# Chesta を使用した電位-pH 図の作成

2017年4月10日 畑田直行

#### 1 はじめに

Chesta は Microsoft Windows 上で動作する多元系(多成分系)化学ポテンシャル図作成ソフトウェアである。本稿執筆時点でのバージョンは 3.2.6.9 である。以下では Chesta を使用して電位-pH 図を作成する手順を説明する。

2 Zn – H<sub>2</sub>O 系電位-pH 図の作成手順

2.1 熱力学データの収集

系に属する化学種を列挙し、それらの標準生成ギブズエネルギーを収集する。Zn-H<sub>2</sub>O系の場合、表1のようになる。

化学種	$\Delta_{\rm f}G^\circ~(298~{\rm K})~/~{\rm kJ}~{ m mol}^{-1}$
$\mathrm{H}^{+}$	0
$H_2O(l)$	-237.129
Zn (s)	0
$Zn^{2+}$	-147.06
ZnO (s)	-318.30
$ZnOH^+$	-330.1
$HZnO_2^-$	-457.08
$Zn(OH)_2\left(s ight)$	-553.81
$Zn(OH)_3^-$	-694.22
$Zn(OH)_4{}^{2-}$	-858.52

表 1 Zn – H<sub>2</sub>O 系化学種の標準生成ギブズエネルギー[1]

2.2 使用するポテンシャル軸の決定

電位-pH 図中で使用するポテンシャル軸を決める。すなわち、系を構成する基本単位となる 化学種(標準化学種1)を決める。今回の Zn – H<sub>2</sub>O 系電位-pH 図の場合は、例えば表 2 の ようにすることができる。

<sup>1</sup>系を構成する基本単位となる化学種で、系内のすべての化学種の組成は標準化学種の足し 合わせで表現できる。

標準化学種	ポテンシャル軸
е	Ε
$\mathrm{H}^+$	pH
$Zn^{2+}$	$\log a(Zn^{2+})$
$H_2O$	$\log a(H_2O)$

表 2 電位-pH 図作成に使用するポテンシャル軸

2.3 半反応式の作成

系内の各化学種(電位-pH 図中に安定領域が現れる可能性がある化学種)が標準化学種から 生成する半反応式を表 3 のように書き下す。また、それらの反応の標準ギブズエネルギー 変化を計算する。電位-pH 図中には H<sub>2</sub>O、H+の安定領域は示さないので、それらの生成反 応式は書く必要はない。

_	$n_{Zn2+} Zn^{2+}$	$+ n_{\rm H^+} {\rm H^+} +$	$-n_{\rm e}  {\rm e} + n_{\rm H}$	$_{2O}$ H <sub>2</sub> O = X	$\Lambda G^{2}$ (298 K)
化学種 X	$n_{Zn2+}$	$n_{\mathrm{H}^+}$	<i>n</i> e	$n_{ m H2O}$	$/ kJ mol^{-1}$
Zn (s)	1	0	2	0	147.06
$Zn^{2+}$	1	0	0	0	0
ZnO (s)	1	-2	0	1	65.889
ZnOH+	1	-1	0	1	54.089
$HZnO_2^-$	1	-3	0	2	164.238
$Zn(OH)_2(s)$	1	-2	0	2	67.508
$Zn(OH)_3^-$	1	-3	0	3	164.227
$Zn(OH)_4^{2-}$	1	-4	0	4	237.056

表 3 各反応式の係数と標準ギブズエネルギー変化

2.4 Chesta データファイルの作成

上記の情報をもとに Chesta データファイルを作成する。

1. まず、Microsoft Excel で"データファイル作成ウィザード 3.xls"を開き、マクロを有効 にする。

データファイル/作成ウィザー	*3.xls [互換モード] - Microsoft Excel						
<b>ファイル</b> ホーム 挿入 ページレイアウト 数式 データ 校閲 表示	開発 アドイン 🛛 🖓 🗆 🗗 🗙						
MS P∃>>>     Y     20 · A* A*     ≡     ≡     ≅       B) dib     B     I     U · I     I     20 · A* A*     I     ≡	<ul> <li>標準</li> <li>● 挿入</li> <li>Σ</li> <li>● 挿入</li> <li>第</li> <li>●</li> <l< td=""></l<></ul>						
	a 数値 <sup>1</sup> a スダイル TCル 梅葉						
A1 ▼ Chesta Data File Creation Wizard Ver. 3 / Chesta データファイル作成ウィザード Ver. 3							
A B C D E F	GHIJKLMN						
1 Chesta Data File Creation Wizard Ver. 3	/ Chesta データファイル作成ウィザード Ver. 3 🛛 🗌						
2 *Please enable macros. / マクロを有効に	してください。						
3 Author: Naoyuki Hatada							
4 Date: Sep. 9, 2011							
っ 6 Language setting 7 言語設定 データファイル作成	standard chemical species 標準化学種の変換						
9							
IN Creation Wizard / 2							

2. 言語選択画面が現れるので、言語を選択する。



3. "データファイル作成"ボタンをクリックし、現れた画面で "プールベ図 (E-pH 図)" を選択して "Next" をクリックする。



4. 使用する軸の設定を入力し、"OK"をクリックする。

データファイ	イル作成ウィザー	l <sup>×</sup> - 2				23				
えのカニお										
未切べた数	糸の次元数を指定してくたさい。									
	4 😴									
系のデータは	が与えられた温度を 109.15 κ	指定してください。								
	.30.10 K									
各軸について	て、相の名前、軸の	らベル、軸の種類、	下限値、上限値を指定し	してください。						
## 1	相の名前 	軸ラベル	軸種類		下限	上限				
単田	Zn[2+]	log aźn[2+]	log)古重	<u> </u>	-20	U				
車由 2	H[+]	рН	-log活量	•	0	14				
■曲 3	e	E	電位 [eV]	•	-1	1				
車由 4	H2O	log aH2O	log活量	•	0	0.01				
車由 5	L[-2]	log aL	log活量	-	-100	0				
温度変更換	繋作(こ対応させます)	<i>ከ</i> ?								
④ 対応さ	5世ない。									
〇 対応さ	きせる。(各相の標準	生成エントロピーが	必要。)							
〇 対応さ	○ 対応させる。(各相の標準生成エンタルピーが必要。)									
図のタイトル	を入力してください。	, ,								
The Zn	-H2O System					□ 自動				
					Back	ок				

5. 新しい Excel 画面が開くので、各化学種(各半反応式)の情報を入力する。

Time	2011/9/9 16:22							
*****	****	*******	*******	******	*******	***		
*このシートの末尾	に 系内にある各	相のデータ	を追記してく	ださい。				
*編集が終わったら		コ てくださ						
*(アステリスクでか	シャンシュレント	行として無な	。 目されます	)				
***********	10.01110-1. <b>~</b> 1		ルCイレの 9 。. ++++++++++++	\ \	*****	***		
****	~~~~~~~~~~~~~~~	*****	******	******	******	*** 		
*								
	ルのハーションや	が作凶余件を	記述しまり	0				
*これらの設定はC	hestaで作凶する	除にも変更	ぐさます。					
*								
	>							
*テータファイルの	バージョンを記述し	ます。現行	バージョンは	は3なので、2	欠の行は変	更する必要	よありません。	
Version	3							
*データファイルの?	欠元を指定します。	<b>b</b>						
Dimension	4							
*図のタイトルを記:	述します。							
DiagramName	The Zn-H2O S	System						
*データファイル中*	で与えられたデー	タが何 К に	おけるものフ	なのかを記述	述します。			
Т	298.15							
*座標軸のラベルを	、次元数だけ順に	「指定します	•					
AxisLabel	log aZn[2+]	рН	E	log aH2O				
*座標軸のタイプを	次元数だけ順に	指定します	 log(活量)連	由 −> 'loga'	-log(活量)j	軸 -> 'pL' :	エネルギー[kJ]	]軸 -> ′k,
		nl	F					
*各座標軸に対応す	よる相の名前を順	に指定しま	╡	Togu				
Composition abel	7n[2+]		•	H20				
→ 久 広 栖 前 の 下 阳 が		*	•	1120				
		9 0	_1	•				
LOWERLIMIL	-20	<b></b>						
	但を順に拍圧しま	9 。		0.01				
UpperLimit	U • • • • • • • •			0.01				
*ナータファイルか;	品度変更に対応し	ているかと	つかを記述し	<b>ょす。</b>			<u> </u>	<b>L</b> \
*'0' -> 温度変更ま	『対応 ´1´−> 温	芟変更对応	(エントロヒ・	一指定)	2′-> 温度多	と史対応(エ	ンタルヒー指定	E)
Tvariable	0							
*								
*ここに系内にある	各相の熱力学デ-	ータを記述し	ます。					
*								
*各相のデータをそ	れぞれ一行で記述	述します。						
*まず、ある相 1 m	olが、各座標軸に	対応する相	から生成す	る反応式を	思い浮かべ	ます。		
*例: 2 Zn[2+] + 3	H[+] -> 相 X							
*この反応に対応す	トる標準ギブズエス	ネルギー変 イ	上(kJ/mol)の	つ値も用意し	ます。			
*そして、相の名前	、反応式の左辺の	)各係数、標	『準ギブズエ	ネルギー変	化(kJ/mol)	、活量シフト	d(log a)(通常	は0)の
*例: Phase, 相X, 2	, 3, 0, 0, -30, 0							
*	相の名前	Zn[2+]	H[+]	е	H2O	dGf*	d(log a)	
Phase	7n[2+]	1	0	0	0	0	0	
*Phase	H[+]	0	1	0	0	Ő	0	
111000				•			•	
*Phase	L	0	0	1	0		0	
*Phase	e H2O	0	0	1	0	0	0	
*Phase *Phase *二の下に	e H2O ちろを坦のご…/	0 0 (本司)は1 主:	0 0	1	0	0	0	
*Phase *Phase *この下に、系内に	e H2O ある各相のデータ	0 0 を記述しま	0 0 す。	1	0	0	0	
*Phase *Phase *この下に、系内に Phase	e H2O ある各相のデータ Zn (s)	0 0 を記述しま 1	0 0 す。 0	1 0 2	0	0 0 147.06	0	
*Phase *Phase *この下に、系内に Phase Phase	e H2O ある各相のデータ Zn O (s) て O (s)	0 0 を記述しま 1 1	0 0 す。 0 -2	1 0 2 0	0 1 0 1	0 0 147.06 65.889	0	
*Phase *Phase *この下に、系内に Phase Phase Phase	e H2O ある各相のデータ Zn (s) ZnO (s) ZnOH[+]	0 0 を記述しま 1 1	0 0 5 -2 -1	1 0 2 0 0	0 1 0 1 1	0 0 147.06 65.889 54.089	0 0 0 0	
*Phase *Phase *この下に、系内に Phase Phase Phase	e H2O ある各相のデータ Zn (s) ZnO (s) ZnOH[+] HZnO2[-]	0 0 を記述しま 1 1 1	0 0 5 -2 -1 -3	1 0 2 0 0 0	0 1 0 1 1 2	0 0 147.06 65.889 54.089 164.238	0 0 0 0 0 0	
*Phase *Phase *この下に、系内に Phase Phase Phase Phase Phase	e H2O ある各相のデータ Zn (s) ZnO (s) ZnOH[+] HZnO2[-] Zn(OH)2 (s)	0 0 を記述しま 1 1 1 1 1	0 0 す。 -2 -1 -3 -2	1 0 2 0 0 0 0 0	0 1 0 1 1 2 2	0 0 147.06 65.889 54.089 164.238 67.508	0 0 10 0 0 0 0 0 0	
*Phase *Phase *この下に、系内に Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase	e H2O ある各相のデータ Zn (s) ZnO (s) ZnOH[+] HZnO2[-] Zn(OH)2 (s) Zn(OH)3[-]	0 0 を記述しま 1 1 1 1 1 1	0 0 す。 -2 -1 -3 -2 -3	1 0 2 0 0 0 0 0 0 0 0	0 1 0 1 1 2 2 3	0 0 147.06 65.889 54.089 164.238 67.508 164.227	0 0 10 0 0 0 0 0 0 0 0 0	
*Phase *Phase *この下に、系内に Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase	e H2O ある各相のデータ Zn (s) ZnO (s) ZnOH[+] HZnO2[-] Zn(OH)2 (s) Zn(OH)3[-] Zn(OH)4[2-]	0 0 を記述しま 1 1 1 1 1 1 1	0 0 す。 -2 -1 -3 -2 -3 -4	1 0 2 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	0 1 0 1 1 2 2 3 4	0 0 147.06 65.889 54.089 164.238 67.508 164.227 237.056	0 0 10 0 10 0 10 0 10 0 10 0 10 0	

### 6. CSV 形式で保存する。

### 2.5 Chesta による描画

## 1. 保存した CSV ファイルを Chesta で開き、"次へ"をクリックする。

開く 保存 現在のファイ	JL C:¥Users¥Naoyuki¥Do	cuments¥Ch	iesta Data Fil	es¥配位子を治	ኇያንE-pHl⊠l¥Zn-⊦	120
ル内容 (Chestaが認識するのは色のついた	行のみです。)					
		1	1 1			1
Time	2011/9/9 16:22					-
*****						
*このシートの末尾に、糸内にある各相のデ						
*編集が終わったら、CSV形式で保存して〈シ						
*(アステリスクで始まる行はコメント行として						
********						
*						
*ここにデータファイルのバージョンや作図条作						
*これらの設定はChestaで作図する際にも3						
*						
*データファイルのバージョンを記述します。ヨ						
Version	3					
*データファイルの次元を指定します。						
Dimension	4					
*図のタイトルを記述します。						
DiagramName	The Zn-H2O System					
*データファイル中で与えられたデータが何к						
т	298.15					

 描画設定を行う。X軸に pH、Y軸に E、投影軸に log a(Zn<sup>2+</sup>)を選択する。考慮するパ ラメータ(=切断軸)に log a(H<sub>2</sub>O)を選択する(これを選択しないと、半反応式に H<sub>2</sub>O が含まれない化学種しか描画されない)。考慮する相を選択し、"次へ"をクリックする。

	X 軸:pH
座標軸	Y 軸: <i>E</i>
	投影軸: log a(Zn <sup>2+</sup> )
パラメータ(切断軸)	$\log a(H_2O)$



3. 電位-pH 図が表示される。



4. "環境設定・図の切断"画面で、log a(H<sub>2</sub>O) = 0 に設定する。

(弾) Chesta 3.2.6.9 - Zn-H2O System.csv ツール(T) ヘルプ (H)	
表示         相の設定         環境設定・図の切断         各種出力           パラメータ設定         設定対象	
T [K] 298.15 log aH2O 0 値 0 適用	
・         パラメータ操作トラックパー(変更は即適用されます)         0.01           図の切断          図を切断するには、切断する面の式を下に入力し「追加」ボタンを押します。           1 pH +         0 E +         0 log aZn[2+] =         0 ig           切断面リスト	道加
い助面の移動(定数項の変更) 適用 -120 定数項操作トラックバー(変更は即適用されます) 20	
展る	次へ

5. 溶存化学種の活量を変えるときは、"相の設定"画面で溶存化学種をまとめて選択し、 log 活量の値を変更する。

Chesta 3.2.6.9 - Zn-H2O System.csv									
-,µ( <u>I</u> ) ∧,µ;	ール(I) ヘルプ ( <u>H</u> )								
長示 相の設定	環境	設定・図の切り	斤 各種出力						
個別設定									
設定対象 (Ctrl的		复数選択可) (d	G0, dH0, dS0 (2	tデータファイルで <del>-</del>	与えられた温	度における値で	ਾਰ)		
相の名前	色	dG0 (kJ/mol)	dH0 (kJ/mol)	dS0 (J/mol K)	log活量	dG (kJ/mol)	表示方法	相名表示	強制
Zn[2+]		0			-4	-22.832	塗りつぶし	する	しない
Zn (s)		147.06			0	147.06	塗りつぶし	する	しない
ZnO (s)		65.889			0	65.889	塗りつぶし	する	しない
ZnOH[+]		54.089			-4	31.257	塗りつぶし	する	しない
HZnO2[-]		164.24			-4	141.41	塗りつぶし	する	しない
Zn(OH)2 (s)		67.508			0	67.508	塗りつぶし	する	しない
Zn(OH)3[-]		164.23			-4	141.39	塗りつぶし	する	しない
Zn(OH)4[2-]		237.06			-4	214.22	塗りつぶし	する	しない
•		1					1		Þ
名前		诸田	缶	আছে	<b>F</b>	表示方法	☑ 相么事:	Ŧ	
-0.80	_		- 			🧿 塗りつぶし		_	
dG0		適用	dG	適用	Ħ	● 輪郭のみ	□ 強制表フ	т	
dH0		清田	loo活量	-4 jāt	B	(二) 無し	📃 計算がら	除外	
		<u>/////</u>	log/alse			0.1.10			
dS0		適用							
1		~			1				
-10 log	活量	栗作トラックバー	(変更は即適用	まされます〉 [	5				



3 Zn - H<sub>2</sub>O - CN 系電位-pH 図の作成手順

3.1 熱力学データの収集

系に属する化学種を列挙し、それらの標準生成ギブズエネルギーを収集する。Zn-H<sub>2</sub>O-CN 系の場合、表 4のようになる。

	み)[1,2]
化学種	$\Delta_{\rm f}G^\circ~(298~{\rm K})~/~{\rm kJ~mol^{-1}}$
CN-	172.4
HCN (ao)	119.7
$Zn(CN)_2(s)$	1212
$Zn(CN)_4^{2-}$	446.9

表 4 Zn-H<sub>2</sub>O-CN 系化学種の標準生成ギブズエネルギー(表 1に含まれないものの

3.2 使用するポテンシャル軸の決定

電位-pH 図中で使用するポテンシャル軸を決める。すなわち、系を構成する基本単位となる

<sup>2</sup> W. M. Latimer, "The oxidation states of the elements and their potentials in aqueous solutions," 2<sup>nd</sup> ed., Prentice-Hall Inc. Eaglewood Cliffs, N.J., 1952.

化学種(標準化学種)を決める。今回の Zn – H<sub>2</sub>O – CN 系電位-pH 図の場合は、例えば表 5のようにすることができる。

表	5	電位-pH 図作成に	使用するポテンシャル軸
	_	標準化学種	ポテンシャル軸
	_	е	Е
		$\mathrm{H}^+$	pН
		$Zn^{2+}$	$\log a(\mathrm{Zn}^{2+})$
		$CN^-$	$\log a(CN^{-})$
		$H_2O$	$\log a(H_2O)$

3.3 半反応式の作成

系内の各化学種(電位-pH図中に安定領域が現れる可能性がある化学種)が標準化学種から 生成する半反応式を表 6 のように書き下す。また、それらの反応の標準ギブズエネルギー 変化を計算する。電位-pH 図中には H2O、H+の安定領域は示さないので、それらの生成反 応式は書く必要はない。

	$n_{\mathrm{Zn2+}} \mathrm{Zn^2}$	$\Lambda G^{\circ}$ (298 K)					
化学種 X	$n_{7-2}$	$\mathcal{D}_{TT}$	n.	$n_{\rm H2O}$	$n_{ m CN-}$		
	TTZII2+	<b>11</b> 11+	116	11/120		$/ kJ mol^{-1}$	
Zn (s)	1	0	2	0	0	147.06	
$Zn^{2+}$	1	0	0	0	0	0	
ZnO (s)	1	-2	0	1	0	65.889	
$ZnOH^+$	1	-1	0	1	0	54.089	
$HZnO_2^-$	1	-3	0	2	0	164.238	
$Zn(OH)_2(s)$	1	-2	0	2	0	67.508	
$Zn(OH)_3^-$	1	-3	0	3	0	164.227	
$Zn(OH)_4^{2-}$	1	-4	0	4	0	237.056	
CN <sup>-</sup>	0	0	0	0	1	0	
HCN (ao)	0	1	0	0	1	-52.7	
$Zn(CN)_2(s)$	1	0	0	0	2	-76.74	
$Zn(CN)_4^{2-}$	1	0	0	0	4	-95.64	

表 6 各反応式の係数と標準ギブズエネルギー変化

3.4 Chesta データファイルの作成

上記の情報をもとに Chesta データファイルを作成する。

Time	2011/9/9 11:59								
*****	****	******	*******	******	******	**			
*このシートの支屋に 系内にある冬相のデータを追引 てください									
*編集が終わったら		$ \tau(t)\rangle$							
*(アステリスクで始	キス行けつメントダ	テレイ毎祖	。 されます )						
*********	10.01110-1/	1000元元	*****	*****	*****	**			
¥									
* *!-ニーカファイ	「II の バーごっこ」	に回冬みた							
*ここに) ータンパイ	ルのハーフョンで		記述しより。 ミキェナ						
* にんらの設定はい	nesta CTF区 9 句际		2590						
*									
	× × - > + = ¬ · +   ·		» <u> </u>		のに止ます	マナスシェル			
*ナーダノアイルの/	ハーションを記述し:	ま9。現行/	いーションは	3なので、次	の行は変更	き 9 る 必 安 に	よめりません	•	
Version									
*ナーダノアイルの3	火元を指定します。								
Dimension	5								
*図のタイトルを記述	正します。								
DiagramName	The Zn-H2O-C	N System							
*データファイル中で	で与えられたデータ	が何 К にお	らけるものな	のかを記述	します。				
Т	298.15								
*座標軸のラベルを	、次元数だけ順に	指定します。							
AxisLabel	log aZn[2+]	pН	E	log aH2O	log aCN[-	-]			
*座標軸のタイプを、	、次元数だけ順に打	旨定します。	log(活量)軸	-> 'loga' -	-log(活量)劑	且->'pL' ユ	ニネルギー[k	J]軸 -> 'kJ'	エネルギー
AxisType	loga	pL	E	loga	loga				
*各座標軸に対応す	する相の名前を順(	こ指定します	-						
CompositionLabel	Zn[2+]	H[+]	e	H2O	CN[-]				
*各座標軸の下限(	直を順に指定します								
LowerLimit	-20	0	-1	0	-20				
*各座標軸の上限(	直を順に指定します	-							
UpperLimit	0	14	1	0.01	0				
*データファイルが湯	温度変更に対応して	ているかどう	かを記述し	ます。					
*'0'->温度変更非	■対応 '1'-> 温度	変更対応(	エントロピー	-指定) '2'	-> 温度変	更対応(エン	ノタルピー指	定)	
Tvariable	0								
Tvariable	0								
Tvariable *	0								
Tvariable * *ここに系内にある	0  各相の熱力学デー	 -タを記述しま	 ます。						
Tvariable * *ここに系内にある *	0 各相の熱力学デー		 ます。 	 					
Tvariable * *こに系内にある ** *各相のデータをそ	0 各相の熱力学デー れぞれ一行で記述		 ます。	 					
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 m	0 各相の熱力学デー れぞれー行で記述 olが、各座標軸に3	タを記述しる	 ます。 	 	い浮かべる				
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 mc *例: 2 H[+] + 3 7n	0 各相の熱力学デー れぞれ一行で記述 olが、各座標軸にす [2+] -> 相 X	タを記述しま します。 対応する相か	 ます。  いら生成する	  3反応式を思	い浮かべる	ت¢.			
Tvariable * *ここに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 md *例: 2 H[+] + 3 Zn *- の反応に対応す	0 各相の熱力学デー ーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーーー	タを記述しま します。 対応する相た ルギー変化	ます。 ます。 から生成する (k.l/mol)の		ます.	٤¢.			
Tvariable * *ここに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 m *の反応に対応す *そして 相の名前	0 各相の熱力学デー れぞれー行で記述 olが、各座標軸にな [2+] -> 相 X ~る標準ギブズエネ 反応式の左辺の	- タを記述しま します。 対応する相な ルギー変化 冬係数 標	ます。 	 5反応式を思 値も用意しる なルギー変イ	lい浮かべま ます。 k(k,1/mol)	ぼす。	d(log a)(通	堂(±0)の順[:	- 記述1.主
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 m *の反応に対応す *そして、相の名前 *のとわち。相X 2	0 各相の熱力学デー れぞれ一行で記述 olが、各座標軸に [2+] -> 相 X る原準準ギブズエネ 、反応式の左辺の 3 0 0 0 -30 0	タを記述しま します。 対応する相が ルギー変化 各係数、標	ます。 いら生成する (kJ/mol)の 準ギブズエス	 3反応式を思 値も用意しる ネルギー変f	えい浮かべき ます。 Ł(kJ/mol)、	きす。 活量シフト	d(log a)(通	常は0)の順に	こ記述します
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 m *の反応に対応す *そして、相の名前 *例: Phase, 相X, 2	0 各相の熱力学デー れぞれ一行で記述 olが、各座標軸に [2+] -> 相 X ~る標準ギブズエネ 、反応式の左辺の 、3, 0, 0, 0, -30, 0	タを記述しま します。 対応する相 ルギー変化 各係数、標	ます。 から生成する (kJ/mol)の 準ギブズエス	 3反応式を思 値も用意しる ネルギー変イ	えい浮かべる ます。 ヒ(kJ/mol)、	ます。 活量シフト	d(log a)(通	常は0)の順に	こ記述します
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 m *の反応に対応す *そして、相の名前 *例: Phase, 相X, 2 *	0 各相の熱力学デー れぞれ一行で記述 olが、各座標軸に [2+] -> 相 X る標準ギブズエネ 、反応式の左辺の 、3,0,0,0,-30,0 相の名前	タを記述しま します。 対応する相 ルギー変化 各係数、標 7n[2+]	ます。 	 5反応式を思 値も用意しま ネルギー変イ	えい浮かべま ます。 と(kJ/mol)、 H2O	たす。 活量シフト	d(log a)(通 dGf#	常は0)の順に d(log a)	こ記述しまで
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 mc *例: 2 H[+] + 3 Zn *この反応に対応す *そして、相の名前 *例: Phase, 相X, 2 * Phase	0 各相の熱力学デー れぞれ一行で記述 olが、各座標軸に5 [2+] -> 相 X -る標準ギブズエネ 、反応式の左辺の , 3, 0, 0, 0, -30, 0 相の名前 Zp (c)	タを記述しま します。 対応する相 ルギー変化 各係数、標 Zn[2+]	ます。 から生成する (kJ/mol)の 準ギブズエ= H[+]	 5反応式を思 値も用意しま ネルギー変イ e	ます。 と(kJ/mol)、 H2O	Eす。 活量シフト CN[-]	d(log a)(通 dGf*	常は0)の順に d(log a)	こ記述します
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 ma *何: 2 H[+] + 3 Zn *この反応に対応す *そして、相の名前 *例: Phase, 相X, 2 * Phase Phase	0 各相の熱力学デー れぞれ一行で記述 olが、各座標軸に5 [2+] -> 相 X - る標準ギブズエネ 、反応式の左辺の 、3、0、0、0、-30、0 相の名前 Zn (s) Zn (s)	タを記述しま します。 対応する相 ルギー変化 各係数、標 Zn[2+] 1	ます。 から生成する (kJ/mol)の 準ギブズエ= H[+] 0	 5反応式を思 値も用意しま ネルギー変イ e 2 0	ます。 と(kJ/mol)、 H2O 0	ます。 活量シフト CN[-]	d(log a)(通 dGf* 147.06	常は0)の順に d(log a) 0	こ記述します
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 md *例: 2 H[+] + 3 Zn *この反応に対応す *そして、相の名前 *例: Phase, 相X, 2 * Phase Phase Phase	0 各相の熱力学デー れぞれ一行で記述 olが、各座標軸に対 [2+] -> 相 X る標準ギブズエネ 、反応式の左辺の ,3,0,0,0,-30,0 相の名前 Zn (s) Zn (s)	タを記述しま します。 対応する相が ルギー変化 各係数、標 Zn[2+] 1 1	ます。 から生成する (kJ/mol)の 準ギブズエス H[+] 0 0	 5反応式を思 値も用意し れルギー変f e 2 0	ます。 ます。 と(kJ/mol)、 H2O 0 0	Eす。 活量シフト CN[-] 0	d(log a)(通 dGf* 147.06 0	常は0)の順に d(log a) 0 0	-記述します
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 md *例: 2 H[+] + 3 Zn *この反応に対応す *そして、相の名前 *例: Phase,相X, 2 * Phase Phase Phase Phase Phase	0 各相の熱力学デー れぞれ一行で記述 blが、各座標軸に対 [2+] -> 相 X る標準ギブズエネ 、反応式の左辺の 、3,0,0,0,-30,0 相の名前 Zn(s) Zn[2+] ZnO(s) ZnO(s)	タを記述しま します。 対応する相が ルギー変化 各係数、標 Zn[2+] 1 1	ます。 いら生成する (kJ/mol)の 準ギブズエス H[+] 0 -22 -1	 5反応式を思 値も用意し ネルギー変1 e 2 0 0	えい浮かべま ます。 と(kJ/mol)、 H2O 0 1	Eす。 活量シフト CN[-] 0 0	d(log a)(通 dGf* 147.06 0 65.889	常は0)の順に d(log a) 0 0	-記述します
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 md *例: 2 H[+] + 3 Zn *の反応に対応す *そして、相の名前 *例: Phase,相X, 2 * Phase Phase Phase Phase Phase	0 各相の熱力学デー れぞれー行で記述 obが、各座標軸にジ [2+] -> 相 X - る標準ギブズエネ 、反応式の左辺の 、3、0、0、0、-30、0 相の名前 Zn (s) Zn[2+] ZnO (s) ZnOH[+] UT= 02[ 1	タを記述しま します。 対応する相が ルギー変化 各係数、標 Zn[2+] 1 1 1	ます。 いら生成する (kJ/mol)の 準ギブズエス H[+] 0 -2 -1	 5反応式を思 値も用意しま トルギー変1 e 2 0 0	ます。 ます。 と(kJ/mol)、 H2O 0 1	Eす。 活量シフト CN[-] 0 0	d(log a) (通 dGf* 147.06 0 65.889 54.089	常は0)の順に d(log a) 0 0 0	こ記述します
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 mo *例:2 H[+] + 3 Zn *この反応に対応す *そして、相の名前 *例: Phase,相X, 2 * Phase Phase Phase Phase Phase Phase	0 各相の熱力学デー れぞれ一行で記述 olが、各座標軸にジ [2+] -> 相 X る標準ギブズエネ 、反応式の左辺の 3,0,0,0,-30,0 相の名前 Zn(s) Zn[2+] ZnO(s) ZnO[+] HZnO2[-] 	タを記述しま します。 対応する相が ルギー変化 各係数、標 Zn[2+] 1 1 1	ます。 から生成する (kJ/mol)の 準ギブズエス H[+] 0 -2 -1 -3	 5反応式を思 値も用意しま トルギー変f e 2 0 0 0	えい浮かべき ます。 と(kJ/mol)、 H2O 0 1 1	Eす。 活量シフト CN[-] 0 0 0	d(log a) (通 dGf* 147.06 0 65.889 54.089 164.238	常は0)の順に d(log a) 0 0 0 0	-記述しまで
Tvariable * *ここに系内にある * *名相のデータをそ *まず、ある相 1 m *の反応に対応す *そして、相の名前 *そして、相の名前 *例: Phase, 相X, 2 * Phase Phase Phase Phase Phase Phase	0 各相の熱力学デー れぞれー行で記述 olが、各座標軸に5 [2+] -> 相 X る標準ギブズエネ 、反応式の左辺の 3,0,0,0,-30,0 相の名前 Zn(s) Zn[2+] ZnO(s) ZnOH[+] HZnO2[-] Zn(OH)2(s)	タを記述しま します。 対応する相が ルギー変化 各係数、標 Zn[2+] 1 1 1 1	ます。 から生成する (kJ/mol)の 準ギブズエス H[+] 0 -2 -1 -3 -2	 5反応式を思 値も用意しま ネルギー変イ e 2 0 0 0 0 0	はい浮かべき     ます。     よ(kJ/mol)、     H2O     0     1     1     2	Eす。 活量シフト CN[-] 0 0 0 0	d(log a) (通 dGf* 147.06 0 65.889 54.089 164.238 67.508	常は0)の順に d(log a) 0 0 0 0	こ記述します
Tvariable * *ここに系内にある * *名相のデータをそ *まず、ある相 1 m *の反応に対応す *そして、相の名前 *例: Phase, 相X, 2 * Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase	0 各相の熱力学デー れぞれ一行で記述 olが、各座標軸に [2+] -> 相 X る標準ギブズエネ 、反応式の左辺の 3,00,0,-30,0 相の名前 Zn(s) Zn[2+] ZnO(s) ZnOH[+] HZnO2[-] Zn(OH)2(s) Zn(OH)3[-] Zn(OH)3[-] Zn(OH)3[-]	タを記述しま します。 対応する相が ルギー変化 各係数、標 Zn[2+] 1 1 1 1 1	ます。 いら生成する (kJ/mol)の 準ギブズエス H[+] 0 -2 -1 -3 -2 -3 -2 -3	 3反応式を思 値も用意しま ネルギー変イ e 2 0 0 0 0 0 0 0 0	えい浮かべき ます。 と(kJ/mol)、 H2O 0 1 1 2 2 3 3	Eす。 活量シフト CN[-] 0 0 0 0 0	d(log a) (通 dGf* 147.06 0 65.889 54.089 164.238 67.508 164.227	常(は0)の順( d(log a) 0 0 0 0 0 0	こ記述しまで
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 m *例: 2 H[+] + 3 Zn *この反応に対応す *そして、相の名前 *例: Phase, 相X, 2 * Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase	0 各相の熱力学デー れぞれ一行で記述 」が、各座標軸にジ [2+] -> 相 X る標準ギブズエネ 、反応式の左辺の 3,00,0,-30,0 相の名前 Zn(s) Zn[2+] ZnO(s) ZnO(s) ZnOH[+] HZnO2[-] Zn(OH)2(s) Zn(OH)3[-] Zn(OH)4[2-]	タを記述しま します。 対応する相加 ルギー変化 各係数、標 Zn[2+] 1 1 1 1 1 1 1	ます。 から生成する (kJ/mol)の 準ギブズエス H[+] 0 -2 -1 -3 -2 -3 -4		えい浮かべま ます。 と(kJ/mol)、 H2O 0 1 1 2 2 3 4	Eす。 活量シフト CN[-] 0 0 0 0 0 0	d(log a) (通 dGf* 147.06 0 65.889 54.089 164.238 67.508 164.227 237.056	常は0)の順に d(log a) 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	こ記述しまで
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 ma *例: 2 H[+] + 3 Zn *この反応に対応す *そして、相の名前 *例: Phase,相X, 2 * Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase	0 各相の熱力学デー れぞれ一行で記述 向が、各座標軸に対 [2+] -> 相 × 「る標準ギブズエネ 、反応式の左辺の 3,0,0,0,-30,0 相の名前 Zn(s) Zn(2+] ZnO(s) ZnO(s) ZnO(+] HZnO2[-] Zn(OH)2(s) Zn(OH)3[-] Zn(OH)4[2-] CN[-]	タを記述しま します。 対応する相が ルギー変化 各係数、標 Zn[2+] 1 1 1 1 1 1 1 0	ます。 から生成する (kJ/mol)の 準ギブズエス H[+] 0 0 -2 -1 -1 -3 -2 -3 -4 0	 5反応式を思 値も用意し ネルギー変化 e 2 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	ます。 ます。 と(kJ/mol)、 H2O 0 1 1 2 2 3 4 0	Eす。 活量シフト CN[-] 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1	d(log a)(通 dGf* 147.06 0 65.889 164.238 67.508 164.227 237.056 0	常はの)の順に d(log a) 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	こ記述します
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 md *例: 2 H[+] + 3 Zn *この反応に対応す *そして、相の名前 *例: Phase,相X, 2 * Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase Phase	0 各相の熱力学デー れぞれ一行で記述 向が、各座標軸に5 [2+] -> 相 × る標準ギブズエネ 、反応式の左辺の 、3、0、0、0、-30、0 相の名前 Zn(s) Zn[2+] ZnO(s) ZnO[+] HZnO2[-] Zn(OH)2(s) Zn(OH)3[-] Zn(OH)4[2-] CN[-] HCN	タを記述しま します。 対応する相が ルギー変化 各係数、標 Zn[2+] 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 0 0 0	ます。 から生成する (kJ/mol)の 準ギブズエス H[+] 0 -2 -1 -3 -3 -2 -3 -4 0 1	 5反応式を思 値も用意し ネルギー変f e 2 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	ます。 ます。 と(kJ/mol)、 H2O 0 1 1 1 2 3 4 0 0	Eす。 活量シフト CN[-] 0 0 0 0 0 0 0 1 1	d(log a) (通 dGf* 147.06 0 65.889 54.089 164.238 67.508 164.227 237.056 0 -52.7	常は0)の順に d(log a) 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	-記述します
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 md *例: 2 H[+] + 3 Zn *この反応に対応す *そして、相の名前 *例: Phase,相X, 2 * Phase	0 各相の熱力学デー れぞれー行で記述 obが、各座標軸にジ [2+] -> 相 X る標準ギブズエネ 、反応式の左辺の 、3、0、0、0、-30、0 相の名前 Zn (s) Zn[2+] ZnO (s) Zn[2+] ZnO (s) ZnOH[+] HZnO2[-] Zn(OH)3[-] Zn(OH)3[-] Zn(OH)4[2-] ON[-] HCN Zn(CN)2 (s)	タを記述しま します。 対応する相ガ ルギー変化 各係数、標 Zn[2+] 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	ます。 いら生成する (kJ/mol)の 準ギブズエス H[+] 0 -2 -1 -3 -3 -4 0 1 0	 5反応式を思 値も用意し ネルギー変1 e 2 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	ます。 ます。 と(kJ/mol)、 H2O 0 1 1 1 2 3 4 0 0 0 0	Eす。 活量シフト CN[-] 0 0 0 0 0 0 0 1 1 1	d(log a) (通 dGf* 147.06 0 65.889 54.089 164.238 67.508 164.227 237.056 0 -52.7 -76.74	常は0)の順に d(log a) 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	-記述します
Tvariable * *こに系内にある * *各相のデータをそ *まず、ある相 1 md *例: 2 H[+] + 3 Zn *の反応に対応す *そして、相の名前 *例: Phase,相X, 2 * Phase	0 各相の熱力学デー れぞれー行で記述 olが、各座標軸にジ [2+] -> 相 X 「る標準ギブズエネ 、反応式の左辺の 、3,0,0,0,-30,0 相の名前 Zn(s) Zn[2+] ZnO(s) Zn[2+] ZnO(H)2[-] Zn(OH)2(s) Zn(OH)4[2-] HCN Zn(CN)2(s) Zn(CN)4[2-]	タを記述しま マクを記述します。 対応する相ガ ルギー変化 各係数、標 Zn[2+] 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	ます。 	 5反応式を思 値も用意し ネルギー変1 e 2 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	ます。 ます。 と(kJ/mol)、 H2O 0 1 1 1 2 2 3 4 0 0 0 0 0 0 0	Eす。 活量シフト CN[-] 0 0 0 0 0 1 1 1 2 4	d(log a) (通 dGf* 147.06 0 65.889 54.089 164.238 67.508 164.227 237.056 0 -52.7 -76.74 -95.64	常(は0)の順( は(log a) 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	-記述しま?

- 3.5 Chesta による描画
- 1. 保存した CSV ファイルを Chesta で開き、"次へ"をクリックする。

式に  $H_2O$  を含まれない化学種しか描画されない)。考慮する相を全て選択し、"次へ" をクリックする。

	$X \equiv \log a(CN^{-})$			
应每十	Y 軸:pH			
产生标 轴	Z 軸: $E$			
	投影軸:log a(Zn <sup>2+</sup> )			
パラメータ(切断	$\log a(H_2O)$			
軸)				



- 3. 電位-pH 図が表示される。
- 4. "環境設定・図の切断"画面で、log a(H<sub>2</sub>O) = 0 に設定する。

 相の設定"画面で溶存 Zn 化学種(Zn<sup>2+</sup>、ZnOH<sup>+</sup>、HZnO<sub>2</sub><sup>-</sup>、Zn(OH)<sub>3</sub><sup>-</sup>、 Zn(OH)<sub>4</sub><sup>2-</sup>、Zn(CN)<sub>4</sub><sup>2-</sup>)をまとめて選択し、log 活量の値を変更する。また、配位子 (CN<sup>-</sup>、HCN (ao))をまとめて選択し、log 活量の値を変更する。このとき、必ず<u>溶存</u> Zn 化学種濃度に対して、配位子濃度が過剰になるようにする。 また、配位子の表示方 法を "無し"にし、相名表示のチェックをはずす。必要に応じて、相の色を変更す る。

Chesta 3.2.6.9 ール(T) へルフ	- Z	n-H2O-CN S	ystem.csv			and the second second			
示 相の設定 圖別設定	環坊	, 観定・図の切り	析 各種出力						
設定対象 (Ctrlギ 相の名前	一C7 色	現 (d d G0 (kJ/mol)	GO, dHO, dSO (2 dHO (kJ/mol)	↓テ ータファイルで- dS0 (J/mol K)	らえられた温 log活量	L度における1直( dG (kJ/mol)	:す) 表示方法	相名表示	強 1
ZnO (s) ZnOH[+]		65.889 54.089			0	65.889 42.673	塗りつぶし 塗りつぶし 注りつぶし	する する オろ	したした
Zn(OH)2 (s) Zn(OH)3[-]		67.508 164.23			-2 0 -2	67.508 152.81	塗りつぶし 塗りつぶし 塗りつぶし	ತನ ತನ	したした
Zn(OH)4[2-] CN[-] HCN		237.06 0 -52.7			-2 0 0	225.64 0 -52.7	塗りつぶし 無し 無し	する しない しない	Ut = Ut Ut
Zn(CN)2 (s) Zn(CN)4[2-]		-76.74 -95.64			0 -2	-76.74 -107.06	塗りつぶし 塗りつぶし	する する	した
▲         Ⅲ         ▲           名前         適用         色         変更         表示方法         ■相名表示           dG0         適用         dG         適用         ● 塗りつぶし         ● 強制表示           dH0         適用         log活量         0         適用         ● 無し         ● 計算から除外									
dS0 通用 									
							展	5	次へ



図を回転し、log a(CN<sup>-</sup>) 軸方向に図を見ると、配位子濃度(CN<sup>-</sup> + HCN)が一定の場合の相平衡関係を表す図が得られる。



- 4 データファイルについて
- 4.1 データファイルに含まれる情報

データファイルには、次のような情報が含まれる。

- 図の名前や、座標軸のラベル、座標軸の種類、作図範囲、温度操作の可否など作
   図の際に必要な設定情報
- 標準物質名。系の次元数、温度など系に関する情報
- 系に存在する各相の組成と標準生成ギブズエネルギー、標準生成エントロピー などの熱力学データ
- 4.2 データファイルの形式

Chesta で使用されるデータファイルはコンマ区切りのテキストファイルである。拡 張子は".txt"または".csv"である。データファイルはメモ帳などのテキストエディタまた は Excel などで編集できる。

データファイルは一行ごとが独立して一つの意味を持っている。行の先頭には、その

行が持つ情報の種類を示す識別子が記される。続いて、コンマ区切りで当該情報が記される。また、アステリスク"\*"で始まる行はコメント行とみなされ作図の際には無視される。以下にデータファイルの例を示す。

Version. 3 Dimension, 3 DiagramName, A-B-C 系 AxisLabel,  $\log a(A)$ ,  $\log a(B)$ ,  $\log a(C)$ AxisType, loga, loga, loga CompositionLabel, A, B, C LowerLimit, -20, -20, -20 UpperLimit, 5, 5, 5 T, 298 Tvariable, 1 Phase, A(g), 1, 0, 0, 0, 0, 0 Phase, B(s), 0, 1, 0, 0, 0, 0 Phase, C(s), 0, 0, 1, 0, 0, 0 Phase, AB(s), 1, 1, 0, -30, -5, 0 Phase, AC(s), 1, 0, 1, -60, -3, 0 Phase, A2BC(s), 2, 1, 1, -95, -30, 0

4.3 各識別子の意味

表 7 に識別子の一覧を示す。一つのデータファイル中で各識別子は1回のみ使用で きる。("Phase"識別子は除く)

表 7 識別子一覧

識別子	説明
Version	データファイルのバージョンを記述する。現行バージョン は3である。 (記述例) Version, 3

Dimension	系の次元数を半角整数で指定する。
	(記述例) Dimension, 3
DiagramName	図の名称を記述する。ここで記述された名称は図の下側に
	表示される。作図時に変更することもできる。
	(記述例) DiagramName, A-B-C 系
AxisLabel	各座標軸のラベルを記述する。系の次元数分だけ連続して
	指定する。作図時に変更することもできる。
	(記述例) AxisLabel, log a(A), log a(B), log a(C)
AxisType	各座標軸の種類を指定する。系の次元数だけ連続して指定
	する。 指定可能な種類は"loga", "pL", "kJ", "eV", "E"で,
	それぞれ log (活量) 軸,-log (活量) 軸,エネルギー[kJ]
	軸,エネルギー[eV]軸,電位軸を表す。log の底は 10 であ
	る。
	(記述例) AxisType, loga, pL, E
Commonition Labol	タ应迺軸に対応ナスは八々な記述ナス、ダの次元数だけ演
CompositionLaber	台座惊軸に対応する成方石を記述する。未の久儿数にり建 はして北京ナマ
	(元元194) CompositionLabel, A, B, C
LowerLimit	各座標軸の下限値を指定する。系の次元数分だけ連続して
	指定する。作図時に変更することもできる。
	(記述例) LowerLimit, -20, -20, -20
UpperLimit	各座標軸の上限値を指定する。系の次元数分だけ連続して
	指定する。作図時に変更することもできる。
	(記述例) UpperLimit, 5, 5, 5
Т	データファイルに記述された熱力学データがどの温度(単
	位:K)におけるものなのかを記述する。
	(記述例) T, 298

Tvariableデータファイルが温度操作に対応しているものかどうかを記述する。記述する値は 0, 1, 2 のいずれかで、それぞれ下表のような意味を持つ。

"Tvariable"識別子の値とその意味

値	温度操作への	必要な熱力学データ
	対応	
0	非対応	標準生成ギブズエネルギー
1	対応	標準生成ギブズエネルギーと
		標準生成エントロピー
2	対応	標準生成ギブズエネルギーと
		標準生成エンタルピー

(記述例) Tvariable, 1

 Phase 系内の化学種の名称、組成、標準生成ギブズエネルギー (kJ/mol)、活量シフト3を記述する。温度操作に対応させる ときは、ギブズエネルギー変化の直後に標準生成エントロ ピー (J/mol) または標準生成エンタルピー (kJ/mol) の値 も記述する。"Phase"識別子は化学種の数だけ使用すること ができる。 (記述例) Phase, A2BC(s), 2, 1, 1, -95, -30, 0

参考文献

[1] Donald D. Wagman et al., The NBS tables of chemical thermodynamic properties, J. Phys Chem. Ref. Data, Volume 11, Supplement No.2 (1982).

[2] W. M. Latimer, "The oxidation states of the elements and their potentials in aqueous solutions," 2<sup>nd</sup> ed., Prentice-Hall Inc. Eaglewood Cliffs, N.J., 1952.

3 Chesta で扱う化学種の活量を意図的にずらすために用いることができる。たとえば、 log (活量) = −1 である状態を新たに log (活量) = 0 と定義して扱いたい場合、活量シフト を −1 と指定する。