Miller, M., *J. Alloys Compnds.* 280, 77-84 1998. Lisek, I., Kapala, J., Miller, M., *J. Alloys Compnds* 278, 113-122 1998.
247. Rycerz, L., Gaune-Escard, M., *J. Thermal Anal. Calorim.* 68, 973-981 2002. Kapala, J., Salamon, B., *calphad* 43, 139-142 2013.
248. Hatem, G., Gaune-Escard, M., *Thermochimica Acta* 293, 137-142 1997.
249. Seifert HJ., Yuan, Y., *J. Less-Common Metals* 170, 135-143 1991.
250. Rycerz, L., Gaune-Escard, M., *J. Alloys Compnds* 56, 355-363 1999.
251. Ushakov, S.V., Navrotsky, A., Farmer, J. M., Boatner, L. A., *J. Mater. Res.*19(7), 2165-2175 2004.
252. Palumbo, M., Borzone, G., Delsante, S., Parodi, N., Cacciamani, G., Ferro, R., Battezzati, Baricco, M., *Intermetallics* 12, 1367-1372 2004.
253. Rahou, Z., Mahdouk, J. *Alloys Componds* 648, 346-352 2015.
254. Subramanian, P. R., Smith, J. F., *Metal. Trans. B*, 16B, 577-584 1985.
255. Ghosh, G., *J. Mater. Res.* 9(3), 599-616 1994.
256. (a) Shimazu, M., Yamaji, K., Isobe, T., Ueno, A., Kishimoto, H., Katsumura, K., Yokokawa, H., Okada, K., *Solid State Ionics* 204-205, 120-128 2011. (b) Komissarova, L.N., Pokrovskii, B.I., Shaplygin, I.S. *Inorg. Mater. (Engl. Transl.)*, 2 [2] 236-240 1966.
257. (a) Tanahashi, M., Furuta, N., Taniguchi, T., Yamauchi, C., *ISIJ International* 43(1), 7-13 2003. (b) Tsai, H.-T.T., Muan, A., *J. Am. Ceram. Soc.* 75, 1407 1992.
258. Schenck, R., Bathe, A., Keuth, H., and Suess, S., *Z. Anorg. Chemie*, 249, 88-99 1942. Phase Diagram for Ceramist Ag-Cr-O pp537-539. 259. (a) Kaiser, A., Sommer, B., Woermann, E., *J. Am. Ceram. Soc.* 75(6), 1463-71 1992. (b) Kovba, M. L., Skolis, Yu.Ya., *Rus. J. Phys. Chem.*

- 64(6), 907-909 1990. (c) Kovba, M. L., Skolis, Yu.Ya., Popov, S.G., Rus. J. Phys. Chem. 64(1), 22-24 1990.
260. (a) Sakai, N., Kawada, T., Yokokawa, H., Dokiya, M., Kojima, I., J. Am. Ceram. Soc. 76(3), 609-616 1993. (b) Yokokawa, H., Sakai, N., Kawada, T., Dokiya, M., J. Electrochem. Soc. 138, 1018-1027 1991.
 261. Meschter, P. J., Worrell, W. L., Metal. Trans. 8A, 503-509 1977.
 262. O'Hare, P.A.G., Johnson, G.K., Tasker, I.R., Flotow, H.E., J. Chem. Thermodyn. 19, 77-88 1987.
 263. Oppermann, H., Ehrich, S., Henning, C., Zeit. Naturforsch. 52(3), 305-310 1997.
 264. Yokokawa, H., Sakai, N., Kawada, T., Dokiya, M., J. Electrochem. Soc. 138, 2719-2727 1991.
 265. Yokokawa, H., Sakai, N., Kawada, T., Dokiya, M., Solid State Ionics 40/41, 398-401 1990.
 266. Yokokawa, H., Horita, T., Sakai, N., Yamaji, K., Brito, M.E., Xiong, Y.-P., Kishimoto, H., Solid State Ionics 177, 1705-1714 2006.
 267. Yokokawa, H. evaluation/estimation concerning SrO-GDC-YSZ interactions.
 268. Stoelen, S., Groenvold, F., Brinks, H., Atake, T., Mori, H., J. Chem. Thermodynam. 30, 365-377 1998.
 269. Yokokawa, H., Sakai, N., Kawada, T., Dokiya, M. Denki Kagaku 58, 161-170 1990. (in Japanese)
 270. (a) Pet'kov, V.I., Asabina, E.A., Markin, A.V., Kir'yanov, K.V., Thermochimica Acta, 403, 185-196, 2003. (b) Pet'kov, V.I., Kir'yanov, K.V., Orlova, A.I., Kitaev, D.B., Inorganic Materials 36(4) 387-391 2000. (c) Milne, S.J., West, A.R., J. Solid State Chem. 57, 166-177 1985. (d) Tiets, F., AIMS Materials Science 4(6), 1305-1318 2017. (e) Pet'kov, V.I., Asabina, E.A., Markin, A.V., Smirnova, N.N., J. Chem. Eng. Data 55, 856-863 2010. (f) Yokokawa, H. Estimation from phase relations
 271. Shock, E.L., Sassani, D.C., Willis, M., Sverjensky, D.A., Geochimica Cosmochimica Acta 61(5), 907-950 1997.
 272. Accornero, M., Marini, L., Lelli, M., Applied Geochem. 25, 242-260 2010.
 273. Marini, L., Accornero, M., Environ. Geol. 52, 1343-1363 2007. Marini, L., Accornero, M., Environ. Earth Sci. 59, 1601-1606 2010.
 274. (a) Cordfunke, E.H.P., Westrum, E.F. Jr., Thermochimica Acta 124, 285-296 1988. (b) Westrum, E.F. Jr., Groenvold, F., J. Phys. Chem. Solids 23, 39-53 1962.
 275. (a) Bolgar, A.S., Muratov, V.B., Blinder, A.V., Kryklya, A.I., Suodis, A.P., J. Alloys Compounds 201, 127-128 1993. (b) Premovic, M., Du, Y., Zhang, F., Sundman, B., Minic, D., Hu, B., Thermochimica Acta 657, 185-196 2017. (c) Hallemans, B., Wollants, P., Roos, J.R., J. Phase Equilib. 16(2), 137-145 1995. (d) Peng, Y., Du, Y., Zhang, L., Sga, C., Liu, S., Zheng,

- F., Zhao, D., Yuan, X., Chen, L., *calphad* 35, 533-541 2011. (e) Bian, Y., Tang, K., Tranell, G., *calphad* 51, 206-210 2015.
276. Loiacono, GM., Jacco, JC., *Mater. Letters* 4(1), 27-29 1985.
 277. Chiotti, P., *J. Less Common Metals* 80, 97-104 1981.
 278. O'Hare, PAG., Jensen, KJ., Johnson, GK., *J. Chem. Thermodyn.* 18, 765-786 1986.
 279. Coble, JW., Stephens, HP., McKinnon, IR., Westrum, EF. Jr., *Inorganic chemistry* 11(7), 1669-1674 1972.
 280. Moriya, K., Matsuo, T., Suga, H., *Thermochimica Acta* 132, 133-140 1988.
 281. Hartwig, P., Rabenau, A., Weppner, W., *J. Less Common Metals* 80, 81-90 1981.
 282. Denielou L., Petitet, JP., Tequi, C., *J. Chem. Eng. Data* 29, 116-117 1984.
 283. (a) Thomas, DF., Abdel-Hafiez, M., Gruber, T., Huettl, R., Seidel, J., Wolter, AUB., Bruechner, B., Kortus, J., Mertens, F., *J. Chem. Thermodyn.* 64, 205-225 2013. (b) Thomas, D., Zeilinger, M., Gruner, D., Huettl, R., Seidel, J., Wolter, AUB., Faessler, FF., Mertens, F., *J. Chem. Thermodyn.* 85, 178-190 2015. (c) Liang, SM, Taubert, F., Kozlov, A., Seidel, J., Merterns, F., Schmid-Fetzer, R., *Intermetallics* 81, 32-46 2017. (d) Taubert, F., Seidel, J., Huettl, R., Bobnar, M., Gumeniuk, R., Mertens, F., *J. Chem. Thermodyn.* 116, 323-329 2018. (e) Thomas, D., Bette, N., Taubert, F., Huettl, R., Seidel, J., Merterns, F., *J. Chem. Thermodyn.* 704, 398-405 2017.
 284. (a) Li, D., Beutl, A., Flandorfer, H., Cupid, DM., *J. Alloys Compnds.*, 701, 186-199 2017. (b) Beutl, A., Cupid, D., Flandorfer, H., *J. Alloys Compnds.*, 695, 1052-1060 2017. (c) Sangster, J., Pelton, AD., *J. Phase Equilibria* 14(4), 510-514 1993. (d) Sangster, J., Pelton, AD., *J. Phase Equilibria* 18(4), 390-393 1997. (e) Sangster, J., Pelton, AD., *J. Phase Equilibria* 18(4), 382-386 1997.
 285. Li, D., Fuertauer, S., Flandorfer, H., Cupid, DM., *CALPHAD* 47, 181-195 2014.
 286. (a) Lepple, M., Cupid, DM., Franke, P., Seifert, H., *J. Phase Equil. Diff.*, 35, 650-657 2014. (b) Patat, S., Blunt, DP., Chippindale, AM., Dickens, PG., *Solid State Ionics* 46, 325-329 1991. (c) Lepple, M., Adam, R., Cupid, DM., Franke, P., Bergfeldt, T., Wadewitz, D., Rafaja, D., Seifert, HJ., *J. Mater. Sci.* 48, 5818-5826 2013.
 287. Li-Mn-O: (a) Zhang, W., Cupid, DM., Gotcu, P., Chang, K., Li, D., Du, Y., Seifert, HJ., *Chem. Mater.* 30, 2287-2298 2018. (b) Wang, M., Navrotsky, A., *J. Solid State Chem.* 178, 1230-1240 2005. (c) Wang, M., Navrotsky, A., *J. Solid State Chem.* 178, 1182-1189 2005. (d) Cupid, DM., Li, D., Geberet, C., Reif, A., Flandorfer, H., Seifert, J., *J. Ceram. Soc. Japan* 124(10), 1072-1082 2016. (e) Paulsen, JM., Dahn, JR., *Chem. Mater.* 11, 3065-3079 1999. (f) Luo, C., Martin, M., *J. Mater. Sci.* 42,

- 1955-1964 2007.
288. (a) Kawaji, H., Takematsu, M., Tojo, T., Atake, T., Hirano, A., Kanno, R., J. Thermal Analysis and Calorimetry 68, 833-839 2002. Kawaji, H., Oka, T., Tojo, T., Atake, T., Hirano, A., Kanno, R., Solid State Ionics 152-153, 195-198 2002. (b) Wang, M., Navrotsky, A., Solid State Ionics 166, 167-173 2004. (c) Gotcu-Freis, P., Cupid, D.M., Rohde, M., Seifert, H.J., J. Chem. Thermodynam. 84, 118-127 2015.
 289. Il'ina, E.A., Raskovalov, A.A., Electrochimica Acta 330, 135220, 2020.
 290. van der Vis, M.G.M., Cordfunke, E., Konings, R., J. de Physique IV Colloque, 03(C3), C3-75-C3-82 1993.
 291. Popa, K., Shvareva, T., Mazeina, L., Colineau, E., Wastin, F., Konings, R.J.M., Navrotsky, A., Am. Mineral. 93, 1356-1362 2008.
 292. Hatada, N., Toyoura, K., Nose, Y., Uda, T., J. Chem. Thermodyn. 61, 147-153, 2013. Hatada, N., Nagai, T., Nose, Y., Uda, T., J. Phase Equilibria and Diffusion 34, 196-201 2013.
 293. Forbes, T.Z., Kurzman, J.A., Seshadri, R., Navrotsky, A., J. Mater. Res. 26(10), 1188-1192 2011.
 294. Tremaine, P., Xiao, C., J. Chem. Thermodyn. 31, 1307-1320 1999.
 295. (a) Le, S.N., Eng, H.W., Navrotsky, A., J. Solid State Chem. 179, 3731-3738 2006. (b) Le, S.N., Navrotsky, A., J. Solid State Chem. 181, 20-29 2008. (c) Iyer, R.G., Delacourt, C., Masquelier, C., Tarascon, J.M., Navrotsky, A., Electrochem. Soli-State Lett. 9(2), A46-A48 2006.
 296. Carling, R., Westrum, E.F., Jr., J. Chem. Thermodyn. 8, 269-276 1976.
 297. Bordier, S., Chocard, A., Gosse, S., J. Nucl. Mater. 451, 120-129 2014. Olsen, T., Roest, E., Groenvold, F., Acta chemica Scandinavica A33, 251-256 1979.
 298. Richter, K.W., Ipser, H., J. Phase Equil. 15(2), 165-170 1994.
 299. Saba, W.G., Wallace, W.E., Sadmo, H., Craig, R.S., J. Chem. Phys. 35, 2148-2155 1961.
 300. Smith, A.L., Gueneau, C., Fleche, J.L., Chatain, S., Benes, O., Konings, R.J.M., J. Chem. Thermodyn. 114, 93-115 2017.
 301. (a) Shvareva, T., Fein, J.B., Navrotsky, A., Ind. Eng. Chem. Res. 51 607-613 2012. (b) Navrotsky, A., Shvareva, T., Guo, X., Mineralogical Association of Canada Short Course 43, Chap 4. Winnipeg MB, May 2013.
 302. Lukas, W., Gaune-Escard, M., J. Chem. Thermodyn. 14, 592-597 1982.
 303. Deiseroth, H.J., Biehl, E., Rochnia, M., J. Alloys Compnds. 246, 80-90 1997.
 304. Charaykova, M.V., Krivovichev, V.G., Depmeir, W., Geol. Ore Deposits, 52(8), 689-700 2010.
 305. Smith, A.L., Pignie, M.C., van Eijck, L., Griveau, J.L., Colineau, E., Konings, R.J.M., J. Chem. Thermodyn. 120, 205-216 2018.

306. Majzlan, J., Stevens, R., Boeria-Goates, J., Woodfield, BF., Navrotsky, A., Burns, PC., Crawford, MK., Amos, TG., *Phys. Chem. Minerals* 31, 518-531 2004.
307. (a) Kanke, Y., Navrotsky, A., *J. Solid State Chem.* 141, 424-436 1998. (b) Konings, RJM., van der Laan, RR., van Genderen, ACG., van Miltenburg, JC., *Thermochimica Acta* 313, 201-206 1998. (c) Mao, H., Sellby, M., Fabrichnaya, O., *Calphad* 32, 399-412 2008. (d) Fabrichnaya, O., Seifert, HJ., *Calphad* 34, 206-214 2010.
308. (a) Kopan, AR., Gorbachuk, MP., Lakiza, SM., Tishchenko, YS., *Power Metall. Metal Ceramics*, 51(3-4), 209-216 2012. (b) Kopan, AR., Gorbachuk, MP., Lakiza, SM., Tishchenko, YS., Kirienko, SM., *Power Metall. Metal Ceramics*, 52(5-6), 329-335 2013. (c) Fabrichnaya, O., Seifert, HJ., *J. Alloys Compnds.* 475, 86-95 2009. (d) Fabrichnaya, O., Savinykh, G., Zienert, T., Schreiber, G., Seifert, HJ., *Int. J. Mater. Res.* 103(12), 1469-1487 2012.
309. (a) Lakiza, S., Fabrichnaya, O., Wang, C., Zinkevich, M., Aldinger, F., *J. Eur. Ceram. Soc.* 26, 233-246 2006. (b) Fabrichnaya, O., Seifert, HJ., *J. Phase Equil. Diffusion* 32, 2-16 2011. (c) Chaudhury, S., Parida, SC., Pillai, KT., Mudher, KDS., *J. Solid State Chem.* 180, 2393-2399 2007.
310. (a) van der Laan, RR., Konings, RJM., van Genderen, ACG., van Miltenburg, JC., *Thermochimica Acta* 329, 1-6 1999. (b) Saal, JE., Shin, DS., Stevenson, AJ., Messing, GL., Liu, ZK., *J. Am. Ceram. Soc.*, 91(10), 3355-3361 2008. (c) Saal, JE., Shin, DS., Stevenson, AJ., Messing, GL., Liu, ZK., *J. Am. Ceram. Soc.*, 93(12), 4158-4167 2010. (d) Fabrichnaya, O., Seifert, HJ., *calphad* 32, 142-151, 2008. (e) Fabrichnaya, O., Savinykh, G., Schreiber, G., Seifert, HJ., *J. Eur. Ceram. Soc.*, 32, 3171-3185 2012.
311. (a) Schnelle, W., Fischer, R., Gmelin, E., *J. Phys. D. Appl. Phys.* 34, 846-851 2001. (b) Fabrichnaya, O., Zinkevich, M., Aldinger, F., *Int. J. Mat. Res.* 97(11), 1495-1501 2006. (c) Fabrichnaya, O., Lakiza, S., Wang, C., Zinkevich, M., Aldinger, M., *J. Alloys Compnds.* 453, 271-281 2008. (d) Fabrichnaya, O., Savinykh, G., Schreiber, G., *J. Eur. Ceram. Soc.* 33, 37-49 2013. (e) Cao, Z., Xie, W., Qiao, Z., Xing, X., *J. Am. Ceram. Soc.* 100, 365-377 2017.
312. (a) Yokokawa, H. 2020. 09. Estimation/Evaluation based on ref.307-311. (b) Wu, P., Pelton, AD., *J. Alloys Compnds.* 179, 259-287 1992.
313. Zinkevich, M., Geupel, S., Aldinger, F., Durygin, A., Saxena, SK., Yang, M., Liu, ZK., *J. Phys Chem. Solid* 67, 1901-1907 2006.
314. (a) Hisham, MWM., Benson, SW., *J Phys. Chem.* 90, 885-888 1986. (b) Burns, JB., Peterson, JR., Haire, RG., *J. Alloys Compnds.* 265, 146-152 1998. (c) Koch, CW., Broido, A., Cunningham, BB., *J. Am. Chem. Soc.* 74, 2349 1952. (d) Koch, CW., Cunningham, BB., *J. Am. Chem. Soc.* 75, 796-797, 1953. (e) Koch, CW., Cunningham, BB., *J. Am. Chem. Soc.* 76, 1471-1474, 1954. (f) Koch, CW., Thesis: Thermodynamics of the trichlorides and oxychlorides of some of the lanthanide and actinide

- elements," U. Calif. Radiation Laboratory, September 1953.
315. Yokokawa, H. Estimation based on rare earth oxyhalides.
 316. Haschke, JM., Eick, HA., J. Am. Chem. Soc. 92(15), 4550-4553 1970.
 317. Work, DE., Erick, HA., J. Phys. Chem. 74(16), 3130-3134 1970.
 318. (a) Balak, GM., Skolis, YY., Zvezdina, IM., Levitskii, VA., Gerasimov, YI., Rus. J. phys. Chem. 59(9), 1985-1986 1985. (b) Skolis, YY., Pashina, SV., Rus. J. Phys. Chem. 75(11), 1774-1779 2001. (c) Petzel, T., Marx, V., Hormann, B., J. Alloys Compnds. 200, 27-31 1993.
 319. (a) van Ende, MA., Jung, IH, J. Alloys Compnds. 548, 133-154 2013. (b) van Ende, MA., Jung, IH., Kim, YH., Kim, TS., Green Chem. 17, 2246-2262 2015. (c) Luis, F., Mate, B., Pique, C., Burriel, R., Bartolome, J., Buschow, KHJ., J. Mag. Mater. 101, 414-416 1991. (d) Spear, KE., Liao, PK., Bull. Alloy Phase Diagram 11(4), 321-324 1990.
 320. Yokokawa, H. Estimation on heat capacities for RE-B-Fe systems.
 321. (a) Capelli, E., Benes, O., Konings, RJM., J. Nucl. Mater. 501, 238-252 2018. (b) Vozarova, N., Smith, ALI., Colle, JY., Raison, PE., Bouexiere, D., Konings, RJM., Benes, O., J. Chem. Thermodym. 114, 71-82 2017.
 322. Capelli, E., Benes, O., Konings, RJM., J. Nucl. Mater. 462, 43-53 2015.
 323. (a)Capelli, E., Benes, O., Konings, RJM., J. Nucl. Mater.449, 111-121 2014. (b)Benes, O., Konings, RJM., J. Chem. Thermodym. 41, 1086-1095 2009.
 324. (a)Jin, Z., Du, Y., calphad 16(4), 355-362 1992. (b)Li, Z., Wang, J., Li, B., Wang, S., Ali, W., Wang, S., Wang, X., Lu, X., Li, C., Wang, K., J. Eur. Ceram. Soc. 38, 323-332 2018. (c) Philippen, J., thesis "Fiber Crystal growth of cerium doped calcium scandate, strontium yttrium oxide, and tristrontium silicate," Berlin Technical University, 2013.
 325. (a) Kitayama, K., J. Solid State Chem. 151, 12-15 2000. (b) Yokokawa, H., estimation/evaluation on rare earth cobaltites, ferrite and cobaltite-ferrites.(2017); see Ref 154.
 326. Yokokawa, H., Xiong, YP., Kishimoto, H., Yamaji, K., Brito, ME., Horita, T., ECS Tans. 28(11), 165-172 2010.
 327. Zinkevich, M., Solak, N., Nitsche, H., Ahrens, M., Aldinger, F., J. Alloy Compnds. 438(1-2), 92-99 2007.
 328. (a) Oishi, M., Yashiro, K., Hong, JO., Nigara, Y., Kawada, T., Mizusaki, J., Solid State Ionics 178, 307-312 2007.(b) Yokokawa, H., estimation based on La₂CrNiO₆. (c) Anderson, HU., Nasrallah, MM., Flandermeyer, BK., Agarwal, AK., J. Solid State Chem. 56, 325-334 1985.
 329. Yokokawa, H 2011. estimation on RE-Ti-O based on Ref. 174.
 330. Yokokawa, H 2003. Reevaluation based on refs. 173 and others.
 331. Yokokawa, H.2005 estimation/evaluation on Li₂CrO₄, Na₂CrO₄ and Rb₂CrO₄.
 332. Haas, JR., Shock, EL., Sassani, DC., Geochim. Cosmochim.Acta 59(21),

4329-4350 1995.

- 333. Sverjensky, DA., Shock, EL., Helgeson, HC., *Geochim. Cosmochim. Acta* 61 (7), 1359-1413 1997.
- 334. Sassani, D., Shock, EL., *Geochim. CosmoChim. Acta* 62(15), 2643-2671, 1998.
- 335. Schulte, MD., Shock, EL., Wood, RH., *Geochim. Cosmochim. Acta* 65(21), 3919-3930, 2001.
- 336. Yokokawa, H., tentative treatment for heat capacity=0. for those aqueous species whose Cp is unknown.

付録2 CHD 第2版におけるプールベ線図

A2.1 CHD第2版におけるプールベ線図取扱方の基本方針

付録で述べたように、一般化された化学ポテンシャル図を構築するために開発されたCHD プログラムは 水溶液に関連する低温での平衡に関連するプールベ線図を構築するにも利用できます。CHD第1版では付録でいくつかの説明をしたのを除けば、何の機能も用意しませんでした。第2版では次のような措置をとりました。

1. MALT for Windows が水溶液データを格納するようになった機会を利用して、新たな機能を用意して、ユーザーが一般化学ポテンシャル図の知識がなくても容易にプールベ線図を構築できるようにしました。これはプールベ線図を構築・利用したいユーザーは、必ずしも、一般化された化学ポテンシャル図を利用するために必要な高温材料化学的知見になじんでいるとは限らないためです。他方で、プールベ線図は良く利用され、プールベ線図をどのように構築するかにかんする形式も標準化されています。このため、CHD 第2版では、対象とする元素を指定するだけで自動的にプールベ線図を構築する 機能を提供することにしました。
2. とは言え、図のカスタマイズは、図構築条件（例えば、座標軸の表示範囲、水溶液化学種の活量の指定、考慮すべき化合物・化学種の選択など）を適切に指定するには必要です。
3. 更に、プールベ線図に現れている電気化学的關係を一般化された方式での他の電気化学的・化学的關係と比較することも大いに推奨されます。特にFe-S-O-H-e-系のような2元素に関するプールベ線図 では、暗黙的に鉄(Fe) が表示の対象元素として指定され、硫黄の関連する相平衡關係のうちあるものは無視されます。プールベ線図に現れている熱力学的關係は、多元系の複雑な相平衡のうちごく一部であり、通常のプールベ線図では無視されている關係を含めて熱力学的考察をしないと適切さを欠くこともありえます。このような場合、異なる環境、例えば水溶液系、水和物生成下、ドライな雰囲気での熱力学的な關係を理解することが肝要です。

そこで、CHD 第2版では次の機能を提供します。

1. 選定されたオプションによる自動構築
2. 図構築オプションに関するカスタマイズ
3. 一般化された化学ポテンシャル図構築と同様な手続きおよび設定の適用。

A2-2 プールベ線図の自動構築

水溶液の溶質元素を一つか二つ選んだ場合、プールベ線図は自動的に構築されます。選ぶのは、次の事項だけです。

1. MALT for Windows で熱力学データを検索するときに水溶液化学種も含める。
2. MALT for Windows では、元素による検索を行う。
3. メニューでツールを選び、さらに CHDを選ぶ。
4. 化合物データはCHDに転送され、図の構築が自動的に開始される。最後にプールベ線図が現れる。

自動構築は次の既定値の設定を基礎に行われます。

1. 対象とする状態は凝縮相と水溶液化学種で、水溶液化学種と凝縮相との平衡も示すことになります。
2. 溶質元素を二つ選んだ場合、NBSオーダーの高い元素が表示すべき対象元素として指定されます異文系。他の元素は多成分系図における表示されない元素として取り扱われます。
3. 座標の表示範囲は事前に指定されます。
4. O₂(g) あるいは H₂(g) ガス発生に関係する平衡線で“断面”データとして指定されています。元々この断面機能は断面に沿った線上でのプロファイル図を提供するものですが、ここでは、元の図の断面位置を示すのみで、断面に沿った水溶液化学種の活量変化を示すプロファイル線図を描画する機能は無効化されています。

A2-3 図構築・表示の条件設定

化合物あるいは化学種の選択は図構築上重要です。

1. 化学種安定線図 (Predominance are diagram) : 電荷を持つか持たない水溶液化学種のみ選択した場合、いわゆる化学種安定線図が構築されます。この図は pH および E/V の関数としてその点で最も安定な化学種を示すもので、図全体が選択された元素を含む化学種の中で最も安定な化学種の存在領域が多角形で与えられます。異なる化学種間の境界線は、電気化学的反応に対応します。例えば、 FeO^+ と Fe^{+2} の境界線は次の反応を示しています。



ここに H^+ , e^- と H_2O は、図の座標の関連する化学種あるいは溶媒としての化学種 (化合物) であり、これらも化学式に関与します。上式(A2-1)中の化学種の化学量論係数が境界線の勾配を決めます。このことはプルベ線図あるいは関連する図の構築規約と完全に一致しています。

2. 通常のプルベ線図では、対象として水溶液化学種と固相を選んで、構築されています。
3. 元素の選択は、次の様な図を構築するときにも重要となります。

多角形表示モードの選択:

多元溶質系では一般化された化学ポテンシャル図の一つとして構築されます。但し、従来型の多元系プルベ線図では一つの元素にのみ焦点をあてて描画されます。

プロフィール線図での元素の選択

プロフィール線図では、存在する水溶液化学種に対応する多くのプロフィール線を示すことができます。通常、溶媒に関する化学種は無視されます。もしユーザーが焦点を当てるべき元素を持っているならば、それらの元素をプロフィール線図用に選択することができます。

水溶液化学種の熱力学的活量の選定

水溶液化学種の熱力学的活量を変化させて、一連の図を構築することができます。一度この活量を調整すると、全ての水溶液化学種の活量が同じ活量で設定されます。

図表示範囲の選定

水平軸および垂直軸の範囲を変更できます。更には、座標軸変数も変更可能です。

多角形表示モードの変更

通常、安定多角形を塗りつぶす色の選択に関して、いくつかの選択肢を用意しています。

化合物/化学種の化学量論数を元にしたもの。

座標変数の係数を元にしたもの。

事前選定した色の順次使用するもの。

更に、選定した色の明度および描画模様様式も選定できます。

水溶液系は、このような選択は、状態毎に（つまり、水溶液、凝縮相、気相別に）設定可能です。

透明表示に関する対象元素の選定

通常、NBSオーダーの高い元素が的確に表示される元素として選択され、この元素を含まない化学種は透明モードで示されます。この元素選択は、溶媒ではない、つまり、溶質元素の中から選ばれます。

A2-4 一般化された電気化学ポテンシャル図

水溶液を取り扱うために、CHDでは次の様な水溶液に関する特別な措置を行っています。

1. 座標変数, pH , pE , E/V を用意しています。

$$pH = -\log a(H^+);$$

$$pE = -\log a(e^-);$$

$$E/V = -(RT/F) \ln a(e^-)$$

CHDアルゴリズムの核心の部分では、電荷は擬元素として取り扱われています。水溶液では、熱力学的規約は H^+ を基準に採用されています。すなわち、 H^+ の生成エンタルピー変化、生成ギブスエネルギー変化、標準エントロピー、熱容量は全てゼロに定義されています。このため、 H^+ 化学種に関連した熱力学量を座標に選ぶことは自然な選択となります。従って、系の構成要素として(H , O , e^-)の代わり

に(H^+ , e^- , H_2O)を採用することとなります。これらの座標変数はまた、断面を指定するときの変数としても用いることができます。

2. 他の条件設定は通常的一般化された化学ポテンシャル図と同じです。例えば、水溶液を、一つの溶液（混合相）と見なすこともできますし、個別化学種としても取り扱うこともできます。通常は個別化学種として取り扱っています。

A2-5 保存と再現に関する条件設定

一つのchdプロジェクトが複数の図から構成されることもあり得るため、ユーザーが図あるいは断面図を構築するために指定した条件に関連する熱力学データとともに保存できれば便利になります。

そこで、CHD 第2版では、新しい機能を用意し、熱力学データと計算条件を保存すること、および保存したデータと作図条件を用いて図を再現することを可能にしました。

同じデータを用いて、異なる条件でことなる図を描くことはごく普通に行われるので、一つの熱力学データに基づくchdプロジェクトの中で、複数の異なる条件設定が格納出来るようにしました。

gem 第2版の新しい特徴

水溶液を適用するために行った修正

水溶液に関する熱力学的モデル

水溶液は溶媒 (H₂O) と溶質から成り立っています。Gem ではこの溶液を理想希薄溶液として扱っています。化学種、例えば、Fe²⁺、の化学ポテンシャルは次の様に定義されます。

$$\mu(\text{Fe}^{2+}) = \mu^\circ(\text{Fe}^{2+}) + RT \ln c(\text{Fe}^{2+})$$

ここに $\mu^\circ(\text{Fe}^{2+})$ は標準状態の化学ポテンシャル値で、 $c(\text{Fe}^{2+})$ はFe²⁺の濃度です。理想溶液では、他の溶媒—溶質相互作用、溶質間相互作用は考慮されていません。

ヘルムホルツモードでの水溶液化学種の活量指定

平衡を求めるのに、ヘルムホルツエネルギーの最小化モードが選択された場合、気相化学種も分圧値を固定することができます。同様の方法で、水溶液がある場合に、水溶液化学種の活量を指定することができます。