

TCTI1 - TCS Ti/TiAl-based Alloys Database

<i>Database name:</i>	TCS Ti/TiAl-based Alloys Thermodynamic Database	<i>Database acronym:</i>	TCTI
<i>Database owner:</i>	Thermo-Calc Software AB	<i>Database version:</i>	1.0

TCTI1.0 is a thermodynamic database for Ti- and TiAl- based alloys for use with Thermo-Calc and the add-on Diffusion Module (DICTRA) and Precipitation Module (TC-PRISMA). TCTI is based on the critical evaluation of binary and ternary systems, which enable predictions to be made for multicomponent systems and alloys of industrial importance. A hybrid approach of experiments, first-principles calculations and CALPHAD modeling is used to obtain thermodynamic descriptions of the constituent binary and ternary systems over a wide composition and temperature ranges. The database is compatible with the MOBTI2 TCS Ti-alloys Mobility Database.

The database has been developed in a 23-element framework:

Al	B	C	Co	Cr	Fe	Hf	Mn	Mo	N
Nb	Ni	O	Re	Ru	Si	Sn	Ta	Ti	V
W	Y	Zr							

In total, 236 binary systems and 71 ternary systems are assessed. Phase diagrams of assessed binary and ternary systems can be calculated using the BINARY and TERNARY modules and calculators in Thermo-Calc, respectively. See [Assessed binary systems in full range of composition and temperature](#) and [Assessed ternary systems, mostly in full compositional ranges](#) for details.

TCTI contains a total of 443 solution and intermetallic phases. The GAS phase is rejected by default when retrieving the data from the database; it needs to be manually restored when it is required for a calculation. This document includes a list of all phases and a detailed description of the models, e.g. number of sublattices and constituents on each sub lattice. You can also get this information by using the command `LIST-SYSTEM CONSTITUENT` or `LIST_DATABASE CONSTITUENT` in the TDB module, available in the Console Mode version of Thermo-Calc. See [Phases Included in TCTI1.0](#) and [Models for all the phases included in TCTI1.0](#).

TCTI includes nearly all stable phases in the assessed systems and most important metastable phases that may form in Ti/TiAl-based alloys. The database can be used to calculate various phase diagrams and property diagrams in the assessed systems or even be extrapolated to higher-order systems. The extrapolation to higher-order systems helps to understand the phase equilibria in multicomponent industrial titanium alloys, in order to predict the phase formation, phase fractions and phase compositions or to calculate the driving force of forming a phase.



The extrapolation to higher-order systems might not be valid beyond the Ti-rich region and the Ti-Al vicinity.

The database can also be used to predict solidification behavior of Ti/TiAl-based alloys with the Scheil Gulliver module and calculator in Thermo-Calc. It can also simulate multi-particle precipitation during aging treatment with the Precipitation Module (TC-PRISMA).

The ordered B2 phase with bcc_A2 is modeled with the so-called partition model, which describes an ordered phase and its disordered counterpart using a single Gibbs energy function. This type of description is of importance to predict second order transformations between a disordered phase and its ordered structures.

Also see [Calculation Examples Using TCTI1.0](#) and [References](#) for validation plots and citations.

Assessed binary systems in full range of composition and temperature

Ti	Al	B	C	Co	Cr	Fe	Hf	Mn	Mo	N	Nb	Ni	O	Re	Ru	Si	Sn	Ta	V	W	Y	Zr
Al	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
B		2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
C			2	2	2	2	2	2	2		2	2		2	2	2		2	2	2	2	2
Co				2	2	2	2	2	2		2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
Cr					2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
Fe						2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
Hf							2	2	2		2	2	2	2	2	2		2	2	2	2	2
Mn								2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
Mo									2	2	2	2	2	2	2	2		2	2	2	2	2
N										2	2	2				2		2	2	2		2
Nb											2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
Ni												2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
O													2	2	2	2	2	2	2		2	2
Re														2	2	2		2	2	2	2	2
Ru															2	2	2	2	2	2	2	2
Si																2	2	2	2	2	2	2
Sn																	2		2			2
Ta																		2	2	2	2	2
V																			2	2	2	2
W																				2	2	2
Y																					2	2
Zr																						2

Assessed ternary systems, mostly in full compositional ranges

Ti-Al-B	Ti-Al-C	Ti-Al-Co	Ti-Al-Cr	Ti-Al-Mn	Ti-Al-Mo	Ti-Al-N
Ti-Al-Nb	Ti-Al-O	Ti-Al-Si	Ti-Al-Sn	Ti-Al-Ta	Ti-Al-V	Ti-Al-W
Ti-Al-Zr	Ti-B-Co	Ti-B-Cr	Ti-B-Mo	Ti-B-Nb	Ti-B-Ni	Ti-B-Sn
Ti-B-Ta	Ti-B-V	Ti-B-W	Ti-B-Zr	Ti-C-Cr	Ti-C-Mo	Ti-C-Nb
Ti-C-Ta	Ti-C-V	Ti-C-W	Ti-C-Zr	Ti-Co-Mo	Ti-Co-Sn	Ti-Co-Ta
Ti-Cr-Fe	Ti-Cr-Mn	Ti-Cr-Mo	Ti-Cr-N	Ti-Cr-Nb	Ti-Cr-Sn	Ti-Cr-Ta
Ti-Cr-V	Ti-Cr-W	Ti-Cr-Zr	Ti-Fe-V	Ti-Mo-N	Ti-Mo-Nb	Ti-Mo-Si
Ti-Mo-Sn	Ti-Mo-Ta	Ti-Mo-V	Ti-Mo-W	Ti-Mo-Zr	Ti-N-Nb	Ti-N-Ta
Ti-Nb-Sn	Ti-Nb-Ta	Ti-Nb-V	Ti-Nb-W	Ti-Nb-Zr	Ti-Ni-Sn	Ti-Si-W
Ti-Sn-V	Ti-Sn-Zr	Ti-Ta-V	Ti-Ta-W	Ti-Ta-Zr	Ti-V-W	Ti-V-Zr
Ti-W-Zr						

Calculation Examples Using TCTI1.0

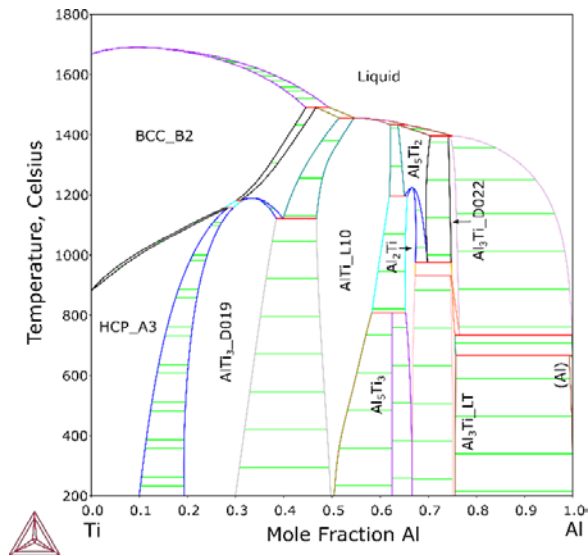


Fig. 1 Calculated Ti-Al phase diagram^[1]

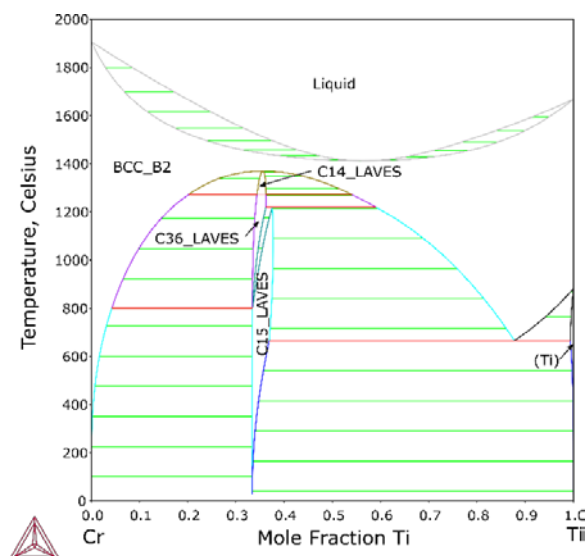


Fig. 2 Calculated Ti-Cr phase diagram^[2]

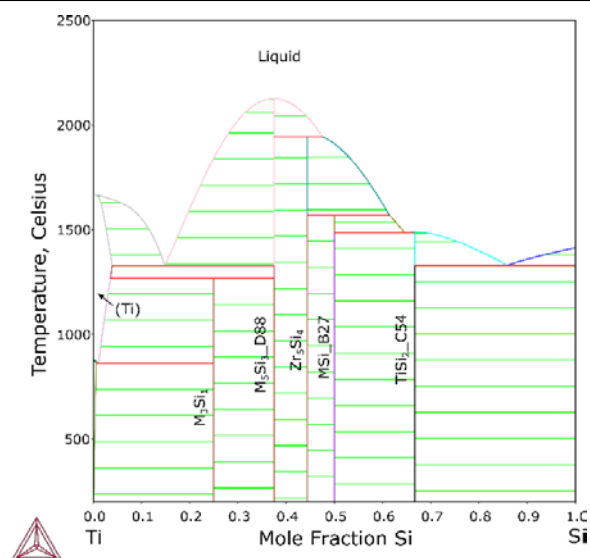


Fig. 3 Calculated Ti-Si phase diagram^[3]

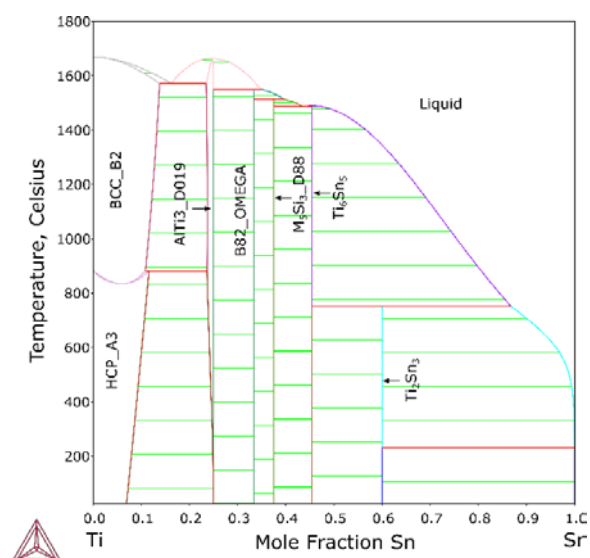


Fig. 4 Calculated Ti-Sn phase diagram^[4]

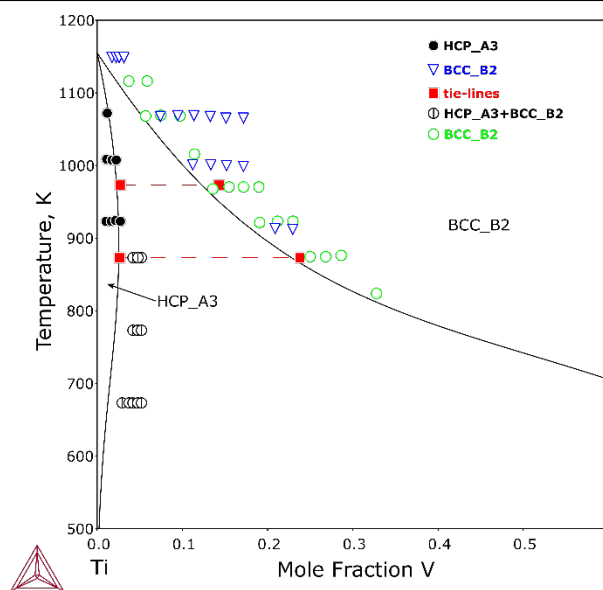


Fig. 5 Calculated Ti-rich Ti-V phase diagram ^[5] with experimental data from Molokanov ^[6], Agented ^[7] and Ermines ^[8].

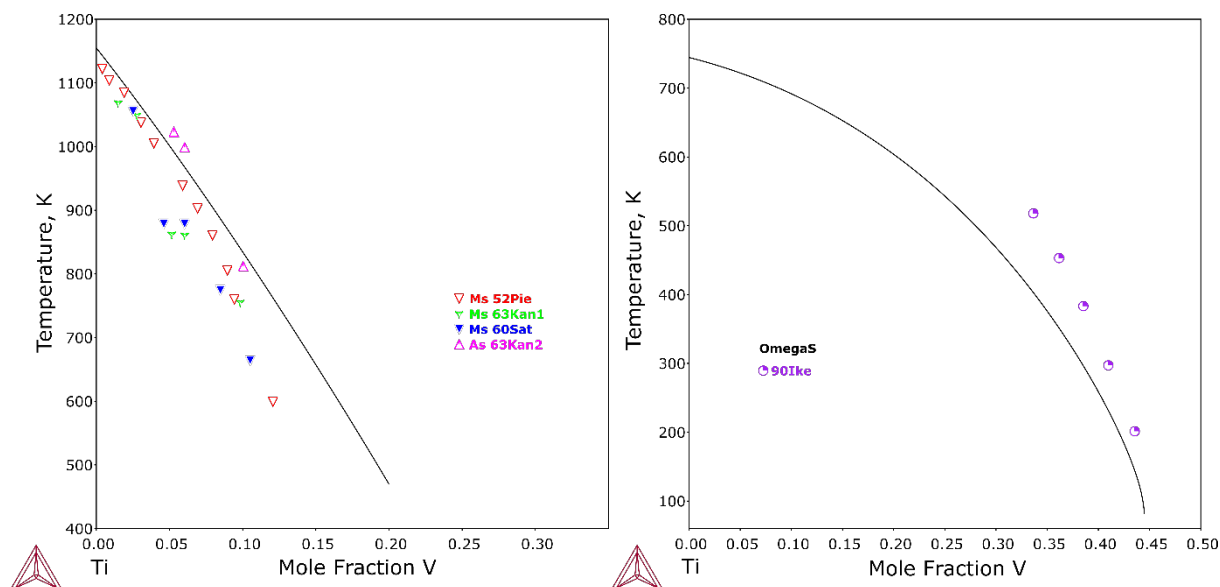


Fig. 6 Calculated A2/A3 T_0 line (a) and A2/omega T_0 line (b) in the Ti-V binary system (Experimental data are from ^[9-13]). As-measured martensitic transformation temperatures had been used for validating or improving the descriptions of the A2, A3 and Omega phases in Ti-V binary system.

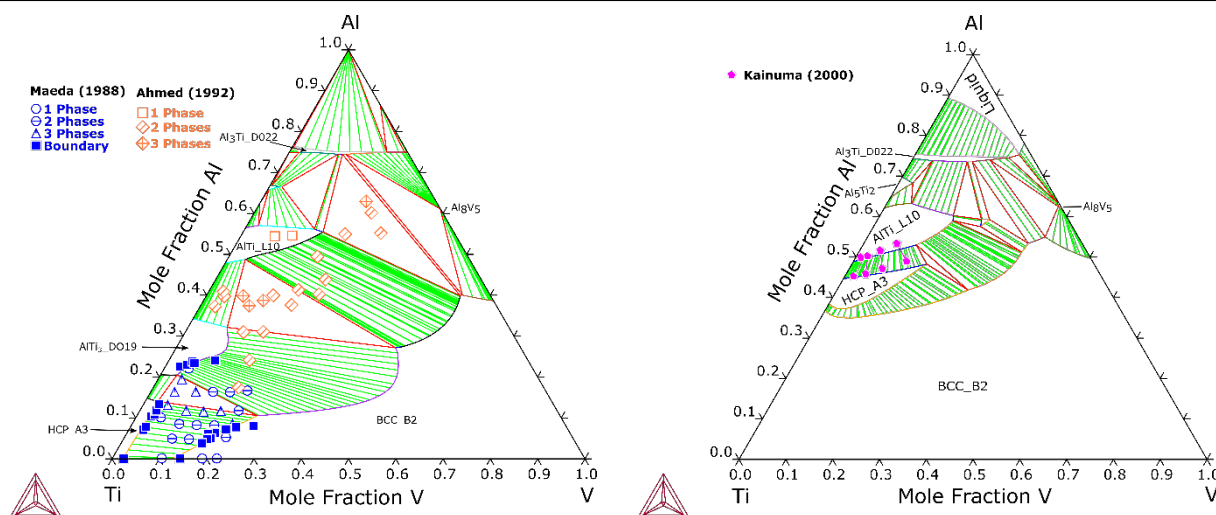


Fig. 7 Calculated isothermal sections of Ti-Al-V at (a) 973 K and (b) 1573 K. (Experimental data are from Maeda ^[14], Ahmed ^[15] and Kainuma ^[16])

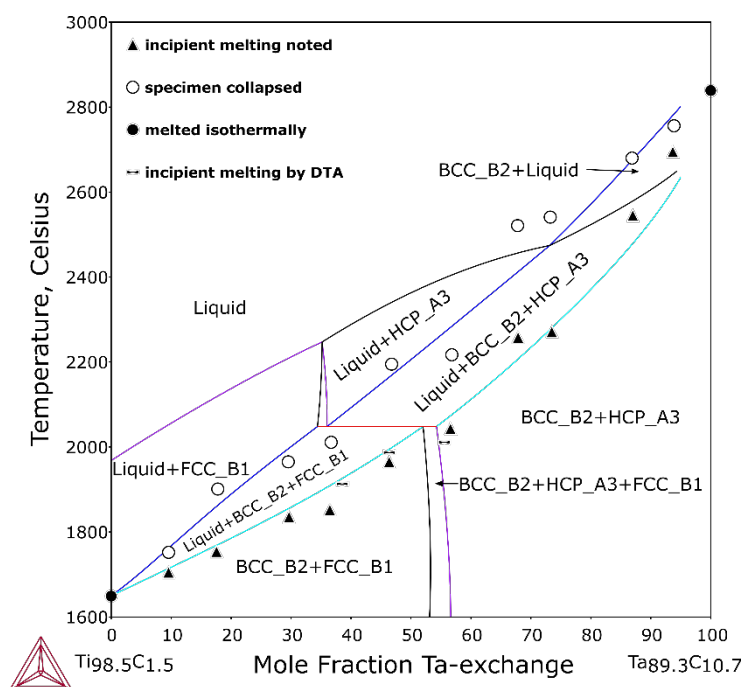


Fig. 8 Calculated Ti-C-Ta vertical section at 6 at. % C. Experimental data are from ^[17].

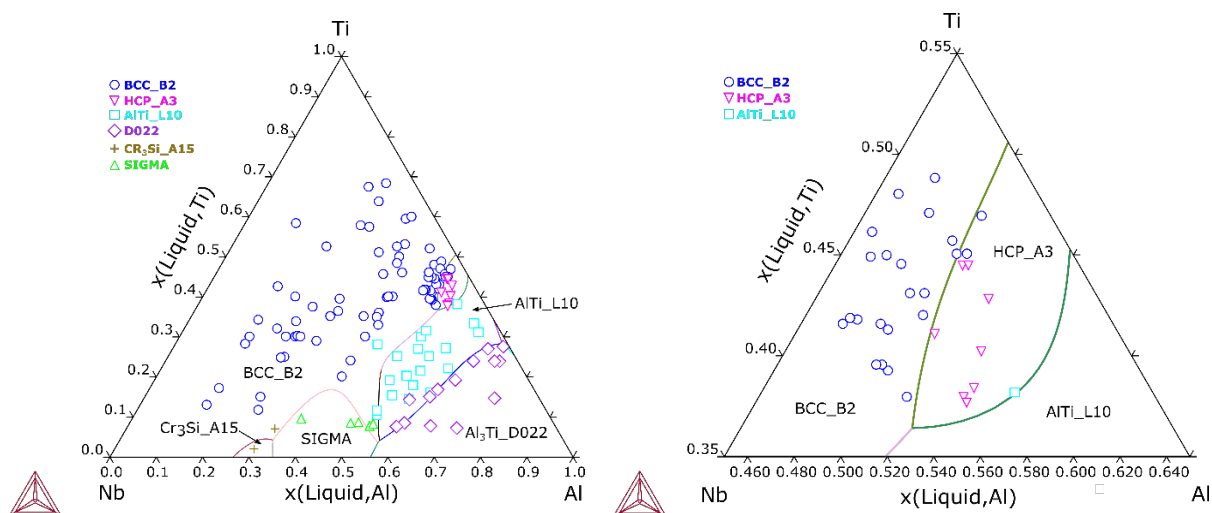


Fig. 9 Calculated *ti*-Al-Nb liquidus projection, (a) over the entire compositional range; (b) in the Ti-Al vicinity (experimental data are from refs. [18-24])

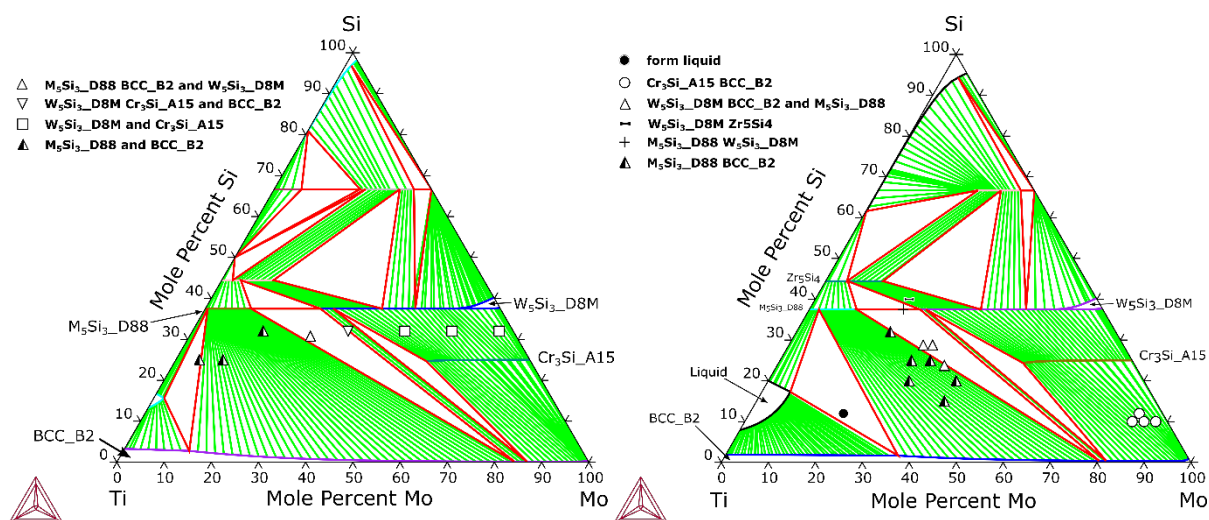


Fig. 10 Calculated isothermal sections of Ti-Mo-Si at (a) 1698 K and (b) 1873 K [25]. (Experimental data are from [26]).

References

- [1] V. T. Witusiewicz, A. A. Bondar, U Hecht, S Rex, T. Y. Velikanova, The Al-B-Nb-Ti system III. Thermodynamic re-evaluation of the constituent binary system Al-Ti, *J. Alloys Compd.*, 465 (2008) 64-77.
- [2] G. Ghosh, Thermodynamic and kinetic modeling of the Cr-Ti-V system, *J. Phase Equilibria* 23 (2002) 310-328.
- [3] Y. Du, J. C. Schuster, H. J. Seifert, F. Aldinger, Experimental investigation and thermodynamic calculation of the titanium-silicon-carbon system, *J. Am. Ceram. Soc.*, 83 (2000) 197-203.
- [4] F. Yin, J. Tedenac, F. Gascoin, Thermodynamic modeling of the Ti-Sn system and calculation of the Co-Ti-Sn system, *CALPHAD* 31 (2007) 370-379. (with modifications)
- [5] H.-L. Chen, Thermodynamic assesement of Al-Ti, Al-V, Ti-V and Ti-Al-V systems, unpublished work, (2016).
- [6] V. V. Molokanov, P. B. Budberg, D. B. Chyemov, Oxygen influence on phase equilibria in binary systems of titanium with vanadium, niobium and tantalum, *Fazovye Ravnovesiya Met. Splavakh* (1981) 135-138.
- [7] H. K. Adenstedt, J. R. Pequignon, J. M. Raynor, The titanium-vanadium system, *Trans. Am. Soc. Met.*, 44 (1952) 990-1003.
- [8] F. Ermanis, P. A. Farrar, H. Margolin, A Reinvestigation of the systems Ti-Cr and Ti-V, *Trans. Metall. Soc. AIME*, 221 (1961) 904-908.
- [9] P. Pietrokowsky, P. Duwez, Partial titanium-vanadium phase diagram. *Trans. Metall. Soc. AIME*, 194 (1952) 627-630.
- [10] H. Kaneko, Y.C. Huang, Allotropic transformation characteristics of titanium alloys during continuous cooling, *J. Jpn. Inst. Met.*, 27 (1963) 387-393.
- [11] T. Sato, S. Hukai, Y. C. Huang, The M_s points of binary titanium alloys, *Journal of Australian Institute of Metals* 5 (1960) 149.
- [12] H. Kaneko, Y.C. Huang, Some considerations on the continuous cooling diagrams and M_s points of titanium-base alloys, *J. Jpn. Inst. Met.*, 27 (1963) 403-406.
- [13] M. Ikeda, S. Y. Komatsu, T. Sugimoto, K. Kamei, Resistometric estimation of temperature-range of athermal omega-phase formation in quenched Ti-V alloys, *J. Jpn. Inst. Met.*, 54 (1990) 743-751.
- [14] T. Maeda, Phase equilibrium and beta stability in Ti-rich Ti-V-Al alloys *Ph.D. Thesis*, Univeristy of London (Imperial College), 1988.
- [15] T. Ahmed, H. M. Flower, The phase transformatios in alloys based on titanium aluminides Ti_3Al -V and $TiAl$ -V, *Mater. Sci. Eng. A.*, 152 (1992) 31-36.
- [16] R. Kainuma, Y. Fujita, H. Mitsui, I. Ohnuma, K. Ishida, Phase equilibria among α (hcp), β (bcc) and γ (L1₀) phases in Ti-Al base ternary alloys, *Intermetallics*, 8 (2000) 855-867.
- [17] E. Rudy, Part I. Phase diagrams of the systems titanium-niobium-carbon, titanium-tantalum-carbon and titanium-molybdenum-carbon. Phase equilibrium investigation of binary, ternary and higher order systems., *Tech. Rep. AFML-TR-69-117*,

ContactNo.USAF33 (615)-67-C-1513 Sacramento, CA, USA: Mater. Res. Lab., Aerojet-Gen. Corp; (1970) 1-132.

[18] O. Shuleshova, T. G. Woodcock, H.-G. Lindenkreuz, R. Hermann, W. Löser, B. Büchner, Private Communications.

[19] O. Shuleshova, T. G. Woodcock, H.-G. Lindenkreuz, R. Hermann, W. Löser, B. Büchner, Metastable phase formation in Ti-Al-Nb undercooled melts, *Acta Mater*, 55 (2007) 681-689.

[20] K. Kaltenbach, S. Gama, D. G. Pinatti, K. Schulze, E.-T. Henig, A contribution to the ternary system Al-Nb-Ti, *Z. Metallkd*, 80 (1989) 535-539.

[21] J. H. Perepezko, Y. A. Chang, L. E. Seitzman, J. C. Lin, N. R. Bonda, T. J. Jewett, in: S.H. Wang, C. T. Liu, D. P. Pope, J. O. Stiegler (Eds.), *High Temperature Aluminides and Intermetallics*, The Minerals, Metals and Materials Society, (1990) 19-47.

[22] A. Zdziobek, M. Durand-Charre, J. Driole, F. Durand, Experimental investigation of high temperature phase equilibria in the Nb-Al-Ti system, *Z. Metallkd*. 86 (1995) 334-340.

[23] K. J. Leonard, J. C. Mishurda, V. K. Vasudevan, Examination of solidification pathways and the liquidus surface in the Nb-Ti-Al system, *Metall. Mater. Trans. 31B* (2000) 1305-1321.

[24] V. T. Witusiewicz, A. A. Bondar, U. Hecht, T. Ya, Velikanova, The Al-B-Nb-Ti system IV. Experimental study and thermodynamic re-evaluation of the binary Al-Nb and ternary Al-Nb-Ti systems, *J. Alloys. Compd.*, 472 (2009) 133-161.

[25] Y. Yang, Thermodynamic assessment of Ti-Mo-Si system, unpublished work, (2017).

[26] Y. Yang, Y. A. Chang, L. Tan, Y. Du, Experimental investigation and thermodynamic descriptions of the Mo-Si-Ti system, *Mater. Sci. Eng., A* 361 (2003) 281-293.

Phases Included in TCTI1.0

You can list phases and constituents in the Database module and the GES module when using Console Mode in Thermo-Calc. For some phases, supplementary information is included in the definitions. To view the information, it is recommended to use '*List-System*' or '*List-Database*' with the option of '*Constituents*' in the Database module. In order to designate the high-temperature and the low-temperature modifications of a phase, respectively, suffixes of '*_HT*' and '*_LT*' was used instead of using prefixes of '*alpha-*', '*beta-*' or '*gamma*'.

AF	AL2TI	AL4MN_R
AL10FEMN2	AL2W	AL4MN_U
AL11CR2	AL2ZR3	AL4RE
AL11CR4	AL31MN6NI2	AL4SIC4
AL11MN4_HT	AL3CO	AL4W
AL11MN4_LT	AL3MN4SI2	AL4ZR5
AL11RE4	AL3MNSI2	AL5CO2_D811
AL12MN	AL3MO	AL5FE2
AL12W	AL3NI1	AL5FE4
AL13CO4	AL3NI2	AL5MN6SI7
AL13FE2MN2	AL3NI5	AL5TI2
AL13FE4	AL3TI_D022	AL5TI3
AL15SI2M4	AL3TI_LT	AL5W
AL16FEMN3	AL3Y_HT	AL63MO37
AL17MO4	AL3Y_LT	AL6MN
AL1MN1SI1	AL3ZR_D023	AL77W23
AL21V2	AL3ZR2	AL7CR
AL22MO5	AL3ZR4	AL7W3
AL23V4	AL3ZR5	AL8CR5_HT
AL2FE	AL45V7	AL8CR5_LT
AL2MN2SI3	AL4C3	AL8CR5_MT
AL2MNSI3	AL4CR	AL8MO3
AL2N2TI3	AL4FE	AL8SIC7

AL8V5	ALRE	BNSI
AL9CO2	ALRE2	BW_ALPHA
ALB12	ALSI3TI2	BW_BETA
ALBMO	ALTI_L10	C14_LAVES
ALCCR2	ALTI3_DO19	C15_LAVES
ALCR2	ALZR	C16_THETA
ALCR2B2	ALZR2	C36_LAVES
ALCR3	ANDALUSITE	CBCC_A12
ALCR3B4	B11	CEMENTITE
ALFESI_ALPHA	B12ZR	CFC2_FENBZR
ALFESI_BETA	B2O3	CHI_A12
ALFESI_DELTA	B3SI	CO11ZR2
ALFESI_GAMMA	B4C	CO17Y2
ALFESI_TAU1	B5W2_X	CO2SI_C23
ALFESI_TAU3	B6SI	CO3AL2B5
ALM3C_E21	B82_OMEGA	CO3SI
ALMNSI_T6	B9W2	CO3SN2
ALMNSI_T8	BCC_A2	CO3VV
ALN_B4	BCC_B2	CO3Y
ALNTI2	BCT_A5	CO3Y2
ALNTI3	BETA_V3O	CO3Y4
ALPHA_B19	BETAR_BORON	CO5Y_D2D
ALPHA_SPINEL	BN_B4	CO5Y8

CO7HF	CUB_A13	G_PHASE
CO7M2	D019_HCP	GAMMA_D83
CO7MO6	D0I_MO2B5	GAMMA_H
CO7Y6	D5A_M3B2	GAS
COB	DIAMOND_A4	GPHASE
CORUNDUM	DIS_L10_FCC	GRAPHITE
COSN	DIS_MU	H_L21
COSN2	DIS_SIG	HALITE
COSN3	FCC_A1	HCP_A3
COSNTI	FCC_B1	HF3NI7
COY_BF	FE2SI	HF8NI21
CR2B_ORTH	FE3SN2	HFMN
CR2NI2SI	FE4N_LP1	HFNI_ALPHA
CR3MN5	FE5SN3	HFNI3_ALPHA
CR3NI5SI2	FE8SI2C	HFNI3_BETA
CR3SI_A15	FECN_CHI	HFRE
CR5B3	FESI_B20	HFSIO4
CR8FE16TI5	FESI2_H	HIGH_SIGMA
CRB4	FESI2_L	ION_LIQ
CRISTOBALITE	FESN	KYANITE
CRNBSI	FESN2	L10_FCC
CRNI2_OP6	FEWB	L12_FCC
CRSI2_C40	FLUORITE_C1	LIQUID

M11SI8	MN2SN	MONI_DELTA
M12C	MN2YO5	MONI4_BETA
M23C6	MN3SI	MOO2
M2B_TETR	MN3SN2	MOO3
M2O3C	MN3TI	MOSI2_C11B
M2O3H	MN4TI	MSI_B27
M3B2	MN6N4	MSI2_C1
M3C2	MN6N5	MU_PHASE
M3SI1	MN6SI	MULLITE
M3SI2_D5A	MN9SI2	MZR3_E1A
M4SI3	MNB4	NB13NI75TI12
M5C2	MNNI2	NB15NI56TI29
M5SI3_D88	MNSN2	NB15NI80TI5
M6C	MNTA	NB2B3
M6SI5	MNTI_HT	NB2O5
M7C3	MNTI_LT	NB3RU5
MB_B33	MNYO3_HEX	NB5NI75TI20
MC_ETA	MO3NI10B11	NB8NI9TI3
MC_SHP	MO4O11	NBO
MN11SI19	MO8O23	NBO2
MN12Y	MO9O26	NBSN2
MN1O2	MOB4	NI10ZR7
MN2B_D1F	MOCOB	NI11ZR9

NI17Y2	NI5ALB4	R_PHASE
NI2SI_TETA	NI5ZR	RE2O7
NI2TA	NI6MNO8	RE2SI
NI2V	NI6SI2B	RE3B
NI2Y	NI7ZR2	RE3CO3B2
NI2Y3	NI8ALB11	RE5CO2B4
NI31SI12	NI8TA	RE7B3
NI3B_D011	NICR3B6	REB2
NI3CR2B6	NIMNO3	RECOB
NI3SI_MONOCL	NIMOO4	REO2
NI3SI_ORTHO	NISI_B31	REO3
NI3SI2	NITi2	RESI2_C11B
NI3SN_D019	NIWO4	REZR2
NI3SN_HT	NIZR	RHODONITE
NI3SN2_HT	O_PHASE	RU25Y44
NI3SN2_LT	O1_DIS	RU2B3
NI3SN4	OLIVINE	RU2SI_C37
NI3TA_D0A	OMEGA	RU2SI3
NI3TI_D024	ORD_SIG	RU2SN3
NI3Y	P_PHASE	RU2Y3
NI4B3	PI	RU2Y5
NI4SI2B	PSEUDO_BROOKITE	RU3SN7
NI4Y	QUARTZ	RU4SI3

RUB	TI2N_C4	TIO_ALPHA
RUB2	TI2SN3	TISI2_C54
RUSI	TI2X_OMEGA	TRIDYMITE
RUTILE_TIO2	TI3AL1O1	V2B3
RUY3	TI3ALC	V2O_SS
SI3N4	TI3ALC2	V2O5
SI5V6	TI3B4	V3C2
SIC	TI3CO5B2	V3O5_LT
SIGMA	TI3N2	V3O7
SILLIMANITE	TI3O2	V52O64
SN3O4	TI3O5	V5B6
SNO	TI3SIC2	V6O13
SPINEL	TI4N3	VO2_LT
TA2O5_HT	TI4O7	W2COB2
TA2O5_LT	TI5AL3O2	W3COC
TA5SI3_D8L	TI5O9	W5SI3_D8M
TAAL	TI6O11	WO2
TAAL2	TI6SN5	WO2_72
TAN_EPS	TI7O13	WO2_90
TAU	TI8O15	WO2_96
TI10O19	TI9O17	WO3_HT
TI20O39	TIB_B27	WO3_LT
TI2ALC	TI2B_C32	Y15C19_H

Y15C19_R	ZRO2_TETR
Y2C3_H	ZRSI2_C49
Y2C3_R	ZRSIO4
Y2S2A_Y2SI2O7	ZRTI2O6
Y2S2B_Y2SI2O7	ZRTIO4_ALPHA
Y2S2D_Y2SI2O7	ZRTIO4_BETA
Y2S2G_Y2SI2O7	
Y2SIO5	
Y3SI5_HT	
Y3SI5_LT	
YAG	
YAM	
YAP	
YB4	
YB6	
YB66	
YC_GAMMA	
YC2_C11A	
YSI2_HT	
Z_PHASE	
ZR3Y4O12	
ZR5SI4	
ZRO2_MONO	

Models for all the phases included in TCTI1.0

AF	2 SUBL, 1 1
: AL ₂ O ₃ : FE ₂ O ₃ :	
AL10FEMN2	2 SUBL, 3 10
: FE MN : AL :	
AL11CR2	2 SUBL, 10 2
: AL : AL CR TI :	
AL11CR4	2 SUBL, 11 4
: AL : AL CR TI :	
AL11MN4_HT	2 SUBL, 29 10
: AL MN : MN :	
AL11MN4_LT	2 SUBL, 11 4
: AL : MN FE :	
AL11RE4	2 SUBL, 11 4
: AL : RE :	
AL12MN	2 SUBL, 12 1
: AL : MN :	
AL12W	2 SUBL, 12 1
: AL : MO RE W :	
AL13CO4	2 SUBL, 13 4
: AL : CO :	
AL13FE2MN2	2 SUBL, 4 13
: FE MN : AL :	
AL13FE4	3 SUBL, 0.6275 0.235 0.1375
: AL : FE MN RU : AL SI VA :	

AL15SI2M4	3 SUBL, 14 4 5
: AL : FE MN : AL SI :	
AL16FEMN3	2 SUBL, 4 1
: AL : FE MN :	
AL17MO4	2 SUBL, 17 4
: AL : MO :	
AL1MN1SI1	3 SUBL, 1 1 1
: AL : MN : SI :	
AL21V2	2 SUBL, 21 2
: AL : V :	
AL22MO5	2 SUBL, 22 5
: AL : MO :	
AL23V4	2 SUBL, 23 4
: AL : V :	
AL2FE	2 SUBL, 2 1
: AL : FE MN :	
AL2MN2SI3	3 SUBL, 2 2 3
: AL : MN : SI :	
AL2MNSI3	3 SUBL, 2 1 3
: AL : MN : SI :	
AL2N2TI3	3 SUBL, 2 2 3
: AL : N : TI :	
AL2TI	2 SUBL, 2 1
: AL NB TA TI : AL CO CR NB TA TI V ZR :	
AL2W	2 SUBL, 2 1

: AL : W :	
AL2ZR3	2 SUBL, 2 3
: AL : HF TI Y ZR :	
AL31MN6NI2	3 SUBL, 31 6 2
: AL : MN : NI :	
AL3CO	2 SUBL, 3 1
: AL : CO :	
AL3MN4SI2	3 SUBL, 3 4 2
: AL : MN : SI :	
AL3MNSI2	3 SUBL, 3 1 2
: AL : MN : SI :	
AL3MO	2 SUBL, 3 1
: AL : MO :	
AL3NI1	2 SUBL, 0.75 0.25
: AL : NI :	
AL3NI2	3 SUBL, 3 2 1
: AL SI : AL NI RU : RU NI VA:	
AL3NI5	2 SUBL, 0.375 0.625
: AL : NI :	
AL3TI_D022	2 SUBL, 3 1
: AL MN MO NB SI TI V: AL CO CR MN MO NB NI TA TI V SI ZR :	
AL3TI_LT	2 SUBL, 3 1
: AL CR NB TI : AL CR NB TI V ZR :	
AL3Y_HT	2 SUBL, 0.75 0.25
: AL : Y :	

AL3Y_LT	2 SUBL, 0.75 0.25
: AL : Y :	
AL3ZR_D023	2 SUBL, 3 1
: AL : HF TI ZR :	
AL3ZR2	2 SUBL, 3 2
: AL : HF ZR :	
AL3ZR4	2 SUBL, 3 4
: AL : HF TI ZR :	
AL3ZR5	2 SUBL, 3 5
: AL : TI ZR :	
AL45V7	2 SUBL, 45 7
: AL : V :	
AL4C3	2 SUBL, 4 3
: AL SI : C :	
AL4CR	2 SUBL, 4 1
: AL AL CR TI :	
AL4FE	2 SUBL, 4.2 1
: AL : FE :	
AL4MN_R	2 SUBL, 461 107
: AL : MN FE :	
AL4MN_U	2 SUBL, 4 1
: AL : MN :	
AL4RE	2 SUBL, 4 1
: AL : RE :	
AL4SIC4	3 SUBL, 4 1 4
: AL : SI : C :	

AL4W	2 SUBL, 4 1
: AL : MO W :	
AL4ZR5	2 SUBL, 4 5
: AL : ZR :	
AL5CO2 _D811	2 SUBL, 5 2
: AL : CO :	
AL5FE2	2 SUBL, 5 2
: AL : FE MN :	
AL5FE4	
: AL FE :	
AL5MN6SI7	3 SUBL, 5 6 7
: AL : MN : SI :	
AL5TI2	2 SUBL, 5 2
: AL CR NB TA TI : AL CR NB TA TI V ZR :	
AL5TI3	2 SUBL, 5 3
: AL : CR NB TA TI :	
AL5W	2 SUBL, 5 1
: AL : MO W :	
AL63MO37	2 SUBL, 63 37
: AL : MO :	
AL6MN	2 SUBL, 6 1
: AL : FE MN RE RU :	
AL77W23	2 SUBL, 77 23
: AL : W :	
AL7CR	2 SUBL, 13 2
: AL : AL CR TI :	

AL7W3	2 SUBL, 7 3
: AL : W :	
AL8CR5_HT	4 SUBL, 2 3 2 6
: AL CR : AL CR TI : CR : AL :	
AL8CR5_LT	3 SUBL, 12 5 9
: AL : CR : AL CR TI :	
AL8CR5_MT	4 SUBL, 2 3 2 6
: AL CR TI : AL CR TI : CR : AL :	
AL8MO3	2 SUBL, 8 3
: AL : MO :	
AL8SIC7	3 SUBL, 8 1 7
: AL : SI : C :	
AL8V5	2 SUBL, 8 5
: AL MN V : AL MN TI V :	
AL9CO2	2 SUBL, 9 2
: AL : CO :	
ALB12	2 SUBL, 1 12
: AL TI : B :	
ALBMO	3 SUBL, 1 1 1
: AL : B : MO :	
ALCCR2	3 SUBL, 1 1 2
: AL : C : CR :	
ALCR2	2 SUBL, 1 2
: AL CR : AL CR TI :	
ALCR2B2	3 SUBL, 1 2 2
: AL : CR : B :	

ALCR3	2 SUBL, 1 3
: AL CR TI : CR :	
ALCR3B4	3 SUBL, 1 3 4
: AL : CR : B :	
ALFESI_ALPHA	4 SUBL, 0.6612 0.19 0.0496 0.0992
: AL : FE : SI : AL SI :	
ALFESI_BETA	3 SUBL, 14 3 3
: AL : FE : SI :	
ALFESI_DELTA	3 SUBL, 0.55 0.15 0.3
: AL : FE : SI :	
ALFESI_GAMMA	3 SUBL, 3 1 1
: AL : FE : SI :	
ALFESI_TAU1	3 SUBL, 2 2 1
: AL : FE : SI :	
ALFESI_TAU3	3 SUBL, 2 1 1
: AL : FE : SI :	
ALM3C_E21	3 SUBL, 1 3 1
: AL : CO FE: C:	
ALMNSI_T6	2 SUBL, 4 1
: AL : MN : SI :	
ALMNSI_T8	5 SUBL, 6 2 12 6 2
: MN VA : MN VA : AL : AL SI : AL SI :	
ALN_B4	2 SUBL, 1 1
: AL : N :	
ALNTI2	3 SUBL, 1 1 2

: AL : N : TI :	
ALNTI3	3 SUBL, 1 1 3
: AL : N : TI :	
ALPHA_B19	2 SUBL, 1 1
: MO NB TI V ZR : MO NB TI V ZR :	
ALPHA_SPINEL	4 SUBL, 1 2 2 4
: CO+2 MN+2 MN+3 NI+2 : AL+3 CR+3 FE+3 MN+2 MN+3 VA : MN+2 VA : O-2:	
ALRE	2 SUBL, 1 1
: AL : RE :	
ALRE2	2 SUBL, 1 2
: AL : RE :	
ALSI3TI2	3 SUBL, 0.166667 0.5 0.333333
: AL : SI : TI :	
ALTI_L10	3 SUBL, 1 1 2
: AL CO CR MN MO NB SN TA TI V W ZR C : AL CO CR MN MO NB SN TA TI V W ZR : O VA :	
ALTI3_DO19	3 SUBL, 3 1 1
: AL CO CR MN MO NB NI TA TI V W ZR : AL CR MO NB NI SI SN TA TI V W C : O VA :	
ALZR	2 SUBL, 1 1
: AL : HF Y ZR :	
ALZR2	2 SUBL, 1 2
: AL : Y TI ZR :	
ANDALUSITE	4 SUBL, 1 1 1 5
: AL+3 : AL+3 : SI+4 : O-2 :	

B11	2 SUBL, 1 1
: CO NI TI : NI TA TI :	
B12ZR	2 SUBL, 12 1
: B : Y ZR :	
B2O3	
: B2O3 :	
B3SI	3 SUBL, 6 2 6
: B : SI : B SI :	
B4C	2 SUBL, 1 1
: B11C B12 :B2 C2B CB2 :	
B5W2_X	2 SUBL, 5 2
: B C VA : W :	
B6SI	3 SUBL, 210 23 48
: B : SI : B SI :	
B82_OMEGA	3 SUBL, 1 1 1
: AL SN : CO CR MO NB TA TI ZR : TI :	
B9W2	2 SUBL, 9 2
: B : W :	
BCC_A2	2 SUBL, 1 3
: AL CO CR FE HF MN MO NB NI RE RU SI SN TA TI VA V W Y ZR : B C N O VA : > If BCC_B2 is defined, this phase will be combined to it.	
BCC_B2	3 SUBL, 0.5 0.5 3
: AL CO CR FE HF MN MO NB NI RE RU SI SN TA TI VA V W Y ZR : AL CO CR FE HF MN MO NB NI RE RU SI SN TA TI VA V W Y ZR : B C N O VA : > This phase has some contribution from	

BCC_A2	
BCT_A5	
: AL SN TI :	
BETA_V3O	2 SUBL, 1 1
: V : O VA :	
BETAR_BORON	2 SUBL, 93 12
: B : B C NB SI TI :	
BN_B4	2 SUBL, 1 1
: B : N :	
BNSI	3 SUBL, 61 1 8
: B : SI : B SI :	
BW_ALPHA	2 SUBL, 1 1
: B C VA : W :	
BW_BETA	2 SUBL, 1 1
: B C VA : W :	
C14_LAVES	2 SUBL, 2 1
: AL CO CR FE HF MN MO NB NI SI RE RU TA TI V W Y ZR : AL CO CR FE HF MN MO NB NI SI RE RU TA TI V W Y ZR :	
C15_LAVES	2 SUBL, 2 1
: AL CO CR FE HF MN MO NB NI SI RE RU TA TI V W Y ZR : AL CO CR FE HF MO NB NI SI RE RU TA TI V W Y ZR :	
C16_THETA	2 SUBL, 2 1
: AL HF MO NB TA TI W ZR : AL CO CR FE NI SI :	
C36_LAVES	2 SUBL, 2 1
: AL CO CR FE HF MO NB NI TA TI V W ZR : AL CO CR FE HF MO NB NI TA TI V W ZR :	

CBCC_A12	2 SUBL, 1 1
: AL CO CR FE MN MO NB NI RE RU SI SN TA TI V W Y ZR : B C VA :	
CEMENTITE	2 SUBL, 3 1
: CO CR FE MN MO NI V W : C N :	
CFC2_FENBZR	3 SUBL, 2 1 3
: FE NB ZR : NB ZR : NB ZR :	
CHI_A12	3 SUBL, 24 10 24
: CR FE NI RE : AL CR HF MO NB TA TI W ZR : CR FE MO NB NI RE TA W :	
CO11ZR2	2 SUBL, 11 2
: CO : ZR :	
CO17Y2	3 SUBL, 1 2 15
: CO2 Y : CO2 Y : CO :	
CO2SI_C23	2 SUBL, 2 1
: CO CR FE NI TI : SI :	
CO3AL2B5	3 SUBL, 3 2 5
: CO : AL : B :	
CO3SI	2 SUBL, 3 1
: CO : SI :	
CO3SN2	4 SUBL, 1 1 0.5 0.5
: CO : SN : CO VA : CO VA :	
CO3VV	2 SUBL, 3 1
: CO V : CO V :	
CO3Y	2 SUBL, 3 1
: CO : Y :	
CO3Y2	2 SUBL, 3 2

: CO : Y :	
CO3Y4	2 SUBL, 3 4
: CO : Y :	
CO5Y_D2D	3 SUBL, 1 4 1
: CO2 Y : CO : CO VA :	
CO5Y8	2 SUBL, 5 8
: CO : Y :	
CO7HF	2 SUBL, 7 1
: CO : HF :	
CO7M2	2 SUBL, 7 2
: CO : NB TA TI :	
CO7MO6	2 SUBL, 7 6
: CO MO : CO MO TI :	
CO7Y6	2 SUBL, 7 6
: CO : Y :	
COB	2 SUBL, 1 1
: CO RE : B :	
CORUNDUM	3 SUBL, 2 1 3
: AL+3 CR+2 CR+3 FE+2 FE+3 MN+3 TI+3 V+3 V+4 VA : CR+3 FE+3 NI+2 VA : O-2 :	
COSN	2 SUBL, 0.5 0.5
: CO : SN :	
COSN2	2 SUBL, 0.333 0.667
: CO : SN :	
COSN3	2 SUBL, 0.25 0.75
: CO : SN :	

COSNTI	3 SUBL, 1 1 1
: CO NI : SN : TI :	
COY_BF	2 SUBL, 1 1
: CO : Y :	
CR2B_ORTH	2 SUBL, 2 1
: CR FE MO RE : B :	
CR2NI2SI	3 SUBL, 5 5 3
: CR : NI : SI :	
CR3MN5	2 SUBL, 3 5
: CR : MN :	
CR3NI5SI2	4 SUBL, 3 5 2 1
: CR : NI : SI : C VA :	
CR3SI_A15	3 SUBL, 3 1 3
: AL CR FE MO NB NI RE SI SN TA TI V ZR : AL CO CR MO NB NI RU SI SN TA TI V ZR : C VA :	
CR5B3	2 SUBL, 0.625 0.375
: CR MO : B :	
CR8FE16TI5	2 SUBL, 24 5
: CR FE : TI :	
CRB4	2 SUBL, 0.2 0.8
: CR : B :	
CRISTOBALITE	
: SIO2 :	
CRNBSI	3 SUBL, 1 1 1
: CR : NB : SI :	
CRNI2_OP6	2 SUBL, 1 2

: CR MO W : MO NI W :	
CRSI2_C40	2 SUBL, 1 2
: CR HF MO NB SI TA TI V W : AL CR SI :	
CUB_A13	2 SUBL, 1 1
: AL CO CR FE HF MN MO NB NI RE RU SI SN TA TI V W Y ZR : B C VA :	
D019_HCP	3 SUBL, 0.75 0.25 1
: AL CO CR FE HF MO NB NI RE SI TA TI W ZR : AL CO CR FE HF MO NB NI RE SI TA TI W ZR : VA :	
D0I_MO2B5	2 SUBL, 0.32 0.68
: MO : B :	
D5A_M3B2	2 SUBL, 3 2
: FE HF MO NB TA TI V : B :	
DIAMOND_A4	
: AL B C O SI SN :	
DIS_L10_FCC	2 SUBL, 1 1
: MN : VA : > If MNPT_L10 or L102_MNPT are defined, this phase will be combined to them.	
DIS_MU	
: AL CO CR FE MN MO NB NI RE TA W :	
DIS_SIG	
: CO CR FE MN MO NB NI RE RU TA V W :	
FCC_A1	2 SUBL, 1 1
: AL CO CR FE HF MN MO NB NI RE RU SI SN TA TI V W Y ZR : B C N O VA :	
FCC_B1	2 SUBL, 1 1

: AL CR MO NB TA TI V ZR W VA : C N O VA :	
FE2SI	2 SUBL, 0.666667 0.333333
: FE : SI :	
FE3SN2	2 SUBL, 3 2
: FE : SN :	
FE4N_LP1	2 SUBL, 4 1
: CO CR FE MN NI : C N :	
FE5SN3	2 SUBL, 5 3
: FE : SN :	
FE8SI2C	3 SUBL, 8 2 1
: FE : SI : C :	
FECN_CHI	2 SUBL, 2.2 1
: FE : C N :	
FESI_B20	2 SUBL, 1 1
: CO CR FE MN NI RE : AL SI :	
FESI2_H	2 SUBL, 0.3 0.7
: FE : SI :	
FESI2_L	2 SUBL, 0.333333 0.666667
: FE : SI :	
FESN	2 SUBL, 1 1
: FE : SN :	
FESN2	2 SUBL, 1 2
: FE : SN :	
FEWB	3 SUBL, 1 1 1

: FE : W : B :	
FLUORITE_C1	2 SUBL, 2 4
: AL+3 CR+3 FE+2 HF+4 MN+2 MN+3 NI+2 TI+4 Y+3 ZR ZR+4 : O-2 VA :	
G_PHASE	3 SUBL, 16 6 7
: AL CO FE MN NI TI : HF NB TI Y ZR : CO FE MN NI SI :	
GAMMA_D83	3 SUBL, 4 1 8
: AL NI SI : AL NI SI : FE MN NI :	
GAMMA_H	3 SUBL, 4 1 8
: AL : AL : FE MN NI :	
GPHASE	4 SUBL, 1 16 7 6
: AL CO : AL TI : CO : TI :	
GRAPHITE	
: B C :	
H_L21	3 SUBL, 0.5 0.5 1
: AL SN TI : AL HF NB NI TA TI ZR : CO NI RU VA :	
HALITE	2 SUBL, 1 1
: AL+3 CO+2 CO+3 CR+3 FE+2 FE+3 MN+2 MN+3 NI+2 NI+3 V V+2 V+3 VA ZR+4 Y+3 : O-2 VA :	
HCP_A3	2 SUBL, 1 0.5
: AL CO CR FE HF MN MO NB NI RE RU SI SN TA TI V W Y ZR : B C N O VA :	
HF3NI7	2 SUBL, 0.3 0.7
: HF : NI :	
HF8NI21	2 SUBL, 8 21
: HF ZR : NI :	

HFMN	2 SUBL, 0.5 0.5
: HF : MN :	
HFNI_ALPHA	2 SUBL, 0.5 0.5
: HF : NI :	
HFNI3_ALPHA	2 SUBL, 0.25 0.75
: HF : NI :	
HFNI3_BETA	2 SUBL, 0.25 0.75
: HF : NI :	
HFRE	2 SUBL, 1 1
: HF : RE :	
HFSIO4	3 SUBL, 1 1 4
: HF+4 : Si+4 : O-2 :	
HIGH_SIGMA	3 SUBL, 8 4 18
: MN : CR : CR MN :	
ION_LIQ	2 SUBL, 1 1
: AL+3 CO+2 CR+2 FE+2 HF+4 MN+2 MO+4 NB+2 NI+2 RE+4 RU+4 Si+4 TA+5 Ti+2 V+2 W+6 Y+3 ZR+4 : ALO2-1 O-2 SIO4-4 VA ALN B BO3/2 C N COO3/2 CRO3/2 FEO3/2 MNO3/2 MOO3 NBO2 NBO5/2 REO7/2 SIO2 TIO2 VO2 VO5/2 :	
KYANITE	4 SUBL, 1 1 1 5
: AL+3 : AL+3 : Si+4 : O-2 :	
L10_FCC	2 SUBL, 0.5 0.5
: MN NI : MN NI :	
L12_FCC	2 SUBL, 0.75 0.25
: AL CO CR MN NI TI ZR : AL CO CR MN NI SI TA TI ZR :	
LIQUID	

: AL AL2/3O1 AL4/3O2 AL1N1 B BO3/2 C CO COO COO3/2 CR CRO CRO3/2 FE FEO FEO3/2 HF HF1/2O1 MN MNO MNO3/2 MO MO1/2O1 MOO3 N NB NB1O1 NBO2 NBO5/2 NI NIO O RE RE1/2O1 REO7/2 RU RU1/2O1 SI SI1/2O1 SIO2 SI2O4 SN1/2O1 SN TA TA2/5O1 TI O1Ti1 TIO3/2 O2Ti1 V V1O1 VO2 VO3/2 VO5/2 W Y Y2/3O1 ZR ZR1/2O1 AL2O4Ti :	
> Metallic LIQUID solution phase	
M11Si8	2 SUBL, 11 8
: CR NB : Si :	
M12C	3 SUBL, 6 6 1
: CO NI : MO W : C :	
M23C6	3 SUBL, 20 3 6
: CO CR FE MN NI RE V : CO CR FE MN MO NI RE V W : C :	
M2B_TETR	2 SUBL, 2 1
: AL CO CR FE MN MO NB NI RE TA W TI : B :	
M2O3C	3 SUBL, 2 3 1
: AL+3 CR+3 FE+3 MN+3 NI+2 Y Y+3 ZR+4 : O-2 VA : O-2 VA :	
M2O3H	3 SUBL, 2 3 1
: MN+3 Y Y+3 ZR+4 : O-2 VA : O-2 VA :	
M3B2	3 SUBL, 0.4 0.2 0.4
: CR FE MO NI W : CR FE NI : B :	
M3C2	2 SUBL, 3 2
: CR MO V W : C :	
M3Si1	2 SUBL, 3 1
: HF NB TA TI ZR : Si :	

M3SI2_D5A	2 SUBL, 3 2
: HF NB ZR : SI :	
M4SI3	2 SUBL, 4 3
: CR NI : SI :	
M5C2	2 SUBL, 5 2
: FE MN : C :	
M5SI3_D88	4 SUBL, 2 3 3 1
: CR FE HF MN MO NI NB SI TI Y ZR W : AL SN SI : CR FE HF MN MO NI NB TI Y ZR : CO SN VA :	
M6C	4 SUBL, 2 2 2 1
: CO FE NI : MO NB TA W : CO CR FE MO NB NI TA V W : C :	
M6SI5	2 SUBL, 6 5
: CR NB : SI :	
M7C3	2 SUBL, 7 3
: CO CR FE MN MO NI RE V W : C :	
MB_B33	2 SUBL, 1 1
: CR FE HF MO NB NI TA TI V W : B :	
MC_ETA	2 SUBL, 1 1
: MO V W : C VA :	
MC_SHP	2 SUBL, 1 1
: MO W : C N :	
MN11SI19	2 SUBL, 11 19
: MN : AL SI :	
MN12Y	2 SUBL, 12 1
: MN : Y :	

MN1O2	2 SUBL, 1 2
: MN : O :	
MN2B_D1F	2 SUBL, 0.6707 0.3293
: MN : B :	
MN2SN	2 SUBL, 0.643 0.357
: MN : SN :	
MN2YO5	4 SUBL, 1 1 1 5
: Y+3 : MN+3 : MN+4 : O-2 :	
MN3SI	2 SUBL, 3 1
: MN FE : AL SI :	
MN3SN2	2 SUBL, 3 2
: MN : SN :	
MN3TI	2 SUBL, 3 1
: MN : TI :	
MN4TI	2 SUBL, 0.815 0.185
: MN : TI :	
MN6N4	2 SUBL, 6 4
: MN : N :	
MN6N5	2 SUBL, 6 5
: MN : N :	
MN6SI	2 SUBL, 17 3
: AL MN : SI :	
MN9SI2	2 SUBL, 33 7
: MN : SI :	
MNB4	2 SUBL, 0.2 0.8

: MN : B :	
MNNI2	2 SUBL, 1 2
: MN NI : NI :	
MNSN2	2 SUBL, 2 1
: SN : MN :	
MNTA	2 SUBL, 1 1
: MN : TA :	
MNTI_HT	2 SUBL, 0.515 0.485
: MN : TI :	
MNTI_LT	2 SUBL, 1 1
: MN : TI :	
MNYO3_HEX	3 SUBL, 1 1 3
: Y+3 : MN+3 : O-2 :	
MO3NI10B11	3 SUBL, 3 10 11
: MO : NI : B :	
MO4O11	2 SUBL, 4 11
: MO : O :	
MO8O23	2 SUBL, 8 23
: MO : O :	
MO9O26	2 SUBL, 1 2.889
: MO : O :	
MOB4	2 SUBL, 0.2 0.8
: MO : B :	
MOCOB	3 SUBL, 1 1 1
: MO W: CO : B :	
MONI_DELTA	3 SUBL, 24 20 12

: CO CR FE NI RE : CO CR FE MO NI RE W : MO W :	
MONI4_BETA	2 SUBL, 1 4
: MO W : NI :	
MOO2	2 SUBL, 1 2
: MO : O :	
MOO3	2 SUBL, 1 3
: MO : O :	
MOSI2_C11B	2 SUBL, 1 2
: CO FE MO NI W : AL HF SI TI ZR :	
MSI_B27	2 SUBL, 1 1
: HF NB TI Y ZR : AL SI :	
MSI2_C1	2 SUBL, 1 2
: CO NI : AL SI :	
MU_PHASE	4 SUBL, 1 2 6 4
: AL CO CR FE MN MO NB NI RE TA W : AL CO CR FE MN MO NB NI RE TA W : AL CO CR FE MN MO NB NI RE TA W : AL CO CR FE MN MO NB NI RE TA W :	
MULLITE	4 SUBL, 1 1 1 5
: AL+3 : AL+3 : AL+3 SI+4 : O-2 VA :	
MZR3_E1A	2 SUBL, 1 3
: CO FE NI : Y ZR :	
NB13NI75TI12	3 SUBL, 0.13 0.75 0.12
: NB : NI : TI :	
NB15NI56TI29	3 SUBL, 0.15 0.56 0.29
: NB : NI : TI :	

NB15NI80TI5	3 SUBL, 0.15 0.8 0.05
: NB : NI : TI :	
NB2B3	2 SUBL, 2 3
: NB : B :	
NB2O5	2 SUBL, 2 5
: NB : O :	
NB3RU5	2 SUBL, 0.375 0.625
: NB RU : RU :	
NB5NI75TI20	3 SUBL, 0.05 0.75 0.2
: NB : NI : TI :	
NB8NI9TI3	3 SUBL, 0.4 0.45 0.15
: NB : NI : TI :	
NBO	2 SUBL, 1 1
: NB : O :	
NBO2	2 SUBL, 1 2
: NB : O :	
NBSN2	2 SUBL, 1 2
: NB SN V : NB SN :	
NI10ZR7	2 SUBL, 23 17
: NI : HF ZR :	
NI11ZR9	2 SUBL, 11 9
: NI : HF ZR :	
NI17Y2	2 SUBL, 1 0.1176
: FE NI : Y :	

NI2SI_TETA	3 SUBL, 1 1 1
: NI : NI VA : AL SI :	
NI2TA	2 SUBL, 2 1
: CO NI : TA :	
NI2V	2 SUBL, 2 1
: MO NI: MO NB TA V :	
NI2Y	2 SUBL, 2 1
: NI : Y :	
NI2Y3	2 SUBL, 2 3
: NI : Y :	
NI31SI12	2 SUBL, 5 2
: CO CR FE NI : SI :	
NI3B_D011	2 SUBL, 3 1
: CO CR FE MO NI : B :	
NI3CR2B6	3 SUBL, 3 2 6
: NI : CR : B :	
NI3SI_MONOCL	2 SUBL, 3 1
: NI : SI :	
NI3SI_ORTHO	2 SUBL, 3 1
: NI : SI :	
NI3SI2	2 SUBL, 3 2
: NI : SI :	
NI3SN_D019	2 SUBL, 1 3
: SN : MN NI :	
NI3SN_HT	3 SUBL, 0.25 0.25 0.5

: NI SN : NI SN : NI :	
NI3SN2_HT	3 SUBL, 0.33333 0.33334 0.33333
: NI : NI SN : SN :	
NI3SN2_LT	3 SUBL, 0.2 0.4 0.4
: SN : NI SN : NI :	
NI3SN4	3 SUBL, 0.25 0.25 0.5
: NI : NI SN : SN :	
NI3TA_D0A	2 SUBL, 3 1
: AL CO CR FE NI NB : AL FE MO NB NI TA TI V W :	
NI3TI_D024	2 SUBL, 0.75 0.25
: AL CO CR FE HF NI TA TI W ZR : AL CR HF MO NB NI SI TA TI W ZR :	
NI3Y	2 SUBL, 3 1
: FE NI : Y :	
NI4B3	2 SUBL, 0.57142857 0.42857143
: NI : B :	
NI4SI2B	3 SUBL, 4.29 2 1.43
: NI : SI : B :	
NI4Y	2 SUBL, 4 1
: NI : Y :	
NI5ALB4	3 SUBL, 5 1 4
: NI : AL : B :	
NI5ZR	2 SUBL, 5 1
: NI : HF Y ZR :	
NI6MNO8	3 SUBL, 6 1 8

: NI+2 : MN+4 : O-2 :	
NI6SI2B	3 SUBL, 6 2 1
: NI : SI : B :	
NI7ZR2	2 SUBL, 7 2
: AL CO CR NI : HF Y ZR :	
NI8ALB11	3 SUBL, 8 1 11
: NI : AL : B :	
NI8TA	2 SUBL, 8 1
: NI : NB TA :	
NICR3B6	3 SUBL, 0.1 0.3 0.6
: NI : CR : B :	
NIMNO3	2 SUBL, 2 3
: MN+3 MN+4 NI+2 : O-2 :	
NIMOO4	3 SUBL, 1 1 4
: NI+2 : MO+6 : O-2 :	
NISI_B31	2 SUBL, 1 1
: NI : SI :	
NITI2	2 SUBL, 1 2
: CO CR FE MO NI RE TI : AL CR HF NI TA TI ZR :	
NIWO4	3 SUBL, 1 1 4
: CO+2 FE+2 MN+2 NI+2 : W+6 : O-2 :	
NIZR	2 SUBL, 1 1
: NI : TI Y ZR :	
O_PHASE	3 SUBL, 0.5 0.25 0.25
: NB TA TI : AL NB TA TI : NB TA TI :	

O1_DIS	2 SUBL, 0.75 0.25
: AL NB TI : AL NB TI :	
OLIVINE	4 SUBL, 1 1 1 4
: CO+2 FE+2 MN+2 NI+2 : CO+2 FE+2 MN+2 NI+2: SI+4 : O-2 :	
OMEGA	
: AL B C CO CR FE HF MN MO NB NI RE RU SI TA TI V W Y ZR :	
ORD_SIG	3 SUBL, 10 4 16
: CO CR FE MN MO NB NI RE RU TA V W : CO CR FE MN MO NB NI RE RU TA V W : CO CR FE MN MO NB NI RE RU TA V W :	
P_PHASE	3 SUBL, 24 20 12
: CR FE NI RE : CR FE MO NI RE : MO :	
PI	3 SUBL, 12.8 7.2 4
: CR : FE NI : N :	
PSEUDO_BROO KITE	3 SUBL, 1 2 5
: TI+4 : AL+3 : O-2 :	
QUARTZ	
: SIO2 :	
R_PHASE	3 SUBL, 27 14 12
: CO CR FE NI RE : MO W : CO CR FE MO NI RE W :	
RE2O7	
: O7RE2 :	
RE2SI	2 SUBL, 2 1
: RE : SI :	

RE3B	2 SUBL, 3 1
: CR MO RE TA W : B :	
RE3CO3B2	3 SUBL, 3 3 2
: RE : CO : B :	
RE5CO2B4	4 SUBL, 4 2 1 4
: RE : CO RE : CO : B :	
RE7B3	3 SUBL, 7 3 3
: CO CR MO NB RE RU TA W : B : B VA :	
REB2	3 SUBL, 1 2 2
: RE : B : B VA :	
RECOB	3 SUBL, 1 1 1
: RE : CO : B :	
REO2	
: O2RE1 :	
REO3	
: O3RE1 :	
RESI2_C11B	2 SUBL, 0.357 0.643
: RE : SI :	
REZR2	2 SUBL, 1 2
: NI RE : ZR :	
RHODONITE	3 SUBL, 1 1 3
: MN+2 : SI+4 : O-2 :	
RU25Y44	2 SUBL, 0.362 0.638
: RU : Y :	
RU2B3	2 SUBL, 2 3
: RU : B :	

RU2SI_C37	2 SUBL, 2 1
: RU : SI :	
RU2SI3	2 SUBL, 2 3
: RU : SI :	
RU2SN3	2 SUBL, 0.4 0.6
: RU : SN :	
RU2Y3	2 SUBL, 0.4 0.6
: RU : Y :	
RU2Y5	2 SUBL, 0.286 0.714
: RU : Y :	
RU3SN7	2 SUBL, 0.3 0.7
: RU : SN :	
RU4SI3	2 SUBL, 4 3
: RU : SI :	
RUB	2 SUBL, 1 1
: RU : B :	
RUB2	2 SUBL, 1 2
: RU : B :	
RUSI	2 SUBL, 1 1
: RU : SI :	
RUTILE_TIO2	2 SUBL, 1 2
: AL+3 RU+4 SN+4 V+4 TI+4 ZR+4 : O-2 VA-2 :	
RUY3	2 SUBL, 0.25 0.75
: RU : Y :	
SI3N4	2 SUBL, 3 4

: SI : N :	
SI5V6	2 SUBL, 5 6
: SI : V :	
SIC	2 SUBL, 1 1
: SI : C :	
SIGMA	3 SUBL, 10 4 16
: AL CO CR FE MN MO NB NI RE RU SI TA TI V W : CO CR FE MN MO NB NI RE RU SI TA TI V W : AL CO CR FE MN MO NB NI RE RU SI TA TI V W :	
SILLIMANITE	4 SUBL, 1 1 1 5
: AL+3 : AL+3 : SI+4 : O-2 :	
SN3O4	2 SUBL, 3 4
: SN : O :	
SNO	2 SUBL, 1 1
: SN : O :	
SPINEL	4 SUBL, 1 2 2 4
: AL+3 CO+2 CO+3 CR+2 CR+3 FE+2 FE+3 MN+2 NI+2 : AL+3 CO+2 CO+3 CR+3 FE+2 FE+3 MN+2 MN+3 MN+4 NI+2 VA : CR+2 FE+2 MN+2 VA : O-2 :	
TA2O5_HT	2 SUBL, 2 5
: TA : O :	
TA2O5_LT	2 SUBL, 2 5
: TA : O :	
TA5SI3_D8L	2 SUBL, 5 3
: HF NB TA : AL SI :	
TAAL	2 SUBL, 0.8837 1.1163

: AL TA TI : AL TA TI :	
TAAL2	2 SUBL, 0.6389 0.3611
: AL TA TI : AL TA TI :	
TAN_EPS	2 SUBL, 1 1
: TA : N :	
TAU	4 SUBL, 20 6 6 3
: CO HF NI RE : B : B VA : AL CR HF MO RE TA TI V W ZR :	
TI10O19	2 SUBL, 10 19
: TI : O :	
TI20O39	2 SUBL, 20 39
: TI : O :	
TI2ALC	3 SUBL, 2 1 1
: TI : AL : C VA :	
TI2N_C4	2 SUBL, 2 1
: TI : N :	
TI2SN3	2 SUBL, 2 3
: CR TI : SN :	
TI2X_OMEGA	2 SUBL, 2 1
: TI : AL B C CO CR FE HF MN MO NB NI RE RU SI TA TI V W Y ZR :	
> Ordered Omega phase, B82 or C33 type	
TI3AL1O1	3 SUBL, 3 0.9 1.1
: TI : AL : O :	
TI3ALC	3 SUBL, 3 1 1
: TI : AL : C VA :	

TI3ALC2	3 SUBL, 3 1 2
: TI : AL : C VA :	
TI3B4	2 SUBL, 4 3
: B : AL CR HF MN NB TA TI V :	
TI3CO5B2	3 SUBL, 3 5 2
: TI : CO : B :	
TI3N2	2 SUBL, 0.71 0.29
: TI : N :	
TI3O2	2 SUBL, 3 2
: TI : O :	
TI3O5	2 SUBL, 3 5
: TI V : O :	
TI3SIC2	3 SUBL, 3 1 2
: TI : SI : C :	
TI4N3	2 SUBL, 0.685 0.315
: TI : N :	
TI4O7	2 SUBL, 4 7
: TI V : O :	
TI5AL3O2	3 SUBL, 5 3 2
: TI : AL : O :	
TI5O9	2 SUBL, 5 9
: TI V : O :	
TI6O11	2 SUBL, 6 11
: TI V : O :	
TI6SN5	2 SUBL, 6 5
: CR MO NB TI ZR : AL SN :	

TI7O13	2 SUBL, 7 13
: TI V : O :	
TI8O15	2 SUBL, 8 15
: TI V : O :	
TI9O17	2 SUBL, 9 17
: TI : O :	
TIB_B27	2 SUBL, 1 1
: B : CR FE HF MN MO NB TI Y TA W ZR V :	
TIB2_C32	2 SUBL, 2 1
: B : AL CR HF MN MO NB TA TI V Y ZR :	
TIO_ALPHA	2 SUBL, 1 1
: TI+2 : O-2 :	
TISI2_C54	2 SUBL, 1 2
: MO NB RU TI ZR : AL SI SN :	
TRIDYMITE	
: SIO2 :	
V2B3	2 SUBL, 0.4 0.6
: V : B :	
V2O_SS	2 SUBL, 1 0.5
: V : O VA :	
V2O5	2 SUBL, 2 5
: V+5 : O-2 :	
V3C2	2 SUBL, 3 2
: V : C :	
V3O5_LT	3 SUBL, 2 1 5
: V+3 : V+4 : O-2 :	

V3O7	3 SUBL, 2 1 7
: V+5 : V+4 : O-2 :	
V52O64	2 SUBL, 52 64
: V : O :	
V5B6	2 SUBL, 5 6
: NB TI V : B :	
V6O13	3 SUBL, 2 4 13
: V+5 : V+4 : O-2 :	
VO2_LT	2 SUBL, 1 2
: V+4 : O-2 :	
W2COB2	3 SUBL, 2 1 2
: MO W : CO NI : B :	
W3COC	3 SUBL, 3 1 1
: W : CO NI : C :	
W5SI3_D8M	3 SUBL, 4 1 3
: CR FE MO NB TI V W : CR FE MO NB TI V W SI : AL SI SN :	
WO2	
: O2W1 :	
WO2_72	
: O2_72W1 :	
WO2_90	
: O2_90W1 :	
WO2_96	
: O2_96W1 :	
WO3_HT	

: O3W1 :	
WO3_LT	
: O3W1 :	
Y15C19_H	2 SUBL, 19 15
: C : Y :	
Y15C19_R	2 SUBL, 19 15
: C : Y :	
Y2C3_H	3 SUBL, 2 2 1
: Y : C : C VA :	
Y2C3_R	3 SUBL, 2 2 1
: Y : C : C VA :	
Y2S2A_Y2SI2O7	3 SUBL, 1 1 1
: Y+3 : Y+3 : SI2O7-6 :	
Y2S2B_Y2SI2O7	3 SUBL, 1 1 1
: Y+3 : Y+3 : SI2O7-6 :	
Y2S2D_Y2SI2O7	3 SUBL, 1 1 1
: Y+3 : Y+3 : SI2O7-6 :	
Y2S2G_Y2SI2O7	3 SUBL, 1 1 1
: Y+3 : Y+3 : SI2O7-6 :	
Y2SIO5	4 SUBL, 1 1 1 1
: Y+3 : Y+3 : SIO4-4 : O-2 :	
Y3SI5_HT	2 SUBL, 3 5
: Y : SI :	
Y3SI5_LT	2 SUBL, 3 5
: Y : SI :	
YAG	3 SUBL, 5 3 12

: AL+3 CR+3 FE+3 : Y+3 : O-2 :	
YAM	4 SUBL, 2 4 1 9
: AL+3 SI+4 : Y+3 : O-2 VA : O-2 :	
YAP	3 SUBL, 1 1 3
: AL+3 CR+3 FE+3 : Y+3 : O-2 :	
YB4	2 SUBL, 1 4
: Y : B :	
YB6	2 SUBL, 1 6
: Y : B :	
YB66	2 SUBL, 1 66
: Y : B :	
YC_GAMMA	2 SUBL, 1 1
: Y : C C2 VA :	
YC2_C11A	
: C2Y1 :	
YSI2_HT	2 SUBL, 1 2
: Y : SI :	
Z_PHASE	3 SUBL, 1 1 1
: CR FE : MO NB V : N VA :	
ZR3Y4O12	3 SUBL, 3 4 12
: ZR+4 : Y+3 : O-2 :	
ZR5SI4	2 SUBL, 5 4
: HF NB TI Y ZR MO : AL SI :	
ZRO2_MONO	2 SUBL, 2 4
: AL+3 CR+3 HF+4 TI+4 Y+3 ZR+4 : O-2 VA:	
ZRO2_TETR	2 SUBL, 2 4

: AL+3 CR+3 FE+2 HF+4 MN+2 MN+3 NI+2 TI+4 Y+3 ZR+4 : O-2 VA :	
ZRSI2_C49	2 SUBL, 1 2
: ZR Y HF NB : SI :	
ZRSIO4	3 SUBL, 1 1 4
: SI+4 : ZR+4 : O-2 :	
ZRTI2O6	3 SUBL, 1 2 6
: ZR+4 : TI+4 : O-2 :	
ZRTIO4_ALPHA	3 SUBL, 1 1 4
: ZR+4 : TI+4 : O-2 :	
ZRTIO4_BETA	2 SUBL, 2 4
: TI+4 ZR+4 : O-2 :	