

Rainer Sändig   Karl Scherwinski   Manfred Grigo

## Die Rostocker Elektrolyt-Datenbank "SAFE"

Rostock: Wilhelm-Pieck-Universität, 1983

**<https://purl.uni-rostock.de/rosdok/ppn187025242X>**

Druck   Freier  Zugang    All Rights Reserved   OCR-Volltext

*Rostocker  
Elektrolyt-Datenbank*

**SAFE**



ROSTOCKER  
PHYSIKALISCHE  
MANUSKRIPTE

Heft 6



DIE ROSTOCKER

ELEKTROLYT-DATENBANK "SAFE"

Zusammengestellt von

Doz. Dr. Rainer Sändig

Dr. Karl Scherwinski

Dr. Manfred Grigo

Wilhelm-Pieck-Universität Rostock

Sektion Physik

Rostock, Februar 1983



Rostocker Physikalische Manuskripte bisher erschienen:

- Heft 1: Physik und Gesellschaftswissenschaften (dieses Heft der Reihe ist unnummeriert erschienen) 1977
- Heft 2: Stochastische Theorie der nichtlinearen irreversiblen Prozesse 1977
- Heft 3: Physik und Gesellschaftswissenschaften, Teil I 1978
- Heft 3: Physik und Gesellschaftswissenschaften, Teil II 1978
- Heft 4: Theorie elektrolytischer Flüssigkeiten 1979
- Heft 5:  $\text{SiO}_2$  Herstellung, Struktur, Eigenschaften, Teil I 1979
- Heft 5:  $\text{SiO}_2$  Herstellung, Struktur, Eigenschaften, Teil II 1979
- Heft 5:  $\text{SiO}_2$  Herstellung, Struktur, Eigenschaften, Teil III 1979

Redaktion: Abt. Wissenschaftspublizistik der  
Wilhelm-Pieck-Universität Rostock  
DDR-2500 Rostock, Vogelsang 13/14  
Fernruf 36 95 77

Herausgegeben von der Wilhelm-Pieck-Universität Rostock  
unter Genehmigungs-Nr.C 56/83

Druck: Ostsee-Druck Rostock, Betriebsteil Ribnitz, Werk II

## Inhaltsverzeichnis

	Seite
1. Einleitung	5
2. Konzeption der Datenbank SAFE	7
2.1 Struktur von SAFE	7
2.2 Eigenschaften der Programm-Moduln	9
2.3 Jobaufbau	9
2.3.1 SAFE-Startteil	10
2.3.2 SAFE-Körper	10
2.3.3 SAFE-Endeteil	11
2.4 Die SAFE-Steuerkarten	11
2.4.1 ICC und das LK-Eingabeprogramm	11
2.4.2 Aktive STK	13
2.4.3 Passive STK	15
2.5 Ende-Anweisungen	18
2.6 Struktur der SAFE-Dateien	18
2.6.1 CGLRELLDA Dateinummer=10	18
2.6.2 CGLRELLAD Dateinummer=14	19
2.6.3 CGLRELLK Dateinummer=12	20
2.6.4 CGLRELLX Dateinummer=13	20
2.6.5 CGLRFGZP Dateinummer=15	20
2.6.6 CGLRSVAE Dateinummer=16	20
3. Das FIXDAT-System	21
3.1 Aufgaben des FIXDAT-Systems	21
3.1.1 Wartung	21
3.1.2 Realisierung des Zugriffes zu FIXDAT-Elementen	23
3.2 Speicherstruktur und Datenschutz	23
3.3 Passive Steuerkarten (PCC)	24
3.4 Eintragen von FIXDAT-Elementen	24
3.5 Ersetzen von FIXDAT-Elementen	26
3.6 Streichen von FIXDAT-Elementen	27
3.7 Kataloge des FIXDAT-Systems	28
3.7.1 Kataloge der FIXDAT-Elemente	28
3.7.2 Adreßkatalog der FIXDAT-Blöcke	30
4. Primäre Datenblock-Verarbeitung	31
4.1 Stepaufbau und Datenblock-Definition	31
4.1.1 Kopfblock	33
4.1.2 Meßdatenblock	38
4.1.3 Standardform der Meßdatensätze	38
4.1.4 Standardisierte Datenblock-Struktur in SAFE	38
4.2 Passive Steuerkarten (PCC)	38
4.3 Die *END SEGMENT-STK	39
4.4 Einlesen der Datenblock-Lochkarten	39
4.5 Schreiben, Lesen und Löschen von Datenblöcken in SAFE	40
4.6 Datenblockbearbeitung im Hauptspeicher	42
4.6.1 DK- und ETA-Berechnung	42
4.6.2 Normalisieren	44
4.6.3 Das CHANGE-System	44
4.7 Drucken und Stanzen von Datenblöcken aus SAFE	48
4.8 Standard-Eingabesteuerkarten	49
4.9 Ende-Anweisungen	50

5.	Datenblock-Kataloge	51
5.1	Stepaufbau	51
5.2	Datenblock-Adresskatalog	51
5.3	Katalog der belegten Blocknummern	52
5.4	Kopfblock-Katalog mit Sortierung	52
5.5	Ende-Anweisungen	52
6.	Das Anpaß-Programmsystem	53
6.1	Step-Aufbau	55
6.2	Die COMMON-Blöcke	55
6.2.1	Der unbenannte COMMON-Block	60
6.2.2	Der COMMON-Block BLOCK	61
6.2.3	Der COMMON-Block ELPARA	61
6.3	Passive Steuerkarten	62
6.4	Der Modul ELSTCT	63
6.5	Der Modul ELLOAD	64
6.6	Der Modul ELPREP	66
6.7	Der Modul ELCOEF	68
6.8	Der Modul ELFIXi	69
6.9	Der Modul ELRES1	71
6.10	Der Modul ELRES2	72
6.11	Der Modul ELCHEM	72
6.12	Der Modul ELSWIT	74
6.13	Der Modul ELUSER	75
6.14	Ende-Anweisungen	75
6.15	Anwendungsbeispiele	76
7.	Theorievarianten	78
8.	Kataloge	82
	- Datenblockkatalog	83
	- Verzeichnis der verwendeten Abkürzungen für Ionennamen	113
	- Tabelle der Meßarten	116
	- Literatur	117
9.	Teilprogrammsystem EXCOND	124

## 1. Einleitung

Das vorliegende Heft der Rostocker Physikalischen Manuskripte ist die zweite Arbeit in dieser Serie, die von Mitarbeitern der Falkenhagenschen Schule zu Problemen elektrolytischer Lösungen verfaßt wurde. In der ersten Arbeit (Heft 4) stand die Weiterentwicklung der Statistischen Theorie von Elektrolytlösungen im Mittelpunkt. Bereits in den grundlegenden Arbeiten von Debye, Hückel, Onsager und Falkenhagen in den zwanziger und dreißiger Jahren galt das besondere Interesse dem Vergleich der Theorie mit dem Experiment - einerseits, um die zugrunde liegenden Modellvorstellungen zu überprüfen und die Gültigkeitsgrenzen der Formeln festzustellen, - andererseits, um zu einem vertieften Verständnis der sehr komplizierten molekularen Struktur in Elektrolytlösungen zu gelangen. Die rasch anwachsende Zahl von Messungen und die zunehmende mathematische Kompliziertheit der theoretischen Formeln legen es nahe, die Elektronische Datenverarbeitung für diesen Vergleich einzusetzen. Nach der Pionierarbeit von R. L. Kay/J. Amer. Chem. Soc. 82, 2099 (1966)/ setzte sich dieses Verfahren schnell durch. In der Rostocker Elektrolytforschungsgruppe begannen Entwicklungsarbeiten für eine Datenbank im Jahre 1970, in deren Resultat bis 1975 ein Programmsystem und eine Datensammlung auf der EDVA BESM-6 entstanden. Aufbauend auf den mit dieser BESM-Version gewonnenen Erfahrungen wurde die vorliegende Version "SAFE 77" geschaffen, die von der Programmseite her dem Nutzer die Arbeit sehr erleichtert, und die wesentlich mehr experimentelle Daten enthält. SAFE 77 ist den Datenbanken der Gruppe von Prof. J. C. Justice (Université Pierre et Marie Curie, Paris, Frankreich) und der Gruppe von Prof. J. Barthel (Universität Regensburg, BRD) sowohl qualitativ als auch quantitativ ebenbürtig.

Die Förderung der Arbeiten an SAFE durch die Professoren Dr. W. Ebeling, Dr. G. Kelbg, Dr. D. Kremp und Dr. H. Ulbricht hat wesentlich zum Gelingen beigetragen. An der Programmentwicklung und Datensammlung haben entscheidenden Anteil:

C. Baudisch, Dr. E. Bich, R. Blockus, Dr. J. Einfeldt, S. Elshazly, Dr. P. Faigl, Doz. Dr. R. Feistel, R. Gawenda, Dr. H. Krienke, H. Künstner, R. Nareyka, N. Schmelzer, W. Timm und H. Wiechert.

Zahlreiche Diskussionen wurden mit Prof. J. Barthel (BRD), Prof. G. Janz (USA), Prof. J. C. Justice (Frankreich), Prof. R. L. Kay (USA) und Prof. D. G. Miller (USA) zu Fragen der Datenbankkonzeption und zur Datensammlung geführt.

Die Autoren des vorliegenden Heftes danken allen Genannten für ihren Beitrag zur Entwicklung von SAFE 77. Besonderer Dank gebührt Frau Hiltrud Bahlo für das recht mühsame Schreiben dieses Manuskriptes.

Abschließend möchten die Autoren aus ihren umfangreichen Programmiererfahrungen an SAFE heraus die Gültigkeit der folgenden Murphy'schen Gesetze zur Computerprogrammierung bestätigen:

1. Any given program, when running, is obsolete.
2. Any given program costs more and takes longer.
3. Program complexity grows until it exceeds the capability of the programmer who must maintain it.



## 2. Konzeption der Datenbank SAFE

Die Datenbank SAFE stellt die Weiterentwicklung der Elektrolyt-Datenbank auf der EDVA BESM-6 dar. Sie wurde auf der EDVA ESER 1040 im Betriebssystem OS/ES in der Programmiersprache FORTRAN IV realisiert. Wesentliche Vorzüge der vorliegenden Variante (SAFE 77) sind eine große Nutzerfreundlichkeit <sup>1)</sup> und allgemeine Einsetzbarkeit für Datenmengen unterschiedlichster Herkunft und Struktur. In der vorliegenden Arbeit werden alle notwendigen Informationen gegeben, damit ein Nutzer mit SAFE arbeiten kann. Die vorliegende Variante ist lochkartenorientiert, d.h. die Steuerinformationen und die Daten werden über Lochkarten (LK) dem Programmsystem übermittelt. Eine Erweiterung auf Dialogbetrieb über ein Terminal ist möglich.

### 2.1 Struktur von SAFE

Aus der Abb. 2.1 ist zu entnehmen, daß SAFE aus zwei Teilkomplexen besteht, den SAFE-Programmen, die die verschiedenen Tätigkeiten realisieren, und den SAFE-Dateien zur Speicherung gewisser Daten.

Charakteristisch an den SAFE-Programmen ist, daß sie eine Menge von Programm-Modulen darstellen, die miteinander nur über die Datenmengen, die bei ihren Tätigkeiten entstehen, in Verbindung stehen. Diese Programm-Module werden durch spezielle Steuerkarten (STK) aktiviert. Somit verfügt der Nutzer von SAFE prinzipiell über alle Teilfunktionen von SAFE und kann sich ein Programm, d.h. eine Menge von Modulen, die in einer wohldefinierten Reihenfolge abzarbeiten sind, selbst mit Hilfe der STK zusammenstellen. Wegen der begrenzten Hauptspeicherkapazität wurden die Module, die logisch miteinander in Zusammenhang stehen, zu SAFE-Teilprogrammen zusammengefaßt. In der Variante SAFE 77 sind folgende Teilprogramme enthalten:

1. FIXPIX zur Arbeit mit FIXDAT-Blöcken (s. Kap. 3)
2. EINEIN zur Arbeit mit Daten-Blöcken (s. Kap. 4)
3. KATALG zur Herstellung von Katalogen (s. Kap. 5)
4. ELPIT Anpaßprogramm-System (s. Kap. 6).

Hierbei sind FIXPIX usw. die FORTRAN-Namen der Teilprogramme (s. 2.3). Über die in den Teilprogrammen verwirklichten Tätigkeiten wird in den folgenden Kapiteln berichtet.

Die SAFE-Dateien 10 und 14 stellen den zentralen Datenspeicher dar. In ihnen befinden sich alle FIXDAT- und Datenblöcke. Von allen Teilprogrammen wird auf diese Dateien als Eingabe- und Ausgabe-Datei Bezug genommen.

Die erste Tätigkeit jedes Teilprogramms besteht darin, das Lochkarten (LK)-Eingabeprogramm zu aktivieren. Dieses Programm überträgt die LK-Bilder aus der vom Betriebssystem gefüllten Datei SYSIN in die Datei 12. Damit ist SAFE unabhängig von der SYSIN, und die LK-Bilder sind permanent gespeichert.

<sup>1)</sup> Build a system that even a fool can use, and only a fool will want to use it. Murphy

Es ist somit die Möglichkeit gegeben, nach einem Maschinenfehler oder einem anderweitig hervorgerufenen anormalen Programmende einen Wiederstart vorzunehmen, d.h. das Programm ab einer Stelle erneut abzuarbeiten, die zeitlich vor dem anormalen Ende lag.

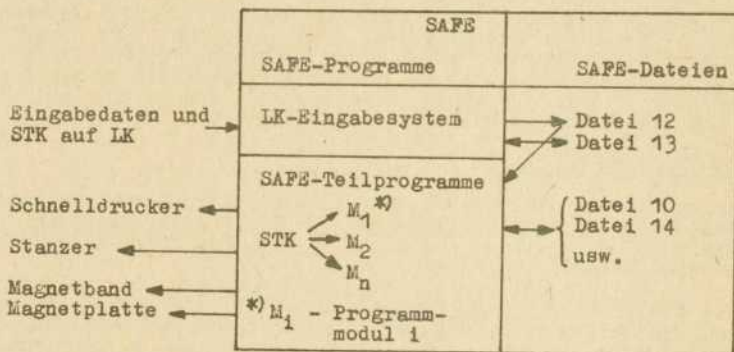


Abb. 2.1: Struktur der Elektrolyt-Datenbank SAFE.

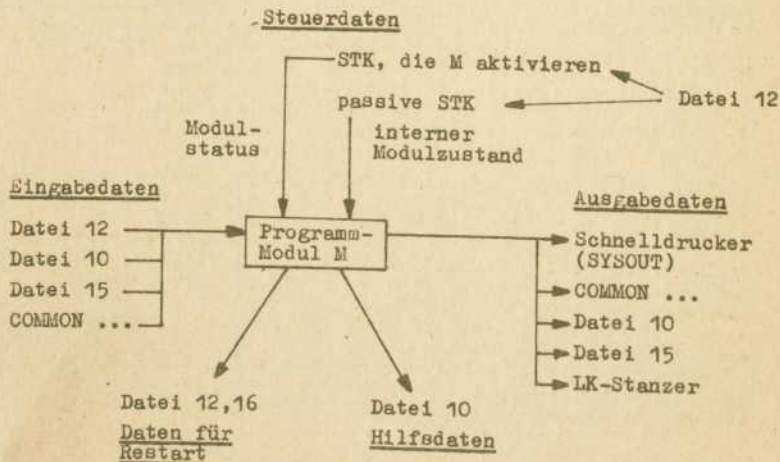


Abb. 2.2: Zusammenarbeit eines Programm-Moduls mit den verschiedenen Datenarten und Dateien.

## 2.2 Eigenschaften der Programm-Moduln

Jeder Modul erzeugt aus einer Menge von Eingabedaten mit Hilfe eines Algorithmus M eine Ausgabedatenmenge (Abb. 2.2). Jedem Modul ist eindeutig eine natürliche Zahl (Modul-Nummer) zugeordnet. Außerdem wird die Arbeit einiger Algorithmen durch eine weitere natürliche Zahl (Modul-Status) gesteuert. Bei der Beschreibung der einzelnen Moduln ist angegeben, welcher Modul-Status durch welche STK erzeugt wird.

Aus der Abb. 2.2 ist weiterhin zu entnehmen, daß durch passive STK der interne Zustand der Moduln gestellt wird. Zur Arbeit des Moduln werden i.a. Hilfedaten benötigt, die sich gewöhnlich im FIXDAT-System befinden. Außerdem ist bei einigen Moduln, die große Rechenzeiten benötigen, vorgesehen, daß Zwischenresultate in den Dateien 12 und 16 für einen Wiederstart (RESTART) gerettet werden.

## 2.3 Jobaufbau

Um mit der Datenbank SAFE zu arbeiten, ist folgender Jobaufbau zu verwenden:

```
// ... JOB      ...
//      CLASS = ...
} steps
//
```

Jeder Step hat folgende Struktur:

```
//stepname EXEC CGLR001
//FORT.SYSIN DD *
      CALL xxxxxx(&1) Name eines SAFE-Teilprogrammes
1      STOP
      END
/*
//GO.SYSIN DD *
} SAFE-File
/*
```

Die Prozedur CGLR001 ist eine erweiterte Variante der Standardprozedur FORSTCLG, wobei verschiedene Programmbibliotheken und die SAFE-Dateien automatisch gekoppelt sind. Jeder

SAFE-File besteht aus n LK mit folgender Struktur:

1.LK: NAME ...	Name-Karte	} SAFE-Startteil
2.LK: **...	ICC-Karte	
} Steuerkarten und Daten		} SAFE-Körper
n.LK: *STOP	STOP-Karte	SAFE-Endteil



### 2.3.1 SAFE-Startteil

In der NAME-Karte ist der Bearbeiternamen und eine Kennzahl angegeben. Diese Karte dient dem Schutz der Datenbank vor unerlaubter Nutzung durch Unbefugte. Das Eingabeprogramm überprüft, ob der Bearbeiternamen und die Kennzahl in einem speziellen Verzeichnis (FIXDAT-Block) enthalten sind. Ist das nicht der Fall, so lehnt das Eingabeprogramm die Zusammenarbeit ab und beendet den Jobstep. Ist der NAME im Katalog enthalten, so wird aus dem Verzeichnis eine Schlüsselzahl entnommen. Bei der weiteren Zusammenarbeit im SAFE-Körper mit der Datenbank sind gewisse Tätigkeiten nur einem Teil der Benutzer erlaubt. Der Umfang der Zusammenarbeit ist in der Schlüsselzahl codiert. Die Benutzer werden in zwei Gruppen eingeteilt - in die Datenbank-Verantwortlichen und in die restlichen Nutzer. Eine Reihe von Modulaufrufen sind nur den Datenbank-Verantwortlichen möglich. Dazu gehören alle Veränderungen in FIXDAT-Blöcken (s. Kap. 3) und ein teilweiser Leseschutz. In der Schlüsselzahl ist weiterhin codiert, welche Typen (MESSUNG) von Daten-Blöcken (s. 4.) vom Benutzer in die Datenbank eingetragen werden dürfen. Dieser Schreibschutz ist notwendig, da nicht jeder Benutzer alle spezifischen Bedingungen für das Eintragen eines Daten-Blockes zu einer Messungsart kennt. Für Daten-Blöcke besteht kein Leseschutz, d.h. jeder Benutzer kann alle Daten-Blöcke lesen. Die zweite LK des Startteils (Instream Control Card) dient zur Steuerung des LK-Eingabestroms (s. 2.4).

### 2.3.2 SAFE-Körper

Der SAFE-Körper hat folgenden Aufbau:

*... (aktive STK)	}	<u>SAFE-Glied</u>
} LK-Eingabedaten und bei Bedarf		
} passive STK		
*... (aktive STK)	}	SAFE-Glied
} LK-Eingabedaten und bei Bedarf		
} passive STK		

usw.

Die Form der aktiven STK ist in 2.4 beschrieben. Die erste aktive STK eines SAFE-Körpers kann in einigen Teilprogrammen (z.B. EINEIN) entfallen. Es wird dann eine Standard-STK verwendet, die bei den einzelnen Teilprogrammen beschrieben ist. Alle LK, die auf eine aktive STK folgen, werden von dieser verarbeitet. Die genaue Struktur dieser LK ist durch die Moduln festgelegt, die von der aktiven STK aktiviert werden. Sie wird deshalb für jeden Modul einzeln beschrieben. Im allgemeinen können an beliebigen Stellen innerhalb der LK-Eingabedaten passive STK (Passive Control Card) liegen. Diese PCC behalten ihre Wirkung, bis sie durch eine entsprechende PCC aufgehoben werden oder bis der Jobstep beendet wurde. Das Ende einer Eingabedatenmenge für eine aktive STK wird durch eine folgende aktive STK, die \*END SEGMENT-Karte, oder die \*STOP-Karte markiert.

### 2.3.3 SAFE-Endeteil

Die letzte Karte eines SAFE-Files ist immer die STOP-Karte. Folgen auf die STOP-Karte weitere Eingabe-LK, so werden diese ignoriert. Fehlt die STOP-Karte, so kann das LK-Eingabeprogramm i.a. nicht ordnungsgemäß enden, und der Jobstep wird abgebrochen.

### 2.4 Die SAFE-Steuerkarten

Es gibt 3 Typen von SAFE-STK:

a) Eingabesteuerkarte (Instream Control Card) ICC

b) aktive STK

c) passive STK (Passiv e Control Card) PCC

Es können bis zu 75 aktive STK und PCC's je SAFE-Teilprogramm definiert werden.

#### 2.4.1 ICC und das LK-Eingabeprogramm

Bekanntlich werden die LK-Bilder vom Betriebssystem OS/ES in die Datei SYSIN eingetragen. Aus zwei Gründen ist es notwendig, diese LK-Bilder in die SAFE-eigene Datei CGLRELLK, die nach Jobende erhalten bleibt, einzutragen:

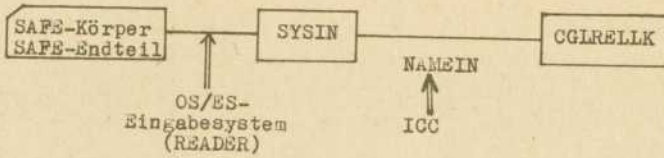
1. Die Daten der SYSIN gehen bei Step- bzw. Jobende verloren. Die Moduln von SAFE sind aber auf die Möglichkeit eines Wiederstarts (RESTART) nach anormalem Jobabbruch ausgelegt, wozu u.a. die Informationen der Eingabe-LK gerettet werden müssen.

2. Bedingt durch die Struktur des SAFE-Körpers muß teilweise rückwärts gelesen werden, was in der SYSIN unmöglich ist.

In der Abb. 2.3 ist skizziert, wie das Eingabeprogramm unter Steuerung einer ICC die Datei 12 CGLRELLK (s.a. 2.6.3) füllt.

Folgende ICC sind vorhanden:

ICC	Wirkung
* * DELETE ALL	1 7 (nur für Datenbank-Verantwortliche)
* * DELETE	2 3 7
* * DELETE AND STORE	2 3 5 7
* * DELETE AND COMPUTE	2 3 5 6 7
* * STORE	3 4 5 7
* * COMPUTE	3 4 5 6 7
* * RESTART 1	8
* * RESTART 2	8
1 . . . 10 . . . 20	LK-Spalte



CGLRELLK:

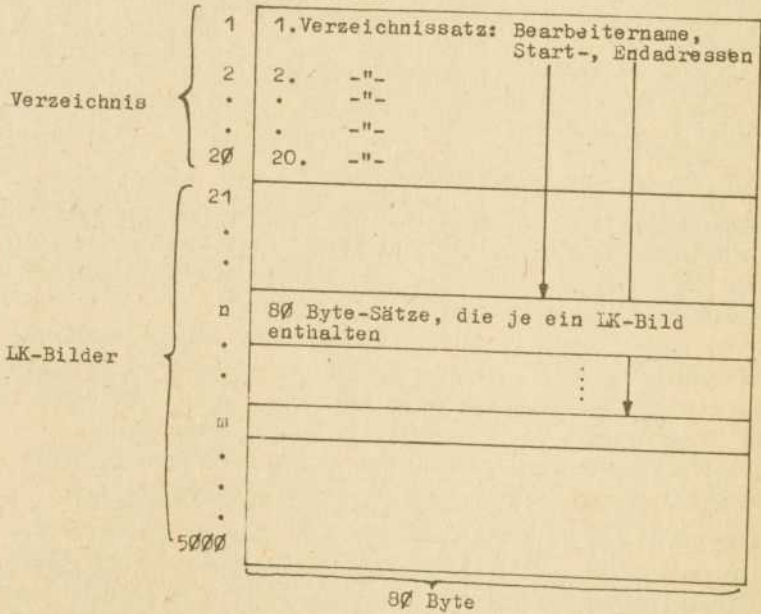


Abb. 2.3: Wirkung der ICC auf das LK-Eingabeprogramm und Struktur der Datei CGLRELLK.

- 1 Alle Verzeichnissätze werden gelöscht (d.h. Byte 1 ... 32 = Leerzeichen, Byte 33 ... 80 = Ø). Damit ist der "Leerzustand" der Datei 12 erzeugt.
- 2 Lösche - falls vorhanden - den Verzeichnissatz, der den gleichen Bearbeiternamen enthält wie die NAME-Karte.
- 3 Lösche alle Verzeichnissätze, die älter als 30 Tage sind.
- 4 Falls ein Verzeichnissatz vorhanden ist, der den gleichen Bearbeiternamen enthält wie die NAME-Karte, so erfolgt der Abbruch (STOP) des Jobschrittes.
- 5 Trage alle LK-Bilder bis einschließlich der Karte \*STOP (SAFE-Endeteil) aus der SYSIN in die CGLRELLK ein und schreibe einen entsprechenden Verzeichnissatz.
- 6 Setze die Bearbeitung nach Rücksprung ins aufrufende SAFE-Teilprogramm mit der Interpretation des ersten LK-Bildes aus dem SAFE-Körper fort.
- 7 Danach wird die Abarbeitung des Jobschrittes beendet.
- 8 Mit dieser ICC wird der Wiederstart eines SAFE-Teilprogramms veranlaßt. In der Datei CGLRELLK befinden sich bereits LK-Bilder unter einem Verzeichnissatz, der den gleichen Bearbeiternamen enthält wie die NAME-Karte. Diese LK-Bilder gelangten entweder über eine STORE-ICC in die CGLRELLK oder bei einem COMPUTE-Lauf wurden infolge Zeitüberschreitung oder Maschinenfehler nicht alle LK-Bilder bis zur \*STOP-Karte verarbeitet. Bei dem einfachen Restart werden die LK-Bilder, beginnend mit der ersten LK verarbeitet. Dieses Regime wird in den SAFE-Teilprogrammen FIXFIX, EINEIN und KATALG verwendet. Beim erweiterten Restart (SAFE-Teilprogramm ELFIT) werden im Teilprogramm weitere Informationen gerettet, die einen Restart innerhalb der LK-Folge gestatten (s. 6.)

Folgen auf die ICC's \*\*DELETE ALL, \*\*DELETE und \*\*RESTART weitere LK (SAFE-Körper und SAFE-Endeteil), so werden diese ignoriert. In den LK-Spalten 79 und 80 der ICC's kann eine Drucksteuerinformation angegeben werden. Dazu gibt es folgende Möglichkeiten:

LK-Spalte 79 = Leerzeichen:	Keine Verzeichnistabelle
= 1	Ausgabe der Verzeichnistabelle
LK-Spalte 80 = Leerzeichen:	Keine Listung der Eingabe LK
= 1	Listung aller STK
= 2	Listung aller Eingabe-LK

#### 2.4.2 Aktive STK

Mit den aktiven STK wird festgelegt, in welcher Reihenfolge welche Moduln mit welchem Modulstatus aktiviert werden. Es können maximal 20 Moduln zu einer Modulfolge vereinigt werden, die durch eine aktive STK aktiviert werden. Es gibt vier Möglichkeiten, aktive STK zu formulieren.



2.4.2.1 \*"CCC-Name"

Diese STK (Compute Control Card) entspricht einer festgelegten Folge von Moduln mit bestimmten Modulstatuswerten. Diese Folge ist ein Element des FIXDAT-Blockes 10. In den jeweiligen SAFE-Teilprogrammen sind die Modulfolgen, für die eine CCC existiert, erläutert.

2.4.2.2 \*"SCC-Name"

Diese STK (Single Modul Compute Control Card) aktiviert genau einen Modul mit einem bestimmten Modulstatus.

2.4.2.3 \*BEGIN PROCEDURE

} 1 ... 20 MCC's

\*END PROCEDURE

Die MCC's (Modul Control Card) sind die eigentlichen STK, die unmittelbar einen Modul aktivieren. Sie werden in den einzelnen SAFE-Teilprogrammen beschrieben. Eine SCC ist offensichtlich nur eine vereinfachte Version der BEGIN-END-Version mit einer MCC.

2.4.2.4 \*"CCC-Name"

} 1 ... 20 MCC's

\*END PROCEDURE

Durch die CCC wird eine Modulfolge erzeugt. Die Statuswerte der Moduln dieser Folge werden mit den MCC's überschrieben. Dabei muß innerhalb der MCC's die gleiche Reihenfolge der Moduln eingehalten werden wie durch die CCC vorgegeben. Wird in der CCC-Modulfolge ein Modul mehrfach (evtl. mit unterschiedlichen Statuswerten) aktiviert, so überschreibt die erste MCC den Statuswert des entsprechenden ersten Moduls in der Folge usw.

Beispiel:

MCC	aktiviert Modul	mit Modulstatus
A	X1	1
B	X1	2
C	X2	1

Die CCC \*ALPHA entspricht der MCC-Folge: A,B,C,A,C,B

Die MCC-Folge B,B,C,B,C,A wird durch folgende Prozedur erzeugt

```
*ALPHA
B
B
B
A
*END PROCEDURE
```

Tritt in die MCC-Folge, die eine CCC korrigiert, eine STK auf, die sich auf einen Modul bezieht, der in der durch die CCC erzeugten Modulfolge nicht enthalten ist, so wird diese MCC ignoriert.

### 2.4.3 Passive Steuerkarten (PCC)

Passive STK legen ein Arbeitsregime fest, das für einen oder mehrere Moduln gilt. Dieses Arbeitsregime bleibt solange erhalten, bis es durch eine weitere entsprechende PCC verändert wird. Ein derartiges Arbeitsregime gibt beispielsweise an, in welchem LK-Code die Symbole der LK-Bilder verschlüsselt sind. PCC's können prinzipiell an einer beliebigen Stelle im SAFE-Körper liegen. Da sie aber auf die Verarbeitung der folgenden LK evtl. einen unmittelbaren Einfluß nehmen, gibt es einige Einschränkungen, die bei den einzelnen Typen von PCC besprochen werden. Es werden in diesem Abschnitt die LK-Code-PCC's und die FORMAT-PCC beschrieben, die in mehreren SAFE-Teilprogrammen definiert sind. Weitere PCC's, die nur für ein Teilprogramm von Bedeutung sind, werden dort erläutert.

#### 2.4.3.1 LK-Code-PCC

SAFE verarbeitet LK, die im ESER (IBM)-, R300- und BESM (ICT Dubna)-Code abgelocht wurden. Die STK haben folgenden Aufbau:

PCC	LK-Code
-ESER CODE	IBM (Standard)
-BESM CODE	ICT Dubna
-R300 CODE	R300

1 . . . 10 LK-Spalte

In der Tabelle 2.1 sind die erlaubten LK-Symbole angegeben. Die LK-Code-PCC können an einer beliebigen Stelle im SAFE-Körper liegen.

Tabelle 2.1 Erlaubte Symbole und Lochkartencodes für SAFE

Symbole: Ø 1 2 3 4 5 6 7 8 9

A B C D E F G H I J K L M N O P Q R S T U V W X Y Z

sowie die Symbole	-ESER CODE (IBM)	-BESM CODE (ICT Dubna)	-R3ØØ CODE (R3ØØ)
Leerzeichen	blank	blank	2 - 8
+	12 - 6 - 8	12	12
-	11	11	11
*	11 - 4 - 8	11 - 4 - 8	11 - 4 - 8
/	Ø - 1	Ø - 1	Ø - 1
(	12 - 5 - 8	{ Ø - 5 - 8 Ø - 4 - 8	4 - 8
)	11 - 5 - 8	{ 12 - 6 - 8 12 - 4 - 8	11 - 3 - 8
=	6 - 8	{ Ø - 3 - 8 Ø - 6 - 8	11 - 5 - 8
.	12 - 3 - 8	12 - 3 - 8	12 - 3 - 8
,	Ø - 3 - 8	Ø - 3 - 8	Ø - 3 - 8
' (Apostroph)	5 - 8	{ 12 - 4 - 8 12 - 6 - 8	6 - 8
:	2 - 8	12 - 5 - 8	5 - 8
<	12 - 4 - 8	11 - 6 - 8	11 - 6 - 8
>	Ø - 6 - 8	11 - 5 - 8	Ø - 6 - 8
%	Ø - 4 - 8	2 - 8	Ø - 4 - 8
;	11 - 6 - 8		12 - 4 - 8
?	Ø - 7 - 8		12 - 11
"	7 - 8		11 - 2 - 8
&	12		
!	11 - 2 - 8		
¤ (\$)	11 - 3 - 8		
@	4 - 8		
[	12 - 2 - 8		
]	11 - 2 - 8		
#	3 - 8		
_ (Unterstr.)	Ø - 5 - 8		
~	11 - 7 - 8		
^	12 - 11		
	12 - 7 - 8		

## 2.4.3.2 FORMAT-PCC

Die LK-Eingabe von FIXDAT-Elementen (s. 3), Meßdatensätze des Meßdatenblockes (s. 4.) usw. geschieht unter externer Format-Steuerung. Durch die LK: 1.LK: -FORMAT

2.LK: Format-Spezifikation

wird festgelegt, welche LK-Spalten mit welcher Formatspezifikation zu interpretieren sind. Die FORMAT-PCC stimmt weitgehend mit der in FORTRAN üblichen FORMAT-Anweisung überein.

Die Format-Spezifikationskarte hat folgenden Aufbau:

$$F_1 [ , F_2 [ , F_3 \dots ] ] .$$

Die Formatgruppen  $F_i$  haben die Struktur  $n \alpha m$  mit dem Wiederholungsfaktor  $n$  = nicht angegeben | Leerzeichen | Leerzeichen  $k$ , der Spezifikationsangabe  $\alpha = A | E | D | I | J | X | /$  und der Anzahl der unter Steuerung von  $\alpha$  zu interpretierenden LK-Spalten  $m = \dots 1$ . Hierbei gilt  $1 \leq k \leq 168$  und  $1 \leq l \leq 80$ . Ist der Wiederholungsfaktor nicht angegeben oder sind nur Leerzeichen vorhanden, so wird automatisch  $n = 1$  gesetzt.

Formatspezifikation A: Aus  $m$  LK-Spalten werden  $(m+3)/4$  4-Byte-Worte linksbündig mit  $m$  alphanumerischen Symbolen gefüllt.

Falls  $m$  nicht restfrei durch 4 teilbar ist, so wird das letzte Wort mit Leerzeichen aufgefüllt.

Formatspezifikation E: Der Inhalt der  $m$  LK-Spalten wird als REAL\*4-Größe interpretiert und in ein 4-Byte-Wort eingetragen. Achtung - falls explizit ein Dezimalexponent angegeben ist, werden alle Symbole nach  $\begin{bmatrix} E \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} + \\ - \end{bmatrix}$  bis einschließlich der  $m$ . Position als ganzzahliger Exponent gedeutet, wobei Leerzeichen wie  $\emptyset$  behandelt werden.

Formatspezifikation D: Der Inhalt der  $m$  LK-Spalten wird als REAL\*8-Größe interpretiert und in ein 8-Byte-Wort eingetragen. Der Bearbeiter hat Sorge zu tragen, daß REAL\*8-Größen an Doppelwortgrenzen beginnen.

Formatspezifikation I: Der Inhalt der  $m$  LK-Spalten wird als INTEGER\*4-Größe interpretiert und in ein 4-Byte-Wort eingetragen.

Formatspezifikation J: Der Inhalt der  $m$  LK-Spalten wird als INTEGER\*2-Größe interpretiert und in ein 2-Byte-Wort eingetragen.





Block eindeutig durch eine Nummer NR (INTEGER\*4-Größe in den Byte 173 - 176 gekennzeichnet ist.

ISV (INTEGER\*2-Größe in dem Byte 169 - 170) gibt die Satzadresse des vorhergehenden SAFE-Satzes zur gleichen Nummer NR an. Im ersten SAFE-Satz zu einer Nummer NR gilt ISV = 0.

ISP (INTEGER\*2-Größe in den Byte 171 - 172) gibt die Satzadresse des nachfolgenden SAFE-Satzes zur gleichen Nummer NR an. Im letzten SAFE-Satz zu einer Nummer NR gilt ISP = 0.  
Für alle un belegten SAFE-Sätze gilt NR = 0.

## 2.6.2 CGLRELA Dateinummer = 14

In dieser Datei befinden sich 115 Sätze der Länge 176 Byte, die das Adressbuch für die Blöcke der CGLRELA bilden. Alle in den Sätzen auftretenden Variablen sind INTEGER\*2-Größen. Aufbau des ersten Satzes:

Byte	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	...	1	1	1	1
														7	7	7	7
														3	4	5	6
	IFREI		unbelegt		Adr <sub>1</sub>		Inf <sub>1</sub>		Adr <sub>2</sub>		Inf <sub>2</sub>			Adr <sub>43</sub>		Inf <sub>43</sub>	
					F <sub>1</sub>		F <sub>2</sub>							F <sub>43</sub>			

IFREI ist die Adresse des ersten un belegten SAFE-Satzes in der CGLRELA.

Die Byte 5 - 176 bilden das Adressbuch für die maximal 43 verschiedenen FIXDAT-Blöcke (s. 3.). Hierbei ist Adr<sub>i</sub> die Adresse des ersten SAFE-Satzes, der zum FIXDAT-Block mit der FIXDAT-Nummer i gehört. Das Informationsswort Inf<sub>i</sub> wird errechnet zu

$$\text{Inf}_i = 512 \cdot \text{"Anzahl der 4-Byte Worte je FIXDAT-Element"} + \text{"Anzahl der im FIXDAT-Block enthaltenen Elemente"}$$

Ist ein FIXDAT-Block i nicht definiert, so gilt Adr<sub>i</sub> = 0 und Inf<sub>i</sub> = 0.

Aufbau des 2. bis 115. Satzes:

Satz	Byte	Inhalt
2	1 - 2	Adresse des ersten SAFE-Satzes (KOPF-Satz) zur Datenblocknummer = 1
	3 - 4	"- = 2
	.	.
	.	.
115	175-176	"- = 88
	.	.
	.	.
	.	.
115	1 - 2	"- = 9945
	.	.
	.	.
	175-176	"- = 10032

Diese Sätze bilden das Adressbuch für die Daten-Blöcke (s. 4.), für die die Blocknummern 1 ... 10 000 reserviert sind. Ist ein Daten-Block i nicht definiert, so ist die entsprechende Adresse gleich 0.

### 2.6.3 CGLRELLK Dateinummer = 12

Diese Datei besteht aus 5000 Sätzen der Länge 80 Byte. Sie enthält die LK-Bilder (s. 2.4.1). Die Sätze 1 bis 20 bilden das Verzeichnis, die Sätze 21 bis 5000 enthalten die LK-Bilder. Jeder Verzeichnissatz hat folgenden Aufbau:

Byte	Inhalt
1 ... 24	Bearbeitername
25 ... 32	alphanumerisches Schreibdatum
33 ... 36	Datum (= Tag + 30·Monat + 360·Jahr)
37 ... 38	Startadresse der LK-Bilder
39 ... 40	Endadresse der LK-Bilder
41 ... 42	relative Adresse des nächsten zu lesenden LK-Bildes
43 ... 80	Restart-Daten (19 INTEGER*2-Worte) IST (22 ... 40) aus COMMON/STATUS/

In einem unbelegten (gelöschten) Verzeichnissatz befinden sich in den Bytes 1 ... 32 Leerzeichen und in den Bytes 33 ... 80 sind Nullen gespeichert.

### 2.6.4 CGLRELLX Dateinummer = 13

Diese Datei besteht aus 5000 Sätzen der Länge 80 Byte. Sie ist eine temporäre Arbeitsdatei für das Eingabeprogramm und hat den gleichen Aufbau wie die CGLRELLK.

### 2.6.5 CGLRFGZP Dateinummer = 15

Diese Datei besteht aus 999 Sätzen der Länge 1024 Byte. Sie ist für den Nutzer frei verfügbar und z.B. für die Speicherung binärer Verteilungsfunktionen vorgesehen.

### 2.6.6 CGLRSAVE Dateinummer = 16

Diese Datei besteht aus 600 Sätzen der Länge 1024 Byte. Sie dient im Anpassprogramm ELFIT (s. 6.) als Rettungsspeicher für den erweiterten Restart (s. 2.4.1).

### 3. Das FIXDAT-System

#### 3.1 Aufgaben des FIXDAT-Systems

Bei der Bearbeitung und Speicherung großer Datenmengen treten zahlreiche Größen auf, die nur wenige definierte Werte annehmen können - wobei diese Größen aber in vielen Datenblöcken auftreten und meist viel Speicherplatz benötigen. Solche FIXierte DATEN werden im FIXDAT-System gespeichert. In den Datenblöcken sind dann nur noch Verweise auf das betreffende Element im FIXDAT-System notwendig. Eine weitere Menge von Größen in Datenblöcken und in Unterprogrammen des SAFE-Systems hat die Eigenschaft, daß sie zur Abarbeitung von Daten durch SAFE nur teilweise und/oder nur zeitweise benötigt wird. Solche Daten werden ebenfalls im FIXDAT-System gespeichert und durch dieses nach Abruf zur Verfügung gestellt.

Alle Größen, die im FIXDAT-System gespeichert sind, werden in FIXDAT-Blöcken zusammengefaßt. Die Elemente eines FIXDAT-Blockes (FIXDAT-Elemente) haben alle die gleichen Eigenschaften: gleicher Speicherplatzbedarf, gleiche Struktur und gleiche inhaltliche Bedeutung. Jeder FIXDAT-Block ist eindeutig durch eine ganzzahlige positive Nummer (1 ... 43) (FIXDAT-Nummer) gekennzeichnet. Jedes Element eines FIXDAT-Blockes ist durch seine Position in der (linearen)Elementreihe eindeutig identifiziert (Element-Nummer 1 ... 511).

Es sind zwei Teilaufgaben im Rahmen des FIXDAT-Systems zu lösen:

1. Wartung der FIXDAT-Blöcke
2. Realisierung des Zugriffs zu FIXDAT-Elementen von anderen SAFE-Teilprogrammen aus.

##### 3.1.1 Wartung

Mit Hilfe des SAFE-Teilprogrammes FIXFIX werden die Grundoperationen im FIXDAT-System realisiert. Diese bestehen im Eintragen (INCLUDE), Ersetzen (SUBSTITUTE) und Streichen (EXCLUDE) von FIXDAT-Elementen. Weiterhin können verschiedene Kataloge der FIXDAT-Blöcke ausgegeben werden (CATALOG). Außerdem ist die Beendigung der Arbeit von FIXFIX zu organisieren (STOP, RETURN). Alle Grundoperationen werden durch entsprechende STK veranlaßt. Der Step zur Arbeit mit dem FIXDAT-System hat folgenden Aufbau:



```

//stepname EXEC CGLR001
//PORT.SYSIN DD *
    CALL FIXFIX (&1)
1    STOP
    END
/*
//LKED.SYSIN DD *
OVERLAY A
    INSERT STKINP,NAMEIN,XBEGIN,XSTOP,RESTRT,NAME0,NAME1,
    NAME2,NAME3,NAME00,NAME01,NAME02,ELADIN,
    ELADOU,ANASTK,NOTE,BESMCD,R300CD,XDATOH
OVERLAY A
    INSERT FIXINC,FIXSUB,INCSUB
OVERLAY A
    INSERT FIXEXC,FIXADR
OVERLAY A
    INSERT FIXKAT,FIXKA1,FIXKA2,FIXBLK
/*
//GO.SYSIN DD *
} SAFE-File
/*

```

Die Struktur des SAFE-Files wurde in 2.3 angegeben. Die Struktur der SAFE-Glieder entsprechend der zu lösenden Aufgabe wird in den folgenden Abschnitten besprochen.

In der Tabelle sind die im FIXDAT-Teilprogramm definierten STK zusammengestellt.

Lochkartenspalte	Beschreibung s. Abschnitt	STK	Modul- name	Modul- nummer	Modul- status
1.....10.....20....					
-ESER CODE	2.4.3	PCC			
-BESM CODE	2.4.3	PCC			
-R300 CODE	2.4.3	PCC			
-FORMAT	2.4.3	PCC			
*FIXDAT INCLUDE	3.4	SCC	FIXINC	3	0
*FIXDAT SUBSTITUTE	3.5	SCC	FIXSUB	4	0
*FIXDAT EXCLUDE	3.6	SCC	FIXEXC	5	0
*FIXDAT CATALOG	3.7.1	SCC	FIXKAT	6	1
*FIXDAT CATALOG PAGE 1	3.7.1	SCC	FIXKAT	6	3
*FIXDAT CATALOG PAGE 2	3.7.1	SCC	FIXKAT	6	4
*FIXDAT CATALOG PAGE 3	3.7.1	SCC	FIXKAT	6	5
*FIXDAT CATALOG PAGE 4	3.7.1	SCC	FIXKAT	6	6
*FIXDAT CATALOG PAGE 5	3.7.1	SCC	FIXKAT	6	7
*FIXDAT CATALOG PAGE 6	3.7.1	SCC	FIXKAT	6	8
*FIXDAT CATALOG PAGE 7	3.7.1	SCC	FIXKAT	6	9
*FIXDAT CATALOG PAGE 8	3.7.1	SCC	FIXKAT	6	10
*FIXDAT CATALOG PAGE 9	3.7.1	SCC	FIXKAT	6	11
*FIXDAT CATALOG PAGE 10	3.7.1	SCC	FIXKAT	6	12
*FIXDAT CATALOG PAGE 11	3.7.1	SCC	FIXKAT	6	13
*FIXDAT CATALOG PAGE 12	3.7.1	SCC	FIXKAT	6	14
*FIXDAT CATALOG PAGE 13	3.7.1	SCC	FIXKAT	6	15

*FIXDAT BLOCK CATALOG	3.7.1	SCC	FIXKAT	6	2
*FIXDAT ADDRESS CATALOG	3.7.2	SCC	FIXADR	7	0
*RETURN	2.5	SCC		2	0
*STOP	2.5	SCC	XSTOP	1	0

Zum Teilprogramm FIXFIX gehören ca. 60 FORTRAN-Unterprogramme mit insgesamt ca. 3000 Lochkarten. Der Hauptspeicherbedarf beträgt etwa 82 kByte.

### 3.1.2 Realisierung des Zugriffes zu FIXDAT-Elementen

Nach Aufruf des Unterprogramms FIXDAT:

CALL FIXDAT (NRFIX, NRELE, ANSWER, &marke1, &marke2) befindet sich in dem Feld ANSWER (4-Byte-Worte) das FIXDAT-Element mit der FIXDAT-Nummer NRELE aus dem FIXDAT-Block NRFIX. Der Bearbeiter muß das Feld ANSWER mindestens so groß vereinbaren, wie die Länge des FIXDAT-Elements beträgt. Befindet sich im FIXDAT-Block NRFIX kein Element mit der Nummer NRELE, so erfolgt ein Sprung zu der FORTRAN-Anweisung, die die Marke marke1 trägt. Der Inhalt von ANSWER ist dann undefiniert. Über marke2 wird das UP FIXDAT verlassen, wenn ein irreparabler Fehler auftrat, der unbedingt zum Step-Abbruch führen muß.

### 3.2 Speicherstruktur und Datenschutz

Die FIXDAT-Elemente werden im Datenteil (Byte 1 ... 168) von SAFE-Sätzen in der CGLRELEDA abgespeichert (s. 2.5). Zur Kennzeichnung dieser FIXDAT-Sätze ist die Variable NR (Byte 173 - 176) gleich der negativen FIXDAT-Nummer. In jedem FIXDAT-Satz befinden sich ein oder mehrere vollständige FIXDAT-Elemente eines FIXDAT-Blockes, d.h. ein Element wird nie über die Grenzen eines FIXDAT-Satzes hinaus fortgesetzt. Damit ist festgelegt, daß ein FIXDAT-Element maximal die Länge von 168 Byte (= 42 2-Byte-Worte) hat. Außerdem hat jedes FIXDAT-Element eine Länge, die ein ganzzahliges Vielfaches eines 4-Byte-Wortes ist, d.h. die minimale Länge beträgt 4 Byte. In der Tabelle ist angegeben, wieviele Elemente bei gegebener Länge in einen FIXDAT-Satz passen. Der evtl. verbleibende freie Speicherplatz im FIXDAT-Satz geht für die Nutzung verloren.

Anzahl der 4-Byte-Worte je Element	1	2	3	4	5	6	7	8	9-10	11-14	15-21	22-42	>42
Anzahl der Elemente je Satz	42	21	14	10	8	7	6	5	4	3	2	1	0

Ein FIXDAT-Element ist i.a. die Zusammenfassung verschiedener Größen, z.B. alphanumerische, REAL\*4-, REAL\*8-, INTEGER\*2- und INTEGER\*4-Größen. Die spezielle Struktur der Elemente eines FIXDAT-Blockes legt der Bearbeiter fest, dem FIXDAT-System wird nur die Länge der Elemente und das FORMAT mitgeteilt.

Um die Elemente des FIXDAT-Systems vor irrtümlichen Veränderungen zu sichern, ist es nur den Datenbank-Verantwortlichen erlaubt, mit den STK INCLUDE, SUBSTITUTE und EXCLUDE zu arbeiten. Die Verwendung dieser STK durch andere Nutzer von SAFE wird vom FIXDAT-System zurückgewiesen.

Ein Teil der im FIXDAT-System enthaltenen Informationen sind vertraulich, z.B. alle Eintragungen, die die NAME-Karten betreffen. Diese Informationen sind ebenfalls nur den Datenbank-Verantwortlichen zugänglich (z.B. beim Katalogisieren). Damit ist die Fälschung von NAME-Karten, die erst die Arbeit mit SAFE ermöglichen, praktisch ausgeschlossen. Infolge der großen Variabilität des FIXDAT-Systems ist es weiterhin den Datenbank-Verantwortlichen leicht möglich, den Text der NAME-Karten zu verändern und damit den Zugang zu SAFE durch Unbefugte zu verhindern. Die Datenbank-Verantwortlichen können weitere Bearbeiter zu Datenbank-Verantwortlichen ernennen sowie sich selbst als auch allen anderen Datenbank-Verantwortlichen diesen Rang aberkennen. Es ist Sorge zu tragen, daß mindestens ein Datenbank-Verantwortlicher definiert ist<sup>1)</sup>.

### 3.3 Passive Steuerkarten (PCC)

Es sind die im Abschnitt 2.4.3 beschriebenen PCC's wirksam - die CODE-Karten und die FORMAT-Karte. Die FORMAT-Karte muß angegeben werden, falls Elemente eingetragen (INCLUDE) oder ersetzt (SUBSTITUTE) werden. Die FORMAT-Karte mit der dazugehörigen Spezifikationskarte muß spätestens vor der ersten zu interpretierenden Elementkarte liegen. Über die FORMAT-Karte wird dem FIXDAT-System die Struktur eines FIXDAT-Elements mitgeteilt, die vom Bearbeiter festgelegt wurde.

### 3.4 Eintragen von FIXDAT-Elementen

Die SCC

#### \*FIXDAT INCLUDE

bewirkt, daß ein oder mehrere FIXDAT-Elemente in einen oder mehrere FIXDAT-Blöcke eingetragen werden. Jedes SAFE-Glied hat folgenden Aufbau:

<sup>1)</sup> If anything can go wrong, it will. Murphy

## \*FIXDAT INCLUDE

} 1. INCLUDE-Block

.

} n. INCLUDE-Block

Die Menge der INCLUDE-Blöcke wird abgeschlossen durch eine aktive STK. Folgt wegen eines Fehlers auf einen INCLUDE-Block nicht ein weiterer INCLUDE-Block oder eine aktive STK, so werden die Informationen aller folgenden LK übergangen, bis ein INCLUDE-Block beginnt oder eine aktive STK erkannt wird.

Jeder INCLUDE-Block hat folgenden Aufbau:

INCLUDE-Informationskarte

-FORMAT

Format-Spezifikationskarte

} Elementkarten

Die INCLUDE-Informationskarte ist folgendermaßen festgelegt:

LK-Spalte	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	...	80
Inhalt	Nr				N <sub>Ele</sub>				N <sub>Worte</sub>					I	N	C	Leer- zeichen		

In die LK-Spalten 1-4 ist rechtsbündig als ganze Zahl die Nummer des FIXDAT-Blockes einzutragen, in den die auf den Elementkarten folgenden FIXDAT-Elemente eingetragen werden sollen.

In den Spalten 5-8 wird die Anzahl der FIXDAT-Elemente, die eingetragen werden sollen, als ganze Zahl rechtsbündig eingetragen.

Mit der INCLUDE-Anweisung werden also zu den evtl. im FIXDAT-Block schon vorhandenen Elementen weitere Elemente hinzugefügt. In den Spalten 9-12 wird die Anzahl der 4-Byte-Worte, die ein FIXDAT-Element bilden, als ganze Zahl rechtsbündig eingetragen. Diese Angabe ist nur notwendig, wenn sich noch kein FIXDAT-Element zu der betreffenden FIXDAT-Nummer im FIXDAT-Block befindet. Sind bereits derartige FIXDAT-Elemente vorhanden, so wird der Inhalt der Spalten 9-12 ignoriert. Damit ist gewährleistet, daß die Länge der FIXDAT-Elemente nicht nachträglich verändert



werden kann. Sollte der Fall eintreten, daß nachträglich die Länge und damit die Struktur der FIXDAT-Elemente verändert werden soll, so muß mit der \*STK FIXDAT EXCLUDE zuerst der gesamte FIXDAT-Block gelöscht werden und danach mit FIXDAT INCLUDE vollständig neu aufgebaut werden.

### 3.5 Ersetzen von FIXDAT-Elementen

Die SCC

#### \*FIXDAT SUBSTITUTE

bewirkt, daß ein oder mehrere FIXDAT-Elemente aus einem oder mehreren FIXDAT-Blöcken, die sich bereits im FIXDAT-System befinden, ersetzt (überschrieben) werden.

Jedes SAFE-Glied hat folgenden Aufbau:

\*FIXDAT SUBSTITUTE

} 1. SUBSTITUTE-Block

.

.

} n. SUBSTITUTE-Block

Die Menge der SUBSTITUTE-Blöcke wird durch eine aktive STK abgeschlossen. Folgt wegen eines Fehlers auf einen SUBSTITUTE-Block nicht ein weiterer SUBSTITUTE-Block oder eine aktive STK, so werden die Informationen aller folgenden LK übergangen, bis ein SUBSTITUTE-Block beginnt oder eine aktive STK erkannt wird. Jeder SUBSTITUTE-Block hat folgenden Aufbau:

SUBSTITUTE-Informationskarte

-FORMAT

Format-Spezifikationskarte

} Elementkarten

Die SUBSTITUTE-Informationskarte ist folgendermaßen festgelegt:

LK-Spalte	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	...	80
Inhalt	Nr				N <sub>Ele</sub>				N <sub>Start</sub>					S	U	B	Leerzeichen		

In die LK-Spalten 1-4 ist rechtsbündig als ganze Zahl die Nummer des FIXDAT-Blockes einzutragen, in dem die auf den Elementkarten folgenden Informationen für die FIXDAT-Elemente ersetzt

werden sollen.

In Spalte 5-8 wird die Anzahl der FIXDAT-Elemente als ganze Zahl rechtsbündig angegeben, die ersetzt werden sollen.

In Spalte 9-12 ist als ganze Zahl rechtsbündig die Nummer des FIXDAT-Elementes einzutragen, bei dem die Ersetzung beginnt. Es ist bedeutungslos, ob durch die ersetzenden FIXDAT-Elemente die Gesamtzahl der Elemente des betreffenden FIXDAT-Blockes vergrößert wird oder nicht. Es muß nur gewährleistet sein, daß unter der in Spalte 9-12 angegebenen Element-Nummer bereits ein FIXDAT-Element eingetragen wurde.

### 3.6 Streichen von FIXDAT-Elementen

Die SCC

#### \*FIXDAT EXCLUDE

bewirkt, daß ein oder mehrere FIXDAT-Elemente, die sich in einem oder mehreren FIXDAT-Blöcken befinden, gestrichen werden. Streichen eines (oder mehrerer) Elemente bedeutet, daß alle nachfolgenden Elemente in dem betreffenden FIXDAT-Block um eine (oder mehrere) Position nach vorn gerückt werden. Dabei wird die Element-Nummer dieser FIXDAT-Elemente entsprechend vermindert. Gleichzeitig wird die Gesamtzahl der vorhandenen Elemente vermindert. Wird die Element-Nummer als Schlüssel für das Element verwendet (z.B. bei den Ionennamen in den Datenblöcken), so ist größte Vorsicht beim Streichen walten zu lassen. Entstehen beim Streichen leere SAFE- (bzw. FIXDAT-)Sätze, so gehen diese für das Datenbanksystem als möglicher Speicherplatz verloren.

Jedes SAFE-Glied hat folgenden Aufbau

#### \*FIXDAT EXCLUDE

1. EXCLUDE-Informationskarte

.

.

.

n. EXCLUDE-Informationskarte

Die Menge der EXCLUDE-Informationskarten wird durch eine aktive STK abgeschlossen. Folgt auf eine Informationskarte nicht eine weitere EXCLUDE-Informationskarte bzw. eine aktive STK, so wird

diese LK ignoriert.

Die EXCLUDE-Informationskarte ist folgendermaßen festgelegt:

LK-Spalte	1	2	3	4	5	6	7-8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	...	80
Inhalt	Nr				N <sub>Beginn</sub>				N <sub>Ende</sub>				E	X	C	Leer-Zeichen		

In die LK-Spalten 1-4 ist rechtsbündig als ganze Zahl die Nummer des FIXDAT-Blockes einzutragen, aus dessen Elementmenge ein oder mehrere Elemente gestrichen werden sollen. In der LK-Spalte 5-8 bzw. 9-12 ist die Element-Nummer angegeben, von der an bzw. bis zu der (immer einschließlich!) gestrichen werden soll. N<sub>Beginn</sub> und N<sub>Ende</sub> sind entweder ganze Zahlen, die rechtsbündig eingetragen wurden oder wohldefinierte Symbole.

Folgende Möglichkeiten für das Streichen gibt es:

- a) das Element mit der FIXDAT-Element-Nummer n soll gestrichen werden:

N<sub>Beginn</sub> = n, N<sub>Ende</sub> = n oder N<sub>Ende</sub> = Ø oder N<sub>Ende</sub> = Leerz.

- b) die k Elemente mit den FIXDAT-Element-Nummern n, n+1, ... n+k-1 sollen gestrichen werden:

N<sub>Beginn</sub> = n, N<sub>Ende</sub> = n+k-1

- c) der gesamte FIXDAT-Block soll gestrichen werden:

N<sub>Beginn</sub> = ALL, N<sub>Ende</sub> = ALL

Diese Anweisung bedeutet, daß alle Informationen für den entsprechenden FIXDAT-Block gelöscht werden. Wird dagegen mit der Variante b) mit N<sub>Beginn</sub> = 1, mit N<sub>Ende</sub> = Anzahl der Elemente gestrichen, so bleiben die Elementlänge (4-Byte-Worte/Element) und die Adresse des ersten FIXDAT-Satzes erhalten. Gleiches gilt, falls bei der Anwendung der Variante a) das einzige Element gestrichen wird.

### 3.7 Kataloge des FIXDAT-Systems

#### 3.7.1 Kataloge der FIXDAT-Elemente

Die SCC

##### \*FIXDAT CATALOG

bewirkt, daß der FIXDAT-Element-Standardkatalog ausgedruckt wird. In diesem Teil werden alle FIXDAT-Blöcke ausgegeben, deren Inhalt für alle Bearbeiter von Interesse ist. Neben den Über-

schriften wird für jeden FIXDAT-Block angegeben, wieviele Elemente bisher im FIXDAT-System enthalten sind (ANZ.D.ELEM.) und wieviele 4-Byte-Worte zu einem Element gehören (WORTE/ELEM.).

Die SCC

### \*FIXDAT CATALOG PAGE i

mit  $i = 1, \dots, 13$  veranlaßt die Ausgabe der Seite  $i$  des Standardkatalogs. In der Tabelle sind die FIXDAT-Blöcke zusammengefaßt, die über  $i$  gedruckt werden. Hier wie auch bei Verwendung der STK FIXDAT CATALOG werden die NAME-Informationen (PAGE 13) nur den Datenbank-Verantwortlichen ausgegeben. Lochkarten, die sich zwischen den STK FIXDAT CATALOG bzw. FIXDAT CATALOG PAGE  $i$  und folgenden aktiven STK befinden, werden ignoriert.

PAGE	Inhalt	FIXDAT-Nummer
1	Art der Messung Lösungsmittel	1
		2
2	Ionensymbol Wertigkeit relative Molmasse Ionenradius individuelle Grenzleitfähigkeiten Ionennamen	3
		4
		5
		6
		7
		9
3	Meßdatenspalten-Überschriften	8
4	Modul-Folge	10
5	Steuerkarten des Datenblock-Eingabeprogramms	15
6	Steuerkarten des Datenblock-Katalogprogramms	16
7	Steuerkarten des FIXDAT-Programms	17
8	Steuerkarten des Anpaß-Programms	18
9	Steuerkarten	19
10	Steuerkarten	20
11	Steuerkarten	21
12	Steuerkarten	22
13	Bearbeiternamen Kennzahl Schlüsselzahl	13

Die SCC

### \*FIXDAT BLOCK CATALOG

bewirkt, daß die Elemente eines oder mehrerer FIXDAT-Blöcke



ausgedruckt werden. Jedes SAFE-Glied hat folgenden Aufbau:

\*FIXDAT BLOCK CATALOG

1. BLOCK-Informationskarte

.

.

.

n. BLOCK-Informationskarte

Die Menge der BLOCK-Informationskarten wird durch eine aktive STK abgeschlossen. Folgt auf eine Informationskarte nicht eine weitere BLOCK-Informationskarte bzw. eine aktive STK, so wird diese folgende LK ignoriert.

Mit der STK FIXDAT BLOCK CATALOG kann nur ein Datenbank-Verantwortlicher arbeiten.

Die BLOCK-Informationskarte ist folgendermaßen festgelegt:

LK-Spalte	1	2	3	4	5	...	80
Inhalt	Nr				Leerzeichen		

In die LK-Spalte 1-4 ist rechtsbündig als ganze Zahl die Nummer des FIXDAT-Blockes einzutragen, von dem ein Element-Katalog erzeugt werden soll.

### 3.7.2 AdreSkatalog der FIXDAT-Blöcke

Die SCC

#### \*FIXDAT ADDRESS CATALOG

bewirkt, daß die Adressen der FIXDAT-Sätze ausgedruckt werden, die einen FIXDAT-Block bilden.

Mit der STK FIXDAT ADDRESS CATALOG kann nur ein Datenbank-Verantwortlicher arbeiten.

Im Katalog wird zu jeder FIXDAT-Nummer angegeben, wieviele Elemente zu diesem FIXDAT-Block gehören (ANZ.D.ELEM.), wieviele 4-Byte-Worte ein Element bilden (WORTE/ELEM.), wieviele Elemente in einen FIXDAT-Satz hineinpassen (ELEM./SATZ) und aus wievielen FIXDAT-Sätzen der FIXDAT-Block gebildet wird (ANZ.D.SÄTZE). Danach folgen die Adressen dieser FIXDAT-Sätze in der Datei CGLREIDA. Lochkarten, die sich zwischen den STK FIXDAT ADDRESS CATALOG und einer folgenden aktiven STK befinden, werden ignoriert.

#### 4. Primäre Datenblock-Verarbeitung

In diesem Abschnitt wird die Struktur und primäre Verarbeitung von Datenblöcken im SAFE-System beschrieben. In der Abb. 4.1 sind die wesentlichen Verarbeitungsschritte angegeben. In einem Datenblock sind alle Meßergebnisse eines Autors mit den dazugehörigen Informationen wie Meßtemperatur, Lösungsmittel, Salz usw. zusammengefaßt. Als Identifikator eines Datenblocks dient die Blocknummer NUM. Die Datenblöcke werden nur über NUM angesprochen; das ist ein Grundprinzip von SAFE.<sup>1)</sup>

In den folgenden Abschnitten wird die primäre Verarbeitung von Datenblöcken besprochen. Das Ziel dieser primären Verarbeitung besteht darin, in SAFE eine standardisierte Form aufzubauen, die unmittelbar zur sekundären Verarbeitung (z.B. als Vergleichsdaten zur Anpassung von Elektrolytheorien im Teilprogramm ELFIT) geeignet ist.

##### 4.1 Stepaufbau und Datenblock-Definition

Jeder Step zur primären Datenblockverarbeitung hat folgenden Aufbau:

```
//stepname EXEC GCLR001
//PORT.SYSIN DD *
    CALL EINEIN (&1)
1    STOP
    END
```

Es folgen evtl. die nutzerspezifischen Unterprogramme  
CHANG1, CHANG2, CHANG 3

```
/*
//LKED.SYSIN DD *
OVERLAY A
    INSERT ELADIN,ELADOU,STKINP,ANASTK
OVERLAY A
    INSERT NAMEIN,XDATOH,XSTOP,NOTE
OVERLAY D
    INSERT NAME,XBEGIN,RESTR1
OVERLAY D
    INSERT NAME0,NAME1,NAME2,NAME3,NAME00,NAME01,NAME02,
        BESMCD,R300CD
OVERLAY A
    INSERT DATALK
OVERLAY B
    INSERT LKBESM,KZUMXX
OVERLAY B
    INSERT LKESER
OVERLAY B
    INSERT LKMES
```

<sup>1)</sup> There is always an easier way to do it. Murphy

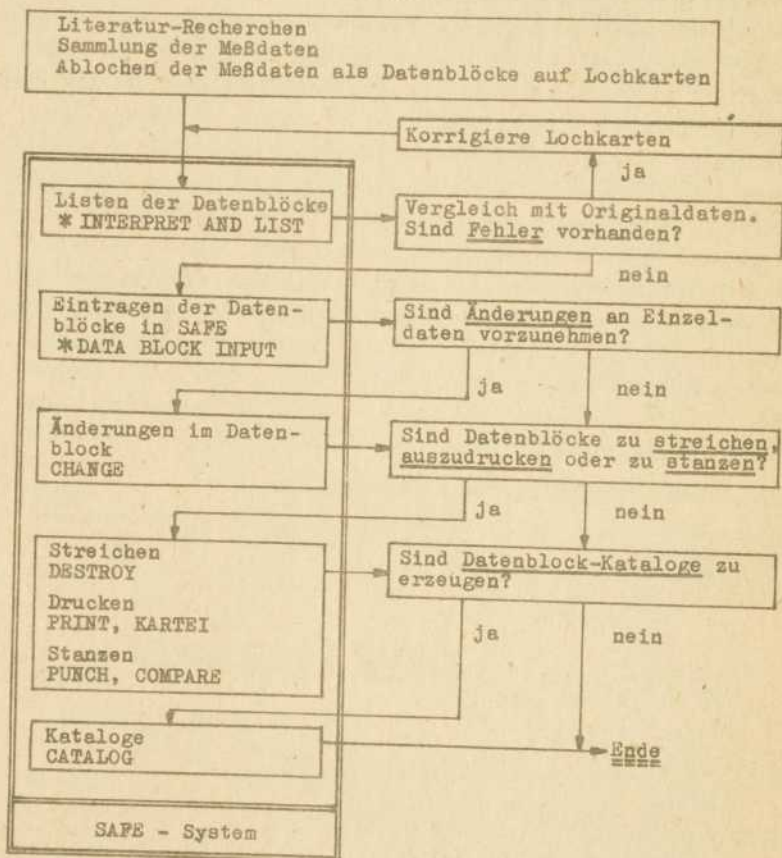
Start

Abb. 4.1: Bearbeitungsschritte bei der primären Datenblock-  
verarbeitung.

```

OVERLAY A
INSERT TOBANK
OVERLAY A
INSERT NORMAL
OVERLAY A
INSERT KARTEI
OVERLAY A
INSERT DKETA
OVERLAY A
INSERT DTPRNT
OVERLAY A
INSERT DTREAD
OVERLAY A
INSERT DTPNCH
OVERLAY A
INSERT DESTRY
OVERLAY A
INSERT COMPAR
OVERLAY A
INSERT CHANGE
OVERLAY C } x=1,2,3,4,5,6,7,8,9,A,Z
INSERT CHANGx }
/*
//GO.SYSIN DD *
} SAFE-File
/*

```

Die Struktur der SAFE-Files wurde in 2.3 angegeben. Die Struktur der SAFE-Glieder entsprechend der zu lösenden Aufgabe wird in den folgenden Abschnitten behandelt.

Das SAFE-Teilprogramm EINEIN besteht aus 90 FORTRAN-Unterprogrammen, von denen 37 Unterprogramme spezifisch für EINEIN sind. Mit Überlagerungsstruktur benötigt EINEIN etwa 98 k Byte Hauptspeicherplatz.

In der Tabelle 4.1 sind alle STK des EINEIN-Teilprogramms zusammengefaßt.

Jeder Datenblock besteht aus einem Kopfblock und einem Meßdatenblock (s. Abb. 4.2), deren Struktur im folgenden beschrieben wird. Die Ablochvorschrift ist der Abb. 4.3 zu entnehmen.

#### 4.1.1 Kopfblock

NUM: Blocknummer. Dient als Identifikator des Datenblocks.

INTEGER\*4-Größe ( $0 < \text{NUM} \leq 10\,000$ )

NMESS: Anzahl der Meßdatensätze im Meßdatenblock. INTEGER\*4-Größe

LAENGE: Anzahl der Meßwerte je Meßdatensatz. INTEGER\*4-Größe (Standard:  $\text{LAENGE} = 5$ ,  $0 < \text{LAENGE} \leq 1000$ )

MESSUNG: Art der Messung. Die erlaubten alphanumerischen Schlüsselwörter sind dem FIXDAT-Katalog zu entnehmen.

MSG: Zu dem Schlüsselwort für "Art der Messung" gehörige FIXDAT-Elementnummer.

LSG-MITTEL: Lösungsmittel. Die erlaubten alphanumerischen Schlüsselwörter sind dem FIXDAT-Katalog zu entnehmen.



**LSG:** Zu dem Schlüsselwort für "Lösungsmittel" gehörige FIXDAT-Elementnummer.

**SALZ:** Chemische Bezeichnung der gelösten Ionen in der Form:  $I_1 - I_2 - \dots - I_n$  ( $2 \leq n \leq 6$ ). Die Ionenbezeichner  $I_k$  haben den

Aufbau:  $I_k = X[(w)][*y]$  mit X: chemisches Ionensymbol (s. FIXDAT-Katalog)  $w = j + |j|$  - mit  $j = 1 \dots 9$ : Wertigkeit  $y$ : Zerfallszahl

Die Angabe der Zerfallszahl dient nur zur stöchiometrisch richtigen Schreibung der Formel, sie wird vom Eingabeprogramm ignoriert, kann entfallen und erscheint bei späterer Ausgabe (z.B. Druck des Datenblockes) nicht. Die in chemischer Darstellung geschriebene Wertigkeit kann samt einschließender Klammern ebenfalls entfallen, wenn das Ion allein durch sein chemisches Symbol (z.B.  $\text{Na}^2\text{Na}^{+}$ ) bereits eindeutig bestimmt ist. Gibt es dagegen verschiedenwertige Ionen eines Elements (z.B.  $\text{Fe}^{2+}$  oder  $\text{Fe}^{3+}$ ), so muß die Wertigkeit angegeben werden.

Es ist also möglich, Meßdaten von Elektrolytmischungen mit bis zu 6 Ionensorten in SAFE einzuspeichern.

**ION (1...6):** Zu dem Ionensymbol  $X_{1...6}$  gehörige FIXDAT-Elementnummer.  $\text{ION}((n+1)...6) = \emptyset$ ,  $1...6$

**IWERT (1...6):** Wertigkeit der Ionen  $X_{1...6}$ .

**T:** Meßtemperatur (LK: in  $^{\circ}\text{C}$ , SAFE: in K).  $\text{REAL*4-Größe}$ . Konvention  $T(\text{K}) = T(^{\circ}\text{C}) + 273,15$ .

**DK:** relative Dielektrizitätszahl des reinen Lösungsmittels bei der Temperatur T. Angabe von DK auf der LK kann entfallen und in SAFE mit dem Modul DKETA errechnet werden.  $\text{REAL*4-Größe}$ .

**ETA:** Viskosität des reinen Lösungsmittels bei der Temperatur T in Poise. Angabe von ETA auf der LK kann entfallen und in SAFE mit dem Modul DKETA errechnet werden.  $\text{REAL*4-Größe}$ .

**k<sub>i</sub>:** Kennzahl für die Überschrift der i. Spalte des Meßdatenblocks.  $\text{INTEGER*4-Größe}$ . Diese Kennzahlen werden in

**KZHEAD (1...10)** eingespeichert und stellen die FIXDAT-Elementnummern der entsprechenden Spalten-Überschriften dar (s. FIXDAT-Katalog). Ist ein  $k_i = \emptyset$ , so besteht die Überschrift aus Leerzeichen. Ist  $\text{LAENGE} > 10$ , so können die restlichen Meßdaten-spalten nicht mit einer Überschrift versehen werden.

**CMIN:** Minimale Gesamtkonzentration  $c = \sum a$  im Meßdatenblock.  $\text{REAL*4-Größe}$ .

**CMAx:** Maximale Gesamtkonzentration  $c = \sum a$  im Meßdatenblock.  $\text{REAL*4-Größe}$ .

**RELERR:** Schätzwert für den relativen Fehler der gesamten Meßserie im Meßdatenblock (kann entfallen).  $\text{REAL*4-Größe}$ .

**QUELLE (1-19):** Literaturquelle, aus der die Meßdaten stammen. Maximal 75 alphanumerische Symbole.

Leerzeichen in "MESSUNG", "LSG-MITTEL" und "SALZ" sind nicht signifikant und können an beliebiger Stelle eingefügt werden. Bei allen Zahlenangaben haben Leerzeichen die Bedeutung von  $\emptyset$ , was besonders bei einer Dezimalexponentenangabe zu beachten ist. Alle  $\text{INTEGER*4-Größen}$  sind rechtsbündig in die entsprechenden LK-Felder einzutragen.

Tabelle 4.1: Die Steuerkarten des EINEIN-Teilprogrammes

Lochkartenspalte	Beschr. siehe Abschnitt	STK	Modul- name	Modul- nummer	Modul- status
1.....3.....4.....					
-ESER CODE	2.4.3	PCC			
-BESM CODE	2.4.3	PCC			
-R300 CODE	2.4.3	PCC			
-FORMAT	2.4.3	PCC			
-IGNORE NMESS	4.2	PCC			
-NOT IGNORE NMESS	4.2	PCC			
RETURN	2.5	MCC		2	0
INTERPRET	4.4	MCC	DATALK	8	1
INTERPRET AND LIST	4.4	MCC	DATALK	8	2
TO BANK	4.5	MCC	TOBANK	9	2
TO BANK UNCONDITIONAL	4.5	MCC	TOBANK	9	3
NOT TO BANK	4.5	MCC	TOBANK	9	1
READ	4.5	MCC	DTREAD	10	2
READ IN	4.5	MCC	DTREAD	10	3
NOT READ	4.5	MCC	DTREAD	10	1
DK AND ETA	4.6.1	MCC	DKETA	13	2
NOT DK AND ETA	4.6.1	MCC	DKETA	13	1
NORMALIZE	4.6.2	MCC	NORMAL	17	2
NOT NORMALIZE	4.6.2	MCC	NORMAL	17	1
CHANGE	4.6.3	MCC	CHANGE	16	2
CHANGE 1	4.6.3	MCC	CHANG1	16	3
CHANGE 2	4.6.3	MCC	CHANG2	16	4
CHANGE 3	4.6.3	MCC	CHANG3	16	5
CHANGE 4	4.6.3	MCC	CHANG4	16	6
CHANGE 5	4.6.3	MCC	CHANG5	16	7
CHANGE 6	4.6.3	MCC	CHANG6	16	8
CHANGE 7	4.6.3	MCC	CHANG7	16	9
CHANGE 8	4.6.3	MCC	CHANG8	16	10
CHANGE 9	4.6.3	MCC	CHANG9	16	11
CHANGE A	4.6.3	MCC	CHANGA	16	12
NOT CHANGE	4.6.3	MCC	CHANGE	16	1
PRINT	4.7	MCC	DTPRNT	14	2
PRINT KOPF	4.7	MCC	DTPRNT	14	3
NOT PRINT	4.7	MCC	DTPRNT	14	1
KARTEI	4.7	MCC	KARTEI	12	2
NOT KARTEI	4.7	MCC	KARTEI	12	1
PUNCH	4.7	MCC	DTPNCH	15	2
PUNCH KOPF	4.7	MCC	DTPNCH	15	3
PUNCH MESS	4.7	MCC	DTPNCH	15	4
NOT PUNCH	4.7	MCC	DTPNCH	15	1
COMPARE	4.7	SCC	COMPAR	21	0
*STOP	2.5	SCC	ISTOP	1	0
*RETURN	2.5	SCC		2	0
*INTERPRET	4.4	SCC	DATALK	8	1
*INTERPRET AND LIST	4.4	SCC	DATALK	8	2
*DESTROY	4.5	SCC	DESTROY	11	0
*COMPARE	4.8	CCC			
*DATA BLOCK INPUT	4.8	CCC			
*BEGIN PROCEDURE	2.4.2				
*END PROCEDURE	2.4.2				
*END SEGMENT	4.3				

## Datenblock

Identifikator: NUM

## Kopfblock

NUM, NMESS, LAENGE, MSG, LSG, ION(1...6), IWERT(1...6),  
T, DK, ETA, KZHEAD(1...10), CMIN, CMAX, RELERR, QUELLE  
(1...19)

## Meßdatenblock

1.Meß- datensatz	$A_{1,1}$	...	$A_{1,LAENGE}$
:	:		:
:	:		:
NMESS.Meß- datensatz	$A_{NMESS,1}$	...	$A_{NMESS,LAENGE}$
:	:		:
:	:		:
m.Meß- datensatz	$A_{m,1}$	...	$A_{m,LAENGE}$
	1.Spalte	...	LAENGE.Spalte

mit  $m = 1000 / LAENGE$   
und  $NMESS * LAENGE \leq 1000$

Standardisierte Meßdatensatz-Struktur

Spalte	Inhalt
1	$c_{1,Ion}$ in Mol/l
:	
n	$c_{n,Ion}$ in Mol/l (n= Anzahl der verschiedenen Ionen)
n + 1	experimenteller Meßwert
n + 2	(eventuell) relativer Fehler des exp. Meßwertes
n + 3	beliebiger vom Bearbeiter festgelegter Inhalt
:	
LAENGE	

Abb. 4.2: Struktur eines Datenblockes in SAFE.

Abb. 4.4: Die CHANGE-Datenkarten

	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55	60	65	70	75	80
MM	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
MMES	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
LAEM	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
MSMG	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
LSG	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
LOW	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
IMER	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
KEME	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
T	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
DK	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
ETA	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
CMIN	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
CWAX	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
RELE	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
QWEL	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
AC(111,111)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

Erläuterung: 11... bzw. jj... Rechtsbündig eingetragene INTEGER\*4-Größen  
 xxxxxxxxxE yy REAL\*4-Größen  
 aaaaaaaaaa... Alphanumerische Symbole



#### 4.1.2 Meßdatenblock

Der Meßdatenblock besteht aus NMESS Meßdatensätzen zu je LAENGE Meßwerten. Diese sind in der Matrix ( $A_{ij}$ ) mit  $1 \leq i \leq m$ ,  $1 \leq j \leq$  LAENGE und  $m = \lfloor 1000/LAENGE \rfloor$  (größte ganze Zahl) abgespeichert (s. Abb. 4.2), die maximal 1000 Elemente hat (NMESS \* LAENGE  $\leq 1000$ ). Es können somit maximal 1000 Meßwerte in einem Datenblock erfaßt werden. Hierbei ist  $A_{ij}$  eine REAL\*4-Größe.

Die Standardablockform für LAENGE = 5 ist in Abb. 4.3 angegeben. Die LK-Spalten 1 bis 5 sind grundsätzlich für NUM reserviert. Mit Hilfe der PCC-FORMAT kann die Aufteilung der LK-Spalten 6 bis 80 und die dazugehörigen Formatspezifikationen verändert werden. Es sind jedoch nur die Spezifikationen E|I|X/ erklärt. Die innerhalb von EINEIN verwirklichten Bearbeitungs- und Ausgabemodule interpretieren allerdings  $A_{ij}$  grundsätzlich als REAL\*4-Größe.

#### 4.1.3 Standardform der Meßdatensätze

Für zweisortige Elektrolyte ist die folgende Bedeutung von  $A_{i,1}$  bis  $A_{i,5}$  auf der LK vereinbart:

- $A_{i,1}$ : - Stöchiometrische Konzentration  $\sum_a c_a / \sum_a \nu_a$  in Mol/l  
 - Gesamtkonzentration  $\sum_a c_a$  in Mol/l  
 - Ionenstärke  $\frac{1}{2} \sum_a c_a z_a^2$  in Mol/l

Die Kennzeichnung dieser drei Möglichkeiten geschieht mit  $k_1$  (1, 2 bzw. 15).

$A_{i,2}$ : Experimenteller Meßwert zur Konzentrationsangabe in Spalte 1

$A_{i,3}$  bis  $A_{i,5}$ : beliebig

Gesteuert durch die CCC \*DATA BLOCK INPUT werden solcherart abgelochte Datenblöcke ohne weiteren Organisationsaufwand in die standardisierte Meßdatenblock-Struktur in SAFE umgewandelt. Wird von der hier angegebenen Meßdatenblockstruktur abgewichen, so muß sich der Nutzer selbst eine entsprechende aktive STK herstellen, die die Umrechnung vornimmt.

#### 4.1.4 Standardisierte Datenblock-Struktur in SAFE

Als Resultat der primären Datenblockverarbeitung sind im Kopfblock alle Angaben vorhanden. Die in den LAENGE-Spalten des Meßdatenblockes stehenden Größen sind in der Abb. 4.2 angegeben.

#### 4.2 Passive Steuerkarten (PCC)

Die Verwendung der PCC ist in 2.4.3 beschrieben. Im Teilprogramm EINEIN sind die PCC

-ESER CODE -BESM CODE -R300 CODE -FORMAT

definiert. Die Formatspezifikationen haben eine interpretierende Wirkung nur auf die Meßdatenlochkarten jeweils ab Spalte 6

bis 80. Werden durch die Spezifikationen mehr als 4\*LAENGE Byte in (A<sub>1j</sub>) belegt, so erfolgt ein Fehlerabbruch der Eingabe dieses Datenblockes. Werden dagegen weniger Byte belegt, so befinden sich in den restlichen Bytes Nullen.

Weiterhin sind die PCC -IGNORE NMESS -NOT IGNORE NMESS definiert. Gilt -NOT IGNORE NMESS, so behandelt der INTERPRET-Modul eine Nichtübereinstimmung von NMESS im Kopfblock mit der Anzahl der auf LK vorliegenden Meßdatensätze als einen Datenblockfehler und verhindert damit z.B. das Eintragen dieses Datenblockes in SAFE.

Beim ersten Aufruf von EINEIN setzt das System selbständig den passiven Standardzustand:

-ESER CODE

-FORMAT

5 E 15.

-NOT IGNORE NMESS

Darüberdem standardmäßig LAENGE = 5 gilt, ist EINEIN ohne zusätzliche PCC für die Verarbeitung von Meßdatenblöcken gemäß Abb. 4.3 vorbereitet.

#### 4.3 Die \*END SEGMENT-STK

In vielen SAFE-Modulen, die LK verarbeiten, ist die Anzahl dieser LK unbestimmt, d.h. vom Nutzer frei wählbar. Jeder LK-lesende Modul beendet die LK-Eingabe, falls er eine aktive STK oder die ansonsten wirkungslose STK \*END SEGMENT antrifft. Mit dieser STK wird also der Zustand der Modulnfolge, die abzuarbeiten ist, nicht verändert.

#### 4.4 Einlesen der Datenblock-Lochkarten

Datenblöcke werden mit der MCC

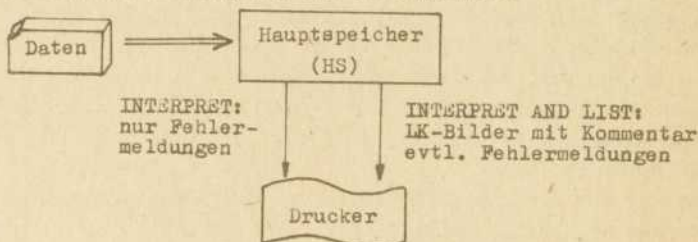
INTERPRET INTERPRET AND LIST

und mit den SCC

\*INTERPRET \*INTERPRET AND LIST

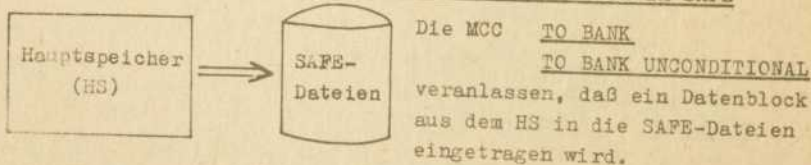
in den Hauptspeicher eingelesen. Dabei sind Kopf- und Meßdatenblöcke grundsätzlich getrennte Größen, die unabhängig voneinander eingelesen und verarbeitet werden. Meßdatenblöcke werden allerdings nur verarbeitet, wenn der Kopfblock zur entsprechenden Blocknummer bereits in SAFE vorhanden ist. Entweder müssen

die Kopfblock-Lochkarten unmittelbar vor den Meßdatenblock-Lochkarten liegen oder der Kopfblock wurde schon früher in die SAFE-Dateien eingetragen. Aus dem folgenden Schema ist die unterschiedliche Wirkung der STK zu entnehmen:



Nach Beendigung der Arbeit des INTERPRET-Moduls befindet sich im HS ein Datenblock in der in 4.1 beschriebenen Form. Wurden beim Interpretieren Fehler entdeckt, so wird eine weitere Bearbeitung des Datenblocks in folgenden Modulen je nach Schwere des Fehlers teilweise oder vollständig unterbunden. Auf den INTERPRET-Modul wirken alle in 4.2 angegebenen PCC in der dort beschriebenen Weise ein. Der INTERPRET-Modul betrachtet alle aufeinander folgenden LK, die die gleiche Blocknummer NUM haben, als zu einem Datenblock gehörig. Das Ende dieser Folge ist erreicht, wenn eine LK mit einer neuen Blocknummer oder eine aktive STK oder die \*END SEGMENT-Karte auftritt. Dabei wirken die Formatspezifikationen B, I, X, / auf die LK-Spalten 6 - 80 der Meßdatenblocklochkarten. Die LK-Spalten 1 - 5 werden grundsätzlich als Blocknummer interpretiert. Die Formatspezifikationen A, D, J sind nicht verwendbar und wirken wie X. Somit können in die Meßdatenelemente also nur REAL\*4- und INTEGER\*4-Größen eingespeichert werden.

#### 4.5 Schreiben, Lesen und Löschen von Datenblöcken in SAFE

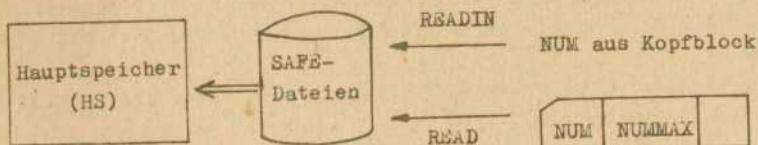


Die MCC NOT TO BANK bewirkt, daß vom TOBANK-Modul kein Schreibversuch unternommen wird.

Wird die MCC TO BANK verwendet und ist unter der Blocknummer, die der Datenblock im HS hat, in SAFE schon ein Datenblock (zumindest ein Kopfblock) eingetragen, so wird der Schreibversuch abgelehnt. Mit der MCC TO BANK UNCONDITIONAL wird in diesem Fall die Schreibfähigkeit erzwungen, d.h. der ursprüngliche Datenblock wird überschrieben. Bei beiden Varianten von

Schreib-MCC wird der Schreibversuch abgelehnt, wenn dem Bearbeiter (codiert in der Schlüsselzahl s. 2.3) nicht erlaubt ist, Datenblöcke zu der vorliegenden "MESSUNG" in SAFE einzutragen (partieller Schreibschutz).  
Die PCC haben keinen Einfluß auf den TOBANK-Modul.

Die MCC READ READ IN veranlassen, daß ein oder mehrere Datenblöcke aus den SAFE-Dateien in den HS gelesen werden.



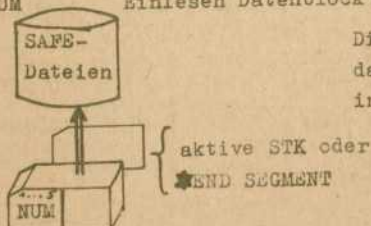
Die MCC NOT READ bewirkt, daß der READ-Modul übergangen wird.

Der READ-Modul erhält die Information, welcher Datenblock einzulesen ist, von einer Blocknummer-Lochkarte (READ):

1 2 3 4 5	6 7 8 9 10	11 . . . 80
N U M rechts- bündig	NUMMAX rechts- bündig	Leerzeichen

oder aus dem Kopfblock (READ IN). Wird eine aktive STK oder die STK \*END SEGMENT angetroffen, so wird der READ-Modul übergangen. Befindet sich unter NUM kein Datenblock in SAFE, so wird der Datenblock im HS gleich 0 gesetzt. Ist nur ein Kopfblock gespeichert, so wird der Meßdatenblock im HS gleich 0 gesetzt. Die PCC haben keinen Einfluß auf den READ-Modul.

NUMMAX	Wirkung
Leerzeichen	Einlesen Datenblock NUM
≥ NUM	mehrfaches Abarbeiten der Prozedur, wobei die Datenblöcke NUM...NUMMAX eingelesen werden
< NUM	Einlesen Datenblock NUM



Die SCC \*DESTROY bewirkt, daß eine Reihe von Datenblöcken in SAFE gelöscht wird.

Der DESTROY-Modul erhält die Information, welche Datenblöcke gelöscht werden sollen, von einer Folge von Blocknummer-Lochkarten, die von einer aktiven STK oder durch \*END SEGMENT abgeschlossen ist. Für die Tätigkeit von DESTROY ist es belanglos,



ob sich unter NUM ein Datenblock in SAFE befindet oder nicht. Die PGC haben keinen Einfluß auf den DESTROY-Modul. Mit der SCC \*DESTROY kann nur ein Datenbank-Verantwortlicher arbeiten, alle Nutzer werden abgewiesen.

#### 4.6 Datenblockbearbeitung im Hauptspeicher

Die im folgenden beschriebenen Moduln bearbeiten einen Datenblock, der sich im HS befindet. Das Ergebnis der Tätigkeit dieser Moduln ist ein (im allgemeinen veränderter) Datenblock im HS.

Befindet sich kein Datenblock im HS, so stellen die Moduln leere Routinen dar.

##### 4.6.1 DK- und ETA-Berechnung

Mit der MCC DK AND ETA wird veranlaßt, daß die relative Dielektrizitätszahl DK(D) und die Zähigkeit ETA( $\eta$ ) [Poise] des Lösungsmittels LSG bei der Temperatur T berechnet und in den Datenblock eingetragen wird.

Folgende Formeln bzw. Einzeldaten werden verwendet ( $t = T - 273.15$ ):

Wasser //

$$D = 87.89543 - 0.4042928 \cdot t + 9.431574E - 4 \cdot t^2 - 1.283895E - 6 \cdot t^3$$

$$\eta = 0.01002 \left( \frac{T}{293.15} \right)^{-1.617788} \exp \left( -2.068505 \frac{T-293.15}{T-184.562} \right)$$

Lösungsmittel x

$$D = A + B/T + C/T^2$$

$$\eta = \exp(a + b/T + c/T^2) / 100$$

x	A	B	C	a	b	c	Lit
Methanol	-23.18	16020	1.82E5	-5.0558	1421	2.62E4	3
Ethanol	-24.33	15480	-2.88E5	-6.5642	2316	-9.9E4	3
n-Propanol	-27.24	16330	-6.29E5	-6.246	2061	9E2	3
Acetonitril	-21.06	20230	-9.63E5	-3.5164	620	3.25E4	3
Propylen-carbonat	-33.09	36650	-2.21E6	5.3565	-4234	8.7E5	3
Tetrahydro-turan	-1.51	2650	0	3.845	909.5	0	2

Lösungsmittel	D(25°C)	$\eta$ (25°C)	Lit.
Dimethylsulfoxide	46.27	0.01963	4
Hexamethylphosphotriamide	29.41	0.03203	4
i-Propanol	19.41	0.02079	5,6
Butanol	17.45	0.02589	7
Pentanol	15.04	0.03475	7
i-Pentanol	14.7	0.035	8
Hexanol	12.5	0.046	8
Heptanol	11.1	0.0555	8
Octanol	9.85	0.073	8
Decanol	7.7	0.1015	8
Aceton	20.47	0.00304	9
Benzen	2.2726	0.005961	10,19
Dimethylacetamide	37.78	0.00919	11,12
Dimethylformamide	36.71	0.00796	11,13
Benzonitrile	25.19	0.01211	14
Methylethylketone	18.014	0.003774	15
Acetonphenone	17.39	0.01675	14,16
Ethylendiamine	12.9	0.0154	17
Pyridine	12.01	0.00879	14,18

#### Literatur

- 1 J.Einfeldt, M.Grigo and N.Schmelzer: *Exper.Techn.* 31,H1 (1983)
- 2 D.J.Metz and A.Glines: *J.Phys.Chem.* 71,1158 (1967)
- 3 J.Barthel, R.Wachter and H.-J.Gores: *In Mod.Aspects of Electrochem. Vol.13 Plenum* (1979)
- 4 C.Altani and J.-C.Justice: *J.Solution Chem.* 4,955 (1975)
- 5 W.Dannhauser and L.W.Bahe: *J.Chem.Phys.* 40,3058 (1964)
- 6 M.A.Matesich, J.A.Nadas and D.F.Evans: *J.Phys.Chem.* 74, 4568 (1970)
- 7 D.F.Evans and P.Gardam: *J.Phys.Chem.* 73,158 (1969)
- 8 A.M.Shkodin, L.P.Sadrovnichaya and V.A.Podolyanko: *Electroshimiya* 4,718 (1968)
- 9 M.B.Reynolds and C.A.Kraus: *J.Amer.Chem.Soc.* 70,1709 (1948)
- 10 J.R.Lewis: *J.Amer.Chem.Soc.* 47, 626 (1924)
- 11 G.R.Leader and J.F.Gormley: *J.Amer.Chem.Soc.* 73,5731 (1951)
- 12 G.R.Lester, T.A.Gover and P.G.Sears: *J.Phys.Chem.* 60,1076 (1956)
- 13 J.E.Prue and P.J.Sherrington: *Trans.Faraday Soc.* 57,1795 (1961)
- 14 G.J.Janz and M.J.Tait: *Canad.J.Chem.* 45,1101 (1967)
- 15 S.Crisp, S.R.C.Hughes and D.H.Price: *J.Chem.Soc. A*,603 (1968)
- 16 S.R.C.Hughes: *J.Chem.Soc.* 634 (1957)
- 17 G.W.A.Powles and W.R.McGregor: *J.Phys.Chem.* 68,1342 (1964)
- 18 D.S.Burgen and C.A.Kraus: *J.Amer. Chem.Soc.* 70,706 (1948)
- 19 R.M.Davies: *Phil.Mag.* 21,1 (1936); 21,1008 (1936)

Wird der DKETA-Modul für andere Lösungsmittel und Temperaturen aufgerufen, so bleiben die im Datenblock vorhandenen Werte für DK und ETA unverändert.

Die MCC NOT DK AND ETA bewirkt, daß der DKETA-Modul übergangen wird.

Die PCC haben keinen Einfluß auf den DKETA-Modul.

#### 4.6.2 Normalisieren

Der mit der MCC NORMALIZE aktivierte Modul führt folgende Tätigkeiten aus:

1. Die Ionen ION (1-n) werden nach fallender Wertigkeit (Kation  $\rightarrow$  Anion) und innerhalb gleicher Wertigkeit nach steigender FIXDAT-Elementnummer der Ionen (s. FIXDAT-Katalog) sortiert.
2. Die ersten n Spalten des Meßdatenblockes ( $A_{ij}$ ) und die dazugehörigen Datenspaltenüberschriften KZHEAD<sub>ij</sub> werden gleichartig umsortiert.
3. Die NMESS Meßdatensätze von ( $A_{ij}$ ) werden nach steigender Konzentration bezüglich der n., n-1., ..., 1. Spalte umsortiert.

Voraussetzung für die erfolgreiche Arbeit des NORMALIZE-Moduls ist, daß der Datenblock im HS die in 2.1 angegebene standardisierte Meßdatenblockstruktur hat.

Die MCC NOT NORMALIZE bewirkt, daß der NORMALIZE-Modul übergangen wird.

Die PCC haben keinen Einfluß auf den NORMALIZE-Modul.

#### 4.6.3 Das CHANGE-System

Aktiviert durch die MCC CHANGE verändert der CHANGE-Modul Einzeldaten oder die Struktur des Datenblockes im HS. Die Informationen über die zu vollziehenden Änderungen erhält CHANGE durch die CHANGE-Datenkarten, deren Aufbau in der Abb. 4.4 gegeben ist. Die Folge der CHANGE-Datenkarten, die einen Datenblock verändern, wird durch eine aktive STK oder \*END SEGMENT abgeschlossen. Die CHANGE-Datenkarten haben folgende Wirkung:

NUM: Die Blocknummer des Datenblocks im HS wird durch die in Spalte 6-10 angegebene Blocknummer ersetzt. Gleichzeitig wird ein sich in SAPE befindlicher Datenblock mit der alten Blocknummer gelöscht. Mit der CHANGE-Datenkarte für NUM kann nur ein Datenbankverantwortlicher arbeiten.

NMESS: Der Wert für die Anzahl der Meßdatensätze NMESS wird durch den in Spalte 7-10 befindlichen ersetzt. Ist NMESS(neu) < NMESS(alt), so gehen die restlichen Meßdatensätze verloren. Mit dieser Version kann nur ein Datenbank-Verantwortlicher arbeiten. Ist NMESS(neu) > NMESS(alt), so wird Speicherplatz zum Meßdatenblock hinzugefügt, dessen Inhalt unbestimmt ist. Es muß gelten NMESS(neu) \* LAENGE  $\leq$  1000.

LAEN: Der Wert für die Anzahl der Meßwerte je Meßdatensatz (Spalten) wird durch den in Spalte 7-10 befindlichen ersetzt. Ist LAENGE(neu) < LAENGE(alt), so geht der Inhalt der restlichen Spalten in ( $A_{ij}$ ) verloren. Mit dieser Version kann nur ein Datenbank-Verantwortlicher arbeiten. Ist LAENGE(neu) > LAENGE(alt), so ist der Inhalt der hinzugefügten Spalten im Meßdatenblock unbestimmt. Es muß gelten NMESS \* LAENGE(neu)  $\leq$  1000.



MSG,LSG: Der Wert der FIXDAT-Elementnummer für "MESSUNG" bzw. "LOESUNGSMITTEL" wird durch den in Spalte 7-10 befindlichen ersetzt.

ION: Die Werte der FIXDAT-Elementnummern für alle 6 Ionen von "SALZ" werden durch die in den Spalten 7-10 usw. befindlichen ersetzt. Sind weniger als 6 Ionen zu codieren, so sind die entsprechenden Werte beginnend mit dem linken Datenfeld einzutragen. Die nicht benötigten Felder bis zum sechsten sind frei zu lassen.

IWER: Die Werte der Wertigkeitsangaben in "IWER" zu den entsprechenden Ionen werden durch die in Spalte 7-10 usw. befindlichen ersetzt. Wie bei ION müssen alle 6 Ionenwertigkeiten angegeben werden.

KZHE: Die Werte der FIXDAT-Elementnummer für die ersten 10 Datenspaltenüberschriften in "KZHEAD" werden durch die in Spalte 8-10 usw. befindlichen ersetzt. Es müssen alle Werte für KZHEAD angegeben werden.

T, DK, ETA, CMIN, CMAX, RELE: Der Wert von "T", "DK", "ETA", "CMIN", "CMAX" oder "RELE" wird durch den in Spalte 7-20 befindlichen ersetzt.

QUEL: Der alphanumerische Inhalt von "QUELLE" wird durch den in Spalte 6-80 befindlichen ersetzt.

A(i,j): Der Wert des Meßwertes  $A_{ij}$  in der i. Zeile und j. Spalte des Meßdatenblockes wird durch den in Spalte 15-28 befindlichen ersetzt. Hierbei muß gelten  $0 < i \leq NMESS$  und  $0 < j \leq LAENGE$ .

Da der CHANGE-Modul keine inhaltlichen Tests der Änderungswerte vornimmt, sondern diese nur in den Datenblock einträgt, muß der Nutzer für die Richtigkeit der Änderungswerte sorgen.

Durch die MCC CHANGE 1 CHANGE 2 CHANGE 3 wird über den CHANGE-Modul ein vom Nutzer zu schreibendes FORTRAN-Unterprogramm aufgerufen, das als Lochkarten-Quelldeck im FORT-Step der CGLR001-Prozedur übersetzt wird. Die Kopfzeile dieser UP muß lauten:

```
SUBROUTINE CHANG1 (*)      für CHANGE 1
SUBROUTINE CHANG2 (*)      für CHANGE 2
SUBROUTINE CHANG3 (*)      für CHANGE 3
```

Der \*-Ausgang ist zu benutzen, wenn in diesen UP ein irreparabler Fehler auftrat, der unbedingt zum STOP der Datenverarbeitung führen muß. In den UP ist die FORTRAN-Anweisung STOP unzulässig. In den UP kann der Nutzer evtl. mit Hilfe weiterer Datenkarten Veränderungen am Datenblock im HS vornehmen.

Während durch die MCC CHANGE 1-3 nutzereigene UP aufgerufen werden, aktivieren die MCC CHANGE 4 usw. CHANGE 9 CHANGE 10 über den CHANGE-Modul SAFE-eigene UP, die gewisse Datenblockmanipulationen vornehmen. Gegenwärtig arbeiten nur die UP CHANGE 4 und CHANGE 9. Alle anderen CHANGE-UP sind leere Routinen.





CHANGE 4 bewirkt für binäre Elektrolyte, daß LAENGE(neu) = LAENGE(alt)+1 gilt und daß die n. Datenspalte (n=2,3,...,LAENGE(alt)) in die n+1. Datenspalte umgespeichert wird. In die Datenspalten 1 und 2 werden die Einzelionenkonzentrationen  $c_1$  und  $c_2$  des in ION(1) und ION(2) beschriebenen Ions eingetragen. In der Tabelle sind die Umrechnungsformeln angegeben, die - gesteuert durch KZHEAD(1) - verwendet werden.

vor der Abarbeitung von CHANGE 4		danach
KZHEAD(1) =	$A_{1,1} =$	
1	$c_{st} := \frac{c_+ + c_-}{\nu_+ + \nu_-}$	$c_a = \nu_a c_{st}$
2	$c_{ges} := c_+ + c_-$	$c_a = \frac{\nu_a c_{ges}}{\nu_+ + \nu_-}$
15	$I := \frac{1}{2}(c_+ z_+^2 + c_- z_-^2)$	$c_a = \frac{2 I}{z_a(z_+ - z_-)}$

CHANGE 9 bewirkt für die Meßarten "osmotischer Koeffizient" und "mittlerer Aktivitätskoeffizient" eine Umrechnung der experimentellen Daten vom Lewis-Randall-System (molale Konzentration  $m$ , osmotischer Koeffizient  $\Phi$ (m), Aktivitätskoeffizient  $\gamma_{\pm}$ (m) ins McMillan-Mayer-System (molare Konzentration  $c$ , osmotischer Koeffizient  $g(c)$ , Aktivitätskoeffizient  $f_{\pm}(c)$ ) nach den Formeln:

$$\left. \begin{aligned} c &= \frac{m d_o}{1 + \frac{d_o m \Phi_v}{1000}} \\ \Phi_v &= \Phi_v^0 + S_v \sqrt{c} + B_v c \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Iterative Lösung mit} \\ \text{relativer Genauigkeit } 10^{-6} \end{array}$$

$$g(c) = \frac{\Phi(m)}{1 - \frac{c \Phi_v}{1000} + g \nu c R T \beta_o}$$

$$\ln f_{\pm}(c) = \ln \gamma_{\pm}(m) + \ln \frac{m d_o}{c} - \frac{g^2 \beta_o \nu c R T}{2} + \frac{g c \Phi_v}{1000}$$

In der letzten Gleichung wurde für den osmotischen Koeffizienten  $g$  näherungsweise  $g=1$  gesetzt.  $\nu$  ist die Zerfallszahl der Elektrolyte. Auf einer Datenkarte sind folgende Größen anzugeben:

Spalte	
1 - 5	frei (Blank)
5 - 8	FIXDAT-Nr. des 1. Ions (rechtsbündig)
9 - 11	FIXDAT-Nr. des 2. Ions (rechtsbündig)
12 - 21	$\Phi_v^0$ [ $\text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$ ]
22 - 31	$S_v$ [ $(\text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1})^{3/2}$ ]
32 - 41	$B_v$ [ $(\text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1})^2$ ]

42 - 51 |  $\beta_0$  - Kompressibilität des Lösungsmittels [ $\text{dm}^3 \cdot \text{J}^{-1}$ ]  
 52 - 61 |  $\rho_0$  - Dichte des Lösungsmittels [ $\text{kg}/\text{dm}^3$ ]  
 62 - 71 |  $T$  - Temperatur [K]

Der experimentelle mittlere Aktivitätskoeffizient kann in der Form  $\gamma_{\pm}$ ,  $\ln \gamma_{\pm}$  bzw.  $1 + \lg \gamma_{\pm}$  bereitgestellt werden.

Eine Umrechnung erfolgt nicht, wenn

- der Elektrolyt aus mehr als 2 Ionensorten besteht
- der Datenblock nicht die Meßart osmotischer Koeffizient oder Aktivitätskoeffizient enthält
- die Ionennummern bzw. die Temperatur des Datenblockes nicht mit den entsprechenden Angaben in der Datenkarte übereinstimmen.

Nach Abarbeitung von CHANGE 9 entsteht folgende Datenspaltenstruktur:

1. Spalte  $c$
2. Spalte  $g^{\text{st}}$  bzw.  $\ln f_{\pm}$
3. Spalte  $m$
4. Spalte  $\phi(m)$  bzw.  $\gamma_{\pm}$  bzw.  $\ln \gamma_{\pm}$  bzw.  $1 + \lg \gamma_{\pm}$
5. Spalte  $\phi_v$

Die MCC NOT CHANGE bewirkt, daß der CHANGE-Modul übergangen wird.

Die LK-Code-PCG wirken auf die Interpretation der CHANGE-Datenkarten. Alle anderen PCG sind wirkungslos.

#### 4.7 Drucken und Stansen von Datenblöcken aus SAFE

Im HS befindet sich ein Datenblock, der mit der MCC PRINT PRINT KOPF ausgedruckt wird. Während mit PRINT der gesamte Datenblock gedruckt wird, veranlaßt PRINT KOPF den Druck nur des Kopfblockes.

Die MCC NOT PRINT bewirkt, daß der PRINT-Modul übergangen wird.

Die MCC KARTEI veranlaßt, daß 4 Karteikarten über den im HS befindlichen Datenblock gedruckt werden.

Die MCC NOT KARTEI bewirkt, daß der KARTEI-Modul übergangen wird.

Die MCC PUNCH PUNCH KOPF PUNCH MESS bewirkt, daß der im HS befindliche Datenblock oder nur der Kopfblock oder nur der Meßdatenblock auf Lochkarten gestanzt wird. Der Meßdatenblock wird gemeinsam mit der dazugehörigen Format-PCG gestanzt, wobei LAENGE < 55 gelten muß.

Die MCC NOT PUNCH bewirkt, daß der PUNCH-Modul übergangen

wird.

Die PCC haben auf die Tätigkeit der Moduln PRINT, KARTEI und PUNCH keinen Einfluß. Diese Moduln werden übergangen oder nur teilweise abgearbeitet, wenn sich kein Datenblock oder nur ein Kopfblock im HS befinden.

Die MCC COMPARE bewirkt, daß ein im HS befindlicher Datenblock oder Kopfblock mit dem Datenblock zur gleichen Blocknummer in SAFE verglichen wird. Stimmen die Datenblöcke nicht überein, so werden entsprechende Fehlermeldungen ausgegeben. Befindet sich zur Blocknummer des Datenblockes im HS kein Datenblock in SAFE, so wird der COMPARE-Modul übergangen. Ebenfalls wird der COMPARE-Modul übergangen, wenn sich kein Datenblock im HS befindet.

#### 4.8 Standard-Eingabesteuerkarten

Die CCC \*DATA BLOCK INPUT ist folgender MCC-Folge äquivalent:

```
*BEGIN PROCEDURE
INTERPRET AND LIST
DK AND ETA
CHANGE 4
NORMALIZE
TO BANK
READ IN
KARTEI
PRINT
*END PROCEDURE
```

Beim Aufruf von EINEIN ist automatisch \*DATA BLOCK INPUT und der PCC-Standard

```
-ESER CODE
-NOT IGNORE NMESS
-FORMAT
5E15.
```

definiert. Die \*DATA BLOCK INPUT dient zur Eingabe einer Folge von Kopf-, Meßdaten- oder Datenblöcken, die interpretierend gelistet werden. Die Meßdatenblöcke liegen in der Standardeingabeform (s. Abb. 4.3) vor, wobei gilt

1. Feld (Spalte 6-20): Stöchiometrische Konzentration  $\sum c_a / \sum \nu_a$   
in Mol/l
2. Feld (Spalte 21-35): Meßwert
- 3.-5. Feld : beliebig



Wurde der Datenblock unter der Bedingung -NOT IGNORE NMESS fehlerfrei eingelesen, so werden anschließend DK und ETA berechnet. Dann wird der Datenblock in die SAFE-Standardform gebracht und in die SAFE-Dateien eingetragen. Abschließend wird der Datenblock wieder aus SAFE gelesen, Karteikarten erzeugt und gelistet. Wurden beim Interpretieren eines Blockes Fehler entdeckt, so werden die restlichen Tätigkeiten nicht ausgeführt und mit der Interpretation des nächsten Blockes fortgefahren. Die Folge der Blöcke wird durch eine aktive STK oder \*END SEGMENT abgeschlossen.

Die CCC \*COMPARE ist folgender MCC-Folge äquivalent:

```
*BEGIN PROCEDURE
INTERPRET AND LIST
COMPARE
*END PROCEDURE
```

Es werden Datenblöcke interpretierend und listend eingelesen und mit den Datenblöcken in SAFE zur gleichen Blocknummer verglichen. Die Anwendung von \*COMPARE ist anzuraten, wenn Datenblöcke mit Hilfe des PUNCH-Moduls auf Lochkarte gestanzt wurden.

#### 4.9 Ende-Anweisungen

Es sind die in 2.5 näher erläuterten SCC \*RETURN \*STOP und die MCC RETURN definiert.

## 5. Datenblock-Kataloge

### 5.1 Stepaufbau

Jeder Step zur Erzeugung von Datenblock-Katalogen hat folgenden Aufbau:

```
//stepname EXEC CGLR001
//PORT.SYSIN DD *
    CALL KATALG(&1)
1    STOP
    END
/*
//LKED.SYSIN DD *
OVERLAY A
    INSERT STKINP,NAMEIN,XBEGIN,XSTOP,RESTRT,NAME0,NAME1,
        NAME2,NAME00,NAME01,NAME02,ELADIN
OVERLAY A
    INSERT DADCAT
OVERLAY A
    INSERT BLOCAT
OVERLAY A
    INSERT DBLCAT,DBXCAT,DBYCAT,DBZCAT
/*
//GO.SYSIN DD *
} SAFE-File
/*
```

Das SAFE-Teilprogramm KATALG besteht aus 54 FORTRAN-Unterprogrammen, von denen 5 Unterprogramme spezifisch für KATALG sind. Mit Überlagerungsstruktur benötigt KATALG etwa 94k Byte Hauptspeicherplatz. In der Tabelle sind alle STK des KATALG-Teilprogramms zusammengefaßt:

Lochkartenspalte	Beschreibung	STK	Modul-	Modul-	Modul-
1.....15.....20.	s.Abschnitt		name	nummer	status
*DATA BLOCK CATALOG	5.4	SCC	DBLCAT	20	0
*BLOCKNUMMER CATALOG	5.3	SCC	BLOCAT	19	0
*DATA ADDRESS CATALOG	5.2	SCC	DADCAT	18	0
*RETURN	2.5	SCC		2	0
*STOP	2.5	SCC	XSTOP	1	0

### 5.2 Datenblock-Adreßkatalog

Das SAFE-Glied zur Erzeugung eines Datenblock-Adreßkatalogs besteht nur aus der SCC \*DATA ADDRESS CATALOG. Es werden ausgedruckt die Blocknummer, die Blocknummer im SAFE -Satz mit Adresse und den Adressen der Vor- und Nachsätze sowie das Datum der letzten Schreibbearbeitung und die Kennzahl des Bearbeiters (s. 2.3), der die Sätze als letzter schrieb.

Dieser Katalog ist besonders wichtig, wenn Adreßbuchfehler auftraten.

### 5.3 Katalog der belegten Blocknummern

Das SAFE-Glied zur Erzeugung dieses Katalogs besteht nur aus der SCC \*BLOCKNUMMER CATALOG. Es werden in aufsteigender Folge alle Blocknummern ausgedruckt, unter denen ein Datenblock in SAFE eingetragen ist. Auf die Blocknummer folgt ein Stern, falls Kopf- und Meßdatenblock gespeichert sind.

### 5.4 Kopfblock-Katalog mit Sortierung

Das SAFE-Glied zur Erzeugung dieses Katalogs besteht aus der SCC \*DATA BLOCK CATALOG und anschließend einer Folge von Sortierungsmerkmal-Lochkarten, die durch eine aktive STK abgeschlossen werden.

Durch jede Sortierungsmerkmal-Lochkarte wird die Ausgabe eines Katalogs veranlaßt. Es gibt folgende Möglichkeiten:

1. Sortierung nach der Blocknummer: Auf der LK stehen die Buchstaben BLOC. Leerzeichen vor, zwischen und hinter diesen Buchstaben sind nicht signifikant. Auch kann nach BLOC ein beliebiger weiterer Text auf der LK stehen, z.B. BLOCKNUMMER-KATALOG. Es werden die Informationen der Kopfböcke, geordnet nach steigender Blocknummer, ausgegeben.
2. Sortierung nach MLTI: Auf der LK stehen die Buchstaben M, L, T, I in beliebiger Reihenfolge. Leerzeichen vor, zwischen und hinter diesen vier Buchstaben sind nicht signifikant. Auch kann nach diesen vier Buchstaben ein beliebiger weiterer Text auf der LK stehen, z.B. MLTI-KATALOG. Die Buchstaben stehen als Sortierungsmerkmal für:

- M - Messung
- L - Lösungsmittel
- T - Temperatur
- I - Ionen.

Sortiert wird zuerst nach dem 1. Buchstaben von links. Innerhalb gleicher "Werte" der 1. Größe wird nach dem 2. Buchstaben sortiert usw. Unter "Wert" sind bei M und L die entsprechenden FIXDAT-Elementnummern von MESSUNG oder von LOESUNGSMITTEL zu verstehen.

I verschlüsselt die FIXDAT-Elementnummern der ersten beiden Ionen von SALZ. Bei zweisortigen Elektrolyten wird also immer zuerst nach dem Kation und dann nach dem Anion sortiert. Bei mehr als zweisortigen Elektrolytmischungen wird nach dem 3. usw. Ion nicht mehr sortiert. Stehen auf der Sortierungsmerkmal-Lochkarte andere als die hier angegebenen Symbole, so wird diese LK übergangen.

### 5.5 Ende-Anweisungen

Es sind die in 2.5 näher erläuterten SCC \*RETURN und \*STOP definiert.



## 6. Das Anpaß-Programmsystem

Dieses Teilprogramm von SAFE wurde zum Vergleich von experimentellen Daten mit theoretischen Formeln eingesetzt. Die experimentellen Daten liegen gewöhnlich als standardisierte Daten-Blöcke (s. 4.1.4) vor. Das Anpaßprogrammsystem gestattet es dem Nutzer, aus der Vielzahl der vorliegenden Theorien zur Beschreibung der experimentellen Meßwerte einer bestimmten Meßart (vgl. Tab. S.116) eine gewünschte Theorie auszuwählen. Über den gegenwärtigen Stand der Theorievarianten gibt das Kapitel 7 Auskunft. Jeder Meßdatensatz ist mit jeder der angegebenen Theorien (entsprechend der Meßart) für sich auswertbar (z.B. Leitfähigkeit von KBr in Methanol bei 25°C mit MSAT). Es können aber auch alle von verschiedenen Autoren an einem Elektrolytssystem (bei  $T = \text{const.}$ ) gemessene Daten gleichzeitig mit einer Theorie ausgewertet werden (z. B. Leitfähigkeit von 4 einzelnen Meßdatensätzen von KBr in Methanol mit PHFP). Bei einer sorgfältigen Datenselektion ist der Vorteil dieser Methode offensichtlich. Darüber hinaus ist eine Auswertung einer ganzen Gruppe von Salzen in einem Lösungsmittel möglich (z.B. Leitfähigkeit von allen Alkalihalogeniden in Methanol mit  $\gamma$ -Theorie). Diese Zyklenanpassung liefert mehr Aussagen als die Summe der einzelnen Auswertungen (z.B. Einzelionenleitfähigkeiten  $\Lambda_{K^+}^{\circ}, \Lambda_{Cl^-}^{\circ} \dots$ ).

Da die elektrolytische Leitfähigkeit nicht nur von  $\Lambda_{ab}^{\circ}$  abhängt, sondern auch von interionischen Wechselwirkungen ( $\epsilon_{aa}, \epsilon_{ab}, \epsilon_{bb}$ ), ist mit dem Anpaßprogrammsystem eine weitere Auswertemethode entwickelt worden. Diese SOFT-Methode (Simultaneous Overlapping Fit of Theories) gestattet eine gleichzeitige Anpassung aller verfügbaren experimentellen Daten verschiedener physikalischer Eigenschaften gemessen in einem Lösungsmittel bei konstanter Temperatur (z.B. Leitfähigkeit, Überführungszahl, Osmotischer Koeffizient). (Ebeling, Feistel, Sändig, J.Sol.Chem. 8, 53 (1979))

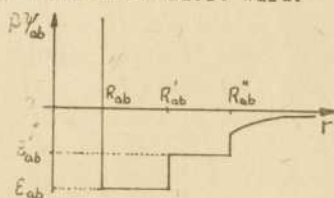
In den theoretischen Formeln sind normalerweise freie Parameter enthalten, die durch Anpassung auf der Grundlage der Gauß'schen Methode der kleinsten Quadrate ermittelt werden. Das ELFIT-



System dient der Lösung<sup>1)</sup> derartiger Aufgaben, wobei aus Speicherplatzgründen einige Einschränkungen zu beachten sind:

- (1) Es können maximal 200 Datenblöcke verschiedener Meßarten gleichzeitig bearbeitet werden.
- (2) Die Anzahl der Meßdatensätze NDATA, die gleichzeitig geladen werden können, hängt von der Anzahl der freien Parameter NPARAM, der Theorie (bes. Anzahl der Koeffizienten LAENGE(K)) und der Länge des unbenannten COMMON-Blockes MAXDAT ab.
- (3) Maximal dürfen in den gleichzeitig geladenen Datenblöcken 30 verschiedene Ionensorten auftreten.
- (4) Die Anzahl der freien Parameter kann 100 nicht übersteigen.
- (5) Aus den Datenblöcken können maximal 10 Spalten geladen werden.
- (6) Maximal sind 30 verschiedene Arten der Messung verarbeitbar.

Von der Struktur her ist ELFIT standardmäßig für Theorien ausgelegt, in denen die Ion-Ion-Wechselwirkung durch ein Treppential potential modelliert wird:



$R_{ab}$  - Hartekugelabstand

$d = R'_{ab} - R_{ab}$  Dicke der 1. Solvathülle

$d' = R''_{ab} - R'_{ab}$  Dicke der 2. Solvathülle

$$\beta V_{ab} = e_a e_b / 4\pi \epsilon_0 D k T r$$

für  $r > R''_{ab}$ : Coulombgesetz

Hier wird die Stufenhöhe  $\epsilon'_{ab}$  vom Nutzer vorgegeben und  $\epsilon_{ab}$  ist ein freier Parameter.

Standardmäßig wird weiterhin angenommen, daß die Theorie auf dem McMillan/Mayer-Niveau formuliert ist, d.h. daß das Lösungsmittel durch die DK  $D$  und die Viskosität  $\eta$  beschrieben ist und daß die Ion-Lösungsmittel-Wechselwirkung allein durch den ionischen Reibungskoeffizienten bei unendlicher Elektrolytverdünnung bestimmt ist.

<sup>1)</sup> It is a simple task to make things complex, but a complex task to make them simple. Murphy

### 6.1 Step-Aufbau

Jeder Step hat folgenden Aufbau:

```
//stepname EXEC CGLR001
//PORT.SYSIN DD *
COMMON//DAT(maxdat)
EXTERNAL ELFIX1                      (i=1,2,...,9,A)
CALL ELFIT(maxdat,ELFIX1,&1)

1  STOP
   END

/*
//LKED.SYSIN DD *
} Overlay      s.Tab. 6.11)
/*
//GO.SYSIN DD *
} SAFE-File
/*
```

Hier ist maxdat die Länge des unbenannten COMMON-Blockes in 4-Byte-Worten. Weiterhin steht  $i=1...A$  für maximal 10,20,... 90,100 freie Parameter.

Das SAFE-Teilprogramm ELFIT besteht gegenwärtig aus 161 Unterprogrammen, von denen 96 spezifische für ELFIT sind. Mit Überlagerungsstruktur werden mindestens 132 kByte Hauptspeicherplatz benötigt. In der Tabelle 6.2 sind die ELFIT-STK zusammengefaßt.

### 6.2 Die COMMON-Blöcke

Im folgenden werden die COMMON-Blöcke des ELFIT-Systems so weit beschrieben, wie zur aktiven Beherrschung des Systems nötig ist. Sie befinden sich alle im Wurzelsegment.

<sup>1)</sup> If builders build buildings the way programmers wrote programs, then the first woodpecker that came along would destroy civilization. Murphy

Tabelle 6.1 Overlay-Baum von ELFIT

```

OVERLAY A
  INSERT NAMEIN, NAME, NAME0, NAME1, NAME2, NAME3, NAME00, NAME01, NAME02,
  SKINP, XBEGIN, XSTOP, RESTRT, SCHUTZ, XDATH, BESMCD, R300CD, NOTE,
  ANASTK, ELADIN
OVERLAY A
  INSERT ELLOAD, ELLOLK, ELLSCO, DATAIN, DBXCAT, KPPADR, KPPIN, MESIN,
  EISE
OVERLAY A
  INSERT ELPREP, ELPRLK, GRUPPE, RADIUS
OVERLAY A
  INSERT ELCOEF, DINTBG, DAIND1, WAHL1, WAHL2, WAHL3
OVERLAY B
  INSERT COELYT
OVERLAY B
  INSERT COCON1, DEIAYG, DEIAYP, DEIYG, DEIYP, DHVAB1, DHVAB2
OVERLAY B
  INSERT COOSM1, DINT
OVERLAY B
  INSERT COCON2, ZPFUN, RESTZP, COINZP, COINZG, ES, EIEXIN, EIXIN
OVERLAY A
  INSERT ELFIX, DELFKT, FEIDEC, FEIIMP, FEIPOH, FEISOL, FEITUN, MGIB
OVERLAY C
  INSERT DELYT
OVERLAY C
  INSERT DELPAN
OVERLAY C
  INSERT DFTRC1, DFTR01, DSGIB, MGIB03
OVERLAY D
  INSERT DSGI00
OVERLAY D
  INSERT DSGI01
OVERLAY D
  INSERT DSGI02
OVERLAY D
  INSERT DSGI03, DSGI04, DSGI20
OVERLAY D
  INSERT DSGI05
OVERLAY D
  INSERT DSGI16
OVERLAY C
  INSERT DPOSM1
OVERLAY C
  INSERT DPOSM2, DCSTM
OVERLAY A
  INSERT ELRES1, ELRESD, SORT
OVERLAY A
  INSERT ELRES2, BNUM, ELGRAF, ELRESL
OVERLAY A
  INSERT ELRES3
OVERLAY A
  INSERT ELSTCT, ELSTLK
OVERLAY A
  INSERT ELSWIT
OVERLAY A
  INSERT ELUSER

```

OVERLAY A  
   INSERT ELFILL  
 OVERLAY A  
   INSERT ELCHEM, ELALFA, ELALAI, ELALKB, ELALKE, ELAL01, ELAL02, ELAL03,  
   ELAL04  
 OVERLAY G (REGION)  
   INSERT ELSAVE  
 OVERLAY G  
   INSERT ELFKT  
 OVERLAY E  
   INSERT ELYT  
 OVERLAY E  
   INSERT ELPAN  
 OVERLAY E  
   INSERT FTRC1, FTR01  
 OVERLAY E  
   INSERT POSM1  
 OVERLAY E  
   INSERT POSM2, SKCTM, BLUGAM, BLUGA  
 OVERLAY F (REGION)  
   INSERT SGIB00  
 OVERLAY F  
   INSERT SGIB01, ZPCOEF, EA  
 OVERLAY F  
   INSERT SGIB02  
 OVERLAY F  
   INSERT SGIB03, SGIB04, SGIB20  
 OVERLAY F  
   INSERT SGIB05  
 OVERLAY F  
   INSERT SGIB16



Tabelle 6.2 Die STK des ELFIT-Teilprogramms

IK-Text	Be- schrei- bung	STK- Typ	Modul- name	Modul- nummer	Modul- status
-ESER CODE	2.4.3	PCC			
-BESM CODE	2.4.3	PCC			
-R300 CODE	2.4.3	PCC			
-NOT IGNORE ERROR	6.3	PCC			
-IGNORE ERROR	6.3	PCC			
-NOT SAVE	6.3	PCC			
-SAVE1	6.3	PCC			
-SAVE2	6.3	PCC			
-NORMALIZED FIT	6.3	PCC			
-NOT NORMALIZED FIT	6.3	PCC			
RETURN	2.5	MCC		2	0
NOT STRUCTURE	6.4	MCC	ELSTCT	29	1
STRUCTURE	6.4	MCC	---	29	2
NOT LOAD	6.5	MCC	ELLOAD	22	1
LOAD	6.5	MCC	---	22	2
LOAD AND LIST	6.5	MCC	---	22	3
LOAD AND FULL LIST	6.5	MCC	---	22	4
LOADGO	6.5	MCC	---	22	5
LOADGO AND LIST	6.5	MCC	---	22	6
LOADGO AND FULL LIST	6.5	MCC	---	22	7
NOT PREPARE	6.6	MCC	ELPREP	23	1
PREPARE	6.6	MCC	---	23	2
PREPARE AND LIST	6.6	MCC	---	23	3
PREPARE AND FULL LIST	6.6	MCC	---	23	4
NOT COEFFICIENT	6.7	MCC	ELCOEF	24	1
COEFFICIENT	6.7	MCC	---	24	2
COEF. UNCOND.	6.7	MCC	---	24	3
COEFFICIENT AND LIST	6.7	MCC	---	24	4
COEF. UNCOND. AND LIST	6.7	MCC	---	24	5
NOT FIT	6.8	MCC	ELFIX1	25	1
FIT	6.8	MCC	---	25	2
FIT AND LIST	6.8	MCC	---	25	3
FIT AND FULL LIST	6.8	MCC	---	25	4

NOT RESULT 1	6.9	MCC	ELRES1	26	1
RESULT 1	6.9	MCC	-"-	26	2
NOT RESULT 2	6.10	MCC	ELRES2	27	1
RESULT 2 (BLOCK)	6.10	MCC	-"-	27	2
RESULT 2 (BLOCK,PCT)	6.10	MCC	-"-	27	3
RESULT 2 (BLOCK,PCT,GRA)	6.10	MCC	-"-	27	4
RESULT 2 (ALL)	6.10	MCC	-"-	27	5
RESULT 2 (ALL,PCT)	6.10	MCC	-"-	27	6
RESULT 2 (ALL,PCT,GRA)	6.10	MCC	-"-	27	7
CHEMICAL MODEL 1	6.11	MCC	ELCHEM	34	1
CHEMICAL MODEL 2	6.11	MCC	-"-	34	2
SWITCH 1 ON	6.12	MCC	ELSWIT	31	1
SWITCH 2 ON	6.12	MCC	-"-	31	2
SWITCH 3 ON	6.12	MCC	-"-	31	3
SWITCH 4 ON	6.12	MCC	-"-	31	4
SWITCH 5 ON	6.12	MCC	-"-	31	5
SWITCH 1 OFF	6.12	MCC	-"-	31	6
SWITCH 2 OFF	6.12	MCC	-"-	31	7
SWITCH 3 OFF	6.12	MCC	-"-	31	8
SWITCH 4 OFF	6.12	MCC	-"-	31	9
SWITCH 5 OFF	6.12	MCC	-"-	31	10
IF SWITCH 1 ON REPEAT	6.12	MCC	-"-	31	11
IF SWITCH 2 ON REPEAT	6.12	MCC	-"-	31	12
IF SWITCH 3 ON REPEAT	6.12	MCC	-"-	31	13
IF SWITCH 4 ON REPEAT	6.12	MCC	-"-	31	14
IF SWITCH 5 ON REPEAT	6.12	MCC	-"-	31	15
USER 1	6.13	MCC	ELUSER	32	1
USER 2	6.13	MCC	-"-	32	2
USER 3	6.13	MCC	-"-	32	3
*RETURN	2.5	SCC		2	0
*STOP	2.5	SCC		1	0
*BEGIN PROCEDURE	2.4.2				
*END PROCEDURE	2.4.2				
*END SEGMENT	4.3				

### 5.2.1. Der unbenannte COMMON-Block

Dieser COMMON-Block besteht aus 4 Bereichen:

COMMON//DATK,DATT,DATD,DATI

REAL\*8 DATK(NDATEN,LAENGK)      Koeffizientenbereich

REAL\*8 DATT(NDATEN,LAENGK)      Theoriebereich

REAL\*4 DATD(NDATEN,LAENGK)      Datenbereich

INTEGER\*2 DATI(2,NDATEN)      Informationsbereich

In jeder der NDATEN Zeilen stehen die Daten zu einem Meßwert, wobei standardmäßig gilt:

DATD(1,1) := $c_{i,1}$	} Expt.Konzentration in mol/dm <sup>3</sup> der Ionen- sorte 1...(n-1) mit n = IPRES(1) (in ELLOAD berechnet)
DATD(i,n-1) := $c_{i,n-1}$	
DATD(i,n) := $f_i^{\text{expt}}$	expt. Wert
(DATD(i,n+1) := $\alpha$	Dissoziationsgrad)
DATT(1,1) := $f^{\text{th}}(c_1; X)$	Theoriewert
DATT(1,2) := $\Delta f^{\text{th}}$	Fehlerfortpflanzungstunnel
DATK(i,1) := $K_1(c_1)$	} Koeffizienten zur Theorie
DATK(i,m) := $K_m(c_1)$	
DATI(1,1) := Nummer der Zeile im COMMON-Block BLOCK, in der die Kopfblockinformationen (wie Salz, Tempera- tur, Lösungsmittel usw.) stehen.	
DATI(2,1) := $j_1 + j_2 * 10$ mit $j_1 = 1$ : an die Zeile 1 wurde in ELFIX an- gepaßt $j_2 = 1$ : zur Zeile 1 wurden in ELCOEF die Koeffizienten berechnet	

Die Gesamtzahl der REAL\*4-Worte je Zeile beträgt

LENGTH=2\*LAENGK+2\*LAENGK+LAENGK+1

Die Anzahl der Zeilen ergibt sich zu

NDATEN= [MAXDAT/LENGTH]

mit MAXDAT:= maxdat. Die Anzahl der Spalten LAENGK in den Be-  
reichen kann der Nutzer vorgeben (vgl. 6.4), sie können grö-  
ßer sein als in der Standardversion vorgesehen. Die restli-  
chen Spalten stehen dann dem Nutzer zur freien Verfügung.

### 6.2.2 Der COMMON-Block BLOCK

Er hat folgenden Aufbau:

COMMON/BLOCK/NRBL(200),	Datenblocknummer
KZION(6,200)	Verweis auf Zeile in NRION
LSGMTL(200)	Lösungsmittelnummer
MSSART(200)	"Art der Messung"-Nummer
TEMP(200)	Temperatur in K
DIELEK(200)	rel. Dielektrizitätszahl
VISKOS(200)	Viskosität in Poise
NRION(30)	Ionennummer
IONWRT(30)	Ionenwertigkeit zu NRION

INTEGER\*2 KZION,LSGMTL,MSSART,NRION,IONWRT

Die Kopfblockinformationen jedes geladenen Datenblockes (vgl. 6.5) werden in jeweils eine Zeile eingetragen.

### 6.2.3 Der COMMON-Block ELPARA

Er enthält alle Informationen zu den maximal 100 freien Parametern:

COMMON/ELPARA/IREF(100)	1.Verweis auf Zeile in NRION
JREF(100)	2.Verweis auf Zeile in NRION
X(100)	Vektor der freien Parameter
DX(100)	vor Aufruf ELFIX: maximale Schrittweite
	nach Aufruf ELFIX: Streuung von X
RAB(100)	Hartkugelabstand $R_{ab}$
RABS(100)	1.Solvatabstand $R'_{ab}$
RABSS(100)	2.Solvatabstand $R''_{ab}$
EPSABS(100)	2.Stufenhöhe $\epsilon'_{ab}$
ASCRA(100)	Abschirmlänge $a_{ab}$ der DHX-Theorie
DELTA(100)	rel.geforderte Genauigkeit
CORR(100)	Korrelationskoeffizient (ELFIX)

REAL\*8 X,DX

REAL\*4 RAB,RABS,RABSS,EPSABS,ASCRA,DELTA,CORR

INTEGER\*2 IREF,JREF

Hier sind X, DX und DELTA universelle Größen und vom Nutzer beliebig verwendbar. In DHX-Theorien mit Treppenpotentialen haben die restlichen Felder RAB,RABS,RABSS,EPSABS und ASCRA



die in 6.6 diskutierte Bedeutung und sind somit nur beim Aufruf dieser Theorien festgelegt. Ansonsten kann über diese Felder beliebig verfügt werden (vgl. 6.6).

Es gibt 4 Gruppen von freien Parametern:

- (1)  $X(i), i=1 \dots N(X)$ ,  $IREF=JREF=\emptyset$ : sind ionenunabhängige Parameter
- (2)  $X_a(i), i=1 \dots N(XA)$ ,  $a:IREF$ ,  $IREF=1 \dots NION$  (=Anzahl der verschiedenen Ionen in  $NRION$ ),  $JREF=\emptyset$ : sind Parameter, die nur von einem Ion abhängen (z.B. ionischer Reibungskoeffizient bei unendlicher Verdünnung)
- (3)  $X_{aa}(i), i=1 \dots N(XAA)$ ,  $a:=IREF=JREF$ ,  $IREF=1 \dots NION$ : sind Parameter, die Ion-Ion-spezifisch sind, wobei beide Ionen zur gleichen Sorte gehören.
- (4)  $X_{ab}(i), i=1 \dots N(XAB)$ ,  $a:=IREF, b:=JREF$ : sind Parameter, die Ion-Ion-spezifisch sind, wobei die Ionen zu verschiedenen Sorten, aber zum gleichen Elektrolyten gehören.

Die Anzahl der Parameter je Gruppe  $N(X) \dots N(XAB)$  kann vom Nutzer vorgegeben werden (vgl. 6.4).

### 6.3 Passive Steuerkarten

Für LK-Codeumwandlung sind die PCC-ESER CODE (Standard), ~~ESER~~ CODE und ~~R300~~ CODE erklärt.

PCC -IGNORE ERROR bewirkt, daß leichte Fehler des Nutzers<sup>1)</sup>, die die Logik der Programmabarbeitung nicht verletzen, nicht zum Programmabbruch führen. Dieser tritt ein, falls die PCC -NOT IGNORE ERROR (Standard) in Kraft ist. Leichte Fehler des Nutzers sind:

- Fehler in einer Datenkarte für ELLOAD (6.5)
- zu ladende Datenblöcke sind nicht vorhanden (ELLOAD)
- Speichervolumen des unben. COMMON-Blockes überschritten (ELLOAD)
- mehr als 30 verschiedene Ionen (ELLOAD)
- mehr als 200 Datenblöcke sollen geladen werden (ELLOAD)
- Fehler in einer Datenkarte für ELPREP (6.6)

<sup>1)</sup> To err is human, but to really foul things up requires a computer. Murphy

Die PCC -NOT NORMALIZED FIT (Standard) setzt in ELFIX die Gewichte  $p_i = 1/N$ , im Falle von -NORAMLIZED FIT dagegen gilt  $p_i = 1/(f_i^{\text{expt}})^2$ .

Im ELFIT-System ist die Sicherung des gesamten Hauptspeichersinhaltes zum Zwecke eines erweiterten Restarts nach anormalem Stepende (etwa infolge Systemabsturz) möglich. Dazu ist die Datei 16 CGLRSAVE in zwei Teile geteilt, die jeweils die vollständigen Informationen eines Jobs aufnehmen können. Der automatische Sicherungsabzug in den Teil 1 oder 2 wird durch die PCC -SAVE 1 bzw. -SAVE 2 freigegeben. Durch die PCC -NOT SAVE (Standard) wird der Abzug verhindert. Es wird kein Test vorgenommen, ob der betreffende Dateiteil noch durch frühere abgestürzte Jobs belegt ist. Der automatische Sicherungsabzug erfolgt nach Ausführung eines Moduls sowie in CPU-intensiven Modulen spätestens alle 600 Sekunden CPU-Zeit. Der Beginn und das Ende des Abzugs werden jeweils protokolliert. Mit Hilfe der ICC \*\*RESTART 1 setzt das Programm seine Arbeit an der Stelle fort, die unmittelbar auf die Sicherungsstelle folgt.

#### 6.4 Der Modul ELSTCT

Mit diesem Modul wird die Struktur des Fit-Systems festgelegt, die im COMMON-Block INFORM abgespeichert ist. Der Modul ist mindestens einmal am Beginn der Abarbeitung mit der MCC STRUCTURE aufzurufen. Der Modul wird unter der Steuerung der MCC NOT STRUCTURE übergangen. Der Modul fordert Datenkarten an, die die Strukturdaten enthalten. Die Menge dieser Datenkarten ist mit \*END SEGMENT abzuschließen. Es sind folgende Datenkarten definiert ( $i,j,k,l,m=\text{INTEGER}*4$ ,  $r=\text{REAL}*4$ ):

Datenkarte	zu Ändernde Größe	Standardwert
STANDARD	(Standard)	
LAENGE(D)= i	LANEGD	3
LAENGE(K)= i	LAENGK	12
LAENGE(T)= i	LAENGT	2
N(X) = 1	NX	0
N(XA)= 1	NXA	1
N(XAA)= 1	NXAA	1
N(XAB)= 1	NXAB	1
MAXIT= i	MAXIT	50
TIME= r	TIME	600.
EPSIL= r	EPSIL	1.E-6

DAEMP = r	DAEMP	0.5
THEORIE(msng)=	ITHEOR(msng,1)=11	msng
ii,jj,kk,ll,mm	-"- 2)=jj	11. jj. kk. ll. mm.
mit:msng=1,2,...	-"- 3)=kk	1-5 03. 02. 01. 00. 00
30 ist die	-"- 4)=ll	6 03. 50. 00. 00. 00
Schlüsselzahl zur	-"- 5)=mm	13-16 03. 02. 01. 00. 00
"Art der Messung"		Rest 00. 00. 00. 00. 00
(s.5.116)		
FREE(j)=r	FREE(j+10)	0.0
IFREE(j)=1	IFREE(j+10)	0
mit j=1,2,...10		

### 6.5 Der Modul ELLOAD

Abhängigkeit: ELSTCT (6.4)

Der Modul überträgt aus den SAFE-Dateien eine Anzahl von Datenblöcken in den Hauptspeicher. Dabei werden die wesentlichen Informationen zu den Datenblöcken (aus KOPF, 4.1.1) im COMMON-Block BLOCK abgelegt. Die Meßdaten (aus MESS, 4.1.2) werden in den Datenbereich des unbenannten COMMON-Blockes übertragen, wobei eine Änderung der Reihenfolge der Spalten sowie eine Zeilenselektion der Daten vorgenommen werden kann. Nach dem Einlesen der Datenblöcke werden die Zeilen des unbenannten COMMON-Blockes aufsteigend nach wachsender Gesamtkonzentration sortiert.

Neben dem Laden von Datenblöcken (LOAD)- d.h. nur die geladenen Datenblöcke stehen im Hauptspeicher - ist auch das Nachladen (LOADGO) möglich, wobei zu den bereits vorhandenen Datenblöcken von vorherigen ELLOAD-Aufrufen neue hinzugefügt werden.

Mit folgenden aktiven Steuerkarten (MCC) wird der Modul aufgerufen:

NO LOAD	Keine Abarbeitung des Moduls
LOAD	Laden von Datenblöcken
LOAD AND LIST	
LOAD AND FULL LIST	
LOADGO	Nachladen von Datenblöcken
LOADGO AND LIST	
LOADGO AND FULL LIST	

Die Zusatzangaben LIST bzw. FULL LIST bestimmen den Umfang der ausgedruckten Informationen zu den geladenen Datenblöcken.

Der Modul benötigt zu seiner Ausführung Datenkarten, von denen es 3 Typen gibt. Die Menge der Datenkarten ist mit \*END SEGMENT abzuschließen.

(1) ELLOAD-Blocknummerkarte

LK-Spalte 1-5: NUM=Datenblocknummer (rechtsbündig)

LK-Spalte 6-80: leer

Der Datenblock NUM wird vollständig geladen.

(2) ELLOAD-Informationskarte

LK-Spalte 1- 5: leer

- |     |        |        |   |
|-----|--------|--------|---|
| -"- | 6-15:  | cmin:  | Laden der Meßdatensätze mit $\sum_n c_n \geq cmin$  |
| -"- | 16-25: | cmax:  | Laden der Meßdatensätze mit $\sum_n c_n \leq cmax$  |
| -"- | 26-30: | istep: | Laden jedes istep.-ten Meßdatensatzes (beginnend mit dem ersten)  |
| -"- | 31-33: | <1>:   | <div style="display: inline-block; vertical-align: middle;"> <div style="font-size: 4em; vertical-align: middle; margin-right: 10px;">}</div>           in die j. Datenspalte des Datenfeldes des unbenannten COMMON-Blockes wird die &lt;j&gt;. Spalte des Meßdatenblockes geladen.         </div> |
| -"- | 34-36: | <2>:   |   |
| -"- | 37-39: | <3>:   |   |
| -"- | 40-42: | <4>:   |   |
| -"- | 43-45: | <5>:   |   |
| -"- | 46-48: | <6>:   |   |
| -"- | 49-51: | <7>:   |   |
| -"- | 52-54: | <8>:   |   |
| -"- | 55-57: | <9>:   |   |
| -"- | 58-60: | <10>:  |   |
| -"- | 61-80: | leer   |   |

Standardzustand (beim Modulaufruf hergestellt): cmin=0.0, cmax=1.E50, istep=1, <i>=1; der Standardzustand bzw. der vorher eingestellte Zustand bleibt erhalten, wenn sich in den entsprechenden LK-Feldern Leerzeichen befinden.

Die ELLOAD-Informationskarte bewirkt, daß alle nachfolgend zu ladenden Datenblöcke den durch cmin bis <10> gegebenen Einschränkungen oder Manipulationen während des Ladeprozesses unterworfen sind.

(3) ELLOAD-Blocknummer-Informationskarte

LK-Spalte 1-5/: NUM= Datenblocknummer (rechtsbündig)

LK-Spalte 6-80: wie bei (2)

Die Informationen cmin bis <10> sind nur während des Ladens des Datenblockes NUM gültig. Anschließend gilt wieder der ursprüngliche Ladezustand.



## 6.6 Der Modul ELPRKP

Abhängigkeit: ELSTCT (6.4), ELLOAD (6.5)

Dieser Modul bestimmt anhand der Wit-Struktur und der geladenen Datenblöcke die Anzahl der anzupassenden Parameter NPARAM und stellt einen Standardzustand des COMMON-Blockes ELPARA her bzw. verändert diesen. Mit folgenden aktiven Steuerkarten (MOC) wird der Modul aufgerufen:

NOT PREPARE	keine Abarbeitung des Moduls
PREPARE	} Aufruf des Moduls mit unterschiedlich ausführlicher Druckerausgabe
PREPARE AND LIST	
PREPARE AND FULL LIST	

Der Modul benötigt zu seiner Ausführung Datenkarten, die mit END SEGMENT abzuschließen sind. Folgende Datenkarten sind definiert ( $r$ =REAL):

### (1) STANDARD

Es wird der Standardzustand hergestellt:

(1.1) im COMMON-Block INFORM:

MINANP=1    MAXANP=NMESNG

FREE(2)=2.76    (=D=Dicke der 1.Solvatationsosphäre)

FREE(3)=0.0    (=D=Dicke der 2.Solvatationsosphäre)

(1.2) im COMMON-Block ELPARA ( $a, b$ = Ionengruppen,  $r_a$ =Ionenradius):

Belegung von IREF und JREF

$X(a,1)=50.0$

$DX(a,1)=10.0$

$X(a-a,1)=1.0$

$DX(a-a,1)=0.5$

$RAB(a-a,1)=2r_a$

$RABS(a-a,1)=RAB(a-a,1)+D$

$RABSS(a-a,1)=RABS(a-a,1)+D'$

$ASCRAB(a-a,1)=RABSS(a-a,1)$

$X(a-b,1)=-1.0$

$DX(a-b,1)=0.5$

$RAB(a-b,1)=r_a+r_b$

$RABS(a-b,1)=RAB(a-b,1)+D$

$RABSS(a-b,1)=RABS(a-b,1)+D'$

$ASCRAB(a-b,1)=RABSS(a-b,1)$

DELTA (alle Indizes)=  $1.E-4$

alle anderen Elemente= 0.0

(2)  $C(MIN)=r$

Die untere Anpassgrenze MINANP wird derart festgelegt, daß gilt  $\sum c_a(MINANP) \geq C(MIN)$ .

(3)  $C(MAX)=r$

Die obere Anpassgrenze MAXANP wird derart festgelegt, daß gilt  $\sum c_a(MAXANP) \leq C(MAX)$ .

(4)  $D(a-b)=r$

(4.1)  $a=b=*$ : Die Dicke der 1. Solvatationsosphäre (FREE(2)) ergibt sich aus D. Anschließend wird RABS, RABSS und ASCRAB für alle Ionenkombinationen neu bestimmt (s. oben (1.2)).

(4.2)  $a$  und  $b$ =Ionengruppe: RABS, RABSS und ASCRAB werden für die Ionenkombinationen  $a-b$  wie in (1.2) neu bestimmt. Der permanente Wert in FREE(2) bleibt unverändert.

(5)  $D'(a-b)=r$

(5.1)  $a=b=*$ : Die Dicke der 2. Solvatationsosphäre FREE(3) ergibt sich aus  $D'$ . Anschließend wird RABSS und ASCRAB wie in (1.2) für alle Ionenkombinationen neu bestimmt.

(5.2)  $a$  und  $b$ = Ionengruppe: RABSS und ASCRAB werden für die Ionenkombination  $a-b$  wie in (1.2) neu bestimmt. Der permanente Wert in FREE(3) bleibt unverändert.

(6)  $RA(a)=r$

(6.1)  $a=*$ : in der Liste der Ionenradien werden alle Radien gleich RA gesetzt. Anschließend wird RAB, RABS, RABSS und ASCRAB wie in (1.2) für alle Ionenkombinationen neu bestimmt.

(6.2)  $a$ =Ionengruppe: in der Liste der Ionenradien wird der Radius des Ions  $a$  gleich RA gesetzt. Anschließend wird RAB, RABS, RABSS und ASCRAB wie in (1.2) für alle Ionenkombinationen, die  $a$  enthalten, neu bestimmt.

(7)  $\text{symbol}[(n)]=r$  mit  $\text{symbol}=X|DX|R|R'|R''|EPS'|A|\Delta$

(7.1)  $n=*$ : Eintragen von  $r$  in die Spalte symbol für  $n=1$  bis  $N(X)$ .

(7.2)  $n \in [1, N(X)]$ : Eintragen von  $r$  in die  $n$ . Zeile von symbol.

(7.3)  $(n)$  nicht angegeben:  $n=1$  und weiter (7.2).

(8)  $\text{symbol}(a[n])=r$  mit  $\text{symbol}=X|DX|R|R'|R''|EPS'|A|\Delta$

(8.1)  $a=*$  und  $n=*$ : Eintragen von  $r$  in alle  $a$ -Elemente der Spalte symbol mit den Zeilen  $n=1$  bis  $N(XA)$ .

(8.2)  $a=*$  und  $n \in [1, N(XA)]$  bzw.  $n=1$  falls nicht angegeben: Eintragen von  $r$  in die  $n$ . Zeile aller  $a$ -Elemente der Spalte symbol.

(8.3)  $a$ =Ionengruppe und  $n=*$ : Eintragen von  $r$  in das  $a$ -Element der Spalte symbol mit den Zeilen  $n=1$  bis  $N(XA)$ .

(9) symbol (a-b [n])=r mit symbol=X|DX|R|R'|R"|EPS|A|DELTA

(9.1) a=\* und b=\* und n=\*: Eintragen von r in alle a-b-Elemente der Spalte symbol mit den Zeilen n=1 bis N(XAA) bzw. N(XAB).

(9.2) a=\* und b=\* und  $n \in [1, N(XAA) \text{ bzw. } N(XAB)]$  bzw. n=1, falls nicht angegeben: Eintragen von r in die n.Zeile aller a-b-Elemente der Spalte symbol.

(9.3) a oder b=\* und b oder a=Ionengruppe und n=\*: Eintragen von r in alle a-b-Elemente, in denen eine Ionengruppe gleich b oder a ist, der Spalte symbol mit den Zeilen n=1 bis N(XAA) bzw. N(XAB).

(9.4) a oder b=\* und b oder a=Ionengruppe und  $n \in [1, N(XAA) \text{ bzw. } N(XAB)]$  bzw. n=1 falls nicht angegeben: Eintragen von r in die n.Zeile aller a-b-Elemente, in denen eine Ionengruppe gleich b oder a ist, der Spalte symbol.

(9.5) a und b=Ionengruppe und n=\*: Eintragen von r in die Zeilen n=1 bis N(XAA) bzw. N(XAB) des a-b-Elements der Spalte symbol.

(9.6) a und b=Ionengruppe und  $n \in [1, N(XAA) \text{ bzw. } N(XAB)]$  bzw. n=1 falls nicht angegeben: Eintragen von r in die n-Zeile des a-b-Elements der Spalte symbol.

Leerzeichen auf den Datenkarten sind nicht signifikant, sie werden übergangen.

## 6.7 Der Modul ELCOEF

Abhängigkeit: ELSTCT, ELLOAD, ELPREP

Feistel /Diss. A. W.-Pieck-Universität Rostock, 1976/ hat erstmalig erkannt, daß eine Reihe von theoretischen Leitfähigkeitsformeln in einer Form geschrieben werden können, daß sich die anzupassenden Parameter (z.B. Stufenhöhe  $\varepsilon_{ab}$ ) multiplikativ von Koeffizienten trennen lassen, die nur noch dichte-, temperatur- usw.-abhängig sind. Die numerische Berechnung dieser Koeffizienten ist meist sehr zeitaufwendig (z.B. 6 Sekunden CPU je Konzentrationswert in der Leitfähigkeitstheorie §3.§2.§1). Es zeigt sich hier das klassische EDV-Problem: mehr Speicherplatz (für die Koeffizienten) und weniger Rechenzeit (bei der Anpassung in ELFIX1) oder umgekehrt. In der Leitfähigkeitstheorie §3.§2.§1 beispielsweise stehen sich bei 100 Datenpunkten und 20 Iterationen 10k Byte Koeffizientenspeicherplatz und 180 Minuten CPU-Zeit

gegenüber! Beim Aufruf des Moduls ELCOEF werden entsprechend der in THEORIE festgelegten Variante die Koeffizienten berechnet und in den Koeffizientenbereich des unbenannten COMMON-Blockes eingetragen. Falls in einer Theorievariante keine Koeffizienten vorgesehen sind, so wird der Modul wieder verlassen. Folgende aktive Steuerkarten (MCC) sind definiert:

NOT COEFFICIENT	keine Abarbeitung des Moduls
COEFFICIENT	} Koeffizientenberechnung
COEFFICIENT AND LIST	
COEF. UNCOND.	} unbedingte Koeffizientenberechnung
COEF. UNCOND. AND LIST	

Der Modul benötigt keine Datenkarten.

Während der einfachen Koeffizientenberechnung (COEFFICIENT) wird eine Marke in jeder Zeile (Konzentration) gesetzt. Wird nochmals COEFFICIENT aufgerufen, so wird diese Marke getestet und, falls gesetzt, keine erneute Koeffizientenberechnung vorgenommen. Damit wird Rechenzeit eingespart. Dieser Markentest wird nicht vorgenommen, falls die unbedingten Aufrufe (COEF. UNCOND.) erfolgen.

Der LIST-Zusatz veranlaßt den Druck des gesamten unbenannten COMMON-Blockes getrennt nach Daten-, Koeffizienten- und Theoriebereich. Einen Sonderfall bezüglich der Theorievarianten stellt die Kombination THEORIE(msng)=00.00.00.00.00 dar. Sie ist eine Nutzervariante, d.h. die Koeffizientenberechnung erfolgt in einem Nutzerprogramm

```
SUBROUTINE COELYT (I,K,*)
```

```
:
```

```
RETURN
```

```
END
```

das als Lochkartendeck vorliegt.

### 6.8 Der Modul ELFIXi (i=1,2,3,4,5,6,7,8,9,A)

Abhängigkeit: ELSTCT, ELLOAD, ELPREP, (ELCOEF)

In ihm wird das im allgemeinen nichtlineare Gleichungssystem der 10,20,...,90,100 (in Entsprechung zu i) freien Parameter X iterativ gelöst. Dieses Gleichungssystem entsteht aus der An-



passung der Theorie  $f(c; X)$  an die experimentellen Datenpaare  $(c_j, f_j)$  mit Hilfe der Gauß'schen Methode der kleinsten Quadrate (s. R. Feistel, Diss. A., W.-Pieck-Univ. Rostock, 1976)<sup>1)</sup>

$$\Phi(X) := \sum_{j=\text{MINANP}}^{\text{MAXANP}} p_j [f(c_j; X) - f_j]^2 = \text{Minimum}$$

Hier ist  $N = \text{MAXANP} - \text{MINANP} + 1$  die Gesamtzahl der anzupassenden Datenpunkte und

$$p_j = 1/N \quad \text{falls } -\text{NOT NORMALIZED FIT}$$

$$p_j = 1/f_j^2 \quad \text{falls } -\text{NORMALIZED FIT}$$

Sei  $X^{(k)}$  eine Näherungslösung nahe genug an der Lösung  $X$ . Dann ist die Linearisierung

$$f(c; X) = f(c; X^{(k)}) + P^{(k)} \cdot \Delta x + O(\Delta x^2)$$

gerechtfertigt. Hier ist  $P^{(k)}$  die Jacobi-Matrix

$$P^{(k)} = \left( \frac{\partial f(c_j; X^{(k)})}{\partial x_1} \right)$$

Setzen wir voraus, daß

$$\varepsilon_j = f(c_j; X^{(k)}) + P^{(k)} \cdot \Delta x - f_j$$

normal verteilt ist, so erhalten wir das lineare Gleichungssystem

$$\Delta x = -(P^{(k)T} \cdot p \cdot P^{(k)})^{-1} \cdot P^{(k)T} \cdot p \cdot (f(c; X^{(k)}) - f)$$

das mit dem Forsythe/Moler-Algorithmus /"Computer Solution of Linear Algebraic Systems", Prentice-Hall, New York 1967/ gelöst wird. Die neue Iterationslösung lautet

$$X_n^{(k+1)} = X_n^{(k)} + \begin{cases} \text{DAEMP} \cdot \Delta x_n & \text{falls } \leq DX_n \\ DX_n & \text{sonst} \end{cases}$$

Hier durchläuft  $n$  alle ganzen Zahlen 1 bis NPARAM, für die  $DX_n \neq 0$  gilt. Ist  $DX_n = 0$ , so wird der entsprechende Parameter  $X_n$  festgehalten. Das tritt ein, falls  $DX_n = 0$  von außen gesetzt wird (6.6)

<sup>1)</sup> If enough data is collected, anything may be proven by statistical methods. Murphy

oder falls  $X_n$  linear von anderen  $X_m$  abhängt (exakt oder im Rahmen der numerischen Genauigkeit EPSIL). Im letzteren Fall streicht ELFIXi selbständig den linear abhängigen Parameter ( $DX_n := 0$ ). Die Iteration wird abgebrochen, falls eine der folgenden Bedingungen erfüllt ist:

- (1)  $|DX_n| \leq \text{DELTA}(n) |X(n)| \quad \forall n \in [1, \text{NAPRAM}] : DX_n \neq 0$   
 (2) Anzahl der Iterationen = MAXIT  
 (3) CPU-Zeit in ELFIXi  $\geq$  TIME  
 (4) n=leer, d.h. keine freien Parameter vorhanden.

Abschließend wird die Gesamtstreuung

$$\text{STREU} = \sqrt{(\sum_j p_j \varepsilon_j^2) / (N - \text{NAPRAM})}$$

berechnet und die Schrittweite  $DX_n$  durch die Streuung der ermittelten Parameter ersetzt

$$DX_n = \sqrt{(F^T \cdot p \cdot F)^{-1}_{nn}}$$

In die erste Spalte des Theoriebereiches des unbenannten COMMON-Blockes werden die Theoriewerte  $f(c_j; X)$  und in die zweite Spalte der Fehlertunnel  $\Delta f(c_j; X)$  (lineare Fehlerfortpflanzung von  $DX$  auf  $f$ ) eingetragen. Hieraus folgt  $\text{LARGE}(T) \geq 2$ .

Der ELFIXi-Modul wird durch folgende MCC aufgerufen:

NOT FIT	}	keine Abarbeitung des Moduls
FIT		
FIT AND LIST		
FIT AND FULL LIST		Anpassung

Der Modul benötigt keine Datenkarten.

Die LIST-Ergänzungen bewirken den Druck von Informationen in jeder Iteration.

## 6.9 Der Modul ELRES 1

Abhängigkeit: ELSTCT, (ELLOAD), ELPREP, (ELFIT)

Dieser Modul dient der Druckerausgabe der Ergebnisse einer Anpassung. Er wird mit der MCC RESULT 1 aktiviert bzw. mit der MCC NOT RESULT 1 übergangen. Im wesentlichen wird der COMMON-Block ELPARA gedruckt. Weiterhin werden Informationen über den Anpassungsverlauf ausgegeben. Hierzu gehören: CPU-Zeit in ELFIT, Anzahl der Iterationen, Gesamtstreuung.

### 6.10 Der Modul ELRES 2

Abhängigkeit: ELSTCT, ELLOAD, ELPREP, (ELCOEF), (ELFIT)

Der Modul dient zur Druckerausgabe der Anpassungsergebnisse der konzentrationsabhängigen Größen. Er wird durch folgende MCC aktiviert:

NOT RESULT 2                      keine Abarbeitung des Moduls

RESULT 2 (BLOCK)

"	(BLOCK,FCT)	} <i>Resultat druck</i>
"	(BLOCK,FCT,GRA)	
"	(ALL)	
"	(ALL,FCT)	
"	(ALL,FCT,GRA)	

Die Angabe BLOCK bedeutet, daß die Ausgabe getrennt nach Datenblöcken erfolgt. Dagegen bewirkt ALL, daß alle Datenblöcke zum gleichen Salz, Lösungsmittel, Temperatur, Art der Messung gemeinsam gedruckt werden.

Die Angabe FCT veranlaßt den zusätzlichen Druck der S-Funktionen und aller Transportgrößen (Onsager-Koeffizienten, Leitfähigkeit, Überföhrungszahlen, ambipolarer Diffusionskoeffizient).

Die Angabe GRA bewirkt die Erzeugung einer Graphik auf dem Drucker. Als Abszisse wird der Logarithmus der Gesamtkonzentration verwendet, als Ordinate der relative Unterschied von experimentellem und theoretischem Wert.

Weiterhin werden zwei Streuungen angegeben

$$\text{SIGMA}^* = \sqrt{\left( \sum_{j=1}^{N^*} (f(c_j; X) - f_j)^2 \right) / (N^* - 1)}$$

$$\text{SIGMA} = \sqrt{\left( \sum_{j=1}^N (f(c_j; X) - f_j)^2 \right) / (N - 1)}$$

Hier symbolisiert  $N^*$  die Anzahl der Punkte, an die angepaßt wurde.  $N$  ist die vorhandene Wertepaare-Anzahl.

### 6.11 Der Modul ELCHEM

Abhängigkeit: ELSTCT, ELLOAD, ELPREP

Ebeling /Rostocker Phys. Manuskripte, 4, 125 (1979)/ hat eine Methode begründet, die es gestattet, thermodynamische und Transportgrößen im ohemischen Modell zu berechnen, ohne Dichteentwicklungen vorzunehmen und doch bis zum 2. Virialkoeffizienten konsistent zu bleiben. Die Grundidee besteht darin, den idealen An-

teil der betreffenden Größe mit der totalen Ionenkonzentration zu berechnen und den durch die ionischen Wechselwirkungen bedingten Korrelationsanteil durch die Konzentration der freien Ionen. Zur Umsetzung dieses Konzepts in SAFE ist folgendes festgelegt:

1) Der Datenbereich des unbenannten COMMON-Blockes enthält 4 Spalten (LAENGE(D)=4):

- |                                      |  |
|--------------------------------------|--|
| 1. Spalte: $c_1^* = \mathcal{L} c_1$ | freie Kationen-Konzentration ( $\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}$ ) |
| 2. Spalte: $c_2^* = \mathcal{L} c_2$ | freie Anionen-Konzentration ( $\text{mol} \cdot \text{dm}^{-3}$ )  |
| 3. Spalte: $f^{\text{exp}}$          | experimenteller Wert   |
| 4. Spalte: $\mathcal{L}$             | Dissoziationsgrad  |

2) Zu jedem anzupassenden Parameter  $X_i$  gehört ein Hintergrundparameter  $X_i^*$ . Das wird mit  $N(XA)=2$  (falls erforderlich),  $N(XAA)=2$  (falls erforderlich) und  $N(XAB)=2$  realisiert. Der Parameter  $X_i^*$  wird zum Test der erreichten Genauigkeit benötigt. Die Anzahl der anzupassenden Parameter (NPARAM) verdoppelt sich also bei dieser Methode.

Der Modul wird mittels zweier aktiver Steuerkarten aufgerufen. Er benötigt keine Datenkarten. Der Modul stellt den Schalter 5. Mit Hilfe der MCC CHEMICAL MODEL 1 werden die notwendigen Vorarbeiten geleistet:

1) Berechne  $\mathcal{L}$  und  $c_{1/2}^* = \mathcal{L} c_{1/2}$ . Die dazu notwendige Massenwirkungskonstante  $K$  und der mittlere Aktivitätskoeffizient  $f_{\pm}$  werden gemäß der Nutzervorgaben in ll und mm von THEORIE(msng) (s. 7.) bestimmt. Dann ist  $\mathcal{L}$  die kleinste Wurzel (größer Null) des Massenwirkungsgesetzes

$$1 - \mathcal{L} = \mathcal{L}^2 \cdot n \cdot K \cdot f_{\pm}^2 (\mathcal{L} n)$$

2) Setze  $X_i^* = X_i (n=2) = 10^{10}$  und  $DX_i^* = DX_i (n=2) = \emptyset$ , d.h. diese Parameter werden nicht in die Anpassung einbezogen.  $\Delta_{\pm} (n=2) := \Delta_{\pm} (n=1)$   $\Delta_{\pm} (n=1) := \emptyset$ .

3) SWITCH 5=OFF, d.h. IST(28)= $\emptyset$ .

4) Organisation, daß der durch ELSTCT (6.4) eingelesene Wert von IFREE(1) als Maximalzahl der internen Iterationen in ELFIT verwendet wird. War kein Wert für IFREE(1) eingelesen worden, so wird standardmäßig mit 5 internen Iterationen gearbeitet. Diese internen Iterationen sind notwendig, da der Dissoziationsgrad direkt von den ermittelten Parametern abhängig ist. Während der mit



IFREE(1) angegebenen Zahl von Iterationen der freien Parameter wird  $\epsilon$  nicht verändert und erst nach Beendigung der internen Iterationen mit den bis dahin ermittelten Parametern neu bestimmt.

Die MCC CHEMICAL MODEL 2 erledigt im Anpaßzyklus folgende Aufgaben:

1) Berechne  $\epsilon$  und  $c_{1/2}^*$  (wie unter CHEMICAL MODEL 1)

2) Genauigkeitstest für alle  $i$  mit  $DX_i(n=1) \neq 0$ :

$$|X_i(n=1) - X_i(n=2)| \leq \sqrt{2} \Delta X_i(n=2) \cdot (|X_i(n=1)| + |X_i(n=2)|)$$

3) falls Genauigkeit erreicht oder Gesamtzahl von Iterationen MAXIT überschritten: SWITCH 5=OFF,  $\Delta X_i(n=1) := \Delta X_i(n=2)$   
sonst  $X_i(n=2) := X_i(n=1)$ ; SWITCH 5=ON.

#### 6.12 Der Modul ELSWIT

Eine STK-Prozedur (s. Abschnitt 2.4.2) wird prinzipiell einmal abgearbeitet. Eine mehrfache Abarbeitung kann auf zwei Wegen erreicht werden:

(1) In der Prozedur sind Datenkarten-lesende Moduln enthalten. Die Prozedur wird solange wiederholt, bis durch die lesenden Moduln eine neue aktive STK oder die Schlußkarte \*STOP eingelesen wird.

(2) In der Modulnfolge der Prozedur ist der Schaltertestmodul ELSWIT enthalten. Ist der getestete Schalter ein (ON), so wird die Modulfolge ab erstem Modul der Prozedur erneut aufgerufen. Damit wird eine Schleife erzeugt, die nur dadurch verlassen werden kann, daß innerhalb der Schleife der Schalter ausgeschaltet wird. Es gibt 5 Schalter (IST befindet sich im COMMON-Block STATUS):

Schalter	=ON (ein)	=OFF (aus)=Standardzustand
SWITCH 1	IST(24)=1	=0
SWITCH 2	IST(25)=1	=0
SWITCH 3	IST(26)=1	=0
SWITCH 4	IST(27)=1	=0
SWITCH 5	IST(28)=1	=0

Diese Schalter kann der Nutzer in eigenen Unterprogrammen (z.B. ELUSER) setzen.

Der Test auf Wiederholung der Modulfolge wird in ELSWIT gesteuert durch die folgenden 5 aktiven Steuerkarten (MCC) vorgenommen:

IF SWITCH 1 ON REPEAT (i=1,2,3,4,5)  
 Die Schalter können explizit durch die MCC  
 SWITCH 1 ON (i=1,2,3,4,5)  
 eingeschaltet und durch die MCC  
 SWITCH 1 OFF (i=1,2,3,4,5)  
 ausgeschaltet werden.

### 6.13 Der Modul ELUSER

Der Nutzer kann einen eigenen Modul in das System einfügen, indem er als LK-FORTRAN-Deck das folgende Unterprogramm hinzufügt:

```
SUBROUTINE ELUSER(NMODUL,*)  
  INTEGER*4 NMODUL
```

```
  :
```

```
  RETURN
```

```
  END
```

Der Modul wird aufgerufen mit den aktiven STK

```
  USER 1      NMODUL=1
```

```
  USER 2      NMODUL=2
```

```
  USER 3      NMODUL=3
```

Durch Test von NMODUL im Modul kann der Nutzer also 3 verschiedene Zweige in Abhängigkeit von der STK durchlaufen.

Der Modul darf kein STOP enthalten. Sollte STOP notwendig sein, so ist der Modul mittels RETURN 1 über den \*-Ausgang zu verlassen.

### 6.14 Ende-Anweisungen

Es sind die in 2.5 näher erläuterten SCC \*RETURN und \*STOP definiert.

6.15 Anwendungsbeispiel 1

```

*BEGIN PROCEDURE
STRUCTURE
LOAD
PREPARE
COEFFICIENT
FIT
RESULT 1
RESULT 2 ...
*END PROCEDURE
STANDARD
*END SEGMENT
    467
*END SEGMENT
STANDARD
*END SEGMENT

```

Anwendungsbeispiel 2

```

*BEGIN PROCEDURE
STRUCTURE
LOAD
PREPARE
COEFFICIENT
FIT
RESULT 1
RESULT 2 ...
*END PROCEDURE
-NORMALIZED FIT
STANDARD
*END SEGMENT
    467
    2149
*END SEGMENT
STANDARD
*END SEGMENT

```

- 1) Alle Moduln arbeiten im Standardzustand, d.h. der Datenblock 467 (KCl, 25°C, H<sub>2</sub>O, Leitfähigkeit) wird zum Fit der Stufenpotentialleitfähigkeitstheorie verwendet. Die Ausgabedaten auf den Listings bestehen im wesentlichen aus den Resultaten des Parameterfits und einem Listing, aus dem ein Vergleich von experimenteller und theoretischer Konzentrationsabhängigkeit zu entnehmen ist. Angepaßt werden die Parameter  $\Lambda_K^\circ$ ,  $\Lambda_{Cl}^\circ$ ,  $\epsilon_{KK}$ ,  $\epsilon_{ClCl}$ ,  $\epsilon_{KCl}$ .
- 2) Im Beispiel 2 werden, ebenfalls im Standardzustand, die Datenblöcke 467 und 2149 (KCl, 25°C, H<sub>2</sub>O, osmotischer Koeffizient) zum Fit herangezogen. Die Parameter sind die gleichen wie bei 1). Wesentlich ist die PCC -NORMALIZED FIT, da sich die numerischen Werte von  $\Lambda$  und  $g$  um 2 Größenordnungen unterscheiden.

Anwendungsbeispiel 3

Prinzipieller Prozeduraufbau für Anpassungen im Rahmen des Chemischen Modells nach Ebeling:

```

*BEGIN PROCEDURE
STRUCTURE
LOAD
PREPARE
CHEMICAL MODEL 1
*END PROCEDURE
  } PCC
STANDARD
LAENGE(D)=4
N(XA)=2
N(XAA)=2
N(XAB)=2
IFREE(1)= Anzahl der internen Iterationen
MAXIT= Gesamtzahl der Iterationen
  .   weitere STRUCTURE-Datenkarten
  .
*END SEGMENT
  .   LOAD-Datenkarten
  .
*END SEGMENT
STANDARD
  .   weitere PREPARE-Datenkarten
  .
*END SEGMENT
*BEGIN PROCEDURE
COEF.UNCOND.           falls erforderlich
FIT                    mit IFREE(1) Iterationen
CHEMICAL MODEL 2
IFSWITCH 5 ON REPEAT  d.h. Wiederholung ab Modul ELCOEF
RESULT 1
RESULT 2 ...
  .   weitere Moduln
  .
*END PROCEDURE

```



## 7. Theorievarianten

In diesem Kapitel geben wir eine Zusammenfassung der bisher für das ELFIT-Programmsystem eingearbeiteten Theorien. Das System kann um beliebige andere Theorien erweitert werden.

Die Auswahl einer Theorie für eine bestimmte MeBart erfolgt nach der im ELSTC (6.4) einzulesenden Datenkarte.

THEORIE (MSNG) = ii.jj.kk.ll.mm

Hier bezeichnet MSNG die Nummer der MeBart (vgl. Tabelle S. ).

Die Kennnummern haben folgende Bedeutung:

### a) ii $\hat{=}$ Potentialmodell

- 00 - Nutzervariante
- 01 - Restricted Primitive Model
- 02 - Primitive Model
- 03 - Stufen- bzw. Treppenpotential
- 04 - Kastenpotential
- 05 - Polynom (bzw. Padé-Approximation)

### b) jj $\hat{=}$ Theorien für verschiedene MeBarten

- 00 - Nutzervariante
- 02 - y-Theorie ohne c-Entwicklung /1/
- 03 - u-Theorie ohne c-Entwicklung /2,3/
- 04 - z- $\psi$  bis  $O(c^{3/2})$  mit freiem  $c^{3/2}$ -Term /3/
- 05 - z- $\psi$  ohne c-Entwicklung /3/
- 09 - EKE bis  $O(c^{3/2})$  + freier  $c^{3/2}$ -Koeffizient /4,5/
- 10 - Fuoss-Onsager-Skinner /6/
- 11 - MSAT /7/
- 12 - MSAT /8/
- 13 - Pitts /9/
- 14 - Fuoss-Hsia-Fernandez-Prini /10/
- 15 - Quint-Viallard /11/
- 16 - Lee-Wheaton /12/
- 17 - Carman /13/
- 18 - Fuoss 78 /14/
- 19 - Murphy-Cohen /15/
- 20 - Chen /16/
- 21 - Fuoss-Justice /17/
- 22 - Pitts-Fernandez-Prini-Prue /9,18/
- 50 - DHX, osmotischer Koeffizient /19/
- 51 - MSA-a-Parameter, osmotischer Koeffizient /20/
- 52 - MSA-ionenspezifische Radien, osmotischer Koeffizient /20/

### c) kk $\hat{=}$ Auswahl der Theorievarianten

- 00 - Nutzervariante
- 01 - Lineare Transporttheorie
- 02 - Feedback Transporttheorie
- 03 - Lineare Transporttheorie im chemischen Modell
- 04 - Feedback Transporttheorie im chemischen Modell
- 05 - Physikalisches Modell für Onsagerkoeffizienten
- 06 - Theorien mit Dichteentwicklung bis max  $c^{3/2}$  im chemischen Modell für Onsagerkoeffizienten

- Ø7 - Gleichgewichtstheorie  
 Ø8 - Gleichgewichtstheorie im chemischen Modell

d) 11  $\hat{=}$  Bestimmung der Massenwirkungskonstante

- ØØ - Nutzervariante  
 Ø1 - Massenwirkungskonstante nach Bjerrum  
 Ø2 - Massenwirkungskonstante nach Ebeling  
 Ø3 - Massenwirkungskonstante für ionenspezifische Radien

e) mm  $\hat{=}$  Bestimmung des Aktivitätskoeffizienten im MvG

- ØØ - Nutzervariante  
 Ø1 - idealer Aktivitätskoeffizient  
 Ø2 - Grenzesetz  
 Ø3 - Debye-Hückel  
 Ø4 - MSA-a-Parameter  
 Ø5 - MSA ionenspezifische Radien  
 Eine Einschätzung der verschiedenen möglichen Kombinationen von  $K_A$  und  $f_{\pm}$  im MvG findet man in /8,5/.

Beispiel:

THEORIE(1)=Ø1.14.Ø6.Ø1.Ø3  
 bedeutet, daß die eingelesenen Leitfähigkeitsmeßdaten (MSNG=1) mit der PHFP-Theorie (jj=14) im chemischen Modell (kk=Ø6) mit einem nichtkonsistenten Massenwirkungsgesetz ausgewertet werden  
 $(f_{\pm} = f_{\pm}^{DH}; K_A = K_A^B)$

THEORIE(1)=Ø1.11.Ø1  
 bedeutet, daß die eingelesenen Leitfähigkeitsmeßdaten mit der MSAT-Theorie (jj=11) ohne Berücksichtigung von Assoziaten ausgewertet werden.

Tab. 7.1 Übersicht über bisher im ELFIT-Programm realisierte Theorievarianten und zulässige Kombinationen

1) Leitfähigkeitstheorien (MSNG=1)

Ø1.Ø4.kk.ØØ.ØØ	kk= Ø1,Ø2,Ø5
Ø1.Ø4.kk.11.mm	kk= Ø3,Ø4,Ø6
	11= Ø1,Ø2
	mm= Ø1,Ø2,Ø3,Ø4
Ø1.Ø9.kk.ØØ.ØØ	kk= Ø1,Ø2,Ø5
Ø1.11.kk.ØØ.ØØ	kk= Ø1,Ø2,Ø5
Ø1.11.kk.Ø2.Ø4	kk= Ø3,Ø4,Ø6
Ø1.12.kk.ØØ.ØØ	kk= Ø1,Ø2,Ø5
Ø1.12.kk.Ø2.Ø4	kk= Ø3,Ø4,Ø6
Ø1.14.kk.ØØ.ØØ	kk= Ø1,Ø2,Ø5
Ø1.14.kk.11.mm	kk= Ø3,Ø4,Ø6
	11= Ø1,Ø2
	mm= Ø1,Ø2,Ø3,Ø4
Ø1.16.kk.ØØ.ØØ	kk= Ø1,Ø2,Ø5

Ø1.16.kk.11.mm	kk= Ø3,Ø4,Ø6
	ll= Ø1,Ø2
	mm= Ø1,Ø2,Ø3,Ø4
Ø1.2Ø.kk.ØØ.ØØ	kk= Ø1,Ø2,Ø5
Ø1.2Ø.kk.11.mm	kk= Ø3,Ø4,Ø6
	ll= Ø1,Ø2
	mm= Ø1,Ø2,Ø3,Ø4
Ø3.Ø2.kk.ØØ.ØØ	kk= Ø1,Ø2,Ø5
Ø3.Ø5.kk.ØØ.ØØ	kk= Ø1,Ø2,Ø5

## 2) Gleichgewichtstheorien (MSNG=6)

- Ø2.51.Ø7
- Ø2.51.Ø8.Ø2.Ø4
- Ø2.52.Ø7
- Ø3.5Ø.Ø7

## Literatur zu den Theorien

- /1/ Feistel, R., Dissertation A WPU Rostock 1976
- /2/ Kremp, D., Lau, U. und Kraeft, W.D., Rostocker Phys. Manusk. 4,67 (1979)
- /3/ Künstner, H., Dissertation A WPU Rostock 1983
- /4/ Kremp, D., Kraeft, W.D., und Ebeling, W., Ann.Phys. 18, 246 (1966)
- /5/ Grigo, M., Einfeldt, J. und Ebeling, W., Wiss.Z.WPU Rostock 31 (Heft 2), 15 (1982)
- /6/ Fuoss, R.M., Onsager, L. und Skinner, J.F., J.Phys.Chem. 69, 2581 (1965)
- /7/ Ebeling, W. und Rose, J., J.Solution Chem. 10, 599 (1981)
- /8/ Grigo, M., Dissertation A WPU Rostock 1982
- /9/ Pitts, E., Proc.R.Soc. (London) 217A, 43 (1953)
- /10/ Fuoss, R.M. und Hsia, K., Proc.Natl.Acad.Sci 57, 1550 (1967)
- Fernandez-Prini, R., Trans.Faraday Soc. 65, 3311 (1969)
- /11/ Quint, J. und Viillard, A., J.Solution Chem. 7, 137, 525, 533 (1978)
- /12/ Lee, W.H. und Wheaton, R.J., Trans.Faraday Soc. II 74, 1456 (1978)

- /13/ Carman, P.C. und Laurie, D.P., J.Solution Chem. 5, 457 (1976)
- /14/ Fuoss, R.M., Proc.Natl.Acad.Sci 75, 16 (1978); J.Phys.Chem. 82, 2477 (1978)
- /15/ Murphy, T.J. und Cohen, E.G.D., J.Chem.Phys. 63, 2177 (1970)
- /16/ Chen, M.S., J.Solution Chem. 8, 165, 509 (1979)
- /17/ Barthel, J., Justice, J.-C. und Wachter, R., Z.Phys.Chem. N.F. 84, 100 (1973)
- /18/ Fernandez-Prini, R. und Prue, J.E., Z.Phys.Chem. (Leipzig) 228, 373 (1965)
- /19/ Bich, E., Ebeling, W. und Krienke, H., Z.phys.Chem. (Leipzig) 257, 549 (1976)
- /20/ Blum, L., in: Theoretical Chemistry. Advances and Perspectives, Vol. 5, ed.: Eyring, H. und Henderson, D., Academic Press New York 1980





ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM T(°C) IN WATER	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
M	CL	436 ±20.0	7.12000	26.15999	16	/ 82/
M	BR	443 ±20.0	7.69200	14.23000	6	/ 82/
M	J	454 ±20.0	6.00000	8.94000	5	/ 82/
M	CL	437 ±10.0	4.93400	25.99998	18	/ 82/
M	BR	444 ±10.0	4.24400	14.16000	11	/ 82/
M	J	453 ±10.0	4.76000	8.90000	7	/ 82/
M	CL	438 0.0	1.12480	25.81999	24	/ 82/
M	BR	447 0.0	1.33420	14.09000	16	/ 82/
M	J	456 0.0	0.85900	8.85800	15	/ 82/
LI	CL	181 0.0	0.00623	0.46240	12	/ 150/
LI	J	182 0.0	0.00295	0.50100	13	/ 150/
LI	CL04	203 0.0	0.00050	0.06847	9	/ 223/
LI	PI	208 0.0	0.00176	0.05519	5	/ 223/
LI	CL	197 0.0	0.00070	0.09775	8	/ 223/
NA	CL	318 0.0	0.00063	0.02001	6	/ 105/
		330 0.0	0.19196	0.92639	4	/ 18/
K	CL	155 0.0	0.00398	0.20700	6	/ 149/
		183 0.0	0.00076	0.22340	10	/ 150/
		188 0.0	0.00086	0.05214	8	/ 223/
		234 0.0	0.02000	2.00000	3	/ 141/
		316 0.0	0.00047	0.01001	5	/ 105/
		336 0.0	0.00404	0.01921	4	/ 18/
		149 0.0	0.02000	1.99995	3	/ 107/
		81 0.0	0.00190	0.10040	36	/ 6/
K	BR	314 0.0	0.00050	7.50000	18	/ 104/
K	J	184 0.0	0.00095	0.50700	26	/ 150/
K	NO3	191 0.0	0.00059	0.05045	9	/ 223/
K	CL03	217 0.0	0.00190	0.00502	3	/ 223/
K	CL04	104 0.0	0.00076	0.12953	15	/ 223/
K	BR03	220 0.0	0.00191	0.05938	5	/ 223/
K	JO3	223 0.0	0.00099	0.02680	6	/ 223/
K	PI	211 0.0	0.00053	0.02782	9	/ 223/
CS	CL	183 0.0	0.00143	0.20840	19	/ 150/
CS	J	186 0.0	0.00121	0.23820	16	/ 150/
CS	NO3	202 0.0	0.00100	0.05109	8	/ 223/
NH4	CL	154 0.0	0.00120	0.20100	7	/ 149/
ME4N	CL	230 0.0	0.00205	0.04364	5	/ 149/
		63 0.0	0.00280	0.04770	5	/ 149/
ME4N	J	231 0.0	0.00140	0.08056	6	/ 149/
		64 0.0	0.00178	0.08056	7	/ 149/
ET4N	CL	242 0.0	0.00540	0.19730	6	/ 149/
		65 0.0	0.00298	0.23700	6	/ 149/
ET4N	J	233 0.0	0.00678	0.20480	7	/ 149/
ET4N	PI	214 0.0	0.00104	0.03763	9	/ 223/
PR4N	CL	146 0.0	0.00129	0.04240	6	/ 149/
PR4N	J	147 0.0	0.00247	0.03940	5	/ 149/
		67 0.0	0.00262	0.04754	7	/ 149/
SU4N	CL	148 0.0	0.00651	0.16064	6	/ 149/
SU4N	J	152 0.0	0.00174	0.03470	5	/ 149/
AM4N	CL	153 0.0	0.00101	0.00713	4	/ 149/
ME3AMN	J	145 0.0	0.00477	0.28600	7	/ 149/
MG	SO4	538 0.0	0.02340	0.11334	4	/ 18/
CA	CL	508 0.0	0.00146	0.18750	8	/ 102/
CA	J	510 0.0	0.00146	0.18750	8	/ 102/
BA	CL	509 0.0	0.00146	0.18750	8	/ 102/
BA	J	511 0.0	0.00146	0.18750	8	/ 102/
UO2	SO4	516 0.0	0.00080	12.13000	11	/ 24/

ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM IN	T(°C) WATER	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
H	CL	124	5.0	0.00155	0.16684	12	1139/
		131		0.13892	24.00200	19	1139/
NA	CL	328	9.0	0.19196	0.02608	4	1181
K	CL	335	5.0	0.00404	0.01921	4	1181
		107		0.00174	0.05479	15	1180/
		141		0.02000	0.19999	2	1171
K	BR	110	5.0	0.00230	0.01519	5	1180/
K	J	113	5.0	0.00196	0.03683	8	1180/
MG	SO4	534	5.0	0.02340	0.11355	4	1181
CA	SO4	535	5.0	0.00919	0.04459	4	1181
H	CL	439	10.0	1.12620	25.78000	24	1181
H	BR	449	10.0	1.30420	14.02600	17	1181
H	J	457	10.0	0.85740	8.81600	15	1181
H	CL04	416	10.0	0.00224	23.49958	38	1181
NA	CL	327	10.0	0.19190	0.02550	4	1181
K	CL	334	10.0	0.00404	0.01920	4	1181
		142		0.02000	0.19999	2	1171
		80		0.00190	0.10039	20	1161
ME4N	CL	372	10.0	0.00345	0.02400	8	1164/
ME4N	BR	383	10.0	0.00228	0.02203	8	1164/
ME4N	J	377	10.0	0.00128	0.01688	8	1164/
ET4N	BR	384	10.0	0.00119	0.01463	16	1164/
PR4N	CL	375	10.0	0.00152	0.01411	8	1164/
PR4N	BR	373	10.0	0.00111	0.01495	8	1164/
PR4N	J	374	10.0	0.00393	0.01397	16	1164/
BU4N	CL	382	10.0	0.00197	0.01608	8	1164/
BU4N	BR	376	10.0	0.00090	0.01533	8	1164/
BU4N	J	378	10.0	0.00112	0.01533	16	1164/
MG	SO4	533	10.0	0.02339	0.11352	4	1181
CA	SO4	537	10.0	0.00919	0.04458	4	1181
H	CL	125	15.0	0.00211	0.16375	11	1139/
		132		0.13879	23.87596	19	1139/
NA	CL	254	15.0	0.00075	0.02000	7	1151
		326		0.19177	0.02467	4	1181
		84		0.00100	0.02000	5	1181
		345		0.00207	0.00948	6	1181
K	CL	250	15.0	0.00102	0.01943	7	1151
		329		0.00446	0.19842	12	1163/
		333		0.00404	0.01919	4	1181
		143		0.02000	0.19999	2	1171
		66		0.00100	0.02000	5	1181
K	BR	258	15.0	0.00102	0.02015	7	1131
		90		0.00100	0.02000	5	1181
K	J	114	15.0	0.00181	0.03388	8	1180/
MG	SO4	532	15.0	0.02338	0.11343	4	1181
CA	SO4	536	15.0	0.00918	0.04455	4	1181
CU	SO4	943	15.0	0.00080	0.00080	6	1203/
ZN	SO4	946	15.0	0.00080	0.00080	6	1203/
MN	SO4	940	15.0	0.00080	0.00080	6	1203/
H	CL	4	18.0	0.00200	26.36400	20	1151/
H	J	3	18.0	0.20080	8.00000	7	1151/
H	NO3	5	18.0	0.00050	0.00200	4	1151/
		6		0.00200	19.99998	18	1151/
		7		2.03400	27.28000	10	1151/
LI	CL	8	18.0	0.00080	19.99998	17	1151/
LI	BR	55	18.0	0.10000	8.00000	7	1151/
LI	J	9	18.0	0.77400	4.53200	5	1151/
LI	NO3	12	18.0	0.00080	2.00000	13	1151/

ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM T(°C) IN WATER	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
		13	0.10000	8.00000	8	1511
LI	CL04	204 18.0	0.00030	0.06833	13	1223
LI	J02	10 18.0	0.00100	2.00000	13	1511
LI	J03	11 18.0	0.00020	2.00000	13	1511
LI	PI	207 18.0	0.00176	0.10989	11	1223
NA	OH	14 18.0	0.00400	2.00000	8	1741
		15	0.50400	38.12000	20	1511
NA	F	18 18.0	0.00020	2.00000	13	1431
NA	CL	196 18.0	0.00070	0.09781	12	1223
		17	0.00020	10.00000	16	1421
		18	1.75800	10.84200	7	1411
NA	BR	21 18.0	0.10000	8.00000	7	1511
NA	J	22 18.0	0.10000	8.00000	7	1511
NA	NO3	199 18.0	0.00156	0.03363	5	1223
		24	0.00020	6.00000	15	1421
NA	CL03	19 18.0	0.20000	8.00000	7	1511
NA	CL04	20 18.0	1.00000	8.00000	5	1511
NA	J03	23 18.0	0.00020	0.40000	11	1401
NA	SO4	513 18.0	0.00060	0.03002	6	171
K	F	26 18.0	1.78800	18.93599	5	1401
		27	0.00020	2.00000	12	1431
		28	0.20000	11.00000	7	1511
K	CL	156 18.0	0.00018	0.00966	22	1551
		187	0.00033	0.05207	11	1223
		235	0.02000	2.00000	3	1111
		150	0.02000	1.99963	3	1031
		30	0.00008	0.00269	6	1561
		31	0.00002	0.00200	19	1223
		32	1.38200	6.42600	5	1401
		79	0.00100	0.10028	36	161
K	BR	35 18.0	0.00020	1.00000	12	1431
		36	0.10000	8.00000	7	1511
K	J	37 18.0	0.00020	2.00000	12	1431
		38	0.10000	8.00000	7	1511
		39	0.62400	10.80200	7	1401
K	NO3	190 18.0	0.00059	0.10482	17	1223
		40	0.00020	4.00000	14	1421
		41	1.01800	4.00200	5	1401
K	CL03	216 18.0	0.00120	0.06319	7	1223
		33	0.00020	1.00000	12	1431
K	CL04	103 18.0	0.00076	0.12928	16	1223
		34	0.00100	0.10000	7	1223
K	BR03	219 18.0	0.00191	0.05931	5	1223
K	J03	222 18.0	0.00099	0.05819	7	1223
K	PI	210 18.0	0.00053	0.03457	14	1223
RB	F	25 18.0	0.40000	8.00000	6	1511
RB	CL	53 18.0	0.00020	8.00000	17	1511
RB	BR	54 18.0	0.20000	8.00000	7	1511
RB	J	52 18.0	0.20000	8.00000	7	1511
CS	CL	61 18.0	0.00020	0.20000	8	1421
		62	0.20000	8.00000	6	1511
CS	NO3	201 18.0	0.00073	0.05101	9	1223
NH4	F	56 18.0	0.20000	8.00000	7	1511
NH4	CL	58 18.0	0.00020	10.00000	19	1511
NH4	BR	57 18.0	0.10000	8.00000	7	1511
NH4	J	59 18.0	0.10000	9.94600	9	1511
ET4H	PI	213 18.0	0.00104	0.03759	11	1223
MQ	SO4	350 18.0	0.00010	5.00000	16	1511



ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM IN	T (°C) WATER	C (MIN)	C (MAX)	N	REF.
CA	CR04	551	18.0	0.00010	1.00000	13	/151/
CU	SO4	553	18.0	0.00010	3.00000	14	/151/
ZN	SO4	554	18.0	0.00010	5.00000	16	/151/
CD	SO4	555	18.0	0.00010	1.00000	13	/151/
		501		0.00001	0.00055	7	/56/
NI	SO4	552	18.0	0.00010	1.00000	14	/151/
H	CL	440	20.0	1.12420	25.48000	24	/88/
H	BR	449	20.0	1.30720	13.99800	17	/88/
H	J	458	20.0	0.85580	8.77400	15	/88/
NA	CL	324	20.0	0.19159	0.92362	4	/18/
K	CL	236	20.0	0.02300	2.00000	3	/111/
		332		0.03404	0.01917	4	/12/
		337		0.00152	0.10962	14	/163/
		144		0.02000	0.10999	2	/17/
MG	SO4	531	20.0	0.02336	0.11334	4	/18/
CA	SO4	540	20.0	0.00017	0.04451	4	/89/
K	CL	338	22.0	0.00152	0.00742	11	/163/
H	F	849	25.0	0.00036	0.02337	11	/61/
H	CL	247	25.0	0.00046	0.06219	14	/199/
		303		0.00006	0.00599	11	/206/
		441		1.12280	25.42000	24	/88/
		100		1.97800	14.67400	7	/95/
		123		0.00072	1.98690	30	/245/
		126		0.00414	0.17273	12	/179/
		133		0.13851	23.74399	19	/179/
		42		0.00010	0.00600	11	/122/
		43		0.00020	0.20000	9	/208/
H	BR	450	25.0	1.30020	13.92000	17	/88/
		101		2.01800	17.51799	8	/95/
H	J	459	25.0	0.85440	8.75400	14	/88/
		102		2.01000	14.23600	7	/95/
LI	OH	242	25.0	0.00278	0.05394	8	/192/
		138		0.00200	10.01840	22	/54/
LI	F	840	25.0	0.00094	0.00848	10	/187/
		846		0.00200	0.04000	5	/122/
LI	CL	238	25.0	0.00111	0.20000	30	/144/
		297		0.00100	0.01000	5	/104/
		344		0.00100	0.20000	7	/41/
		6223		1.00000	25.99998	10	/7/
		44		0.00011	0.12705	8	/144/
		45		0.20000	8.00000	10	/179/
LI	BR	841	25.0	0.00243	0.04607	5	/187/
		97		0.00235	0.02080	7	/19/
		98		0.00061	0.01047	7	/19/
LI	J	842	25.0	0.00091	0.03350	10	/187/
LI	NO3	368	25.0	0.00100	2.00000	10	/30/
		369		0.01994	18.25999	15	/30/
		6218		1.00000	12.00000	7	/7/
		46		0.01994	27.09999	22	/27/
LI	CL03	347	25.0	0.04376	38.65997	27	/32/
LI	CL04	167	25.0	0.00136	0.21088	14	/112/
NA	OH	240	25.0	0.00051	0.02103	18	/211/
		243		0.00182	0.00434	10	/192/
		139		0.15016	38.25598	27	/54/
NA	F	847	25.0	0.00200	0.40000	8	/128/
		848		0.00059	0.04455	10	/61/
NA	CL	226	25.0	0.00393	0.01948	5	/143/
		248		0.00017	0.04480	16	/199/

ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM IN	T(°C) WATER	C(MIN)	C(MAX)	N	REF:
		255		0.00109	0.01965	7	/ 851
		317		0.00063	0.02001	6	/ 1051
		324		0.19136	0.92237	4	/ 141
		463		0.15448	2.08320	24	/ 331
		465		0.00608	0.21409	33	/ 391
		6203		0.00209	0.01564	7	/ 2111
		6224		1.00100	8.00000	6	/ 71
		106		0.22100	9.62280	18	/ 311
		1		0.00100	10.00000	20	/ 1511
		44		0.00120	0.20000	10	/ 2041
		87		0.00100	0.02000	5	/ 81
		50		0.20100	10.70000	24	/ 371
NA	BR	342	25.0	0.00195	0.01000	6	/ 2051
		2		0.00100	8.00000	12	/ 1511
		99		0.00171	0.01637	7	/ 191
NA	J	843	25.0	0.00177	0.05002	10	/ 1431
		312		0.00047	0.34100	17	/ 1521
NA	NO3	186	25.0	0.01783	9.69940	15	/ 2291
		800		0.00601	0.26155	9	/ 1261
		801		0.00195	0.16374	9	/ 1261
		6219		1.00000	8.00000	6	/ 71
NA	ClO3	823	25.0	0.01066	0.09414	8	/ 1251
		824		0.00604	0.18292	14	/ 1251
		831		0.01442	0.16942	8	/ 1251
NA	ClO4	168	25.0	0.00143	0.19960	13	/ 1181
		51		0.00100	0.20000	9	/ 1181
NA	BrO3	172	25.0	0.00102	0.96386	15	/ 1171
		808		0.00507	0.06030	7	/ 1261
NA	JO3	815	25.0	0.00690	0.08248	9	/ 1261
		816		0.00699	0.06291	7	/ 1261
NA	N3	343	25.0	0.00200	2.00000	11	/ 2051
NA	ClAC	249	25.0	0.00132	0.01415	10	/ 1991
NA	SO4	514	25.0	0.00031	0.00357	10	/ 1031
K	OH	241	25.0	0.00031	0.02235	17	/ 2111
		244		0.00118	0.10096	11	/ 1921
		140		0.19162	21.22198	21	/ 541
K	F	6200	25.0	0.00210	0.01844	7	/ 2171
K	Cl	151	25.0	0.01094	1.98892	3	/ 1071
		19A		0.00040	0.01255	17	/ 551
		160		0.00029	0.09306	9	/ 721
		163		0.00387	0.01964	5	/ 1551
		237		0.01998	1.99541	3	/ 1911
		251		0.00101	0.02012	7	/ 851
		262		0.00063	0.18154	13	/ 2121
		263		0.00100	0.02000	5	/ 81
		264		0.00093	0.00202	9	/ 531
		265		0.00080	0.02779	11	/ 1631
		266		0.00025	4.00000	20	/ 2051
		267		0.00100	7.91800	14	/ 331
		302		0.00007	0.00657	18	/ 2061
		319		0.00047	0.03993	9	/ 1051
		331		0.00403	0.01915	4	/ 181
		464		0.20338	1.98652	16	/ 391
		466		0.01008	0.20665	49	/ 391
		467		0.00055	0.01285	19	/ 601
		468		0.00120	0.57617	13	/ 601
		498		0.00768	0.07449	13	/ 1221
		499		0.00811	0.08677	10	/ 1221

ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM IN	T(°C) WATER	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
		6202		0.00166	0.01222	6	1217/
		6225		1.00000	8.00000	6	1 7/
		105		0.24008	7.40980	17	1 37/
		108		0.00110	0.03546	7	1280/
		78		0.00190	0.10012	36	1 6/
		83		0.00077	0.28706	25	1 60/
		60		0.00257	0.01558	6	1 19/
K	RR	256	25.0	0.00100	0.01957	7	1 86/
		313		0.00050	7.50000	17	1 106/
		6204		0.00149	0.01489	7	1217/
		111		0.00279	0.01434	5	1180/
		94		0.00213	0.01477	6	1 19/
		91		0.00100	0.02000	5	1 8/
K	J	299	25.0	0.00100	0.01000	4	1109/
		6201		0.00144	0.01435	7	1217/
		115		0.00277	0.03169	11	1180/
		119		0.02008	11.38320	28	1 36/
K	NO3	802	25.0	0.01421	0.15467	8	1126/
		803		0.00880	0.17379	10	1126/
		304		0.00014	0.00734	9	1206/
		6220		1.00000	4.00000	4	1 7/
K	ClO3	825	25.0	0.00714	0.11807	10	1125/
		826		0.00548	0.14083	10	1125/
K	ClO4	169	25.0	0.00103	0.21162	20	1118/
		832		0.00746	0.07812	9	1125/
K	BR03	171	25.0	0.00109	0.29548	17	1117/
		809		0.00746	0.10007	8	1126/
		810		0.00478	0.08657	9	1126/
K	JO3	170	25.0	0.00037	0.00782	8	1122/
		239		0.00021	0.20252	16	1145/
		817		0.00791	0.08478	7	1126/
		818		0.00677	0.11120	8	1126/
		346		0.00017	0.00338	11	1 26/
K	JO4	323	25.0	0.00099	0.04084	13	1113/
K	SO4	515	25.0	0.00034	0.00334	16	1103/
K	BENZOAT	6206	25.0	0.00190	0.01328	7	1217/
K	TOSYLAT	6208	25.0	0.00107	0.01125	7	1217/
RB	OH	245	25.0	0.00424	0.02319	7	1192/
RB	F	844	25.0	0.01140	0.04787	10	1127/
RB	CL	227	25.0	0.00355	0.01701	5	1148/
		6226		1.00000	6.00000	5	1 7/
		480		0.00192	0.02294	10	1 69/
RB	BR	229	25.0	0.00404	0.02055	5	1157/
RB	J	481	25.0	0.00299	0.01550	10	1 69/
RB	NO3	804	25.0	0.00447	0.17557	10	1126/
		805		0.00688	0.00753	7	1126/
		6221		1.00000	3.00000	3	1 7/
RB	ClO3	827	25.0	0.00602	0.11258	8	1125/
		828		0.00682	0.14447	7	1125/
RB	ClO4	833	25.0	0.00709	0.05850	7	1125/
		834		0.00477	0.07316	8	1125/
RB	BR03	811	25.0	0.00516	0.06212	8	1126/
		812		0.00475	0.13567	10	1126/
RB	JO3	819	25.0	0.00495	0.05290	8	1126/
		820		0.00881	0.09390	7	1126/
CB	OH	246	25.0	0.00139	0.13084	9	1192/
CB	F	845	25.0	0.00179	0.01694	10	1127/
CB	CL	228	25.0	0.00287	0.01872	5	1123/

ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM IN WATER	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
		6205		0.00477	0.01488	6	1217/
		6227		1.00000	6.00000	5	1 71
		104		0.00477	0.02361	5	1221/
		594		0.00603	0.09503	8	1431/
		95		0.00177	0.00973	7	1 49/
CS	BR	107	25.0	0.00263	0.01986	15	1431/
CS	J	164	25.0	0.00499	0.01888	5	1454/
CS	NO3	806	25.0	0.00588	0.00835	9	1426/
		807		0.01134	0.20062	11	1426/
		6222		1.00080	2.00000	2	1 71
CS	ClO3	829	25.0	0.00566	0.00047	8	1425/
		830		0.01301	0.14051	9	1425/
CS	ClO4	835	25.0	0.00537	0.05973	8	1425/
		836		0.00594	0.06704	10	1425/
CS	BR03	813	25.0	0.00754	0.07998	10	1426/
		814		0.00409	0.06009	9	1426/
CS	JO3	821	25.0	0.01131	0.13044	7	1426/
		822		0.00423	0.06714	8	1426/
NH4	CL	301	25.0	0.20380	10.50400	8	1227/
NH4	NO3	300	25.0	0.20400	15.90000	12	1227/
		351		0.20000	22.46400	12	1 29/
		365		0.00200	1.00000	10	1 30/
NH4	SO4	522	25.0	0.30180	15.00000	8	1227/
ME4N	CL	352	25.0	0.00225	0.02228	8	1 64/
		69		0.00505	0.04902	6	1 64/
ME4N	BR	71	25.0	0.00058	0.01370	8	1 64/
		96		0.00099	0.01506	7	1 19/
ME4N	J	75	25.0	0.00117	0.01683	7	1 64/
		157		0.00104	0.00992	6	1 19/
ET4N	CL	580	25.0	0.00276	0.02720	9	1 19/
ET4N	BR	175	25.0	0.00022	0.03001	10	1 73/
		72		0.00122	0.02005	7	1 64/
		581		0.00174	0.01718	9	1219/
ET4N	J	582	25.0	0.00587	0.01940	6	1219/
ET4N	ClO4	583	25.0	0.00318	0.01857	8	1219/
ET4N	PI	178	25.0	0.00008	0.01976	9	1 73/
		400		0.00068	0.01481	11	1225/
PR4N	BR	353	25.0	0.00065	0.01343	8	1 64/
		388		0.00476	0.01662	5	1227/
		73		0.00060	0.02103	11	1 64/
PR4N	J	353	25.0	0.00092	0.01703	8	1 64/
		389		0.00424	0.02212	5	1227/
BU4N	CL	70	25.0	0.00198	0.01382	8	1 64/
BU4N	BR	354	25.0	0.00076	0.01531	8	1 64/
		6207		0.00114	0.00846	8	1277/
		74		0.00086	0.01627	8	1 64/
		6138		0.00062	0.00558	5	1203/
		29		0.00199	0.01199	6	1 19/
BU4N	J	356	25.0	0.00123	0.01657	8	1 64/
		77		0.00076	0.01970	10	1 64/
MG	CL	526	25.0	0.00045	0.31199	32	1207/
MG	SO4	530	25.0	0.02333	0.11321	4	1 18/
		554		0.00020	2.00000	15	1451/
		585		0.00049	0.00202	4	1481/
		586		0.00143	0.00771	5	1481/
		587		0.00784	0.07379	5	1481/
		588		0.04653	0.23254	6	1481/
		591		0.00027	0.00177	6	1481/



ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM IN	T(°C) WATER	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
		592		0.00151	0.01004	7	1188/
		593		0.01045	0.06974	5	1188/
		594		0.04576	0.23814	5	1188/
		595		0.01930	0.04710	3	1188/
		597		0.00097	0.23814	26	1188/
		598		0.00049	0.23294	20	1188/
		470		0.00043	0.75873	23	160/
		471		0.00017	0.00177	7	1171/
CA	CL	527	25.0	0.00037	0.32563	55	1207/
CA	SO4	539	25.0	0.00916	0.04446	4	189/
SR	CL	528	25.0	0.00022	0.35716	36	1207/
BA	CL	525	25.0	0.00991	3.01581	20	1103/
		529		0.00060	0.21050	32	1207/
BA	J	512	25.0	0.00146	0.11750	8	1102/
CU	SO4	562	25.0	0.00020	2.00000	15	1151/
		944		0.00020	0.00080	6	1209/
		469		0.00028	1.06683	18	160/
AG	NO3	305	25.0	0.00006	0.00581	10	1206/
		350		0.20000	19.41800	11	129/
		370		0.00100	19.41800	17	130/
ZN	ClO4	524	25.0	0.00017	0.00874	25	158/
ZN	SO4	563	25.0	0.00020	2.00000	14	1151/
		947		0.00020	0.00080	6	1209/
CD	SO4	566	25.0	0.00020	2.00000	14	1151/
HG	ClO3	349	25.0	0.00308	0.15464	18	1120/
MN	SO4	523	25.0	0.00055	0.00447	5	1183/
		557		0.00020	2.00000	14	1151/
		941		0.00020	0.00080	6	1209/
FE	SO4	558	25.0	0.00020	2.00000	14	1151/
CO	SO4	559	25.0	0.00010	0.40000	12	1151/
		560		0.00020	2.00000	15	1151/
NI	SO4	561	25.0	0.00020	2.00000	15	1151/
UO2	SO4	517	25.0	0.00020	9.42000	10	121/
TL	OH	165	25.0	0.00184	3.75320	30	1161/
TL	ClO4	173	25.0	0.00035	0.01960	9	1195/
TL	AC	174	25.0	0.00086	0.02947	11	1195/
IAM3BUN	BR	47	25.0	0.00733	0.01483	5	1136/
IAM3BUN	J	48	25.0	0.00236	0.00935	6	1136/
PH4P	BR	82	25.0	0.00122	0.01060	5	1203/
H	CL	442	30.0	1.12120	25.35999	24	188/
H	BR	451	30.0	1.29640	13.81400	17	188/
H	J	460	30.0	0.85180	8.73400	12	188/
H	ClO4	423	30.0	0.00223	23.14000	37	187/
H	CL	127	35.0	0.00190	0.12424	14	1179/
		134		0.15908	23.60999	19	1179/
LI	NO3	225	35.0	0.22012	23.59316	9	131/
NA	CL	256	35.0	0.00099	0.01976	7	185/
		500		0.03670	0.02113	5	179/
		88		0.00100	0.02000	5	181/
NA	NO3	584	35.0	0.00101	0.01012	9	131/
K	CL	161	35.0	0.00028	0.01006	5	172/
		252		0.00098	0.02066	7	185/
		84		0.00100	0.02000	5	181/
K	BR	260	35.0	0.00093	0.02006	7	186/
		92		0.00100	0.02000	5	181/
K	J	116	35.0	0.00253	0.03564	8	180/
NH4	CL	275	35.0	0.00087	0.16918	13	125/
NH4	NO3	274	35.0	0.00091	0.15520	15	125/

ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM T (°C) IN WATER	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
		366	0.10760	3.82080	4	/ 301
		272	0.10760	21.49799	11	/ 281
BT4N	BR	176 35.0	0.00064	0.02962	9	/ 731
BT4N	PI	179 35.0	0.00072	0.01970	8	/ 731
AG	NO3	273 35.0	0.19720	15.32660	10	/ 221
		363	1.07200	8.46120	6	/ 301
H	CL	443 40.0	1.11720	25.20000	23	/ 881
H	BR	453 40.0	1.29200	13.77600	16	/ 881
H	J	461 40.0	0.86880	8.60600	13	/ 881
K	CL	340 40.0	0.00184	0.15594	8	/ 1631
CU	SO4	945 40.0	0.00020	0.00080	6	/ 2091
ZN	SO4	948 40.0	0.00020	0.00080	6	/ 2091
MN	SO4	942 40.0	0.00020	0.00080	6	/ 2091
H	CL	128 45.0	0.00414	0.18051	11	/ 1791
		133	0.13755	23.47400	19	/ 1791
NA	CL	247 45.0	0.00104	0.02017	7	/ 851
		89	0.00100	0.02000	5	/ 81
K	CL	162 45.0	0.00134	0.01002	4	/ 721
		253	0.00103	0.01971	7	/ 851
		85	0.00100	0.02000	5	/ 81
K	BR	261 45.0	0.00005	0.02019	7	/ 861
		93	0.00100	0.02000	5	/ 81
K	J	117 45.0	0.00327	0.03465	7	/ 1801
ME4N	BR	371 45.0	0.00180	0.01568	8	/ 1351
ME4N	J	362 45.0	0.00119	0.01233	8	/ 1351
ET4N	BR	177 45.0	0.00044	0.02981	9	/ 731
		180	0.00008	0.01962	9	/ 731
ET4N	BR	357 45.0	0.00134	0.01576	8	/ 1351
PR4N	BR	359 45.0	0.00141	0.00729	5	/ 1351
PR4N	J	358 45.0	0.00101	0.01059	8	/ 1351
BU4N	BR	360 45.0	0.00200	0.00951	7	/ 1351
BU4N	J	361 45.0	0.00084	0.01149	8	/ 1351
H	CL	444 50.0	1.11260	25.06000	24	/ 881
		122	0.00087	0.04958	21	/ 421
H	BR	452 50.0	1.28700	13.70400	17	/ 881
H	J	462 50.0	0.86600	8.65800	13	/ 881
NA	CL	121 50.0	0.01325	0.15520	26	/ 361
K	CL	120 50.0	0.02434	8.78960	22	/ 361
MG	SO4	589 50.0	0.00026	0.00109	5	/ 1881
		590	0.00062	0.00860	7	/ 1881
		599	0.00026	0.00860	12	/ 1881
UO2	SO4	518 50.0	0.00020	14.56000	12	/ 211
H	CL	129 55.0	0.00466	0.14023	11	/ 1791
		136	0.13692	19.29079	18	/ 1791
K	CL	109 55.0	0.00455	0.05159	14	/ 1801
K	BR	112 55.0	0.00258	0.02645	7	/ 1801
K	J	118 55.0	0.00271	0.03231	8	/ 1801
LI	CL04	485 60.0	0.16880	5.51400	17	/ 811
H	CL	130 65.0	0.00197	0.14304	12	/ 1791
		137	0.24292	19.19279	15	/ 1791
UO2	SO4	519 90.0	0.00019	9.32000	11	/ 211
NH4	NO3	367 95.0	0.17560	8.44200	7	/ 301
AG	NO3	364 95.0	0.10680	23.75200	10	/ 301
LI	CL04	206 100.0	0.00036	0.06562	12	/ 2231
LI	PI	209 100.0	0.00211	0.03226	6	/ 2231
NA	CL	198 100.0	0.00080	0.04660	8	/ 2231
NA	NO3	200 100.0	0.00149	0.03228	5	/ 2231
K	CL	188 100.0	0.00022	0.08001	9	/ 2231

ION	ION	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
ELECTRICAL	CONDUCTANCE	IN	WATER				
K	NO3	102	100.0	0.00064	0.04837	11	/223/
K	ClO3	218	100.0	0.00115	0.00479	4	/223/
K	ClO4	194	100.0	0.00073	0.04178	13	/223/
K	BR03	221	100.0	0.00183	0.00808	4	/223/
K	JO3	224	100.0	0.00095	0.02569	5	/223/
K	PI	212	100.0	0.00172	0.03318	11	/223/
CS	NO3	203	100.0	0.00066	0.04895	7	/223/
ET4N	PI	214	100.0	0.00224	0.03608	7	/223/
LI	NO3	249	110.0	0.19440	28.71999	14	/27/
UD2	SO4	520	125.0	0.00080	9.32000	11	/21/
LI	ClO3	348	131.8	0.22520	46.21997	18	/32/
UD2	SO4	521	200.0	0.00000	-5.04000	8	/24/
ELECTRICAL	CONDUCTANCE	IN	HEAVY WATER				
NA	CL	6212	25.0	0.00209	0.01998	8	/217/
K	F	6209	25.0	0.00221	0.01822	7	/217/
K	CL	6211	25.0	0.00185	0.01798	8	/217/
K	BR	6213	25.0	0.00163	0.01562	7	/217/
K	J	6210	25.0	0.00158	0.01392	7	/217/
K	BENZOAT	6215	25.0	0.00161	0.01372	7	/217/
K	TGSYLAT	6217	25.0	0.00102	0.01135	7	/217/
CS	CL	6214	25.0	0.00167	0.01494	7	/217/
BU4N	BR	6216	25.0	0.00109	0.00781	7	/217/
ELECTRICAL	CONDUCTANCE	IN WATER *		METHANOL			
ET4N	CL	6539	25.0	0.00191	0.01719	10	/219/
		6541		0.00185	0.01674	10	/219/
		6543		0.00230	0.01475	9	/219/
		6545		0.00261	0.01704	9	/219/
		6527		0.00538	0.01573	7	/219/
		6531		0.00252	0.01620	9	/219/
		6535		0.00198	0.01529	9	/219/
ET4N	BR	6536	25.0	0.00181	0.01631	10	/219/
		6540		0.00218	0.01986	10	/219/
		6544		0.00280	0.01807	9	/219/
		6528		0.00368	0.02168	8	/219/
		6532		0.00189	0.01725	10	/219/
ET4N	J	6537	25.0	0.00257	0.01647	9	/219/
		6529		0.00347	0.01740	7	/219/
ET4N	ClO4	6533		0.00249	0.01372	8	/219/
		6538	25.0	0.00254	0.01624	9	/219/
		6542		0.00196	0.01781	10	/219/
		6546		0.00268	0.01721	9	/219/
		6534		0.00186	0.01620	10	/219/
		6736		0.00235	0.02315	9	/219/
ELECTRICAL	CONDUCTANCE	IN WATER *		ETHANOL			
K	CL	6081	25.0	0.00278	0.02678	8	/93/
		6082		0.00229	0.02470	8	/93/
		6083		0.00252	0.02101	8	/93/
		6084		0.00313	0.01837	8	/93/
		6085		0.00262	0.01491	8	/93/
CS	CL	6086	25.0	0.00176	0.01387	8	/93/
		6087		0.00164	0.01381	8	/93/
		6088		0.00170	0.01399	8	/93/
		6089		0.00181	0.01269	8	/93/
		6090		0.00139	0.01128	8	/93/
		6091		0.00142	0.01165	8	/93/
		6096		0.00063	0.01275	7	/185/
		6099		0.00055	0.01277	6	/185/
		6102		0.00064	0.01618	6	/185/

ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM IN	T (°C) WATER	C (MIN) ETHANOL	C (MAX)	N	REF
		6105		0.00769	0.00984	6	1851
NA	NO3	6559	35.0	0.00100	0.01005	10	1321
		6561		0.00101	0.01009	8	1321
		6562		0.00101	0.00809	8	1321
		6563		0.00101	0.01009	8	1321
		6564		0.00101	0.01011	10	1321
		6560		0.00051	0.00612	8	1321
CB	CL	6007	35.0	0.00063	0.01263	7	1851
		6100		0.00054	0.01265	6	1851
		6103		0.00063	0.01605	6	1851
		6106		0.00069	0.00979	6	1851
		6008		0.00062	0.01250	7	1851
		6101		0.00054	0.01250	6	1851
		6104		0.00063	0.01591	6	1851
		6107		0.00068	0.00973	6	1851
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN WATER + NITRANE							
LI	CL	6035	25.0	0.00761	0.02079	4	1681
		6048		0.00174	0.00719	4	1681
		6049		0.00136	0.00410	5	1681
		6050		0.00116	0.00503	5	1681
		6051		0.00079	0.00379	5	1681
		6052		0.00068	0.00332	5	1681
NA	CL	6041	25.0	0.00104	0.00357	8	1471
		6042		0.00092	0.00412	5	1471
		6043		0.00118	0.00484	4	1471
		6044		0.00096	0.00491	5	1471
		6045		0.00172	0.00732	5	1471
		6046		0.00168	0.00869	5	1471
		6047		0.00213	0.01114	4	1471
NA	BRO3	6059	25.0	0.00117	0.01867	5	1461
		6060		0.00118	0.00944	5	1461
		6061		0.00119	0.01868	6	1461
K	CL	6000	25.0	0.00299	0.01432	4	1551
		6001		0.00233	0.01109	5	1551
		6002		0.00170	0.00735	5	1551
		6003		0.00135	0.00656	5	1551
		6004		0.00097	0.00470	5	1551
		6005		0.00104	0.00369	4	1551
		6006		0.00059	0.00291	5	1551
RB	CL	6016	25.0	0.00048	0.00214	5	1471
		6037		0.00173	0.00337	5	1481
		6038		0.00091	0.00419	5	1481
		6039		0.00111	0.00512	5	1481
		6040		0.00289	0.01393	5	1481
RB	BR	6014	25.0	0.00192	0.01004	5	1571
		6015		0.00157	0.00761	5	1571
		6016		0.00123	0.00617	5	1571
		6017		0.00104	0.00521	5	1571
		6018		0.00062	0.00317	6	1571
		6034		0.00001	0.01501	5	1571
RB	J	6053	25.0	0.00223	0.01119	5	1631
		6054		0.00127	0.00639	4	1631
		6055		0.00094	0.00489	5	1631
		6056		0.00066	0.00307	5	1631
		6057		0.00058	0.00228	5	1631
CB	CL	6007	25.0	0.00166	0.00901	4	1231
		6008		0.00144	0.00678	5	1231
		6009		0.00095	0.00484	5	1231



ION	ION	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.					
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN WATER *				DIOXANE								
CB	J	6010	25.0	0.00076	0.00386	5	1423/					
		6011		0.00063	0.00315	5	1423/					
		6510		0.00072	0.00661	6	1443/					
		6511		0.00031	0.00471	8	1443/					
		6027		0.00109	0.01475	5	1456/					
		6028		0.00198	0.00993	5	1456/					
		6029		0.00186	0.00830	5	1456/					
		6030		0.00132	0.00619	5	1456/					
		6031		0.00110	0.00493	5	1456/					
		6032		0.00088	0.00402	5	1456/					
		6033		0.00065	0.00319	5	1456/					
		TAN4N		NO3	6070	25.0	0.00006	0.14000	21	77/		
6071	0.00006		0.10000		20		77/					
6072	0.00010		0.10000		19		77/					
6073	0.00020		0.10000		17		77/					
6074	0.00020		0.10000		17		77/					
6075	0.00002		0.00200		13		77/					
6076	0.00002		0.14000		24		77/					
6077	0.00002		0.00140		12		77/					
6078	0.00004		0.00300		12		77/					
6079	0.00002		0.00200		13		77/					
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN WATER *					DIMETHYLOXYETHANE							
CB	CL		6512		25.0		0.00632	0.10425	8	1493/		
		6513	0.00601	0.07415		8	1493/					
		6514	0.00765	0.09964		7	1493/					
		6515	0.00472	0.07067		8	1493/					
		6516	0.00201	0.01686		7	1493/					
		6517	0.00081	0.00946		8	1493/					
		6518	0.00048	0.00602		8	1493/					
		6519	0.00046	0.00637		8	1493/					
		6520	0.00036	0.00559		5	1493/					
		6521	0.00027	0.00356		7	1493/					
		6522	0.00023	0.00332		6	1493/					
		6530	0.00588	0.11203		7	1493/					
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN WATER *				TETRAHYDROFURANE								
CB	CL	6523	25.0	0.00435	0.03535	5	1493/					
		6524		0.00083	0.01103	7	1493/					
		6525		0.00073	0.00317	6	1493/					
		6526		0.00045	0.00220	5	1493/					
		CB	NO3	6506	25.0	0.00508	0.07512	7	22/			
				6507		0.00741	0.04308	7	22/			
				6504		0.00575	0.06182	8	22/			
				6505		0.00435	0.04503	7	22/			
				6508		0.00425	0.03611	8	22/			
				6509		0.00579	0.02829	6	22/			
				ELECTRICAL CONDUCTANCE IN METHANOL								
				LI		CL	6451	25.0	0.00020	0.01000	7	1404/
6452	0.00055	0.00339	5		75/							
LI	NO3	6453	25.0	0.00042	0.00230	5	75/					
		6401		1.00000	4.00000	3	77/					
LI	CLO4	6462	25.0	0.00035	0.00256	6	75/					
		6463		0.00032	0.00386	6	75/					
LI	PH4B	6488	25.0	0.00026	0.00157	5	43/					
		6489		0.00023	0.00196	5	43/					
NA	CL	6480	25.0	0.00069	0.00376	5	146/					
		6402		0.00009	0.00799	13	67/					
NA	CL	6403	25.0	0.00012	0.00918	10	67/					
		6497		0.00030	0.00374	6	75/					

ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	TEMP (°C) IN METHANOL	C (MIN)	C (MAX)	N	REF
		645R	0.00022	0.00377	6	75/
		647R	0.00040	0.02000	8	23/
NA	BR	644R 25.0	0.00020	0.01000	7	107/
NA	J	670R 25.0	0.00033	0.00813	7	14/
NA	NO3	646R 25.0	0.00037	0.00348	6	75/
		646S	0.00047	0.00328	5	75/
NA	ClO4	6490 25.0	0.00029	0.00126	5	43/
		6491	0.00023	0.00183	5	43/
NA	PI	642S 25.0	0.00085	0.00420	5	44/
		642A	0.00041	0.00453	5	44/
		6427	0.00089	0.00437	4	44/
		642R	0.00081	0.00402	5	44/
NA	PH4B	6481 25.0	0.00070	0.00244	4	146/
		6482	0.00102	0.00393	5	146/
		6483	0.00048	0.00354	4	146/
K	CL	6404 25.0	0.00015	0.00815	12	61/
		6405	0.00013	0.01030	13	61/
		6434	0.00032	0.00408	7	75/
		6455	0.00022	0.00288	6	75/
		6456	0.00022	0.00319	6	75/
		647R	0.00040	0.02000	8	23/
		649R	0.00074	0.00252	6	5/
		6497	0.00005	0.00051	6	5/
K	BR	6440 25.0	0.00020	0.01000	7	104/
		6474	0.00029	0.00362	6	75/
		6475	0.00076	0.00324	6	75/
		6476	0.00016	0.00302	6	75/
K	J	6430 25.0	0.00020	0.01000	7	104/
		6477	0.00025	0.00277	6	75/
		6706	0.00022	0.00802	5	14/
K	NO3	6466 25.0	0.00019	0.00193	5	75/
		6467	0.00029	0.00225	6	75/
K	ClO4	6427 25.0	0.00070	0.00232	8	40/
K	PI	6406 25.0	0.00018	0.00559	8	67/
		6429	0.00089	0.00443	5	44/
		6430	0.00103	0.00511	5	44/
		6431	0.00082	0.00413	5	44/
		6432	0.00094	0.00461	5	44/
		6433	0.00170	0.00863	9	44/
K	PH4B	6484 25.0	0.00058	0.00224	4	146/
		6485	0.00071	0.00248	5	146/
		6486	0.00065	0.00320	5	146/
		6487	0.00047	0.00298	5	146/
K	NO3O4	6424 25.0	0.00026	0.00123	6	67/
		6425	0.00022	0.00160	6	67/
RB	CL	6459 25.0	0.00042	0.00340	7	75/
RB	J	6707 25.0	0.00034	0.00826	7	14/
RB	NO3	646R 25.0	0.00022	0.00270	7	75/
		6469	0.00026	0.00238	6	75/
CB	CL	6400 25.0	0.00143	0.00971	8	138/
		6460	0.00027	0.00301	6	75/
		6461	0.00032	0.00329	6	75/
CS	J	670R 25.0	0.00031	0.00782	8	14/
CS	NO3	6470 25.0	0.00012	0.00119	6	75/
		6471	0.00010	0.00124	6	75/
CS	ClO4	692R 25.0	0.00084	0.00480	10	40/
MB4N	CL	6709 25.0	0.00206	0.01723	8	133/
MB4N	BR	6710 25.0	0.00098	0.01523	8	133/

ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN METHANOL							
ME4N	J	6711	25.0	0.00120	0.01440	8	1391
ME4N	PI	6417	25.0	0.00013	0.00475	8	671
		6418		0.00026	0.00435	6	671
		6718		0.00065	0.00935	8	1391
		6589		0.00085	0.00981	8	1391
ET4N	BR	6715	25.0	0.00060	0.01129	8	1391
		6413		0.00019	0.01191	13	671
		6414		0.00022	0.00354	7	671
PR4N	BR	6716	25.0	0.00057	0.00991	8	1391
PR4N	J	6717	25.0	0.00054	0.00977	8	1391
		6590		0.00078	0.00947	8	1391
PR4N	PI	6415	25.0	0.00015	0.00295	8	671
		6416		0.00020	0.00336	7	671
BU4N	CL	6712	25.0	0.00185	0.01304	7	1391
BU4N	BR	6714	25.0	0.00079	0.00840	8	1391
		6615		0.00066	0.00934	9	1391
BU4N	J	6721	25.0	0.00077	0.00945	8	1391
BU4N	PI	6409	25.0	0.00016	0.00238	6	671
		6410		0.00017	0.00191	6	671
		6411		0.00027	0.00854	9	671
		6412		0.00021	0.00633	7	671
		6434		0.00083	0.00415	5	441
		6435		0.00091	0.00414	5	441
		6436		0.00073	0.00365	5	441
		6713		0.00057	0.01009	8	1391
BU4N	PH48	6439	25.0	0.00034	0.00140	4	441
		6440		0.00038	0.00309	5	441
AM4N	BR	6719	25.0	0.00070	0.01012	8	1391
AM4N	J	6720	25.0	0.00092	0.02148	13	1391
AM4N	PI	6684	25.0	0.00021	0.00854	16	671
IAM4N	J	6724	25.0	0.00205	0.00944	7	1361
IAM4N	CLO4	6725	25.0	0.00137	0.00908	6	1361
IAM4N	PI	6407	25.0	0.00013	0.00175	7	671
		6408		0.00015	0.00159	6	671
AG	NU3	6472	25.0	0.00035	0.00323	6	751
		6473		0.00032	0.00321	6	751
AG	CLO4	6492	25.0	0.00031	0.00283	6	431
		6493		0.00027	0.00278	6	431
		6494		0.00026	0.00141	5	431
		6495		0.00028	0.00277	5	431
IAM3BUN	BR	6722	25.0	0.00108	0.01084	7	1361
IAM3BUN	J	6445	25.0	0.00087	0.00430	5	451
		6723		0.00118	0.00933	8	1361
IAM3BUN	PI	6437	25.0	0.00072	0.00352	5	441
IAM3BUN	PH48	6441	25.0	0.00042	0.00210	5	441
		6442		0.00043	0.00215	5	441
DBME34	PI	6414	25.0	0.00023	0.00202	6	671
		6420		0.00028	0.00241	6	671
DBME34	DBS34	6421	25.0	0.00013	0.00261	9	671
		6422		0.00029	0.00254	6	671
AM3BUN	PI	6438	25.0	0.00105	0.00508	5	441
BU3PN	PI	6692	25.0	0.00016	0.00238	12	671
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN ETHANOL							
AG	CLO4	6629	0.0	0.00034	0.00424	6	461
NA	J	6500	15.0	0.00052	0.00898	8	111
K	J	6501	15.0	0.00033	0.00838	8	111
RB	J	6502	15.0	0.00056	0.01052	8	111
CS	J	6503	15.0	0.00057	0.00944	8	111

ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM T(°C) IN ETHANOL	C(MIN)	C(MAX)	N REF.
LI	CL	6613 25.0	0.00020	0.00400	6 / 241
		6616	0.00020	0.00283	6 / 461
		6617	0.00021	0.00273	6 / 461
		6618	0.00021	0.00343	6 / 461
		6619	0.00026	0.00325	6 / 461
		6620	0.00029	0.00341	6 / 461
LI	J	6647 25.0	0.00020	0.00261	6 / 51
		6648	0.00025	0.00292	6 / 51
LI	NO3	6605 25.0	0.00132	0.00962	5 / 121
		6621	0.00044	0.00421	6 / 461
		6622	0.00044	0.00427	6 / 461
		6623	0.00044	0.00474	6 / 461
LI	ClO4	6624 25.0	0.00040	0.00374	6 / 461
		6625	0.00040	0.00376	6 / 461
LI	PI	6606 25.0	0.00024	0.00319	6 / 51
		6605	0.00014	0.00219	6 / 51
LI	SCN	6651 25.0	0.00027	0.00335	6 / 51
		6652	0.00019	0.00329	6 / 51
NA	CL	6612 25.0	0.00040	0.00043	5 / 241
		6614	0.00020	0.00400	6 / 241
		6640	0.00022	0.00132	5 / 51
		6641	0.00016	0.00116	5 / 51
		6642	0.00017	0.00141	4 / 51
NA	BR	6633 25.0	0.00012	0.00157	6 / 461
		6634	0.00028	0.00223	6 / 461
		6643	0.00024	0.00259	6 / 51
		6644	0.00018	0.00255	6 / 51
NA	J	6649 25.0	0.00022	0.00249	6 / 51
		6650	0.00021	0.00247	6 / 51
		6663	0.00044	0.00971	14 / 141
NA	ClO4	6626 25.0	0.00033	0.00342	6 / 461
		6627	0.00036	0.00350	5 / 461
NA	PI	6669 25.0	0.00020	0.00248	6 / 51
		6670	0.00004	0.00248	16 / 51
		6667	0.00014	0.00185	6 / 51
NA	SCN	6653 25.0	0.00029	0.00222	6 / 51
		6654	0.00020	0.00267	6 / 51
K	CL	6664 25.0	0.00020	0.00400	6 / 241
K	BR	6645 25.0	0.00022	0.00166	6 / 51
		6646	0.00024	0.00136	5 / 51
		6648	0.00006	0.00433	8 / 131
K	J	6635 25.0	0.00034	0.00272	5 / 461
		6636	0.00042	0.00221	5 / 461
		6637	0.00015	0.00272	6 / 461
		6664	0.00034	0.00803	16 / 141
K	SCN	6655 25.0	0.00020	0.00339	6 / 51
RB	J	6638 25.0	0.00013	0.00027	5 / 461
		6639	0.00017	0.00102	5 / 461
		6665	0.00021	0.00933	17 / 141
RB	SCN	6656 25.0	0.00017	0.00257	6 / 51
		6657	0.00018	0.00270	6 / 51
CB	CL	6601 25.0	0.00033	0.01094	9 / 1251
		6607	0.00028	0.00034	7 / 591
		6608	0.00035	0.00044	6 / 591
		6606	0.00019	0.00027	7 / 591
CS	J	6606 25.0	0.00020	0.00729	16 / 141
CB	SCN	6659 25.0	0.00015	0.00186	6 / 51
		6660	0.00023	0.00181	6 / 51



ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM IN ETHANOL	T (°C)	C (MIN)	C (MAX)	N	REF.
NH4	NO3	6664	25.0	0.00019	0.00201	6	1 / 51
		6663		0.00018	0.00310	6	1 / 51
NH4	CLO4	6671	25.0	0.00022	0.00232	6	1 / 51
		6672		0.00020	0.00297	6	1 / 51
		6668		0.00025	0.00320	6	1 / 51
NH4	SCN	6661	25.0	0.00021	0.00279	6	1 / 51
		6662		0.00023	0.00281	6	1 / 51
ME4N	CL	6852	25.0	0.00066	0.01126	9	1 / 62
ME4N	BR	6854	25.0	0.00106	0.00719	6	1 / 62
ET4N	CL	6673	25.0	0.00018	0.00298	6	1 / 51
		6674		0.00018	0.00298	11	1 / 51
ET4N	BR	6675	25.0	0.00019	0.00222	6	1 / 51
		6676		0.00016	0.00254	6	1 / 51
		6850		0.00133	0.01000	7	1 / 134
		6853		0.00078	0.00728	8	1 / 62
ET4N	J	6858	25.0	0.00077	0.00799	8	1 / 62
ET4N	NO3	6962	25.0	0.00019	0.00338	12	1 / 51
ET4N	CLO4	6963	25.0	0.00016	0.00125	10	1 / 51
ET4N	PI	6961	25.0	0.00013	0.00189	12	1 / 51
PR4N	BR	6851	25.0	0.00050	0.00739	7	1 / 134
		6856		0.00086	0.00803	8	1 / 62
PR4N	J	6859	25.0	0.00097	0.00962	8	1 / 62
BU4N	CL	6853	25.0	0.00061	0.00848	9	1 / 62
BU4N	BR	6857	25.0	0.00095	0.00920	8	1 / 62
		6849		0.00135	0.01087	13	1 / 134
BU4N	J	6860	25.0	0.00092	0.00874	8	1 / 62
HP4N	J	6862	25.0	0.00067	0.00622	8	1 / 62
MG	CL	6609	25.0	0.00003	0.00009	8	1 / 59
		6443		0.00009	0.00016	7	1 / 59
		6444		0.00016	0.00023	7	1 / 59
AG	NO3	6604	25.0	0.00196	0.02336	7	1 / 171
		6631		0.00041	0.00276	5	1 / 46
		6632		0.00063	0.00341	5	1 / 46
AG	CLO4	6628	25.0	0.00036	0.00376	6	1 / 46
		6630		0.00038	0.00281	5	1 / 46
IAM3BUN	J	6861	25.0	0.00080	0.00758	8	1 / 62
CS	CL	6602	35.0	0.00033	0.01079	9	1 / 185
CS	CL	6603	45.0	0.00032	0.01068	9	1 / 185
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN N-PROPANOL							
LI	CL	6565	25.0	0.00012	1.00680	14	1 / 210
NA	BR	6921	25.0	0.00033	0.00346	8	1 / 99
NA	J	6920	25.0	0.00045	0.00519	11	1 / 99
		6903		0.00028	0.00707	14	1 / 224
K	BR	6922	25.0	0.00026	0.00144	4	1 / 99
K	J	6919	25.0	0.00021	0.00360	14	1 / 99
		6908		0.00033	0.00784	12	1 / 224
RB	J	6917	25.0	0.00019	0.00362	14	1 / 224
CS	J	6918	25.0	0.00015	0.00222	12	1 / 224
ME4N	CL	6825	25.0	0.00116	0.00868	7	1 / 62
ME4N	BR	6827	25.0	0.00040	0.00548	8	1 / 62
ET4N	BR	6828	25.0	0.00086	0.00799	8	1 / 62
ET4N	J	6831	25.0	0.00066	0.00763	8	1 / 62
PR4N	BR	6829	25.0	0.00117	0.01083	8	1 / 62
PR4N	J	6832	25.0	0.00105	0.01011	8	1 / 62
BU4N	CL	6826	25.0	0.00047	0.00898	8	1 / 62
BU4N	BR	6830	25.0	0.00085	0.00839	8	1 / 62
BU4N	J	6833	25.0	0.00091	0.00882	8	1 / 62
BU4N	CLO4	6883	25.0	0.00077	0.01007	8	1 / 62

ION	ION	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF
ELECTRICAL	CONDUCTANCE	IN	PROPANOL				
HP4N	J	6833	25.0	0.00056	0.00640	8	62/
IAM3BUN	J	6834	25.0	0.00058	0.00710	8	62/
ELECTRICAL	CONDUCTANCE	IN	ACETONITRILE				
LI	CL	6577	25.0	0.00096	0.00932	8	72/
		6578		0.00018	0.00796	8	72/
LI	RR	6579	25.0	0.00258	0.00832	6	72/
		6329		0.00197	0.00903	6	72/
LI	J	6581	25.0	0.00137	0.00421	7	72/
		6582		0.00106	0.00579	8	72/
LI	SGN	6330	25.0	0.00018	0.00693	9	72/
		6332		0.00020	0.00602	8	72/
LI	ASP6	6588	25.0	0.00183	0.00819	6	72/
		6331		0.00210	0.00865	6	72/
NA	CLO4	6904	25.0	0.00083	0.00773	13	72/
NA	PH4B	6334	25.0	0.00213	0.00729	8	72/
		6913		0.00106	0.01059	16	72/
		6333		0.00249	0.00523	8	72/
K	CLO4	6910	25.0	0.00144	0.01240	14	72/
		6069		0.00196	0.00648	10	72/
K	PH4B	6914	25.0	0.00102	0.00854	14	72/
RB	CLO4	6911	25.0	0.00116	0.00988	13	72/
RB	PH4B	6915	25.0	0.00063	0.00691	16	72/
CS	CLO4	6912	25.0	0.00110	0.00950	14	72/
		6094		0.00101	0.00429	10	72/
CS	PH4B	6916	25.0	0.00086	0.00766	16	72/
ME4N	BR	6899	25.0	0.00165	0.01132	7	66/
ME4N	J	6904	25.0	0.00121	0.01410	8	66/
ME4N	PI	6905	25.0	0.00074	0.00967	8	66/
PR4N	BR	6902	25.0	0.00074	0.01045	8	66/
		6583		0.00236	0.01307	7	66/
		6584		0.00089	0.01129	8	66/
PR4N	J	6906	25.0	0.00084	0.01066	8	66/
		6587		0.00100	0.01201	8	66/
BU4N	BR	6900	25.0	0.00228	0.01004	7	66/
		6585		0.00088	0.00952	8	66/
BU4N	J	6901	25.0	0.00084	0.00910	8	66/
		6586		0.00081	0.00972	8	66/
BU4N	PI	6907	25.0	0.00052	0.00836	7	66/
BA	CLO4	6941	25.0	0.00033	0.00849	7	222/
AG	NO3	6950	25.0	0.00017	0.00457	7	222/
AG	CLO4	6949	25.0	0.00018	0.00456	7	222/
AG	PI	6942	25.0	0.00011	0.00505	13	222/
IAM3BUN	J	6322	25.0	0.00069	0.00351	5	45/
AM3BUN	PI	6324	25.0	0.00126	0.00315	4	45/
IAM3BUN	PH4B	6323	25.0	0.00078	0.00397	5	45/
K	CLO3	6592	25.0	0.00181	0.01659	5	3/
K	CLO4	6591	25.0	0.00318	0.02492	5	3/
ME4N	BR	6593	25.0	0.00215	0.02321	5	3/
ME4N	J	6743	25.0	0.00000	0.00355	5	3/
BT4N	BR	6596	25.0	0.00205	0.02349	5	3/
ET4N	J	6594	25.0	0.00145	0.02297	5	3/
ET4N	CLO4	6597	25.0	0.00213	0.02165	5	3/
BU4N	CLO4	6731	25.0	0.00132	0.01212	5	3/
PH4P	CL	6126	25.0	0.00098	0.00991	5	203/
PH4P	BR	6593	25.0	0.00095	0.00927	5	203/
ELECTRICAL	CONDUCTANCE	IN	FORMAMIDE				
LI	NO3	6308	25.0	1.00000	4.00000	3	7/

ION	ION	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
ELECTRICAL	CONDUCTANCE	IN	FORMAMIDE				
NA	NO3	A309	25.0	1.00000	2.00000	2	/ 7/
ELECTRICAL	CONDUCTANCE	IN	DIOXANE	* FORMAMIDE			
MG	SO4	A300	25.0	0.00037	0.00299	7	/ 218/
		A301		0.00035	0.00462	7	/ 218/
		A302		0.00033	0.00331	9	/ 218/
		A303		0.00025	0.00246	7	/ 218/
		A304		0.00038	0.00351	9	/ 218/
		A305		0.00033	0.00211	7	/ 218/
		A306		0.00029	0.00298	7	/ 218/
		A307		0.00036	0.00174	5	/ 218/
K	ClO4	6063	25.0	0.00115	0.00575	5	/ 40/
		6064		0.00120	0.00606	5	/ 40/
		6065		0.00066	0.00555	5	/ 40/
		6066		0.00173	0.00626	5	/ 40/
		6067		0.00127	0.00543	5	/ 40/
		6068		0.00161	0.00620	5	/ 40/
CS	ClO4	6080	25.0	0.00106	0.00422	5	/ 40/
		6092		0.00092	0.00490	5	/ 40/
		6093		0.00114	0.00490	5	/ 40/
ELECTRICAL	CONDUCTANCE	IN	METHANOL	* ACETONITRILE			
IAM3BUN	J	A310	25.0	0.00064	0.00474	5	/ 45/
		A312		0.00101	0.00471	5	/ 45/
		A313		0.00109	0.00426	4	/ 45/
IAM3BUN	PI	A318	25.0	0.00099	0.00427	5	/ 45/
		A319		0.00088	0.00448	5	/ 45/
		A320		0.00100	0.00478	5	/ 45/
		A321		0.00088	0.00441	5	/ 45/
IAM3BUN	PH4B	A314	25.0	0.00068	0.00336	5	/ 45/
		A315		0.00085	0.00429	5	/ 45/
		A316		0.00113	0.00565	5	/ 45/
		A317		0.00096	0.00484	4	/ 45/
AM3BUN	J	A311	25.0	0.00102	0.00511	5	/ 45/
ELECTRICAL	CONDUCTANCE	IN	ACETONITRILE	* NITROMETHAN			
IAM3BUN	J	A325	25.0	0.00104	0.00524	5	/ 45/
		A326		0.00112	0.00556	5	/ 45/
		A327		0.00104	0.00518	5	/ 45/
		A328		0.00112	0.00537	5	/ 45/
ELECTRICAL	CONDUCTANCE	IN	1-PROPANOL				
NA	BR	6925	25.0	0.00066	0.00517	8	/ 99/
NA	J	6924	25.0	0.00040	0.00401	7	/ 99/
K	BR	6926	25.0	0.00046	0.00103	5	/ 99/
K	J	6923	25.0	0.00028	0.00239	8	/ 99/
ME4N	CL	6836	25.0	0.00046	0.00361	9	/ 167/
ME4N	BR	6842	25.0	0.00041	0.00425	8	/ 167/
ET4N	BR	6837	25.0	0.00035	0.00343	8	/ 167/
ET4N	J	6843	25.0	0.00072	0.00553	5	/ 167/
PR4N	BR	6838	25.0	0.00033	0.00430	8	/ 167/
PR4N	J	6844	25.0	0.00033	0.00430	8	/ 167/
BU4N	CL	6839	25.0	0.00019	0.00235	8	/ 167/
BU4N	BR	6845	25.0	0.00035	0.00545	8	/ 167/
BU4N	J	6846	25.0	0.00027	0.00341	8	/ 167/
HP4N	CL	6840	25.0	0.00032	0.00446	8	/ 167/
HP4N	J	6847	25.0	0.00017	0.00260	8	/ 167/
IAM3BUN	J	6841	25.0	0.00019	0.00281	8	/ 167/
ELECTRICAL	CONDUCTANCE	IN	BUTANOL				
LI	CL	6566	25.0	0.00012	1.00380	14	/ 240/
LI	J	6947	25.0	0.00180	0.03208	11	/ 20/
NA	J	6575	25.0	0.00064	0.00687	32	/ 10/

ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM T (°C) IN BUTANOL	C (MIN)	C (MAX)	N	REF
RR	J	6572 25.0	0.00040	0.00247	6	101
		6611	0.00038	0.00240	6	101
NH4	J	6948 25.0	0.00132	0.02654	11	201
MEAN	CL	6867 25.0	0.00060	0.00962	7	631
		6447	0.00041	0.00700	8	631
MEAN	BR	6868 25.0	0.00023	0.00357	8	631
ETAN	BR	6871 25.0	0.00086	0.00783	8	631
ETAN	J	6869 25.0	0.00072	0.00807	8	631
PRAN	BR	6875 25.0	0.00074	0.00804	8	631
PRAN	J	6872 25.0	0.00095	0.00920	8	631
BUAN	CL	6874 25.0	0.00048	0.00797	8	631
BUAN	BR	6446 25.0	0.00054	0.00701	8	631
BUAN	J	6870 25.0	0.00071	0.00743	8	631
BUAN	CLO4	6873 25.0	0.00064	0.00974	8	631
MPAN	J	6870 25.0	0.00053	0.00894	9	631
IAMBUN	J	6877 25.0	0.00066	0.00806	8	631
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN PENTANOL						
BUAN	BR	6878 25.0	0.00067	0.00824	8	631
BUAN	J	6879 25.0	0.00065	0.00797	8	631
MPAN	J	6880 25.0	0.00047	0.00601	8	631
IAMBUN	J	6881 25.0	0.00049	0.00694	8	631
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN 1-PENTANOL						
LI	CL	6567 25.0	0.00003	0.92188	16	12101
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN HEXANOL						
LI	CL	6568 25.0	0.00003	0.97960	16	12101
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN HEPTANOL						
LI	CL	6569 25.0	0.00002	0.34132	15	12101
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN OCTANOL						
LI	CL	6570 25.0	0.00002	0.40868	15	12101
LI	BR	6573 25.0	0.00008	0.00837	46	1121
NA	J	6670 25.0	0.00011	0.00054	5	101
		6658	0.00013	0.00057	13	101
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN DECANOL						
LI	CL	6571 25.0	0.00008	0.07066	8	101
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN ACETONE						
LI	CL	6894 25.0	0.00005	0.00633	11	1381
LI	BR	6895 25.0	0.00001	0.00225	7	1381
LI	J	6897 25.0	0.00002	0.00366	8	1381
LI	PI	6940 25.0	0.00007	0.00416	6	1341
NA	PI	6943 25.0	0.00011	0.00440	6	1341
K	J	6945 25.0	0.00010	0.00488	6	1341
		6896	0.00005	0.00343	7	1381
K	PI	6944 25.0	0.00006	0.00463	6	1341
K	SCN	6946 25.0	0.00005	0.00364	5	1341
NH4	PI	6980 25.0	0.00009	0.00104	5	1681
MEAN	PI	6981 25.0	0.00013	0.00126	5	1681
ETAN	PI	6939 25.0	0.00008	0.00384	6	1341
BUAN	CL	6898 25.0	0.00003	0.00337	7	1381
		6983	0.00003	0.00040	4	1681
BUAN	BR	6937 25.0	0.00007	0.00430	6	1341
BUAN	J	6938 25.0	0.00006	0.00520	6	1341
BUAN	NO3	6936 25.0	0.00008	0.00505	6	1341
BUAN	CLO4	6935 25.0	0.00006	0.00403	6	1341
BUAN	PI	6984 25.0	0.00008	0.00340	6	1341
AMAN	BR	6982 25.0	0.00006	0.00112	5	1681
PM4P	CL	6132 25.0	0.00049	0.00383	5	2031
PM4P	BR	6598 25.0	0.00057	0.00370	5	2031



ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM T(°C)	G(MIN)	C(MAX)	N	REF:
PH4P	BR	6599 25.0	0.00092	0.00985	6	1203/
PH4P	BR	6600 25.0	0.00098	0.01034	6	1203/
		6121	0.00096	0.01009	6	1203/
		6120	0.00095	0.00973	6	1203/
ET4N	ClO4	6025 25.0	0.00032	0.01267	19	14/
ET4N	ClO4	6026 30.0	0.00066	0.01281	16	14/
ET4N	ClO4	6058 40.0	0.00031	0.01286	15	14/
ET4N	ClO4	6062 50.0	0.00051	0.01252	17	14/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN PROPYLENE CARBONATE						
ME4N	PHAC	6548 25.0	0.00027	0.00685	12	184/
ET4N	NO3	6558 25.0	0.00025	0.00632	12	184/
ET4N	BENZOAT	6550 25.0	0.00138	0.02207	7	184/
ET4N	DIPHAC	6549 25.0	0.00020	0.00726	12	184/
ET4N	PNIBAT	6551 25.0	0.00025	0.00757	12	184/
ET4N	PNCLPHAT	6556 25.0	0.00093	0.00673	11	184/
ET4N	METSUAT	6557 25.0	0.00025	0.00826	12	184/
BU4N	AC	6547 25.0	0.00045	0.00786	12	184/
BU4N	PNIPHAT	6553 25.0	0.00043	0.00732	11	184/
BU4N	DINIPHAT	6554 25.0	0.00018	0.00557	12	184/
BU4N	DICLPHAT	6555 25.0	0.00024	0.00456	12	184/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN DIOXANE						
BU4N	ClO4	6892 25.0	0.00001	0.02090	26	1465/
BU4N	AC	6893 25.0	0.00002	0.00092	7	1465/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN BENZENE						
BU4N	BR	6886 25.0	0.00002	1.68400	25	1216/
BU4N	ClO4	6890 25.0	0.00000	0.02588	27	1465/
BU4N	AC	6891 25.0	0.00002	0.00110	20	1465/
BU4N	SCN	6884 25.0	0.00004	4.10800	23	1216/
IAM4N	PI	6888 25.0	0.43400	2.38000	8	1216/
IAM4N	SCN	6885 25.0	0.00007	2.27600	18	1216/
AG	ClO4	6889 25.0	0.00005	0.28200	18	1465/
BU3MEN	SCN	6887 25.0	0.00020	0.03838	7	1216/
BU4N	Cl	6728 30.0	0.00004	0.00050	18	1465/
		6729	0.00002	0.00066	13	1465/
BU4N	NO3	6726 30.0	0.00002	0.00200	22	1465/
BU4N	ClO4	6727 30.0	0.00002	0.00080	26	1465/
		6730	0.00005	0.00050	11	1465/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN TETRAHYDROFURAN						
LI	ClO4	6794 25.0	0.00010	1.29035	16	140/
LI	PH4B	6934 25.0	0.00001	0.00022	6	145/
NA	PH4B	6932 25.0	0.00000	0.00016	13	145/
K	PH4B	6931 25.0	0.00000	0.00016	11	145/
CE	PH4B	6933 25.0	0.00000	0.00040	21	145/
BU4N	PH4B	6930 25.0	0.00000	0.00040	13	145/
IAM3BUN	PH4B	6929 25.0	0.00001	0.00019	7	145/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN ETHYLACETATE						
	ClO4	6818 25.0	1.00000	9.80000	12	1476/
		6819	0.00526	5.26000	28	1476/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN METHANOL + DIOXANE						
LI	ClO4	6801 25.0	0.00253	0.39200	23	1476/
		6806	0.00132	1.41200	17	1476/
		6802	0.00073	0.54800	29	1476/
		6803	0.00046	2.16000	22	1476/
		6805	0.00011	2.74000	33	1476/
		6807	0.00004	3.94000	20	1476/
		6809	0.00007	4.00000	29	1476/
		6808	0.00006	5.04000	27	1476/

ION	ION	NUM	T (°C)	C (MIN)	C (MAX)	N	REF
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN METHANOL + DIOXANE							
		6810		0.00038	5.36000	26	11761
		6812		0.00026	5.22400	22	11761
		6813		0.00151	7.56000	20	11761
		6800		0.00826	0.28500	17	11761
		6804		0.00100	1.47240	19	11761
		6811		0.00019	0.32000	25	11761
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN CHLOROBENZENE							
PR4N	PI	6882	25.0	0.00001	0.00308	21	11581
BU4N	PI	6574	25.0	0.00002	0.00392	11	1131
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN DIMETHYLSULFOXIDE + ACETON							
PR4N	BR	6133	25.0	0.00126	0.00563	6	12031
		6134		0.00070	0.00672	6	12031
		6135		0.00039	0.00545	6	12031
		6136		0.00025	0.00314	6	12031
BU4N	BR	6139	25.0	0.00110	0.00488	4	12031
		6140		0.00073	0.00434	4	12031
		6137		0.00057	0.00568	5	12031
PH4P	CL	6127	25.0	0.00102	0.00969	6	12031
		6128		0.00079	0.00560	5	12031
		6129		0.00060	0.00383	6	12031
		6130		0.00140	0.00824	5	12031
		6151		0.00073	0.00687	5	12031
PH4P	BR	6732	25.0	0.00101	0.00437	5	12031
		6733		0.00058	0.00409	6	12031
		6734		0.00076	0.00866	6	12031
		6735		0.00071	0.00599	5	12031
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN WATER + DIMETHYLSULFOXIDE							
PR4N	BR	6740	25.0	0.00039	0.00743	6	12031
PH4P	CL	6122	25.0	0.00102	0.01034	5	12031
		6123		0.00106	0.01043	5	12031
		6124		0.00107	0.01070	5	12031
		6125		0.00101	0.00993	6	12031
PH4P	BR	6737	25.0	0.00067	0.01004	5	12031
		6738		0.00103	0.01063	5	12031
		6739		0.00093	0.00982	5	12031
		6741		0.00107	0.01027	5	12031
LI	CLO4	6817	25.0	0.00017	2.73400	55	11761
		6816		0.00047	1.08000	31	11761
		6814		0.00120	0.13760	13	11761
		6815		0.00020	0.47000	37	11761
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN METHANOL + ETHYLACETATE							
		6820		0.00002	8.50000	39	11761
		6823		0.00018	9.42000	31	11761
		6824		0.00013	9.01000	37	11761
		6821		0.00005	7.58000	38	11761
		6822		0.00004	6.92000	32	11761
CATION TRANSFERENCE NUMBER IN WATER							
NA	CL	4020	25.0	0.03005	0.20056	6	12311
OSMOTIC COEFFICIENT IN WATER							
N	SO4	2216	0.0	0.0	0.0	27	11911
LI	CL	2076	0.0	0.0	0.0	33	12011
		2001		0.0	0.0	19	11511
		2135		0.00401	0.20240	24	11501
LI	BR	2079	0.0	0.0	0.0	24	12011
		2003		0.0	0.0	22	11511
LI	J	2136	0.0	0.01107	0.22460	10	11501
LI	NO3	2088	0.0	0.0	0.0	33	12001

ION OSMOTIC	ION COEFFICIENT	NUM IN	T (°C)	C (MIN)	C (MAX)	N	REF
LI	CLO4	2082	0.0	0.0	0.0	41	12021
LI	CLO4	2085	0.0	0.0	0.0	33	12021
NA	CL	2070	0.0	0.0	0.0	20	11911
		2075		0.0	0.0	28	12011
		2005		0.0	0.0	20	11511
NA	BR	2078	0.0	0.0	0.0	31	12011
NA	NO3	2087	0.0	0.0	0.0	33	12001
NA	CLO3	2081	0.0	0.0	0.0	38	12021
NA	CLO4	2084	0.0	0.0	0.0	32	12021
NA	SO4	2217	0.0	0.0	0.0	11	11911
K	CL	2071	0.0	0.0	0.0	16	11911
		2074		0.0	0.0	27	12011
		2058		0.0	0.0	21	11781
		2134		0.00319	0.20940	9	11491
K	BR	2077	0.0	0.0	0.0	30	12011
K	J	2137	0.0	0.00523	0.13794	20	11501
K	NO3	2086	0.0	0.0	0.0	28	12001
K	CLO3	2080	0.0	0.0	0.0	26	12021
K	CLO4	2083	0.0	0.0	0.0	15	12021
CS	CL	2056	0.0	0.0	0.0	15	11541
		2138		0.00350	0.15296	20	11501
CS	J	2139	0.0	0.00319	0.07700	16	11501
MA	CL	2103	0.0	0.0	0.0	53	11781
MA	BR	2104	0.0	0.0	0.0	25	11781
MA	CL	2105	0.0	0.00280	0.18300	7	11491
MA	BR	2016	0.0	0.003487	0.14444	6	12041
MA	J	2106	0.0	0.00176	0.14850	8	11491
ET	CL	2107	0.0	0.00298	0.23700	6	11491
ET	BR	2017	0.0	0.13630	0.23511	4	12041
ET	J	2106	0.0	0.00357	0.13260	3	11491
MA	CL	2109	0.0	0.00236	0.07290	5	11491
MA	BR	2018	0.0	0.01624	0.17571	8	12041
MA	J	2123	0.0	0.00262	0.06376	8	11491
MA	CL	2124	0.0	0.00168	0.05744	4	11491
MA	J	2125	0.0	0.00344	0.03412	5	11491
MA	SO4	2400	0.0	0.0	0.0	14	11911
		2401		0.0	0.0	16	12201
NI	SO4	2402	0.0	0.0	0.0	14	12201
NA	CL	2061	15.0	0.0	0.0	4	11961
H	F	2140	25.0	0.00000	20.70691	45	11901
H	CL	2010	25.0	0.14903	27.01233	36	11791
		2141		0.00000	19.03000	39	11901
	BR	2019	25.0	0.0	0.0	33	11701
		2142		0.00000	14.21400	34	11901
	J	2025	25.0	0.0	0.0	24	11701
		2143		0.00200	13.24700	33	11901
	NO3	2035	25.0	0.0	0.0	47	11701
		2144		0.00400	24.44990	51	11901
	CLO4	2114	25.0	0.00000	20.60990	39	11901
LI	NA	2599	25.0	0.0	0.29746	31	11901
K	CL						
LI	NA	2502	25.0	0.0	5.32680	84	11911
CL							
		2503		0.0	5.32680	84	11911
LI	K	2508	25.0	0.0	2.82720	72	11911
CL							
		2504		0.0	4.53000	78	11911

ION	ION	NUM T (°C)	C (MIN)	L (MAX)	N	REF
OSMOTIC	COEFFICIENT IN WATER					
LI	CS	2505	25.0	0.0	5.32084	84 / 1971
CL						
		2506		0.0	6.81124	46 / 1971
LI	OH	2041	25.0	0.14450	9.43594	21 / 1701
		2110		0.91104	5.43304	26 / 901
LI	CL	2013	25.0	0.14405	27.52150	37 / 1701
		2145		0.04194	26.75211	43 / 301
LI	BR	2020	25.0	0.14892	25.51474	37 / 1701
		2146		0.04194	1.44528	16 / 901
LI	J	2026	25.0	0.14869	16.46132	29 / 1701
		2153		0.04194	1.92411	16 / 301
LI	NO3	2036	25.0	0.14882	23.15494	37 / 1701
		2115		0.91400	21.80996	43 / 301
LI	CLO4	2126	25.0	0.98100	6.18304	26 / 901
LI	BA	2518	25.0	0.0	3.64532	30 / 1601
CL						
NA	K	2500	25.0	0.0	4.52754	74 / 1971
CL						
		2501		0.0	4.51315	78 / 1971
NA	K	2531	25.0	0.0	0.47252	56 / 481
BR						
NA	CS	2507	25.0	0.0	5.32320	84 / 1971
CL						
NA	OH	2042	25.0	0.14451	42.42775	46 / 1701
		2111		0.97800	31.64697	52 / 901
NA	F	2031	25.0	0.14445	1.44445	10 / 1701
		2154		0.04194	1.99408	16 / 301
NA	CL	2002	25.0	0.14403	7.13404	12 / 921
		2006		0.14403	10.64644	35 / 1941
		2012		0.14406	10.60851	23 / 1701
		2147		0.04194	1.45802	16 / 901
NA	BR	2021	25.0	0.14592	14.31494	26 / 1701
		2148		0.04194	1.94545	16 / 301
NA	J	2027	25.0	0.14870	16.52262	24 / 1701
		2155		0.04194	1.92411	16 / 301
NA	NO3	2037	25.0	0.14882	14.18000	27 / 1701
		2116		0.91600	12.20404	34 / 901
NA	CLO3	2130	25.0	0.97800	3.88000	23 / 901
NA	CLO4	2127	25.0	0.97800	7.06200	24 / 901
NA	BR03	2165	25.0	0.97000	3.40404	23 / 901
K	CS	2509	25.0	0.0	4.51254	84 / 1971
CL						
K	OH	2043	25.0	0.14432	29.66650	38 / 1701
		2112		0.97800	23.07898	43 / 901
K	F	2032	25.0	0.14425	25.16508	34 / 1701
		2156		0.04194	1.97411	16 / 301
K	CL	2004	25.0	0.14883	8.34376	14 / 921
		2008		0.14883	8.32886	29 / 1941
		2013		0.14883	7.187747	20 / 1701
		2149		0.04194	1.43564	16 / 301
K	BR	2022	25.0	0.14872	4.08155	22 / 1701
		2150		0.04194	1.42533	16 / 301
K	J	2028	25.0	0.14644	11.46382	25 / 1701
		2157		0.04194	1.90544	16 / 301
K	NO3	2038	25.0	0.14863	6.48331	18 / 1701
		2117		0.91200	4.07904	24 / 901
K	CLO3	2134	25.0	0.91500	1.50304	13 / 901
K	BR03	2166	25.0	0.97400	1.31904	11 / 901



ION OSMOTIC	ION COEFFICIENT	NUM T(°C) IN WATER	C(MIN)	C(MAX)	N	REF
K CL RU	CA	2526	25.0	0.0	4.31121	78 / 1971
	F	2033	25.0	0.14414	28.56612	39 / 1701
		2158		0.00199	1.96461	16 / 901
RB	CL	2014	25.0	0.14875	11.08764	24 / 1701
		2159		0.00199	1.92873	16 / 901
RR	BR	2023	25.0	0.14862	9.50923	23 / 1701
		2160		0.00199	1.91631	16 / 901
RB	J	2024	25.0	0.14839	10.14116	24 / 1701
		2161		0.00199	1.89583	16 / 901
RR	NO3	2034	25.0	1.00300	5.01600	20 / 1701
		2118		0.91200	5.02100	26 / 901
CS	OH	2044	25.0	0.0	0.0	11 / 1701
		2113		0.90000	2.22900	17 / 901
CS	F	2034	25.0	0.14900	30.50986	47 / 1701
		2162		0.00199	1.95112	16 / 901
CS	CL	2015	25.0	0.14861	14.66239	28 / 1701
		2151		0.00199	1.91536	16 / 901
CS	BR	2024	25.0	0.14867	8.60223	22 / 1701
		2163		0.00199	1.90316	16 / 901
CS	J	2030	25.0	0.14825	5.06853	17 / 1701
		2164		0.00199	1.88251	16 / 901
CS	NO3	2040	25.0	0.14839	2.59442	12 / 1701
		2119		0.91200	2.19000	19 / 901
CS CL	BA	2519	25.0	0.0	3.40242	36 / 1601
NH4	CL	2007	25.0	0.14868	10.94932	24 / 1701
		2152		0.00199	1.92227	16 / 901
NH4	BR	2073	25.0	0.0	0.0	23 / 471
NH4	NO3	2009	25.0	0.14845	22.73270	44 / 1701
		2122		0.91300	26.46098	49 / 901
NH4	ClO4	2129	25.0	0.91100	3.57604	22 / 901
ME4N	CL	2045	25.0	0.14728	12.88386	36 / 1531
ME4N	BR	2049	25.0	0.14714	6.73984	22 / 1531
ME4N	J	2053	25.0	0.14692	0.48324	4 / 1531
ET4N	CL	2046	25.0	0.14614	7.53967	26 / 1531
ET4N	BR	2050	25.0	0.14600	8.18884	29 / 1531
ET4N	J	2062	25.0	0.0	0.0	13 / 161
		2054		0.14578	2.80824	19 / 1531
PR4N	CL	2047	25.0	0.14489	7.89460	35 / 1531
PR4N	BR	2072	25.0	0.0	0.0	30 / 1231
		2051		0.14476	6.11104	26 / 1531
PR4N	J	2055	25.0	0.14454	3.62761	9 / 1531
BU4N	CL	2048	25.0	0.14374	6.17360	32 / 1531
BU4N	BR	2052	25.0	0.14361	6.02504	38 / 1531
CL	BR	2534	25.0	0.0	0.97891	48 / 481
NA CL	BR	2533	25.0	0.0	0.96916	48 / 481
K CL NA CL NA	NO3	2532	25.0	0.0	5.30429	84 / 1971
	SO4	2524	25.0	0.0	5.30429	84 / 1971
		2525		0.0		
MG CL	NA	2520	25.0	0.0	5.30429	84 / 1971
				0.0	1.90974	84 / 1971
MG	CL	2521		0.0	1.90974	84 / 1971
		2204	25.0	0.00299	8.37924	36 / 871

ION	ION	NUM T (°C)		C (MIN)	C (MAX)	N	REF
OSMOTIC	COEFFICIENT IN WATER						
MG	BR	2205	25.0	0.00299	8.06284	36	1 811
MG	J	2206	25.0	0.00299	7.64265	36	1 811
MG	SO4	2405	25.0	0.0	0.0	13	1 2281
CA	NA	2522	25.0	0.0	1.89405	90	1 1971
CL							
CA	CL	2200	25.0	0.24850	22.24496	27	1 1701
		2203		0.01495	10.69822	35	1 811
		2207		0.00299	8.27404	36	1 811
CA	BR	2208	25.0	0.00299	8.00871	36	1 811
CA	J	2209	25.0	0.00299	5.13383	38	1 811
BR	CL	2201	25.0	0.24847	10.39889	19	1 1961
		2210		0.00299	8.23827	36	1 811
SR	BR	2211	25.0	0.00299	5.85536	40	1 811
SR	J	2215	25.0	0.00299	5.25676	38	1 811
BA	NA	2523	25.0	0.0	1.57784	78	1 1971
CL							
BA	K	2527	25.0	0.0	1.57784	78	1 1971
CL							
BA	CL	2202	25.0	0.24835	5.10806	14	1 1961
		2212		0.00299	5.04924	36	1 811
BA	BR	2213	25.0	0.00299	6.28361	42	1 811
BA	J	2214	25.0	0.00299	5.27351	38	1 811
CU	CL	2221	25.0	0.24877	8.51891	17	1 2141
AG	NO3	2120	25.0	0.91200	15.34700	38	1 901
LA	CL	2300	25.0	0.37802	13.84764	19	1 1701
MN	SO4	2404	25.0	0.0	0.0	12	1 2281
FE	CL	2222	25.0	0.90000	3.43890	33	1 821
CO	CL	2226	25.0	0.90730	6.05280	41	1 821
CO	BR	2227	25.0	0.91760	8.65400	48	1 821
CO	J	2228	25.0	0.90630	13.25290	65	1 821
CO	NO3	2229	25.0	0.90390	8.14540	49	1 821
NI	CL	2220	25.0	0.24871	8.146512	17	1 2141
		2223		0.90850	8.11080	48	1 821
NI	BR	2224	25.0	0.91380	7.64500	43	1 821
NI	NO3	2225	25.0	0.90680	6.87160	43	1 821
SO4	CL	2528	25.0	0.0	1.47082	90	1 1971
MG							
TL	CL	2132	25.0	0.96300	0.98800	4	1 901
TL	NO3	2121	25.0	0.90000	1.17600	10	1 901
TL	ClO4	2126	25.0	0.91100	1.30300	11	1 901
TL	NO2	2133	25.0	0.94300	2.02400	18	1 901
NA	CL	2090	35.0	0.0	0.0	4	1 1961
NA	CL	2089	45.0	0.0	0.0	4	1 1961
K	CL	2101	50.0	0.0	0.0	5	1 941
NA	CL	2091	60.0	0.0	0.0	16	1 1961
K	BR	2094	60.0	0.0	0.0	14	1 1961
NA	CL	2092	70.0	0.0	0.0	16	1 1961
K	CL	2102	70.0	0.0	0.0	5	1 941
K	BR	2095	70.0	0.0	0.0	14	1 1961
NA	CL	2057	75.0	0.0	0.0	17	1 2301
NA	CL	2093	80.0	0.0	0.0	16	1 1961
K	BR	2096	80.0	0.0	0.0	14	1 1961
NA	CL	2100	90.0	0.0	0.0	16	1 1961
K	BR	2097	90.0	0.0	0.0	14	1 1961
NA	CL	2059	100.0	0.0	0.0	18	1 2301
K	BR	2099		0.0	0.0	16	1 1961
NA	CL	2098	100.0	0.0	0.0	14	1 1961
		2060	125.0	0.0	0.0	18	1 2301

ION	ION	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
OSMOTIC	COEFFICIENT	IN WATER					
NA	CL	2063	150.0	0.0	0.0	19	12301
NA	CL	2064	175.0	0.0	0.0	19	12301
NA	CL	2065	200.0	0.0	0.0	19	12301
NA	CL	2066	225.0	0.0	0.0	20	12301
NA	CL	2067	250.0	0.0	0.0	20	12301
NA	CL	2068	275.0	0.0	0.0	21	12301
NA	CL	2069	300.0	0.0	0.0	22	12301

## MEAN ACTIVITY COEFFICIENT IN WATER

M	CL	1004	0.0	0.88460	0.00600	17	1911
M	NO3	1031	25.0	0.89100	3.90900	9	1921
M	SO4	1202	25.0	0.30300	18.97298	29	1921
LI	CL	1003	25.0	0.14905	5.05118	10	1921
LI	BR	1011	25.0	0.89400	4.35200	10	1921
LI	J	1021	25.0	0.91100	4.73900	10	1921
LI	NO3	1037	25.0	0.88800	4.55200	11	1921
NA	F	1047	25.0	0.80400	1.57200	6	1921
NA	CL	1001	25.0	0.87800	4.79200	12	1921
		1002		0.00997	7.38149	21	1921
		1051		0.87110	0.43300	10	1921
		1057		0.00109	10.63273	41	1961
		1061		0.87100	0.95860	8	1961
NA	BR	1013	25.0	0.88700	4.93800	12	1921
NA	J	1023	25.0	0.80800	4.56000	11	1921
NA	NO3	1039	25.0	0.82500	6.37300	10	1921
K	F	1049	25.0	0.87400	4.74000	12	1921
K	CL	1005	25.0	0.80900	5.09000	13	1921
		1053		0.80500	4.58200	15	1921
		1055		0.80700	4.58100	11	1921
		1059		0.90040	5.56930	24	1961
		1063		0.80330	0.95840	4	1961
K	BR	1015	25.0	0.87100	4.01500	12	1921
K	J	1025	25.0	0.87600	5.19200	13	1921
K	NO3	1041	25.0	0.83300	3.74400	11	1921
RB	CL	1007	25.0	0.80400	5.54700	14	1921
RB	BR	1017	25.0	0.80300	5.51800	14	1921
RB	J	1027	25.0	0.80200	5.52000	14	1921
RB	NO3	1043	25.0	0.83000	4.70000	13	1921
CS	CL	1009	25.0	0.82500	5.47600	14	1921
CS	BR	1019	25.0	0.82400	5.46000	14	1921
CS	J	1029	25.0	0.82300	3.43400	10	1921
CS	NO3	1045	25.0	0.82900	1.85400	7	1921
NH4	CL	1033	25.0	0.87000	4.56000	10	1921
NH4	NO3	1035	25.0	0.84000	4.33000	10	1921
SR	CL	1201	25.0	0.61400	2.89400	24	1921
BA	CL	1200	25.0	0.59200	2.25000	20	1921
ZN	SO4	1100	25.0	0.25000	3.54780	16	1921
LA	CL	1300	25.0	0.43600	2.05400	16	1921
H	CL	1006	50.0	0.87110	2.93270	15	1911

## HEAT OF DILUTION IN WATER

LI	CL	3050	25.0	0.00022	2.69782	30	14831
LI	BR	3051	25.0	0.00022	2.67430	30	14831
LI	J	3052	25.0	0.00022	2.12774	29	14831
NA	CL	3053	25.0	0.00022	2.21320	29	14831
NA	BR	3054	25.0	0.00022	2.69720	30	14831
NA	J	3055	25.0	0.00022	2.67362	30	14831
NA	F	3056	25.0	0.00022	2.63420	30	14831
K	F	3057	25.0	0.00022	2.72600	30	14831
K	CL	3058	25.0	0.00022	2.65978	30	14831

ION HEAT OF	ION DILUTION IN WATER	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF
K	BR	3059	25.0	0.00022	2.63700	30	11831
K	J	3060	25.0	0.00022	2.59920	30	11831
RB	F	3061	25.0	0.00022	1.00821	26	11831
RB	CL	3062	25.0	0.00022	1.08683	26	11831
RB	BR	3063	25.0	0.00022	0.22033	19	11831
RB	J	3064	25.0	0.00022	0.22011	19	11831
CS	F	3065	25.0	0.00022	0.27600	20	11831
CS	CL	3066	25.0	0.00022	2.11700	29	11831
CS	BR	3067	25.0	0.00022	0.22021	19	11831
CS	J	3068	25.0	0.00022	0.21993	19	11831

## VISCOSITY IN WATER

NA	CL	7059	0.0	0.0	4.03532	11	11421
K	BR	7061	0.0	0.0	7.50000	17	11141
K	MNO4	7074	0.0	0.0	0.36149	14	11101
K	SU4	7094	0.0	0.0	0.90414	11	11081
K	FECl4	7058	0.0	0.0	1.00000	13	11131
K	CHCl4	7096	0.0	0.0	7.63260	15	11081
CS	J	7072	0.0	0.0	2.87994	22	11101
AG	NO3	7092	0.0	0.0	10.10000	16	11031
LA	CL	7063	0.0	0.0	3.48813	14	11141
NA	CL	7000	12.5	0.0	1.00000	9	11311
K	CL	7120	12.5	0.0	1.00156	11	11321
K	SO4	7133	12.5	0.0	0.27043	7	11321
NH4	CL	7026	12.5	0.0	1.20156	11	11291
NA	CL	7001	15.0	0.0	1.00050	9	11311
NA	SO4	7033	15.0	0.0	0.42040	10	11291
K	CL	7127	15.0	0.0	1.00104	11	11321
K	SO4	7134	15.0	0.0	0.27033	7	11321
NH4	CL	7024	15.0	0.0	1.20110	11	11291
BE	SO4	7146	15.0	0.0	0.20042	9	11321
MG	CL	7160	15.0	0.0	0.48044	9	11321
MG	SO4	7152	15.0	0.0	0.40000	11	11321
CE	CL	7017	15.0	0.0	1.16108	10	11311
LI	SO4	7005	15.1	0.0	0.52044	9	11311
FE	CL	7011	15.5	0.0	0.64319	10	11311
H	NO3	7078	18.0	0.0	2.22000	15	11211
K	CL	7076	18.0	0.0	2.00000	25	11211
K	J	7022	18.0	0.0	0.40018	8	11291
K	ClO3	7082	18.0	0.0	0.80000	20	11211
RB	NO3	7080	18.0	0.0	0.20000	13	11211
ET4N	PI	7086	18.0	0.0	0.01000	10	11491
MO	SO4	7084	18.0	0.0	0.02020	11	11491
		7153		0.0	0.00000	11	11321
BA	CL	7037	18.0	0.0	1.42530	7	11361
LA	CL	7085	18.0	0.0	0.02420	10	11491
FE	CL	7012	18.0	0.0	0.84250	10	11311
CE	CL	7018	18.0	0.0	1.16030	10	11311
LI	SO4	7006	20.0	0.0	0.51990	9	11311
NA	F	7039	20.0	0.0	0.20244	5	11311
K	CL	7128	20.0	0.0	1.00000	11	11321
		7101		0.0	7.96943	10	11231
K	J	7023	20.0	0.0	0.40000	8	11291
K	SO4	7135	20.0	0.0	0.27000	7	11321
RE	SO4	7147	20.0	0.0	0.20024	9	11321
MG	CL	7141	20.0	0.0	0.48000	9	11321
NA	SO4	7034	22.0	0.0	0.42000	11	11291
H	AC	7050	25.0	0.0	0.0	10	11531
LI	CL	7045	25.0	0.0	0.43710	19	11531



ION VISCOSITY	ION IN WATER	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
LI	BR	7046	25.0	0.0	0.14362	9	14531
LI	J	7047	25.0	0.0	0.14950	14	14531
LI	JO3	7049	25.0	0.0	0.18030	22	14531
LI	AC	7052	25.0	0.0	0.18786	8	14531
LI	PI	7053	25.0	0.0	0.07144	14	14531
LI	SO4	7007	25.0	0.0	0.51427	9	14311
NA	CL	7002	25.0	0.0	1.00000	9	14311
		7060		0.0	4.00420	11	14121
		7097		0.0	10.32976	15	14311
NA	JO4	7038	25.0	0.0	0.14360	9	14771
K	CL	7065	25.0	0.0	5.42415	5	14461
		7067		0.0	0.40082	11	1451
		7129		0.0	0.44866	11	14321
		7102		0.0	7.45453	10	1434
K	BR	7064	25.0	0.0	7.44853	16	14461
K	J	7024	25.0	0.0	0.34448	8	14291
		7048		0.0	0.14392	16	14531
K	NO3	7068	25.0	0.0	0.20000	8	14451
K	CLO3	7066	25.0	0.0	0.20000	7	14451
K	BR03	7069	25.0	0.0	0.20000	7	14451
K	JO3	7050	25.0	0.0	0.08410	9	14531
K	MNO4	7075	25.0	0.0	0.40074	16	14101
	AC	7051	25.0	0.0	0.12592	10	14531
	SO4	7093	25.0	0.0	1.50000	12	14081
		7136		0.0	0.20961	7	14321
	FECNO	7057	25.0	0.0	2.50000	14	14131
	CRO4	7095	25.0	0.0	7.36627	14	14021
CS	J	7073	25.0	0.0	3.99930	22	14101
CS	NO3	7070	25.0	0.0	0.04000	7	14451
NH4	CL	7030	25.0	0.0	1.14860	11	14291
		7071		0.0	0.40000	8	14451
ET4N	BR	7055	25.0	0.0	0.07084	14	14531
ET4N	PI	7054	25.0	0.0	0.04014	5	14531
RE	SO4	7148	25.0	0.0	0.20000	9	14321
MG	CL	7142	25.0	0.0	0.47940	9	14321
MG	SO4	7154	25.0	0.0	0.40000	11	14321
		7120		0.0	0.01034	17	1421
CA	FECNO	7125	25.0	0.0	0.01901	14	1421
CA	FECNO	7124	25.0	0.0	0.03792	17	1421
CU	SO4	7118	25.0	0.0	0.01848	16	1421
AG	NO3	7091	25.0	0.0	0.99016	15	14081
ZN	SO4	7119	25.0	0.0	0.01740	12	1421
CD	SO4	7122	25.0	0.0	0.01033	25	1421
LA	CL	7062	25.0	0.0	3.46255	13	14461
		7106		0.0	10.25527	17	14131
CH	SO4	7123	25.0	0.0	0.05043	17	1421
HI	SO4	7121	25.0	0.0	0.02864	25	1421
	CL	7013	25.0	0.0	0.89086	10	14311
	SO4	7113	25.0	0.0	0.50000	13	14311
	CL	7019	25.0	0.0	1.15804	10	14311
NI	CL	7107	25.0	0.0	13.76271	17	14131
SI	CL	7108	25.0	0.0	12.90413	17	14131
TE	CL	7109	25.0	0.0	12.64601	17	14131
DT	CL	7110	25.0	0.0	12.82530	16	14131
MO	CL	7111	25.0	0.0	12.10710	17	14131
ER	CL	7112	25.0	0.0	13.33700	17	14131
LI	CL	7098	30.0	0.0	0.51834	8	14311
NA	CL	7096	30.0	0.0	10.30013	15	14311

ION	ION	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF
ISCOSITY	IN WATER						
NA	SO4	7035	30.0	0.0	0.41928	9	11291
K	CL	7130	30.0	0.0	0.99712	11	11321
		7103		0.0	7.93094	10	1131
K	J	7025	30.0	0.0	0.39894	8	11291
K	SO4	7137	30.0	0.0	0.26928	7	11321
RE	SO4	7149	30.0	0.0	0.19470	4	11321
MG	CL	7143	30.0	0.0	0.47874	9	11321
MG	SO4	7155	30.0	0.0	0.34432	11	11321
FE	CL	7014	30.0	0.0	0.88447	10	11311
H	NO3	7079	35.0	0.0	2.24000	13	11211
LI	SO4	7009	35.0	0.0	0.51750	8	11311
NA	CL	7003	35.0	0.0	0.99470	9	11311
K	CL	7077	35.0	0.0	2.00000	22	11211
		7131		0.0	0.99540	11	11321
K	J	7026	35.0	0.0	0.34670	8	11291
K	CL03	7083	35.0	0.0	0.80000	23	11211
K	SO4	7138	35.0	0.0	0.26883	7	11321
RR	NO3	7081	35.0	0.0	2.00000	17	11211
NH4	CL	7031	35.0	0.0	1.19458	11	11291
BE	SO4	7150	35.0	0.0	0.19438	9	11321
MG	CL	7144	35.0	0.0	0.47796	9	11321
		7117		0.0	1.20000	14	1131
MG	SO4	7156	35.0	0.0	0.34854	11	11321
RA	CL	7116	35.0	0.0	0.15000	14	1131
FE	CL	7013	35.0	0.0	0.88780	10	11311
CO	CL	7114	35.0	0.0	0.60000	18	1131
NI	CL	7115	35.0	0.0	0.60000	17	1131
CE	CL	7020	35.0	0.0	1.13404	10	11311
NA	CL	7099	40.0	0.0	9.68121	9	1131
NA	SO4	7036	40.0	0.0	0.41760	10	11291
K	CL	7104	40.0	0.0	7.90073	10	1131
K	J	7027	40.0	0.0	0.19272	8	11291
FE	CL	7016	40.0	0.0	0.88617	10	11311
LI	SO4	7010	42.5	0.0	0.51600	9	11311
NA	CL	7004	42.5	0.0	0.49960	9	11311
K	CL	7132	42.5	0.0	0.49260	11	11321
K	SO4	7134	42.5	0.0	0.26808	7	11321
NH4	CL	7032	42.5	0.0	1.19160	11	11291
BE	SO4	7151	42.5	0.0	0.19884	9	11321
MG	CL	7145	42.5	0.0	0.47064	9	11321
MG	SO4	7157	42.5	0.0	0.34728	11	11321
CE	CL	7021	42.5	0.0	1.13070	10	11311
NA	CL	7100	50.0	0.0	9.63513	9	1131
K	CL	7105	50.0	0.0	7.90073	10	1131
VISCOSITY IN ETHANOL							
NA	J	7088	25.0	0.0	0.03360	13	11491
VISCOSITY IN ACETONE							
LI	CL	7089	18.0	0.0	0.54780	7	1131
LI	CL	7090	25.0	0.0	0.54240	6	1131
VISCOSITY IN NITROBENZENE							
ET4N	PI	7087	18.0	0.0	0.01580	10	11491
MASS DENSITY IN WATER							
NA	CL	8001	12.5	0.0	1.00068	9	11311
NA	CL	8002	15.0	0.0	1.00050	9	11311
CF	CL	8018	15.0	0.0	1.16108	10	11311
LI	SO4	8006	15.1	0.0	0.52044	9	11311
FE	CL	8012	15.5	0.0	0.89319	10	11311
BA	CL	8000	18.0	0.0	1.42530	7	11311

ION MASS	DENSITY	ION IN WATER	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
FE		CL	8013	18.0	0.0	12.28770	10	1311
CE		CL	8019	18.0	0.0	1.16030	10	1311
LI		SO4	8007	20.0	0.0	0.51900	9	1311
K		CL	8027	20.0	0.0	8.42487	10	1311
LI		SO4	8008	25.0	0.0	0.51927	9	1311
NA		CL	8003	25.0	0.0	1.00000	9	1311
			8023		0.0	10.32721	15	1311
K		CL	8028	25.0	0.0	8.41990	10	1311
LA		CL	8032	25.0	0.0	10.25131	17	12131
FE		CL	8014	25.0	0.0	0.89088	10	1311
CU		SO4	8039	25.0	0.0	0.50000	11	1341
CE		CL	8020	25.0	0.0	1.15804	10	1311
NU		CL	8033	25.0	0.0	13.175887	17	12131
SM		CL	8034	25.0	0.0	12.89948	17	12131
TH		CL	8035	25.0	0.0	12.04090	17	12131
DY		CL	8036	25.0	0.0	12.82204	16	12131
HU		CL	8037	25.0	0.0	12.10264	17	12131
EH		CL	8038	25.0	0.0	13.33492	17	12131
LI		SO4	8009	30.0	0.0	0.51834	8	1311
NA		CL	8024	30.0	0.0	10.30208	15	1311
K		CL	8029	30.0	0.0	8.39400	10	1311
FE		CL	8015	30.0	0.0	0.88447	10	1311
LI		SO4	8010	35.0	0.0	0.51750	8	1311
NA		CL	8004	35.0	0.0	0.99470	9	1311
MG		CL	8043	35.0	0.0	1.00000	10	1311
BA		CL	8042	35.0	0.0	2.24530	12	1311
FE		CL	8018	35.0	0.0	0.88788	10	1311
CO		CL	8040	35.0	0.0	0.60000	18	1311
NI		CL	8041	35.0	0.0	0.60000	17	1311
NA		CL	8025	40.0	0.0	9.07894	4	1311
K		CL	8030	40.0	0.0	8.30320	10	1311
FE		CL	8017	40.0	0.0	0.88617	10	1311
LI		SO4	8011	42.5	0.0	0.51600	9	1311
NA		CL	8005	42.5	0.0	0.99460	9	1311
CF		CL	8022	42.5	0.0	1.15020	10	1311
NA		CL	8020	50.0	0.0	9.03247	9	1311
K		CL	8031	50.0	0.0	8.52688	10	1311

Symbol	Name (englisch)	Wertig- keit	Ionen- durch- messer (Å)	Literatur- zitat
AC	Acetate	- 1	1.18	
AG	Silver (Argentous)	- 1	1.26	186
AL	Aluminium	3	0.50	186
AM3BUN	Triamylbutylammonium	1		
AM4N	Tetraamylammonium	1	5.36	124
ASF6	Hexafluoroarsonium	- 1		
ASO3	Arsenite	- 3		
ASO4	Arsenate	- 3		
AU	Gold	1	1.37	186
BA	Barium	2	1.35	186
BE	Beryllium	2	0.31	186
BENZOAT	Benzoate	- 1		
BF4	Tetrafluoroborate	- 1		
BR	Bromide	- 1	1.95	186
BRO3	Bromate	- 1	3.11	
BUNH3	Butylammonium	1		
BUOHNH3	Butanolammonium	1		
BU3ETN	Tributylethylammonium	1		
BU3HN	Tributylammonium	1		
BU3MEN	Tributylmethylanmonium	1		
BU4N	Tetrabutylammonium	1	4.94	124
CA	Calcium	2	0.99	186
CD	Cadmium	2	0.97	186
CE (3+)	Cerium III (Cerous)	3	1.11	186
CE (4+)	Cerium IV (Ceric)	4	1.01	186
CI	Citrate	- 1	2.00	
CL	Chloride	- 1	1.81	186
CLAC	Chloroacetate	- 1	2.00	
CLO	Hypochlorite	- 1		
CLO2	Chlorite	- 1		
CLO3	Chlorate	- 1	2.05	
CLO4	Perchlorate	- 1	2.91	
CN	Cyanide	- 1		
CO	Cobalt II	2	0.78	186
CO3	Carbonate	- 2		
CR	Chromium III	3	0.69	186
CRO4	Chromate	- 2		
CR2O7	Dichromate	- 2		
CS	Cesium	1	1.69	186
CU (1+)	Copper I (Cuprous)	1	0.96	186
CU (2+)	Copper II (Cupric)	2	0.69	186
DICLPHAT	2,6-Dichlorophenolate	- 1		
DINIBAT	3,5-Dinitrobenzoate	- 1		
DINIPHAT	2,5-Dinitrophenolate	- 1		
DIPHAC	Diphenylacetate	- 1		
DY	Dysprosium	3	0.99	186
DEME3N	Octadecyltrimethylammonium	1		
DESO4	Octadecylsulfate	- 1		
ER	Erbium	3	0.96	186
ET4N	Tetraethylammonium	1	4.00	124



ETNH3	Ethylammonium	1		
ETOHNH3	Ethanolammonium	1		
F	Fluoride	- 1	1.36	186
FE (2+)	Iron II (Ferrous)	2	0.76	186
FE (3+)	Iron III (Ferric)	3	0.64	186
FECH6(3-)	Hexacyanoferrate III (3-)	- 3		
FECH6(4-)	Hexacyanoferrate II (4-)	- 4		
FO	Formate (Formate)	- 1		
F3AC	Trifluoroacetate	- 1		
GA	Gallium	3	0.62	186
H	Hydrogen	1	0.45	186
HG	Mercury II (Mercuric)	2	1.10	186
HGJ3	Triiodomercurate	- 1		
HGJ4	Tetraiodomercurate	- 2		
HGJ5	Pentaiodomercurate	- 3		
HO	Holmium	3	0.97	186
HP4N	Tetraheptylammonium	1		
HPNH3	Heptylammonium	1		
HPO4	Hydrogen Phosphate	- 2		
HS	Hydrogen Sulfide	- 1		
HX4N	Tetrahexylammonium	1		
H2PO4	Dihydrogen Phosphate	- 1		
IAM3BUN	Triisoamylbutylammonium	1	4.94	124
IAM4N	Tetraisoamylammonium	1	4.94	
IN	Indium	3	0.81	186
IOPR	Isopropylate	- 1		
J	Iodide	- 1	2.16	186
JO2	Iodite	- 1	3.30	
JO3	Iodate	- 1	3.39	
JO4	Periodate	- 1	4.00	
K	Potassium	1	1.33	186
LA	Lanthanum	3	1.15	186
LI	Lithium	1	0.60	186
MENH3	Methylammonium	1		
MEOHNH3	Methanolammonium	1		
METSUAT	Methylsulfonate	- 1		
ME2BU2N	Dimethyldibutylammonium	1		
ME2NH2	Dimethylammonium	1		
ME3AMN	Trimethylamylammonium	1		
ME3BUN	Trimethylbutylammonium	1		
ME3ETN	Trimethylethylammonium	1		
ME3NH	Trimethylammonium	1		
ME3PHN	Trimethylphenylammonium	1		
ME3PRN	Trimethylpropylammonium	1		
ME4N	Tetramethylammonium	1	3.47	124
MG	Magnesium	2	0.65	186
MN	Manganese II	2	0.80	186
MNO4	Permanganate	- 1	3.09	
MOO4	Molybdate	- 2		
N3	Azide	- 1	2.00	
NA	Sodium	1	0.95	186
ND	Neodymium	3	1.08	186
NH2	Amide	- 1		
NH4	Ammonium	1	1.25	
NI	Nickel II	2	0.78	186

NO2	Nitrite	- 1		
NO3	Nitrate	- 1	2.77	
OC4N	Tetraoctylammonium	- 1		
OET	Ethylate	- 1		
OH	Hydroxyl	- 1	1.50	
OME	Methylate	- 1		
OPR	Propylate	- 1		
PB	Lead II (Plumbous)	2	1.20	186
PENH3	Pentylammonium	1		
PBOHNH3	Pentanolammonium	1		
PF6	Hexafluorophosphate	- 1		
PHAC	Phenylacetate	- 1		
PH4AS	Tetraphenylarsonium	1	4.54	76
PH4B	Tetraphenylborate	- 1	4.94	
PH4N	Tetraphenylammonium	1		
PH4P	Tetraphenylphosphonium	1	4.50	130
PH4SB	Tetraphenylantimonium	1	4.60	130
PI	Picrate	- 1	5.00	
PNCLPHAT	Pentachlorophenolate	- 1		
PNIBAT	P-Nitrobenzoate	- 1		
PNIPHAT	P-Nitrophenolate	- 1		
PO4	Phosphate	- 3		
PR4N	Tetrapropylammonium	1	4.52	124
PROHNH3	Propanolammonium	1		
RB	Rubidium	1	1.48	186
S	Sulfid (Sulphide)	- 2	1.84	186
SC	Scandium	3	0.81	186
SCN	Thiocyanate (Rhodanide)	- 1		
SM	Samarium	3	1.04	186
SO3	Sulfite	- 2		
SO4	Sulfate	- 2	2.30	
SR	Strontium	- 2	1.13	186
S2O3	Thiosulfate	- 2		
TB	Terbium	3	1.00	186
TH	Thorium	4	0.95	186
TiO	Titanyl	2		
TL (1+)	Thallium I (Thallous)	1	1.40	186
TL (3+)	Thallium III (Thallic)	3	0.95	186
TOSYLAT	Tosylate (P-Toluene-sulphonate)	- 1		
UO2	Uranyl	2		
V (3+)	Vanadium III (Vanadols)	3	0.74	186
V (5+)	Vanadium V	5	0.59	186
VO3	Vanadate	- 1		
WO4	Wolframates	- 2		
Y	Yttrium	3	0.93	186
ZN	Zinc	2	0.74	186
ZRO	Zirconyl	2		

Tabelle der Meßarten

Abkürzung	Meßart	Kenn- nummer
LEITFAEH.	Leitfähigkeit	1
KATION-LEIT.	Kationen-Leitfähigkeit	2
ANION-LEIT.	Anionen-Leitfähigkeit	3
KAT.UEBERPZ	Kationen-Überföhrungszahl	4
AN.UEBERPZ	Anionen-Überföhrungszahl	5
OSMOT.KOEF	Osmotischer Koeffizient	6
AKTIV.KOEF	Mittlerer Aktivitätskoeffizient	7
VED.WAERME	Verdünnungswärme	8
VISKOSITAET	Viskosität	9
REL.DK.	Relative Dielektrizitätszahl	10
DICHTE	Dichte	11
A.DIFF.KOEF.	Ambipolarer Diffusions- koeffizient	12
T.DIFF.KOEF.	Thermodynamischer Diffusions- koeffizient	13
TR.KOEF.K-K	Transportkoeffizient Kation- Kation	14
TR.KOEF.A-A	Transportkoeffizient Anion- Anion	15
TR.KOEF.K-A	Transportkoeffizient Kation- Anion	16

Literatur

- /1/ Accascina, P., D'Aprano, A., Triolo, R.: J.Phys.Chem. 71, 3469 (1967)
- /2/ Asmus, E.: Ann.Phys. 35,1 (1939)
- /3/ Atlani, C., Justice, J.-C.: J.Sol.Chem. 4, 955 (1975)
- /4/ Baniewicz, J.J., Maguire, J.A., Shih, P.: J.Phys.Chem. 72, 1960 (1968)
- /5/ Barak, M., Hartley, H.: Z.Phys.Chem. A165, 272 (1933)
- /6/ Barthel, J., Feuerlein, F., Neueder, R., Wachter, R.: J.Sol.Chem. 2, 209 (1980)
- /7/ Behret, H., Schmithals, F.: Z.Naturforsch. 30A, 1497 (1975)
- /8/ Benson, G.C., Gordon, A.R.: J.Chem.Phys. 13, 473 (1945)
- /9/ Beronius, P.: Acta Chem.Scand. A32, 467 (1978)
- /10/ Beronius, P.: Acta Chem.Scand. A32, 887 (1978)
- /11/ Beronius, P.: Acta Chem.Scand. A33, 101 (1979)
- /12/ Beronius, P., Lindbäck, T.: Acta Chem.Scand. A32, 423 (1978)
- /13/ Beronius, P., Lindbäck, T.: Acta Chem.Scand. A33, 397 (1979)
- /14/ Beronius, P., Wikander, G., Nilsson, A.M.: Z.Phys.Chem. (N.F.) 70, 52 (1970)
- /15/ Bhattacharyya, D.N., Lee, C.L., Smid, J., Zwart, S.: J.Phys.Chem. 69, 608 (1965)
- /16/ Bower, V.E., Robinson, R.A.: Trans.Paraday Soc. 59, 1717 (1963)
- /17/ Bremner, R.W., Thompson, T.G.: J.Amer.Chem.Soc. 59, 2372 (1937)
- /18/ Bremner, R.W., Thompson, T.G., Utterback, C.L.: J.Amer.Chem.Soc. 61, 1219 (1939)
- /19/ Broadwater, T.L., Kay, R.L.: J.Phys.Chem. 74, 3802 (1970)
- /20/ Brown, G.H., Venkatesetty, H.V.: J.Phys.Chem. 66, 2075 (1962)
- /21/ Brown, R.D., Bunker, W.B., Marshall, W.L., Secoy, C.H.: J.Amer.Chem.Soc. 76, 1532 (1954)
- /22/ Bury, R., Justice, J.-C.: J.Solution Chem. 6, 349 (1977)
- /23/ Butler, J.P., Schiff, H.I., Gordon, A.R.: J.Chem.Phys. 19, 752 (1951)
- /24/ Campbell, A.N.: Can.J.Chem. 32, 1051 (1954)
- /25/ Campbell, A.N., Bock, E.: Can.J.Chem. 36, 330 (1958)
- /26/ Campbell, A.N., Bock, E.: Can.J.Chem. 36, 1277 (1958)
- /27/ Campbell, A.N., Debus, G.H., Kartzmark, E.M.: Can.J.Chem. 33, 1508 (1955)
- /28/ Campbell, A.N., Gray, A.P., Kartzmark, E.M.: Can.J.Chem. 31, 617 (1953)
- /29/ Campbell, A.N., Kartzmark, E.M.: Can.J.Res.Sect. B28, 49 (1950)
- /30/ Campbell, A.N., Kartzmark, E.M.: Can.J.Chem. 33, 891 (1955)
- /31/ Campbell, A.N., Kartzmark, E.M.: Can.J.Chem. 36, 1325 (1958)
- /32/ Campbell, A.N., Paterson, W.G.: Can.J.Chem. 36, 1004 (1958)
- /33/ Campbell, A.N., Ross, L.: Can.J.Chem. 34, 566 (1956)
- /34/ Cantelo, R.C., Berger, A.J.: J.Amer.Chem.Soc. 52, 2648 (1930)



- /35/ Chacravarti, A.S., Prasad, B.: Trans.Paraday Soc. 35, 1466 (1939)
- /36/ Chambers, J.F.: J.Phys.Chem. 62, 1136 (1958)
- /37/ Chambers, J.F., Stokes, J.M., Stokes, R.H.: J.Phys.Chem. 60, 985 (1956)
- /38/ Chazhoor, J.S., Radhakrishnan, T.P.: Proc.Ind.Acad.Sci. 88A, 53 (1979)
- /39/ Chiu, Y.C., Fuoss, R.M.: J.Phys.Chem. 72 (12), 4123 (1968)
- /40/ Conti, P., Pistoia, G.: J.Phys.Chem. 72, 2245 (1968)
- /41/ Conway, B.E.: Electro-Chemical Data 141 (1952)
- /42/ Cook, B.M., Stokes, R.H.: J.Phys.Chem. 67, 511 (1963)
- /43/ Copley, E.D., Hartley, H.: J.Chem.Soc. 2488 (1930)
- /44/ Coplan, M.A., Fuoss, R.M.: J.Phys.Chem. 68, 1177 (1964)
- /45/ Coplan, M.A., Fuoss, R.M.: J.Phys.Chem. 68, 1181 (1964)
- /46/ Copley, E.D., Murray-Rust, D.M., Hartley, H.: J.Chem.Soc. 2492 (1930)
- /47/ Covington, A.K., Irish, D.E.: J.Chem.Eng.Data 17, 175 (1972)
- /48/ Covington, A.K., Lilley, T.H., Robinson, R.A.: J.Phys.Chem. 72, 2759 (1968)
- /49/ Cox, W.M., WoFenden, J.H.: Proc.Roy.Soc.London A1145, 475 (1934)
- /50/ Cussler, E.L., Fuoss, R.M.: J.Phys.Chem. 71, 4459 (1967)
- /51/ D'Aprano, A., Fuoss, R.M.: J.Phys.Chem. 67, 1704 (1963)
- /52/ D'Aprano, A., Triolo, R.: J.Phys.Chem. 71, 3474 (1967)
- /53/ Daggett, H.M. jr., Blair, E.J., Kraus, C.A.: J.Amer.Chem. Soc. 73, 799 (1951)
- /54/ Darken, L.S., Meier, H.F.: J.Amer.Chem.Soc. 64, 621 (1942)
- /55/ Davies, C.W.: J.Chem.Soc. 432 (1937)
- /56/ Deubner, A., Heise, R.: Ann.Physik 9, 213 (1951)
- /57/ Desnoyers, J.E., Arel, M., Perron, G., Jolicœur, C.: J.Phys.Chem. 73, 3346 (1969)
- /58/ Dye, J.L., Faber, M.P., Karl, D.J.: J.Amer.Chem.Soc. 82, 314 (1960)
- /59/ El-Aggen, A.M., Bradley, D.C., Wardlaw, W.: J.Chem.Soc. 2002 (1958)
- /60/ Elshazly, S., Schmelzer, N.: Sektion Physik, W.-Pieck-Univ. Rostock, unveröffentlicht
- /61/ Erőssy-Gruz, T., Majthenyi, L., Kugler, E.: Acta Chim.Hung. 37, 293 (1963)
- /62/ Evans, D.F., Gardam, P.: J.Phys.Chem. 72, 3281 (1968)
- /63/ Evans, D.F., Gardam, P.: J.Phys.Chem. 73, 158 (1969)
- /64/ Evans, D.F., Kay, R.L.: J.Phys.Chem. 70, 366 (1966)
- /65/ Evans, D.F., Kay, R.L.: J.Phys.Chem. 70, 370 (1966)
- /66/ Evans, D.F., Zawoycki, C., Kay, R.L.: J.Phys.Chem. 69, 2376 (1965)
- /67/ Evers, E.C., Knox, A.G.: J.Amer.Chem.Soc. 73, 1739 (1951)
- /68/ Fabry, T.L., Fuoss, R.M.: J.Phys.Chem. 68, 971 (1964)
- /69/ Fabry, T.L., Fuoss, R.M.: J.Phys.Chem. 68, 974 (1964)
- /70/ Fernandez-Prini, R., Prue, J.E.: Trans.Paraday Soc. 62, 1252 (1966)
- /71/ Pink, W., Gross, P.: Monatsheft Chemie 63, 271 (1933)
- /72/ Foster, N.G., Amis, E.S.: Z.Phys.Chem. (N.F.) 3, 365 (1955)
- /73/ Foster, N.G., Amis, E.S.: Z.Phys.Chem. (N.F.) 7, 360 (1956)
- /74/ Foster, . . : Physic.Rev. 8, 257 (1899)

- /75/ Frazer, J.E., Hartley, H.: Proc.Royal.Soc. A109, 351 (1925)
- /76/ Friedman, H.L., Zebolsky, D.M., Kalman, E.: J.Solution Chem. 5, 8536 (1976)
- /77/ Fuoss, R.M., Kraus, C.M.: J.Amer.Chem.Soc. 55, 21 (1933)
- /78/ Garnsey, R., Prue, J.E.: Trans.Paraday Soc. 62, 1265 (1966)
- /79/ Goffredi, M., Shedlovsky, T.: J.Phys.Chem. 71, 2176 (1967)
- /80/ Goffredi, M., Shedlovsky, T.: J.Phys.Chem. 71, 4436 (1967)
- /81/ Goldberg, R.N., Nuttall, R.L.: J.Phys.Chem.Ref.Data 7, 263 (1978)
- /82/ Goldberg, R.N., Nuttall, R.L., Staples, B.R.: J.Phys. Chem.Ref.Data 8, 923 (1979)
- /83/ Goncalves, P.A., Kestin, J.: Ber.Bunsen-Ges.für Phys. Chem. 81, 11 (1977)
- /84/ Graham, J.R., Kell, G.S., Gordon, A.R.: J.Amer.Chem.Soc. 79, 2352 (1957)
- /85/ Gunning, H.E., Gordon, A.R.: J.Chem.Phys. 10, 126 (1942)
- /86/ Gunning, H.E., Gordon, A.R.: J.Chem.Phys. 11, 18 (1943)
- /87/ Haase, R., Sauermann, P.-F., Dücker, K.-H.: Z.Phys.Chemie N.F. 46, 140 (1965)
- /88/ Haase, R., Sauermann, P.-F., Dücker, K.-H.: Z.Phys.Chemie N.F. 47, 224 (1965)
- /89/ Hamm, R.E., Thompson, T.G.: J.Amer.Chem.Soc. 63, 1418 (1941)
- /90/ Hamer, W.J., Wu, Y.-C.: J.Phys.Chem.Ref.Data 1, 1047 (1972)
- /91/ Harned, H.S., Ehlers, R.W.: J.Amer.Chem.Soc. 55, 2179 (1933)
- /92/ Harned, H.S., Owen, B.B.: Electrolytic Solutions, London 1958
- /93/ Hawes, J.L., Kay, R.L.: J.Phys.Chem. 69, 2420 (1965)
- /94/ Herrington, T.H., Jackson, R.J.: J.Chem.Soc. Faraday 1 69, 1635 (1973)
- /95/ Hlasko, M.: Bull.Int.Acad.Polon.Scie.Letters, Ser.A (1928) 181
- /96/ Hood, G.R., Hohlfelder, L.P.: Physics 4, 208 (1933)
- /97/ Hood, G.R., Hohlfelder, L.P.: J.Phys.Chem. 38, 979 (1934)
- /98/ Hopkins, H.P. jr., Jahagirdar, D.V., Norman, A.B.: J.Solution Chem. 8, 147 (1979)
- /99/ Hovorka, F., Simms, J.C.: J.Amer.Chem.Soc. 59, 92 (1937)
- /100/ Hughes, E.D., Ingold, C.K., Patai, S., Pocker, Y.: J.Chem.Soc. 1206, (1957)
- /101/ Jain, R.P., Pandey, J.D.: Z.Phys.Chem. N.F. 89, 74 (1974)
- /102/ Jantsch, G., Grubitsch, H., Lischka, E.: Z.Elektrochem. 43, 293 (1937)
- /103/ Jenkins, I.L., Monk, C.B.: J.Amer.Chem.Soc. 72, 2695 (1950)
- /104/ Jarvis, R.E., Muir, D.R., Butler, J.P., Gordon, A.R.: J.Amer.Chem.Soc. 75, 2855 (1953)
- /105/ Johnson, C.R., Hullett, G.A.: J.Amer.Chem.Soc. 57, 256 (1935)
- /106/ Jones, G., Bickford, C.F.: J.Amer.Chem.Soc. 56, 602 (1934)
- /107/ Jones, G., Bradshaw, B.D.: J.Amer.Chem.Soc. 55, 1780 (1933)
- /108/ Jones, G., Colvin, J.H.: J.Amer.Chem.Soc. 62, 338 (1940)

- /109/ Jones, G., Dole, M.: J.Amer.Chem.Soc. 52, 2245 (1930)
- /110/ Jones, G., Fornwalt, H.J.: J.Amer.Chem.Soc. 58, 649 (1936)
- /111/ Jones, G., Prendergast, M.J.: J.Amer.Chem.Soc. 59, 731 (1937)
- /112/ Jones, G., Schuyler, M.C.: J.Amer.Chem.Soc. 59, 484 (1937)
- /113/ Jones, G., Stauffer, R.E.: J.Amer.Chem.Soc. 58, 2558 (1936)
- /114/ Jones, G., Stauffer, R.E.: J.Amer.Chem.Soc. 62, 335 (1940)
- /115/ Jones, G., Talley, S.K.: J.Amer.Chem.Soc. 55, 624 (1933)
- /116/ Jones, G., Talley, S.K.: J.Amer.Chem.Soc. 55, 4124 (1933)
- /117/ Jones, J.H.: J.Amer.Chem.Soc. 66, 1115 (1944)
- /118/ Jones, J.H.: J.Amer.Chem.Soc. 67, 855 (1945)
- /119/ Jones, J.H.: J.Amer.Chem.Soc. 68, 240 (1946)
- /120/ Jones, J.H.: J.Amer.Chem.Soc. 69, 2066 (1947)
- /121/ Joy, W.E., Wolfenden, J.H.: Proc.Roy.Soc. A134, 413 (1932)
- /122/ Justice, J.-C.: J.Chim.Phys. (France) 65, 353 (1968)
- /123/ Justice, J.-C., Fuoss, R.M.: J.Phys.Chem. 67, 1707 (1963)
- /124/ Justice, J.-C., Justice, M.-C.: Faraday Disc. of the Chem. Soc. 64, 265 (1978)
- /125/ Justice, M.-C.: These de Doctorat, Universit t Paris 1967
- /126/ Justice, M.-C., Bury, R., Justice, J.-C.: Electrochim. Acta 16, 687 (1971)
- /127/ Justice, M.-C., Justice, J.-C.: Compt.Rend.Ser.C 262, 8 608 (1966)
- /128/ Kahlweit, M.: Z.Phys.Chem. (N.F.) 21, 436 (1959)
- /129/ Kaminsky, M.: Z.Phys.Chem. (N.F.) 5, 154 (1955)
- /130/ Kalfoglon, G., Bowen, L.H.: J.Phys.Chem. 73, 2728 (1969)
- /131/ Kaminsky, M.: Z.Phys.Chem. (N.F.) 8, 173 (1956)
- /132/ Kaminsky, M.: Z.Phys.Chem. (N.F.) 12, 206 (1957)
- /133/ Kay, R.L., Vituccio, T., Zawoyski, C., Evans, D.F.: J.Phys.Chem. 70, 2336 (1966)
- /134/ Kay, R.L., Broadwater, T.L.: J.Solution Chem. 5, 57 (1976)
- /135/ Kay, R.L., Evans, D.F.: J.Phys.Chem. 70, 2325 (1966)
- /136/ Kay, R.L., Evans, D.F., Cunningham, G.P.: J.Phys.Chem. 73, 3322 (1969)
- /137/ Kay, R.L., Hales, B.J., Cunningham, G.P.: J.Phys.Chem. 71, 3925 (1967)
- /138/ Kay, R.L., Hawes, J.L.: J.Phys.Chem. 69, 2787 (1965)
- /139/ Kay, R.L., Zawoyski, C., Evans, D.F.: J.Phys.Chem. 69, 4208 (1965)
- /140/ Kohlrausch, F.: Gesammelte Abhandlungen Teil 2, Das Leitverm. der Elektrolyte, Leipzig 1911
- /141/ Kohlrausch, F., Holborn, L.: Das Leitvermoeegen Der Elektrolyte, 2. Auflage, Leipzig 1916
- /142/ Kohlrausch, F., Maltby, U.: Berl.Sitzber. 665 (1899)
- /143/ Kohlrausch, F., Steinwehr, .: Berl.Sitzber. 581 (1902)
- /144/ Krieger, K.A., Kilpatrick, M.: J.Amer.Chem.Soc. 59, 1878 (1937)
- /145/ Krieger, K.A., Kilpatrick, M.: J.Amer.Chem.Soc. 64, 7 (1942)
- /146/ Kunze, R.W., Fuoss, R.M.: J.Phys.Chem. 67, 385 (1963)
- /147/ Kunze, R.W., Fuoss, R.M.: J.Phys.Chem. 67, 911 (1963)
- /148/ Kunze, R.W., Fuoss, R.M.: J.Phys.Chem. 67, 914 (1963)
- /149/ Lange, J.: Z.Phys.Chemie A168, 147 (1934)
- /150/ Lange, J.: Z.Phys.Chemie A177, 193 (1936)
- /151/ Landolt-Boernstein, 6. Auflage BD7, Teil 2 (1966)



- /152/ Lasselle, P.A., Aston, J.G.: J.Amer.Chem.Soc. 55, 3067 (1933)
- /153/ Laurence, V.D., Wolfenden, J.H.: J.Chem.Soc. 1144 (1934)
- /154/ Liley, T.H., Scat, R.P.: J.Chem.Thermodyn. 6, 1015 (1974)
- /155/ Lind, J.E., Fuoss, R.M.: J.Phys.Chem. 65, 999 (1961)
- /156/ Lind, J.E., Fuoss, R.M.: J.Phys.Chem. 65, 1414 (1961)
- /157/ Lind, J.E., Fuoss, R.M.: J.Phys.Chem. 66, 1727 (1962)
- /158/ Lindbäck, T., Beronius, P.: Acta Chem.Scand. A34, 709 (1980)
- /159/ Lindenbaum, S., Boyd, G.E.: J.Phys.Chem. 68, 911 (1964)
- /160/ Lindenbaum, S., Rush, R.M., Robinson, R.A.: J.Chem.Thermodyn. 4, 381 (1972)
- /161/ Lindsay, W.T. jr.: J.Phys.Chem. 66, 1341 (1962)
- /162/ Lindsay, W.T. jr.: J.Solution Chem. 1, 45 (1972)
- /163/ Li, N.C.C., Fang, H.: J.Amer.Chem.Soc. 64, 1544 (1942)
- /164/ Longhi, P. et al.: J.Chem.Thermodyn. 6, 227 (1974)
- /165/ Luder, W.F., Kraus, P.B., Kraus, C.A., Fuoss, R.M.: J.Amer.Chem.Soc. 58, 255 (1936)
- /166/ Martel, R.W., Kraus, C.A.: Proc.Natl.Acad.Sci.U.S. 41, 9 (1955)
- /167/ Matesich, M.A., Nadas, J.A., Evans, D.F.: J.Phys.Chem. 74, 4568 (1970)
- /168/ McDowell, M.J., Kraus, C.A.: J.Amer.Chem.Soc. 73, 3293 (1951)
- /169/ Mercier, P.L., Kraus, C.A.: Proc.Natl.Acad.Sci.U.S. 41, 1033 (1955)
- /170/ Mikulin, G.I.: Fragen der physikalischen Chemie von Elektrolytlösungen (russ.), Leningrad 1968
- /171/ Money, R.W., Davies, C.W.: Trans.Paraday Soc. 28, 609 (1932)
- /172/ Monk, C.B.: J.Amer.Chem.Soc. 70, 3281 (1948)
- /173/ Murata, H.: Bull.Chem.Soc. Japan 3, 47 (1928)
- /174/ Nickels, A., Allmand, B.: J.Phys.Chem. 41, 861 (1937)
- /175/ Nicolas, M., Reich, R.: J.Phys.Chem. 83, 749 (1979)
- /176/ Nicolas, M., Reich, R.: J.Phys.Chem. 85, 2843 (1981)
- /177/ Nightingale, E.R. jr., Benck, R.F.: J.Phys.Chem. 63, 1777 (1959)
- /178/ Nomura, H. et al.: Nippon Kagaku Kaisei 3, 438 (1973)
- /179/ Owen, B.B., Sweeton, F.H.: J.Amer.Chem.Soc. 63, 2811 (1941)
- /180/ Owen, B.B., Zeldes, H.: J.Chem.Phys. 18, 1083 (1950)
- /181/ Parfitt, G.D., Smith, A.L.: Trans.Parad.Soc. 59, 257 (1963)
- /182/ Parker, H.C.: J.Amer.Chem.Soc. 45, 2017 (1923)
- /183/ Parker, V.B.: Thermal Prop.Nat.Stand Ref.Data Ser., NBS 2, Wash. 1965
- /184/ Pawlak, Z., Robinson, R.A., Bates, R.G.: J.Solution Chem. 7, 631 (1978)
- /185/ Pedersen, L.G., Amis, E.S.: Z.Phys.Chemie (N.F.) 36, 199 (1965)
- /186/ Periodic Table of Elements, Sci.Lab.Inst., Appl.Chem. (SARGENT)
- /187/ Pethybridge, A.D., Spiers, D.J.: J.C.S.Paraday I 73, 768 (1977)
- /188/ Pethybridge, A.D., Taba, S.S.: Faraday Disc.Chem.Soc. 64, 274 (1978)
- /189/ Petrucci, S., Hemmes, P., Battistini, M.: J.Amer.Chem.Soc. 89, 5552 (1967)



- /190/ Berechnet nach: Pitzer, K.S., Kim, J.J.: J.Amer.Chem.Soc. 96, 5701 (1974)
- /191/ Platford, R.F.: J.Chem.Eng.Data 18, 216 (1973)
- /192/ Randall, M., Scalione, C.C.: J.Amer.Chem.Soc. 49, 1486 (1927)
- /193/ Renard, E., Justice, J.-C.: J.Solution Chem. 3, 633 (1974)
- /194/ Reynolds, M.B., Kraus, C.A.: J.Amer.Chem.Soc. 70, 1709 (1948)
- /195/ Robinson, R.A., Davies, C.W.: J.Chem.Soc. 574 (1937)
- /196/ Robinson, R.A., Stokes, H.R.: Electrolyte Solutions, London 1959
- /197/ Rush, R.M.: Report ORNL-4402 (1969) Oak Ridge, Tenn.
- /198/ Savedoff, L.G.: J.Amer.Chem.Soc. 88, 664 (1966)
- /199/ Saxton, B., Langer, T.W.: J.Amer.Chem.Soc. 55, 3638 (1933)
- /200/ Scatchard, G., Prentiss, S.S.: J.Amer.Chem.Soc. 54, 2696 (1932)
- /201/ Scatchard, G., Prentiss, S.S.: J.Amer.Chem.Soc. 55, 4355 (1933)
- /202/ Scatchard, G., Prentiss, S.S.: J.Amer.Chem.Soc. 56, 807 (1934)
- /203/ Schiavo, S., Fuoss, R.M., Marrosu, G., Guida, G.: J.Solution Chem. 8, 557 (1979)
- /204/ Schulze, H.A.: Dissertation Univ. Rostock 1969
- /205/ Sementschenko, W.K., Serpinsky, W.W.: Z.Phys.Chem. A167, 197 (1933)
- /206/ Shedlovsky, T.: J.Amer.Chem.Soc. 54, 1411 (1932)
- /207/ Shedlovsky, T., Brown, A.S.: J.Amer.Chem.Soc. 56, 1066 (1934)
- /208/ Shedlovsky, T., Longworth, L.G.: Principles of electrochemistry (1939) 339
- /209/ Shimizu, K., Tsuchihashi, N., Kondo, Y.: Rev.Phys.Chem. Japan 47, 80 (1977)
- /210/ Shkodin, A.M., Sadownitschaja, L.P., Podoljanko, W.A.: Elektrochimija 4, 718 (1968)
- /211/ Sivertz, V., Reitmeier, R.E., Tartar, H.V.: J.Amer.Chem. Soc. 62, 1379 (1940)
- /212/ Smith, W.P.: Univ.S.Dakota Bull.Proc. 31, 237 (1952)
- /213/ Spedding, F.H., Pikal, M.J.: J.Phys.Chem. 70, 2340 (1966)
- /214/ Stokes, R.H.: Trans.Faraday Soc. 44, 295 (1948)
- /215/ Stokes, R.H.: J.Phys.Chem. 65, 1242 (1961)
- /216/ Strong, L.E., Kraus, G.A.: J.Amer.Chem.Soc. 72, 166 (1950)
- /217/ Swain, C.G., Evans, D.P.: J.Amer.Chem.Soc. 88, 383 (1966)
- /218/ Tewari, P.H., Johari, G.P.: J.Phys.Chem. 69, 2857 (1965)
- /219/ Tissier, M., Douheret, G.: J.Solution Chem. 7, 87 (1978)
- /220/ Toshiaki, I.: Sci.papers Inst.Phys.Chem.Research 65, 95 (1971)
- /221/ Treiner, C., Justice, J.-C., Fuoss, R.M.: J.Phys.Chem. 68, 3886 (1964)
- /222/ Walden, P., Birr, E.J.: Z.Phys.Chem. 144A, 269 (1929)
- /223/ Walden, P., Ulich, H.: Z.Phys.Chem. 106, 49 (1923)
- /224/ Weiland, H.J.: J.Amer.Chem.Soc. 40, 131 (1918)
- /225/ Whorton, R., Amis, E.S.: Z.Phys.Chem. (NF) 17, 300 (1958)
- /226/ Wikander, G., Isacson, U.: Z.Phys.Chem. (NF) 81, 57 (1972)
- /227/ Wishaw, B.D., Stokes, R.H.: J.Amer.Chem.Soc. 76, 2065 (1954)
- /228/ Yokoyama, H., Yamatera, H.: Bull.Chem.Soc.Japan 48, 2708 (1975)

- /229/ Gellings, P.J.: Reicueil Trav.Chim. Pays-Bas 75, 209 (1956)  
/230/ Liu, C., Lindsay, W.T. jr.: J.Solution Chem. 1, 45 (1972)  
/231/ Longworth, L.G.: J.Amer.Chem.Soc. 54, 274 (1932)  
/232/ Pepela, C.N., Dunlop, P.J.: J.Chem.Thermodyn. 6, 115 (1974)

## 9. Teilprogrammsystem EXCOND

Dieses Programmsystem dient zur Bestimmung der molaren Leitfähigkeit elektrolytischer Lösungen aus primären experimentellen Eingabegrößen (z.B. gewogene Massen, Kennnummern von Widerständen, Ionen, Lösungsmittel). Das Programm ist so gestaltet, daß eine sofortige Anpassung an eine Leitfähigkeitstheorie vorgenommen wird und daß am Ende der Meßsatz in der Standardform im SAFE und als gestanzte Lochkarten vorliegt.

Um die Möglichkeiten des Programmsystems anzudeuten, ist der Programmablauf kurz erläutert worden. Der gesamte Ablauf wird über die erste einzulesende Datenkarte gesteuert. Die darauf enthaltenen zehn Größen (IPR<sub>i</sub> mit  $i=1,2,\dots,10$ ) dienen als Schalter für die Programmverzweigungen. Standard ist IPR<sub>1</sub>=0  $i=1,2,\dots,10$ .

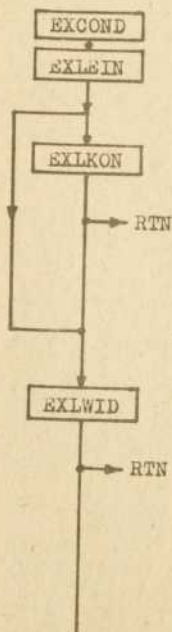
### Programmablaufplan

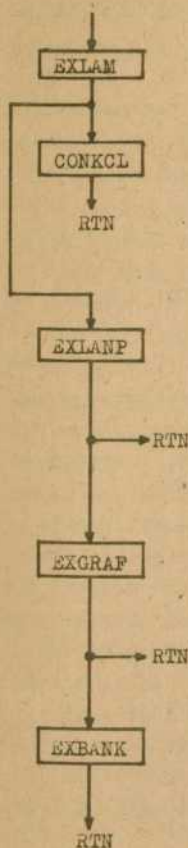
#### Hauptprogramm

Je nach vorgegebener Version ist hier eine Dateneingabe für die Konzentrationsbestimmung und/oder die Widerstandsanpassung möglich.

Hier wird die Berechnung der Konzentrationen und Dichten der Lösungen realisiert. Falls keine Daten zur Widerstandsbestimmung eingegeben wurden, wird der RTN-Ausgang benutzt. Danach kann eine Ankopplung an Auswertprogramme für andere Meßgrößen elektrolytischer Lösungen erfolgen (z.B. Viskosität, Dichte oder Dielektrizitätszahl).

Es werden die frequenzabhängigen Widerstände berechnet, und es sind verschiedene Varianten für eine Extrapolation auf  $R_E(0)$  möglich. Falls EXLKON übersprungen wurde, werden vom gesamten Programm nur Informationen über die elektrische Messung verarbeitet, und es wird der RTN-Ausgang benutzt. Diese Variante wird bei der Eichung neuer Widerstandsnormale benutzt.





Wird nur abgearbeitet, falls EXLKON und EXLWID ausgeführt wurden, und bestimmt die molare Leitfähigkeit.

Die Abarbeitung von CONKCL erfolgt nur bei der Eichung neuer Meßzellen. Es werden entsprechend den bestimmten Konzentrationen und Widerständen die Zellkonstanten berechnet. Die dazu notwendige KCl-Leitfähigkeit wird nach 7 verschiedenen Standardgleichungen ermittelt.

Hier wird mit einer vorgegebenen Anzahl von Meßpunkten eine Auswertung mit der KKE3&MAL-Leitfähigkeitstheorie ( $THEORIE(1)=01.09.06.02.04$ ) vorgenommen. Es werden durch Anpassung  $\Lambda_0$ ,  $a$  und  $J_{3/2}$  bestimmt;  $K_A$  wird berechnet. Falls keine graphische Darstellung gewünscht wird, muß der RTN-Ausgang benutzt werden.

Es erfolgt eine Reihe von verschiedenen graphischen Darstellungen der Ergebnisse dieser Meßreihe und eine Verknüpfung mit eventuell in SAFE bereits vorhandenen Meßreihen. Falls keine sofortige Eintragung ist das SAFE-System erwünscht ist, ist der RTN-Ausgang zu benutzen. Hiermit wird eine sofortige Eintragung der Meßreihe in das SAFE-System vorgenommen. Der Meßblock wird im Standardformat auf Lochkarten ausgestanzt.

Aufgrund der Dimensionierung der Felder sind einige Einschränkungen für die Durchführung der Messungen notwendig:

- in einer Meßreihe können nur 20 verschiedene Konzentrationen abgearbeitet werden (einschließlich des reinen Lösungsmittels)
- Zu jeder Konzentration kann die Widerstandsmessung bei maximal 10 verschiedenen Frequenzen erfolgen
- in einer Meßreihe können maximal 5 verschiedene Stammlösungen verwendet werden
- eine Konzentrationserhöhung der Lösung ist nur durch die Zugabe von Salz oder Stammlösung möglich.



Nach dem Aufruf von EXCOND können, je nach IPRI, die folgenden Unterprogramme aktiviert werden:

- (1) EXLEIN realisiert die gesamte Dateneingabe, die Bereitstellung von Informationen zum vermessenen Elektrolytsystem aus dem FIXDAT-System und eine Korrektur der eingelesenen Daten (z.B. wird an den Massen eine Auftriebskorrektur durchgeführt).
- (2) EXLKON berechnet die Konzentrationen und die Dichte der Lösung.
- (3) EXLWID bestimmt die frequenzabhängigen gemessenen Widerstände und ermittelt durch ein Anpassprogramm die Elektrolytwiderstände.
- (4) Im Programmteil EXLAM werden die Ergebnisse aus EXLKON und EXLWID miteinander zur molaren Leitfähigkeit verknüpft, und es wird ein komplettes Meßprotokoll ausgegeben.
- (5) EXLANP gestattet es, sofort eine Auswertung der gemessenen Leitfähigkeiten mit der KKE3&MAL-Theorie vorzunehmen. Im Programm
- (6) EXGRAF werden die relativen Abweichungen der theoretischen von den experimentellen Werten graphisch dargestellt. Falls zu dem vermessenen experimentellen System in SAFE bereits Datenblöcke abgespeichert sind, werden in einer zweiten Graphik die Leitfähigkeiten direkt gegen die Konzentration aufgetragen. Dabei werden die eigenen mit den bereits vorhandenen gemeinsam dargestellt. In einem dritten Schritt werden die in SAFE vorhandenen Meßdatenblöcke mit KKE3&MAL ausgewertet und die relativen Abweichungen von  $(\Lambda_i^{th} - \Lambda_i^{ex}) / \Lambda_i^{th}$  gemeinsam mit den Abweichungen der eigenen Messung dargestellt. Das Programm
- (7) EXBANK realisiert eine sofortige Eintragung in die Datenbank und das Ausstanzen des Meßblockes im Standardformat.

Für eine ausführliche Darstellung mit sämtlichen Formeln und Nutzerhinweisen verweisen wir auf das Manuskript "Beschreibung eines EDV-Programmsystems zur Auswertung experimenteller Daten der elektrischen Leitfähigkeit elektrolytischer Lösungen" von Grigo, Einfeldt und Schmelzer.

Publikationen, die in Zusammenhang mit SAFE stehen

- Timm, W.: Diplomarbeit, W.-Pieck-Univ. Rostock 1974
- Bich, E.: Diplomarbeit, W.-Pieck-Univ. Rostock 1974
- Baudisch, Ch.: Diplomarbeit, W.-Pieck-Univ. Rostock 1977
- Blockus, R.: Diplomarbeit, W.-Pieck-Univ. Rostock 1978
- Gawenda, R.: Diplomarbeit, W.-Pieck-Univ. Rostock 1979
- Wenzl, P.: Diplomarbeit, W.-Pieck-Univ. Rostock 1981
- Geisler, D.: Dissertation A, W.-Pieck-Univ. Rostock 1975
- Feistel, R.: Dissertation A, W.-Pieck-Univ. Rostock 1976
- Scherwinski, K.: Dissertation A, W.-Pieck-Univ. Rostock 1980
- Grigo, M.: Dissertation A, W.-Pieck-Univ. Rostock 1982
- Sändig, R.: Dissertation B, W.-Pieck-Univ. Rostock 1980
- Ebeling, W., Feistel, R.: Chem.Phys.Lett. 36, 404 (1975)
- Geisler, D., Feistel, R., Sändig, R.: WZ WPU Rostock 24, 687 (1975)
- Bich, E., Ebeling, W., Krienke, H.: Z.phys.Chemie 257, 549 (1976)
- Ebeling, W., Feistel, R., Geisler, D.: Z.phys.Chemie 257, 337 (1976)
- Sändig, R., Feistel, R., Ulbricht, H., Baudisch, Ch., Künstner, H.: WZ WPU Rostock 26, 635 (1977)
- Ebeling, W., Feistel, R., Kelbg, G., Sändig, R.: J.Non-Equil. Thermodyn. 3, 11 (1978)
- Wiechert, H., Krienke, H., Feistel, R., Ebeling, W.: Z.phys. Chemie 259, 1057 (1978)
- Ebeling, W., Feistel, R., Sändig, R.: J.Sol.Chem. 8, 53 (1979)
- Grigo, M., Einfeldt, J., Ebeling, W.: WZ WPU Rostock 31, 15 (1982)
- Grigo, M., Sändig, R.: WZ WPU Rostock 31, 7 (1982)

Die gelegentlich angeführten Zitate von Murphy sind entnommen aus:

Arthur Block: "Murphy's law and other reasons why things go  
Suo:m"

"Murphy's Law Book Two more reasons why things  
go Suo:m"

Price/Stern/Sloan Publishers, Inc., Los Angeles, 1982









the scale towards document

$\rho$ (25°C)	$\eta$ (25°C)	Lit.
6.27	0.01963	4
9.41	0.03203	4
9.41	0.02079	5,6
7.45	0.02589	7
5.04	0.03475	7
4.7	0.035	8
2.5	0.046	8
1.1	0.0555	8
9.85	0.073	8
7.7	0.1015	8
20.47	0.00304	9
2.2726	0.005961	10,19
37.78	0.00919	11,12
36.71	0.00796	11,13
25.19	0.01211	14
18.014	0.003774	15
17.39	0.01675	14,16
12.9	0.0154	17
12.01	0.00879	14,18

go and N.Schmelzer: *Exper.Techn.* 31, H1 (1983)  
 lines: *J.Phys.Chem.* 71, 1158 (1967)  
 ater and H.-J.Gores: in *Mod.Aspects of*  
 13 Plenum (1979)  
 Justice: *J.Solution Chem.* 4, 955 (1975)  
 L.W.Bahe: *J.Chem.Phys.* 40, 3058 (1964)  
 Nadas and D.F.Evans: *J.Phys.Chem.* 74,

ardam: *J.Phys.Chem.* 73, 158 (1969)  
 Sadrovnichaya and V.A.Podolyanko: *Electro-*  
 68)  
 C.A.Kraus: *J.Amer.Chem.Soc* 70, 1709 (1948)  
 r.Chem.Soc. 47, 626 (1924)  
 P.Gormley: *J.Amer.Chem.Soc.* 73, 5731 (1951)  
 over and P.G.Sears: *J.Phys.Chem.* 60, 1076

Sherrington: *Trans.Faraday Soc.* 57, 1795

Tait: *Canad.J.Chem.* 45, 1101 (1967)  
 aghes and D.H.Price: *J.Chem.Soc. A*, 603 (1968)  
 Chem.Soc. 634 (1957)  
 W.R.McGregor: *J.Phys.Chem.* 68, 1342 (1964)  
 A.Kraus: *J.Amer.Chem.Soc.* 70, 706 (1948)  
 Mag. 21, 1 (1936); 21, 1008 (1936)

für andere Lösungsmittel und Temperaturen  
 en die im Datenblock vorhandenen Werte für  
 rt.

ETA bewirkt, daß der DKETA-Modul über-

Einfluß auf den DKETA-Modul.

C1 B1 A1 C2 B2 A2 B5 A5 20 18 17 16 11

Patch Reference numbers on ITT

Image Engineering Scan Reference Chart TE263 Serial No.