株式会社計算熱力学研究所
https://ww.rictsystems.com

溶融塩熱力学データベース

RICT-Salt

2023 年 4 月 15 日

1. 概要

RICT-Salt は溶融塩材料に関する熱力学パラメータのデータベースです。様々な実験データや状態図情報を元に、CALPHAD 法によって最適化されたパラメータを多数収録していますので、本データベースを用いることで、信頼性の高い熱力学平衡計算や化学反応計算、あるいは状態図計算などを行うことが出来ます。

2. 構成元素

本データベースには下記の 30 種の金属元素の陽イオンと 8 種の陰イオン により構成される塩の擬二元系と一部の擬三元系の熱力学パラメータが収録されています。最適化されたパラメータが与えられている系については、6. のリストを参照してください。なお、リストに記載されていない系でも推定計算は可能です。

陽イオン： Ag-Al-Ca-Cr-Cs-K-Li-Mg-Na-Rb-Zn-La-Be-Sr-Ba-U-Y-Zn-Ni-Fe-Cr-Cu-Mn-Co-In-La-Ce-Pu-Th-Zr

陰イオン： F-Cl-Br-I-CO3-NO3-SO4-OH

3. 推奨組成範囲

パラメータが最適化されている系についてはすべて全組成範囲をカバーしています。擬三元系以上の多元系においても全組成範囲で予測計算することが可能です。

4. 使用上の注意

1. ガス成分については自動で IdealGas.ADB からデータを読み込むように設定されています。ガスが出現して困る場合は、圧力を高めにしてガスを不安定化させてください。
2. 一般に、様々な実験データや計算データに基づいて最適化していますので、十分な情報がある系では推定精度は±25℃程度と期待されます。しかし、実験データが全く無い場合や、データの信頼性や精度が低い場合も多いのが実情ですので、組成や条件によっては推定誤差が±100℃程度以上に大きい場合もあり得ます。よって、例えば文献情報を参照するなど、計算結果についてはなるべく検証や確認を行ってください。

5. 構成

相数: 428
溶体数: 78
純物質化合物数: 347

6. 最適化されている擬二元系

Total Number: 485

LiF-NaF	LiF-KF	NaF-KF	LiF-MgF2	NaF-MgF2	KF-MgF2
LiF-CaF2	NaF-CaF2	KF-CaF2	CaF2-MgF2	LiF-RbF	NaF-RbF
KF-RbF	RbF-CaF2	RbF-MgF2	LiF-CsF	NaF-CsF	KF-CsF
RbF-CsF	CsF-CaF2	CsF-MgF2	LiF-BeF2	NaF-BeF2	KF-BeF2
RbF-BeF2	CsF-BeF2	CaF2-BeF2	MgF2-BeF2	SrF2-BeF2	BaF2-BeF2
KF-YF3	LiF-AlF3	NaF-AlF3	KF-AlF3	BeF2-AlF3	LiF-SrF2
NaF-SrF2	KF-SrF2	RbF-SrF2	CsF-SrF2	MgF2-SrF2	CaF2-SrF2
LiF-BaF2	NaF-BaF2	KF-BaF2	RbF-BaF2	CsF-BaF2	CaF2-BaF2
MgF2-BaF2	SrF2-BaF2	LiF-ZnF2	NaF-ZnF2	KF-ZnF2	RbF-ZnF2
CsF-ZnF2	NaF-NiF2	KF-NiF2	LiF-CrF3	NaF-CrF3	KF-CrF3
LiF-LaF3	NaF-LaF3	KF-LaF3	RbF-LaF3	CsF-LaF3	MgF2-LaF3
CaF2-LaF3	LiF-CeF3	NaF-CeF3	KF-CeF3	CsF-CeF3	CaF2-CeF3
MgF2-CeF3	SrF2-CeF3	BaF2-CeF3	LiF-NdF3	LiF-DyF3	NdF3-DyF3
LiF-PrF3	LiF-SmF3	LiF-GdF3	LiF-UF3	NaF-UF3	LiF-PuF3
NaF-PuF3	KF-PuF3	BeF2-PuF3	LaF3-PuF3	LiF-AmF3	LiF-UF4
NaF-UF4	KF-UF4	BeF2-UF4	UF3-UF4	PuF3-UF4	LiF-ZrF4
NaF-ZrF4	KF-ZrF4	BeF2-ZrF4	AlF3-ZrF4	ZrF4-UF4	LiF-ThF4
NaF-ThF4	KF-ThF4	RbF-ThF4	CsF-ThF4	CaF2-ThF4	MgF2-ThF4
BeF2-ThF4	CeF3-ThF4	PuF3-ThF4	ThF4-UF4	LiCl-NaCl	LiCl-KCl
KCl-NaCl	LiCl-CaCl2	NaCl-CaCl2	KCl-CaCl2	LiCl-MgCl2	NaCl-MgCl2
KCl-MgCl2	CaCl2-MgCl2	LiCl-RbCl	NaCl-RbCl	KCl-RbCl	RbCl-CaCl2

RbCl-MgCl2 LiCl-CsCl NaCl-CsCl KCl-CsCl RbCl-CsCl CsCl-CaCl2
CsCl-MgCl2 LiCl-SrCl2 NaCl-SrCl2 KCl-SrCl2 RbCl-SrCl2 CsCl-SrCl2
MgCl2-SrCl2 CaCl2-SrCl2 LiCl-BaCl2 NaCl-BaCl2 KCl-BaCl2 RbCl-BaCl2
CsCl-BaCl2 MgCl2-BaCl2 CaCl2-BaCl2 SrCl2-BaCl2 NaCl-AgCl LiCl-CuCl
NaCl-CuCl KCl-CuCl RbCl-CuCl CsCl-CuCl CuCl-MgCl2 CuCl-CaCl2
CuCl-AlCl3 CuCl-UCl4 LiCl-BeCl2 NaCl-BeCl2 KCl-BeCl2 RbCl-BeCl2
CsCl-BeCl2 BaCl2-BeCl2 LiCl-ZnCl2 NaCl-ZnCl2 KCl-ZnCl2 RbCl-ZnCl2
CsCl-ZnCl2 CuCl-ZnCl2 CaCl2-ZnCl2 MgCl2-ZnCl2 ZnCl2-SrCl2 ZnCl2-BaCl2
LiCl-FeCl2 NaCl-FeCl2 KCl-FeCl2 RbCl-FeCl2 CsCl-FeCl2 CaCl2-FeCl2
MgCl2-FeCl2 FeCl2-SrCl2 FeCl2-NiCl2 ZnCl2-FeCl2 CuCl-CuCl2 FeCl2-CuCl2
CuCl-FeCl2 CuCl2-FeCl3 LiCl-NiCl2 NaCl-NiCl2 KCl-NiCl2 CaCl2-NiCl2
MgCl2-NiCl2 LiCl-MnCl2 NaCl-MnCl2 KCl-MnCl2 CaCl2-MnCl2 MgCl2-MnCl2
SrCl2-MnCl2 FeCl2-MnCl2 MnCl2-NiCl2 AgCl-CoCl2 LiCl-CoCl2 NaCl-CoCl2
KCl-CoCl2 MgCl2-CoCl2 CaCl2-CoCl2 NiCl2-CoCl2 MnCl2-CoCl2 FeCl2-CoCl2
LiCl-FeCl3 NaCl-FeCl3 KCl-FeCl3 MgCl2-FeCl3 CaCl2-FeCl3 ZnCl2-FeCl3
FeCl2-FeCl3 LiCl-UCl3 NaCl-UCl3 KCl-UCl3 CaCl2-UCl3 MgCl2-UCl3
LiCl-AlCl3 NaCl-AlCl3 KCl-AlCl3 RbCl-AlCl3 CsCl-AlCl3 CaCl2-AlCl3
MgCl2-AlCl3 CoCl2-AlCl3 FeCl2-AlCl3 ZnCl2-AlCl3 NaCl-InCl3 LiCl-YCl3
NaCl-YCl3 KCl-YCl3 RbCl-YCl3 CsCl-YCl3 MgCl2-YCl3 CaCl2-YCl3
SrCl2-YCl3 BaCl2-YCl3 LiCl-CeCl3 NaCl-CeCl3 KCl-CeCl3 RbCl-CeCl3
CsCl-CeCl3 CaCl2-CeCl3 MgCl2-CeCl3 SrCl2-CeCl3 BaCl2-CeCl3 FeCl2-CeCl3
ZnCl2-CeCl3 LiCl-LaCl3 NaCl-LaCl3 KCl-LaCl3 CsCl-LaCl3 CaCl2-LaCl3
MgCl2-LaCl3 FeCl2-LaCl3 YCl3-LaCl3 LiCl-PuCl3 NaCl-PuCl3 KCl-PuCl3
RbCl-PuCl3 CsCl-PuCl3 MgCl2-PuCl3 UCl3-PuCl3 LiCl-ThCl4 NaCl-ThCl4
KCl-ThCl4 MgCl2-ThCl4 CaCl2-ThCl4 PuCl3-ThCl4 UCl3-ThCl4 LiCl-UCl4
NaCl-UCl4 KCl-UCl4 MgCl2-UCl4 CaCl2-UCl4 ThCl4-UCl4 UCl3-UCl4
LiF-LiCl NaF-NaCl KF-KCl RbF-RbCl CsF-CsCl CaF2-CaCl2
MgF2-MgCl2 SrF2-SrCl2 BeF2-BeCl2 LiF-NaCl NaF-LiCl LiF-KCl
KF-LiCl NaF-KCl KF-NaCl CaF2-LiCl LiF-CaCl2 MgF2-LiCl
LiF-MgCl2 CaF2-NaCl NaF-CaCl2 MgF2-NaCl NaF-MgCl2 CaF2-KCl
KF-CaCl2 MgF2-KCl KF-MgCl2 CaF2-MgCl2 MgF2-CaCl2 NaF-RbCl
RbF-NaCl LiF-CsCl CsF-LiCl NaF-CsCl CsF-NaCl KF-CsCl
CsF-KCl CaF2-CsCl CsF-CaCl2 MgF2-CsCl CsF-MgCl2 AlF3-KCl
KF-AlCl3 BeF2-KCl KF-BeCl2 LiF-SrCl2 SrF2-LiCl NaF-SrCl2
SrF2-NaCl KF-SrCl2 SrF2-KCl LiBr-NaBr LiBr-KBr LiBr-RbBr
LiBr-CsBr NaBr-KBr NaBr-RbBr NaBr-CsBr KBr-RbBr KBr-CsBr
RbBr-CsBr LiI-NaI LiI-KI LiI-RbI LiI-CsI NaI-KI
NaI-RbI NaI-CsI KI-RbI KI-CsI CsI-RbI LiF-LiBr
LiF-LiI LiCl-LiBr LiCl-LiI LiBr-LiI NaF-NaBr NaF-NaI

NaCl-NaBr	NaCl-NaI	NaBr-NaI	KF-KBr	KF-KI	KCl-KBr
KCl-KI	KBr-KI	RbF-RbBr	RbF-RbI	RbCl-RbBr	RbCl-RbI
RbBr-RbI	CsF-CsBr	CsF-CsI	CsCl-CsBr	CsCl-CsI	CsBr-CsI
LiOH-NaOH	LiOH-KOH	NaOH-KOH	LiOH-RbOH	LiOH-CsOH	NaOH-RbOH
NaOH-CsOH	KOH-RbOH	KOH-CsOH	RbOH-CsOH	LiCl-LiOH	NaCl-NaOH
KCl-KOH	RbCl-RbOH	LiF-Li2CO3	NaF-Na2CO3	KF-K2CO3	LiF-Li2SO4
NaF-Na2SO4	KF-K2SO4	LiCl-Li2CO3	NaCl-Na2CO3	KCl-K2CO3	KCl-Na2CO3
NaCl-K2CO3	LiCl-Li2SO4	NaCl-Na2SO4	LiCl-Na2SO4	NaCl-Li2SO4	KCl-K2SO4
KCl-Na2SO4	NaCl-K2SO4	KCl-Li2SO4	LiBr-LiOH	LiBr-LiNO3	LiI-LiOH
NaBr-NaOH	NaBr-NaNO3	NaI-NaOH	NaI-NaNO3	KBr-KOH	KBr-KNO3
KI-KOH	KI-KNO3	RbBr-RbNO3			

Li2CO3-Na2CO3	Li2CO3-K2CO3	Na2CO3-K2CO3	Li2CO3-CaCO3
Na2CO3-CaCO3	K2CO3-CaCO3	Li2CO3-MgCO3	Na2CO3-MgCO3
K2CO3-MgCO3	CaCO3-MgCO3	K2SO4-Na2SO4	Na2SO4-CaSO4
Na2SO4-MgSO4	K2SO4-CaSO4	K2SO4-MgSO4	CaSO4-MgSO4
Li2SO4-Na2SO4	Li2SO4-K2SO4	LiNO3-NaNO3	LiNO3-KNO3
NaNO3-KNO3	LiNO3-RbNO3	LiNO3-CsNO3	NaNO3-RbNO3
NaNO3-CsNO3	KNO3-RbNO3	KNO3-CsNO3	RbNO3-CsNO3
LiNO3-MgN2O6	NaNO3-MgN2O6	KNO3-MgN2O6	LiNO3-CaN2O6
NaNO3-CaN2O6	KNO3-CaN2O6	RbNO3-CaN2O6	CsNO3-CaN2O6
LiCl-K2SO4	Li2CO3-LiOH	Na2CO3-NaOH	K2CO3-KOH
Li2SO4-LiOH	Na2SO4-NaOH	K2SO4-KOH	Li2CO3-Li2SO4
Na2CO3-Na2SO4	K2CO3-K2SO4	Na2CO3-K2SO4	K2CO3-Na2SO4
LiCl-LiNO3	NaCl-NaNO3	KCl-KNO3	Na2CO3-NaNO3
K2CO3-KNO3	Li2SO4-LiNO3	Na2SO4-NaNO3	K2SO4-KNO3
RbOH-RbNO3	CsF-CsNO3	CsCl-CsNO3	CsBr-CsNO3
CsOH-CsNO3	NiSO4-K2SO4		

7. 相の種類と構成

本データベースを構成している各相の名称、相モデルと構成成分を以下に示します。

－－

Solutions（溶体相）

(1) Name: LIQ　　Phase-Model: Modified Quasichemical Model

[LiF,NaF,KF,RbF,CsF,CaF2,MgF2,SrF2,BaF2,BeF2,ZnF2,NiF2,AlF3,CrF3,ScF3,YF3,LaF3,CeF3,PrF3,NdF3,PmF3,SmF3,EuF3,GdF3,TbF3,DyF3,HoF3,ErF3,TmF3,YbF3,LuF3,UF3,PuF3,AmF3,ZrF4,ThF4,UF4,LiCl,KCl,NaCl,RbCl,CsCl,AgCl,CuCl,CaCl2,MgCl2,ZnCl2,FeCl2,SrCl2,BaCl2,BeCl2,CuCl2,MnCl2,NiCl2,CoCl2,AlCl3,FeCl3,InCl3,ScCl3,YCl3,LaCl3,CeCl3,GdCl3,UCl3,PuCl3,ZrCl4,ThCl4,UCl4,Li2CO3,Na2CO3,K2CO3,CaCO3,MgCO3,SrCO3,B

aCO3,Li2SO4,K2SO4,Na2SO4,CaSO4,MgSO4,SrSO4,BaSO4,LiBr,NaBr,KBr,RbBr,CsBr,LiI,NaI,KI,CsI,RbI,LiOH,NaOH,KOH,RbOH,CsOH,LiNO3,NaNO3,KNO3,RbNO3,CsNO3,MgN2O6,CaN2O6,NiSO4]1

(2) Name: Halite Phase-Model: Compound Energy Model
[LiF,KF,NaF,KCl,NaCl,LiCl,AgCl,CaCl2,MgCl2,MgF2,ZnF2,KBr,LiBr,NaBr,KI,LiI,NaI,RbF,RbCl,RbBr,RbI,CsF,CsCl,CsBr,CsI,LiOH,NaOH,KOH,CsOH,RbOH,FeCl2,CuCl,MnCl2,NiCl2,CoCl2]1

(3) Name: MX_B2 Phase-Model: Compound Energy Model
[K,Rb,Cs]1[Br,I,Cl]1

(4) Name: MX_B3 Phase-Model: Compound Energy Model
[CuCl,ZnCl2,LiCl,NaCl]1

(5) Name: Fluorite Phase-Model: Compound Energy Model
[CaF2,CaOVa,NaFVa,KFVa,LiFVa,SrF2,BaF2,ThF4]1

(6) Name: b_CaF2 Phase-Model: Compound Energy Model
[CaF2,CaOVa,NaFVa,KFVa,LiFVa,SrF2,BaF2,LaF3,CeF3]1

(7) Name: A3MeF5 Phase-Model: Compound Energy Model
[RbF,CsF]3[BeF2]1

(8) Name: o_A2MeF4 Phase-Model: Compound Energy Model
[NaCl,KCl,RbF,CsF]2[MgCl2,BeF2]1

(9) Name: t_A2MeF4 Phase-Model: Compound Energy Model
[KF,RbF,CsF]2[MgF2,ZnF2]1

(10) Name: c_AMeF3 Phase-Model: Compound Energy Model
[KF,NaF,NaCl,KCl,RbF,CsF,LiF]1[MgF2,MgCl2,CaCl2,CaF2,BaF2,ZnF2,BeF2]1

(11) Name: h_AMeF3 Phase-Model: Compound Energy Model
[CsF,RbF]1[MgF2,SrF2,ZnF2,BeF2]1

(12) Name: o_AMeF3 Phase-Model: Compound Energy Model
[NaF,KF,KCl]1[MgF2,CaF2,MgCl2,CaCl2,ZnF2]1

(13) Name: AMe2F5 Phase-Model: Compound Energy Model
[RbF,CsF]1[BeF2]2

(14) Name: MxCl2(O) Phase-Model: Compound Energy Model
[CaCl2,MgCl2,UCl3,SrCl2]1

(15) Name: MgF2 Phase-Model: Compound Energy Model
[MgF2,LiF,NaF,KF,CaF2,MgO]1

(16) Name: MxCl2(R) Phase-Model: Compound Energy Model
[MgCl2,LiCl,CaCl2,FeCl2,MnCl2,NiCl2,CoCl2]1

(17) Name: MxCl2(C2) Phase-Model: Compound Energy Model
[SrCl2,CaCl2,BaCl2]1

(18) Name: MxOH(M) Phase-Model: Compound Energy Model
[KOH,NaOH,RbOH]1

(19) Name: AE2CO3(A) Phase-Model: Compound Energy Model
[K2CO3,K2SO4,Na2CO3]1

(20) Name: AE2CO3(AP) Phase-Model: Compound Energy Model
[Na2CO3,K2CO3]1

(21) Name: AE2CO3(BP) Phase-Model: Compound Energy Model
[Na2CO3,K2CO3]1

(22) Name: AECO3(R) Phase-Model: Compound Energy Model
[CaO,MgO,(CaMgO2)/2]1[CO2]1

(23) Name: A2AE(CO3)2(s) Phase-Model: Compound Energy Model
[K2Ca(CO3)2,Na2Ca(CO3)2,Na2Mg(CO3)2]1

(24) Name: A2Ca2(CO3)3(s) Phase-Model: Compound Energy Model
[K2Ca2(CO3)3,Na2Ca2(CO3)3]1

(25) Name: ReF3 Phase-Model: Compound Energy Model
[LaF3,CaF2,CeF3,SrF2,BaF2,PrF3,ThF4]1

(26) Name: ReF3(H) Phase-Model: Compound Energy Model
[NdF3,DyF3,SmF3,GdF3,UF3,PuF3,ThF4,UF4,AmF3]1

(27) Name: ReF3(O) Phase-Model: Compound Energy Model
[DyF3,SmF3,GdF3,TbF3,YF3]1

(28) Name: AReF4(H) Phase-Model: Compound Energy Model
[NaLaF4,NaCeF4]1

(29) Name: AReF4(T) Phase-Model: Compound Energy Model
[RbLaF4,LiDyF4,LiGdF4]1

(30) Name: AReF4(O) Phase-Model: Compound Energy Model
[KLaF4,KPuF4,KCeF4]1

(31) Name: A3ReF6 Phase-Model: Compound Energy Model
[K3LaF6,Rb3LaF6,Cs3LaF6,K3PuF6,K3CeF6,Cs3CeF6]1

(32) Name: ARe2F7 Phase-Model: Compound Energy Model
[RbLa2F7,KCe2F7,K4CeF7]1

(33) Name: ZnCl2(s) Phase-Model: Compound Energy Model
[ZnCl2,FeCl3]1

(34) Name: A2ZnCl4 Phase-Model: Compound Energy Model
[Li2ZnCl4,Na2ZnCl4,K2ZnCl4]1

(35) Name: FeCl3(s) Phase-Model: Compound Energy Model
[FeCl3,ZnCl2]1

(36) Name: BaCl2(s) Phase-Model: Compound Energy Model
[BaCl2,SrCl2]1

(37) Name: A2ZrF6 Phase-Model: Compound Energy Model
[Li2ZrF6,Na2ZrF6]1

(38) Name: A3ZrF7 Phase-Model: Compound Energy Model
[Li3ZrF7,Na3ZrF7,K3ZrF7]1

(39) Name: A3Zr4F19 Phase-Model: Compound Energy Model
[Li3Zr4F19,Na3Zr4F19]1

(40) Name: A7Zr6F31 Phase-Model: Compound Energy Model
[Na7Zr6F31,K7Zr6F31]1

(41) Name: A5Zr2F13 Phase-Model: Compound Energy Model
[Na5Zr2F13,K5Zr2F13]1

(42) Name: A3Zr2F11 Phase-Model: Compound Energy Model
[Na3Zr2F11,K3Zr2F11]1

(43) Name: Anhydrite Phase-Model: Compound Energy Model
[FeSO4,CaSO4]1

(44) Name: A2SO4(H) Phase-Model: Compound Energy Model
[Na2SO4,K2SO4,CaSO4,MgSO4,Li2SO4,Na2CO3,K2CO3,Li2CO3]1

(45) Name: K2SO4(O) Phase-Model: Compound Energy Model
[K2SO4,Na2SO4,CaSO4,MgSO4,K2CO3]1

(46) Name: Glaserite Phase-Model: Compound Energy Model
[K3Na(SO4)2,Na3Na(SO4)2]1

(47) Name: Na2SO4(P) Phase-Model: Compound Energy Model
[Na2SO4,K2SO4]1

(48) Name: Na2SO4(O) Phase-Model: Compound Energy Model
[Na2SO4,K2SO4]1

(49) Name: Langbeinite Phase-Model: Compound Energy Model
[K]2[Mg,Ca]2[SO4]3

(50) Name: Li2SO4(C) Phase-Model: Compound Energy Model
[Li2SO4,Li2CO3,Na2SO4,K2SO4]1

(51) Name: LiNaSO4(s2) Phase-Model: Compound Energy Model
[Li2SO4,Na2SO4]1

(52) Name: KLiSO4(s2) Phase-Model: Compound Energy Model
[KLiSO4,Li2SO4]1

(53) Name: KLiSO4(s3) Phase-Model: Compound Energy Model
[KLiSO4,Li2SO4]1

(54) Name: MxNO3(RC) Phase-Model: Compound Energy Model
[LiNO3,NaNO3]1

(55) Name: MxNO3(O) Phase-Model: Compound Energy Model
[KNO3,NaNO3]1

(56) Name: MxNO3(R) Phase-Model: Compound Energy Model
[KNO3,NaNO3,CsNO3,RbNO3,NaI,KBr,KI,CsCl,CsBr,CsOH]1

(57) Name: MxNO3(C) Phase-Model: Compound Energy Model
[KNO3,NaNO3,CsNO3,RbNO3,NaI,KBr,KI,CsCl,CsBr,CsOH]1

(58) Name: MxNO3(H) Phase-Model: Compound Energy Model
[RbNO3,CsNO3,KNO3,CsOH]1

(59) Name: MxCl3(H) Phase-Model: Compound Energy Model
[UCl3,CaCl2,PuCl3,LaCl3,CeCl3,PrCl3,NdCl3,PmCl3,SmCl3,EuCl3,GdCl3,UCl4]1

(60) Name: MxCl3(M) Phase-Model: Compound Energy Model
[YCl3,YbCl3,LuCl3,TbCl3,DyCl3,ErCl3,TmCl3,InCl3]1

(61) Name: A3RCl6(s) Phase-Model: Compound Energy Model
[K3YCl6,Na3YCl6,Li3YCl6,Rb3YCl6,Cs3YCl6,K3CeCl6,K3GdCl6,Li3GdCl6]1

(62) Name: AR2Cl7(s) Phase-Model: Compound Energy Model
[RbY2Cl7,CsY2Cl7,KGd2Cl7]1

(63) Name: A2RCl5(s) Phase-Model: Compound Energy Model
[Rb2YCl5,Cs2YCl5,K2CeCl5,K2LaCl5,K2GdCl5]1

(64) Name: A3R5Cl18(s) Phase-Model: Compound Energy Model
[Na3Ce5Cl18,K3Ce5Cl18]1

(65) Name: AR3Cl10(s) Phase-Model: Compound Energy Model
[NaLa3Cl10,KLa3Cl10]1

(66) Name: A2AeCl4 Phase-Model: Compound Energy Model
[K2SrCl4,K2BaCl4,Rb2BaCl4,Cs2BaCl4,Rb2SrCl4]1

(67) Name: AAe2Cl5 Phase-Model: Compound Energy Model
[KSr2Cl5,RbSr2Cl5]1

(68) Name: AAeCl3 Phase-Model: Compound Energy Model
[RbSrCl3,CsSrCl3,CsBaCl3,KSrCl3]1

(69) Name: MxF4 Phase-Model: Compound Energy Model
[UF4,ZrF4,ThF4]1

(70) Name: A3UF7 Phase-Model: Compound Energy Model
[Na3UF7,K3UF7]1

(71) Name: A2UF6 Phase-Model: Compound Energy Model
[Na2UF6,K2UF6]1

(72) Name: A7U6F31 Phase-Model: Compound Energy Model
[Na7U6F31,K7U6F31]1

(73) Name: AU2F9 Phase-Model: Compound Energy Model
[NaU2F9,KU2F9]1

(74) Name: MxCl4(T) Phase-Model: Compound Energy Model
[ThCl4,PuCl3,UCl4]1

(75) Name: ZnF2(s) Phase-Model: Compound Energy Model
[ZnF2,LiF]1

(76) Name: MeO_B1 Phase-Model: Compound Energy Model
[MgO,CaO]1

(77) Name: MLIQ Phase-Model: Compound Energy Model
[Ag,Au,Ir,Os,Pd,Pt,Rh,Ru,Sc,Y,La,Ce,Pr,Nd,Pm,Sm,Eu,Gd,Tb,Dy,Ho,Er,Tm,Yb,Lu]1

(78) Name: BCC_A2 Phase-Model: Compound Energy Model
[Ag,Au,Ir,Os,Pd,Pt,Rh,Ru,Sc,Y,La,Ce,Pr,Nd,Pm,Sm,Eu,Gd,Tb,Dy,Ho,Er,Tm,Yb,Lu]1[Va]3

(79) Name: FCC_A1 Phase-Model: Compound Energy Model
[Ag,Au,Ir,Os,Pd,Pt,Rh,Ru,Sc,Y,La,Ce,Pr,Nd,Pm,Sm,Eu,Gd,Tb,Dy,Ho,Er,Tm,Yb,Lu]1[Va]1

(80) Name: HCP_A3 Phase-Model: Compound Energy Model
[Ag,Au,Ir,Os,Pd,Pt,Rh,Ru,Sc,Y,La,Ce,Pr,Nd,Pm,Sm,Eu,Gd,Tb,Dy,Ho,Er,Tm,Yb,Lu]1[Va]0.5

(81) Name: DHCP Phase-Model: Compound Energy Model
[Pm,Ce,La,Nd,Pr,Sc,Y]1[]0.5

Compounds（純物質化合物相）

Phase Name	Formula
CaFCl	CaFCl
MxCl2(C)	SrCl2
A3Ae2Cl7	3KCl*2MgCl2
LiKMgCl4(s)	LiCl*KCl*MgCl2
LiOH(s)	LiOH
NaOH(O)	NaOH
Li2CO3(A)	Li2CO3
Li2CO3(B)	Li2CO3
Li2CO3(C)	Li2CO3
KLiCO3	KLiCO3
LiNaCO3	LiNaCO3
NaOH*Na2SO4	NaOH*Na2SO4
K2Ca(CO3)2(s2)	K2Ca(CO3)2
K2Ca2(CO3)3(s2)	K2Ca2(CO3)3
K2Ca2(CO3)3(s3)	K2Ca2(CO3)3
K4Ca5(CO3)7(s)	K4Ca5(CO3)7
LiCsF2(s)	LiCsF2
Rb2LaF5(s)	Rb2LaF5
BeF2(s)	BeF2

BeF2(s2)	BeF2
CaBeF4(s)	CaBeF4
SrBeF4(s)	SrBeF4
BaBeF4(s)	BaBeF4
NaBeF3(s1)	NaBeF3
NaBeF3(s2)	NaBeF3
Na2BeF4(s1)	Na2BeF4
Na2BeF4(s2)	Na2BeF4
Na2BeF4(s3)	Na2BeF4
LiBeF3(s)	LiBeF3
Li2BeF4(s)	Li2BeF4
LiNaBeF4(s)	LiNaBeF4
LiNa2Be2F7(s)	LiNa2Be2F7
LiNa5Be3F12(s)	LiNa5Be3F12
K2BeF4(s)	K2BeF4
K2BeF4(s2)	K2BeF4
K2BeF4(s3)	K2BeF4
K3BeF5(s)	K3BeF5
KBeF3(s)	KBeF3
KBeF3(s2)	KBeF3
KBeF3(s3)	KBeF3
KBe2F5(s)	KBe2F5
KBe2F5(s2)	KBe2F5
KBe2F5(s3)	KBe2F5
K3BeCl5(s)	K3BeCl5
K2BeCl4(s)	K2BeCl4
KBe2Cl5(s)	KBe2Cl5
LiRbF2(s)	LiRbF2
LiRbCl2(s)	LiRbCl2
Cs2LiCl3(s)	Cs2LiCl3
CsCaCl3(s)	CsCaCl3
K5Zn4Cl13(s)	K5Zn4Cl13
KZn2Cl5(s)	KZn2Cl5
BaMgF4(s)	BaMgF4
RbMgCl3(s)	RbMgCl3
Rb2MgCl4(s)	Rb2MgCl4
RbCaCl3(s)	RbCaCl3
CsMgCl3(s)	CsMgCl3
Cs2MgCl4(s)	Cs2MgCl4

Cs3MgCl5(s)	Cs3MgCl5
KZrF5(s3)	KZrF5
K2ZrF6(s)	K2ZrF6
K2ZrF6(s3)	K2ZrF6
K2ZrF6(s4)	K2ZrF6
Na2ZrF6(s2)	Na2ZrF6
Na2ZrF6(s3)	Na2ZrF6
Li4ZrF8(s)	Li4ZrF8
K3Zr2F11(s2)	K3Zr2F11
RbPuF4(s)	RbPuF4
Rb2PuF5(s)	Rb2PuF5
Rb3PuF6(s)	Rb3PuF6
Cs3PuF6(s)	Cs3PuF6
LiUF5(s)	LiUF5
Li4UF8(s)	Li4UF8
LiU4F17(s)	LiU4F17
Li6BeZrF12(s)	Li6BeZrF12
MgSrF4(s)	MgSrF4
MgSrF4(s2)	MgSrF4
CaSO4(s2)	CaSO4
MgSO4(s)	MgSO4
MgSO4(s2)	MgSO4
MnSO4(s)	MnSO4
Na2SO3(s)	Na2SO3
Al2(SO4)3(s)	Al2(SO4)3
Na2S2O7(s)	Na2S2O7
SO3(s)	SO3
ZnO*2ZnSO4(s)	ZnO*2ZnSO4
ZnSO4(s)	ZnSO4
Zr(SO4)2(s)	Zr(SO4)2
K2SO3(s)	K2SO3
Vanthoffite(s)	Na6Mg(SO4)4
Na2Mg(SO4)2(s)	Na2Mg(SO4)2
Na2Mg(SO4)2(s2)	Na2Mg(SO4)2
Na2Mg(SO4)2(s3)	Na2Mg(SO4)2
Na2Mg3(SO4)4(s)	Na2Mg3(SO4)4
Na6Ca(SO4)4(s)	Na6Ca(SO4)4
Glauberite(s)	Na2Ca(SO4)2
Ca_langbeinite(s)	K2Ca2(SO4)3

Ca_langbeinite(s2)	K2Ca2(SO4)3
CaMg3(SO4)4(s)	CaMg3(SO4)4
Li2SO4(M)	Li2SO4
LiNaSO4(s)	LiNaSO4
KLiSO4(s)	KLiSO4
LiRbBr2(s)	LiRbBr2
LiCsBr2(s)	LiCsBr2
LiRbI2(s)	LiRbI2
K3FCO3(s)	K3FCO3
Na3FSO4(s)	Na3FSO4
K3FSO4(s)	K3FSO4
RbNO3(s2)	RbNO3
RbNO3(s3)	RbNO3
MxCl3(O)	HoCl3
K2UCl5(s)	K2UCl5
K3UCl6(s)	K3UCl6
YF3(s2)	YF3
K3YF6(s)	K3YF6
K3YF6(s2)	K3YF6
K2YF5(s)	K2YF5
KYF4(s)	KYF4
KY2F7(s)	KY2F7
KY2F7(s2)	KY2F7
KY3F10(s)	KY3F10
AYCl4(s)	NaYCl4
K3YCl6(s2)	K3YCl6
K2YCl5(s)	K2YCl5
KY2Cl7(s)	KY2Cl7
KY2Cl7(s2)	KY2Cl7
RbY2Cl7(s)	RbY2Cl7
AlCl3(s)	AlCl3
KAlCl4(s)	KAlCl4
NaAlCl4(s)	NaAlCl4
LiAlCl4(s)	LiAlCl4
RbAlCl4(s)	RbAlCl4
CsAlCl4(s)	CsAlCl4
CaAlCl5(s)	CaAlCl5
MgAl2Cl8(s)	MgAl2Cl8
AlF3(s)	AlF3

KAl4F13(s)	KAl4F13
K2AlF5(s)	K2AlF5
KAlF4(s)	KAlF4
K3AlF6(s)	K3AlF6
Na3AlF6(s)	Na3AlF6
Na3AlF6(s2)	Na3AlF6
Na5Al3F14(s)	Na5Al3F14
Li3AlF6(s2)	Li3AlF6
MgBa2Cl6(s)	MgBa2Cl6
CaBaCl4(s)	CaBaCl4
BeCl2(s)	BeCl2
BeCl2(s2)	BeCl2
ScF3(s)	ScF3
ScCl3(s)	ScCl3
SmCl2(s)	SmCl2
EuF3(s)	EuF3
EuF3(s2)	EuF3
TbCl3(s2)	TbCl3
HoF3(s)	HoF3
HoF3(s2)	HoF3
ErF3(s)	ErF3
ErF3(s2)	ErF3
ErCl3(s2)	ErCl3
TmF3(s)	TmF3
TmF3(s2)	TmF3
YbF3(s)	YbF3
YbF3(s2)	YbF3
YbCl2(s)	YbCl2
LuF3(s)	LuF3
LuF3(s2)	LuF3
NaPuF4(s)	NaPuF4
Na3UF7(s2)	Na3UF7
Na5U3F17(s)	Na5U3F17
ThCl4(s)	ThCl4
Li4ThCl8(s)	Li4ThCl8
Na2ThCl6(s)	Na2ThCl6
KThCl5(s)	KThCl5
K2ThCl6(s)	K2ThCl6
Li3ThF7(s)	Li3ThF7

LiThF5(s)	LiThF5
LiTh2F9(s)	LiTh2F9
LiTh4F17(s)	LiTh4F17
Na4ThF8(s)	Na4ThF8
Na7Th2F15(s)	Na7Th2F15
Na2ThF6(s)	Na2ThF6
Na3Th2F11(s)	Na3Th2F11
Na7Th6F31(s)	Na7Th6F31
NaThF5(s)	NaThF5
NaTh2F9(s)	NaTh2F9
a_K5ThF9(s)	K5ThF9
b_K5ThF9(s)	K5ThF9
a_K2ThF6(s)	K2ThF6
b_K2ThF6(s)	K2ThF6
K3ThF7(s)	K3ThF7
K7Th6F31(s)	K7Th6F31
KTh2F9(s)	KTh2F9
KTh6F25(s)	KTh6F25
a_KNaThF6(s)	KNaThF6
b_KNaThF6(s)	KNaThF6
ZnF2(s2)	ZnF2
CsZn2F5(s)	CsZn2F5
CrF3(s)	CrF3
Li3CrF6(s)	Li3CrF6
NaCrF4(s)	NaCrF4
Na5Cr3F14(s)	Na5Cr3F14
Na3CrF6(s2)	Na3CrF6
Na3CrF6(s)	Na3CrF6
K3CrF6(s)	K3CrF6
K2CrF5(s)	K2CrF5
KCrF4(s)	KCrF4
K2Cr5F17(s)	K2Cr5F17
CaThF6(s)	CaThF6
Li2CaThF8(s)	Li2CaThF8
MgTh2F10(s)	MgTh2F10
Cs3ThF7(s)	Cs3ThF7
Cs2ThF6(s)	Cs2ThF6
CsThF5(s)	CsThF5
CsThF5(s2)	CsThF5

Cs2Th3F14(s)	Cs2Th3F14
CsTh2F9(s)	CsTh2F9
CsTh3F13(s)	CsTh3F13
CsTh6F25(s)	CsTh6F25
Rb3ThF7(s)	Rb3ThF7
RbThF5(s)	RbThF5
RbTh3F13(s)	RbTh3F13
Th2PuF11(s)	Th2PuF11
U2PuF11(s)	U2PuF11
CeThF7(s)	CeThF7
CeTh2F11(s)	CeTh2F11
NiF2(s)	NiF2
NaNiF3(s)	NaNiF3
KNiF3(s)	KNiF3
K2NiF4(s)	K2NiF4
Rb2ZnCl4(s)	Rb2ZnCl4
RbZn2Cl5(s)	RbZn2Cl5
Cs3ZnCl5(s)	Cs3ZnCl5
Cs2ZnCl4(s)	Cs2ZnCl4
CsZn2Cl5(s)	CsZn2Cl5
CuCl(s2)	CuCl
CuCl2(s)	CuCl2
CuCl2(s2)	CuCl2
LiFeCl4(s)	LiFeCl4
NaFeCl4(s)	NaFeCl4
KFeCl4(s)	KFeCl4
CaFeCl5(s)	CaFeCl5
MgFe2Cl8(s)	MgFe2Cl8
Li6FeCl8(s)	Li6FeCl8
Li2FeCl4(s)	Li2FeCl4
Li2FeCl4(s2)	Li2FeCl4
Na2FeCl4(s)	Na2FeCl4
KFeCl3(s)	KFeCl3
K2FeCl4(s)	K2FeCl4
Rb3FeCl5(s)	Rb3FeCl5
Rb2FeCl4(s)	Rb2FeCl4
RbFeCl3(s)	RbFeCl3
Cs3FeCl5(s)	Cs3FeCl5
Cs2FeCl4(s)	Cs2FeCl4

CsFeCl3(s)	CsFeCl3
K2CuCl3(s)	K2CuCl3
Rb2CuCl3(s)	Rb2CuCl3
Rb2Cu3Cl5(s)	Rb2Cu3Cl5
CsCu2Cl3(s)	CsCu2Cl3
Cs3Cu2Cl5(s)	Cs3Cu2Cl5
CuAlCl4(s)	CuAlCl4
Cu2UCl6(s)	Cu2UCl6
KNiCl3(s)	KNiCl3
Na2MnCl4(s)	Na2MnCl4
Na6MnCl8(s)	Na6MnCl8
Na2Mn3Cl8(s)	Na2Mn3Cl8
NaMn4Cl9(s)	NaMn4Cl9
Na9Mn11Cl31(s)	Na9Mn11Cl31
MnAl2Cl8(s)	MnAl2Cl8
KMnCl3(s)	KMnCl3
K4MnCl6(s)	K4MnCl6
K3Mn2Cl7(s)	K3Mn2Cl7
Li2MnCl4(s)	Li2MnCl4
Na2CoCl4(s)	Na2CoCl4
KCoCl3(s)	KCoCl3
K2CoCl4(s)	K2CoCl4
LiCoCl3(s)	LiCoCl3
Li2CoCl4(s)	Li2CoCl4
Li4CoCl6(s)	Li4CoCl6
Li2NiCl4(s)	Li2NiCl4
Li6NiCl8(s)	Li6NiCl8
RbCe2Cl7(s)	RbCe2Cl7
Rb2CeCl5(s)	Rb2CeCl5
Rb3CeCl6(s)	Rb3CeCl6
CsCe2Cl7(s)	CsCe2Cl7
Cs3CeCl6(s)	Cs3CeCl6
CsPu2Cl7(s)	CsPu2Cl7
Cs3PuCl6(s)	Cs3PuCl6
RbPu2Cl7(s)	RbPu2Cl7
Rb2PuCl5(s)	Rb2PuCl5
Rb3PuCl6(s)	Rb3PuCl6
K2PuCl5(s)	K2PuCl5
K3PuCl6(s)	K3PuCl6

Na3InCl6(s)	Na3InCl6
U4ThCl16(s)	U4ThCl16
Li2UCl6(s)	Li2UCl6
Na2UCl6(s)	Na2UCl6
K2UCl6(s)	K2UCl6
K2UCl6(s2)	K2UCl6
KUCl5(s)	KUCl5
KU3Cl13(s)	KU3Cl13
Y6CaCl20(s)	Y6CaCl20
YSr3Cl9(s)	YSr3Cl9
YBa3Cl9(s)	YBa3Cl9
CeBa3Cl9(s)	CeBa3Cl9
BaZnCl4(s)	BaZnCl4
SrZnCl4(s)	SrZnCl4
Li2BeCl4(s)	Li2BeCl4
Na2BeCl4(s)	Na2BeCl4
Rb2BeCl4(s)	Rb2BeCl4
RbBe2Cl5(s)	RbBe2Cl5
Cs2BeCl4(s)	Cs2BeCl4
CsBeCl3(s)	CsBeCl3
CsBe2Cl5(s)	CsBe2Cl5
BaBeCl4(s)	BaBeCl4
Cs3LaCl6(s)	Cs3LaCl6
LiK(NO3)2(s)	LiK(NO3)2
Mg(NO3)2(s)	Mg(NO3)2
Mg(NO3)2(s2)	Mg(NO3)2
K2Mg(NO3)4(s)	K2Mg(NO3)4
Ca(NO3)2(s)	Ca(NO3)2
K4Ca(NO3)6(s)	K4Ca(NO3)6
KCa(NO3)3(s)	KCa(NO3)3
RbCa(NO3)3(s)	RbCa(NO3)3
CsCa(NO3)3(s)	CsCa(NO3)3
CsOH(s)	CsOH
LiNa(OH)2(s)	LiNa(OH)2
Li2K(OH)3(s)	Li2K(OH)3
Li2Rb(OH)3(s)	Li2Rb(OH)3
CsLi5(OH)6(s)	CsLi5(OH)6
LiRb(NO3)2(s)	LiRb(NO3)2
LiCs(NO3)2(s)	LiCs(NO3)2

NaRb3(NO3)4(s)	NaRb3(NO3)4
Li2BrOH(s)	Li2BrOH
Li4Br(OH)3(s)	Li4Br(OH)3
Li5I(OH)4(s)	Li5I(OH)4
Li2IOH(s)	Li2IOH
Na5I4OH(s)	Na5I4OH
RbNO3*RbOH(s)	RbNO3*RbOH
Li2ClOH(s)	Li2ClOH
SrFCl(s)	SrFCl
K2ClNO3(s)	K2ClNO3
Al2CoCl8(s)	Al2CoCl8
Al2FeCl8(s)	Al2FeCl8
Al2MnCl8(s)	Al2MnCl8
Al2ZnCl8(s)	Al2ZnCl8
NiSO4(s)	NiSO4
NiSO4(s2)	NiSO4
K2Ni(SO4)2(s)	K2Ni(SO4)2
K2Ni2(SO4)3(s)	K2Ni2(SO4)3

株式会社 計算熱力学研究所 Research Institute of Computational Thermodynamics, Inc.(RICT)
〒841-0016 佐賀県鳥栖市田代外町 674-18 Tel: 0942-80-0547
email: mail@rictsystems.com homepage: http://www.rictsystems.com