

Dieses Werk wurde Ihnen durch die Universitätsbibliothek Rostock zum Download bereitgestellt.

Für Fragen und Hinweise wenden Sie sich bitte an: [digibib.ub@uni-rostock.de](mailto:digibib.ub@uni-rostock.de)

---

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



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 unnummiert 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 CGLRELDA Dateinummer=10	18
2.6.2 CGLRELAD Dateinummer=14	19
2.6.3 CGLRELLK Dateinummer=12	20
2.6.4 CGLRELLX Dateinummer=13	20
2.6.5 CGLRGZP Dateinummer=15	20
2.6.6 CGLRSAVE 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	
	- Tabelle der Maßarten	113
	- Literatur	116
		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 Programmierung 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  
gehört Frau Hiltrud Bahlo für das recht mühsame Schreiben  
dieses Manuskriptes.

Abschließend möchten die Autoren aus ihren umfangreichen  
Programmiererfahrungen an SAFE heraus die Gültigkeit der fol-  
genden Murphy'schen Gesetze zur Computerprogrammierung be-  
stätigen:

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 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-Modulen werden durch spezielle Steuerkarten (STK) aktiviert. Somit verfügt der Nutzer von SAFE prinzipiell über alle Teifunktionen von SAFE und kann sich ein Programm, d.h. eine Menge von Modulen, die in einer wohldefinierten Reihenfolge abzuarbeiten sind, selbst mit Hilfe der STK zusammenstellen. Wegen der begrenzten Hauptspeicherkapazität wurden die Modulen, die logisch miteinander in Zusammenhang stehen, zu SAFE-Teilprogrammen zusammengefaßt. In der Variante SAFE 77 sind folgende Teilprogramme enthalten:

1. FIXFIX 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. ELFIT Anpaßprogramm-System (s. Kap. 6).

Hierbei sind FIXFIX 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.

1) 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.

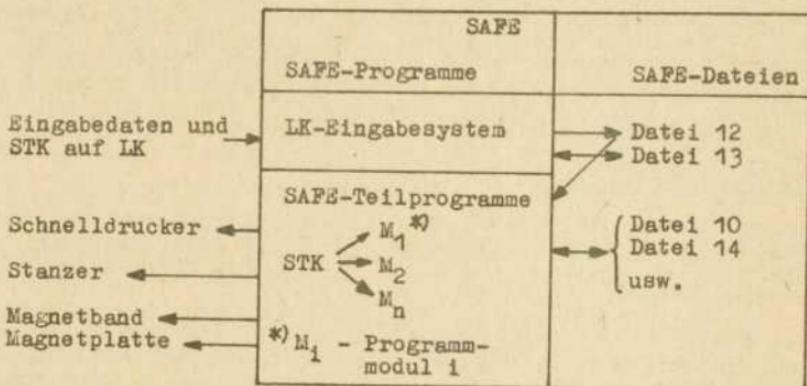


Abb. 2.1: Struktur der Elektrolyt-Datenbank SAFE.

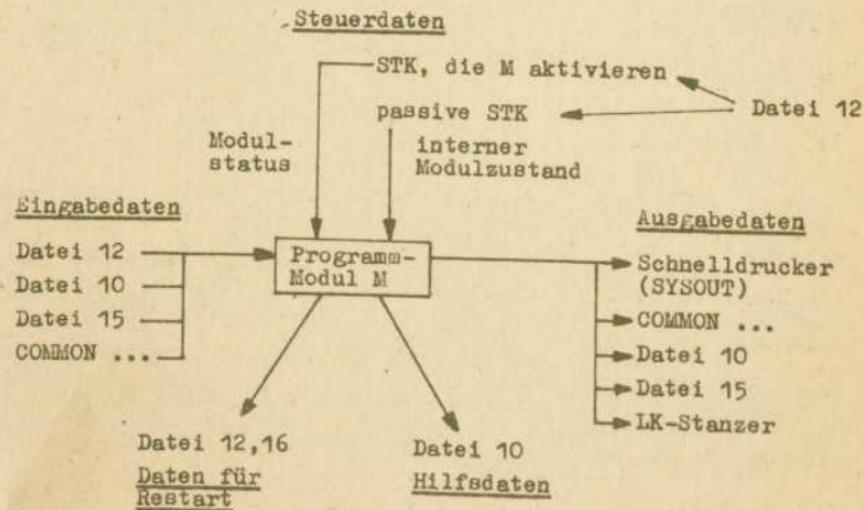


Abb. 2.2: Zusammenarbeit eines Programm-Moduls mit den verschiedenen Datenarten und Dateien.

## 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 Moduls werden i.a. Hilfsdaten 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 Programmzbibliotheken 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 Bearbeitername und eine Kennzahl angegeben. Diese Karte dient dem Schutz der Datenbank vor unerlaubter Nutzung durch Unbefugte. Das Eingabeprogramm überprüft, ob der Bearbeitername 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 Bearbeiter erlaubt. Der Umfang der Zusammenarbeit ist in der Schlüsselzahl codiert. Die Bearbeiter werden in zwei Gruppen eingeteilt - in die Datenbank-Verantwortlichen und in die restlichen Nutzer. Eine Reihe von Modul-Aufrufen 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 Bearbeiter in die Datenbank eingetragen werden dürfen. Dieser Schreibschutz ist notwendig, da nicht jeder Bearbeiter alle spezifischen Bedingungen für das Eintragen eines Daten-Blockes zu einer Messungsart kennt. Für Daten-Blöcke besteht kein Leseschutz, d.h. jeder Bearbeiter 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) } LK-Eingabedaten und bei Bedarf } passive STK	}	<u>SAFE-Glied</u>
*... (aktive STK) } LK-Eingabedaten und bei Bedarf } passive STK		<u>SAFE-Glied</u>

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 (Passive 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 Modulen 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
<b>** DELETE ALL</b>	1 7 (nur für Datenbank-Verantwortliche)
<b>* * DELETE</b>	2 3 7
<b>* * DELETE AND STORE</b>	2 3 5 7
<b>* * DELETE AND COMPUTE</b>	2 3 5 6 7
<b>* * STORE</b>	3 4 5 7
<b>* * COMPUTE</b>	3 4 5 6 7
<b>* * RESTART 1</b>	8
<b>* * RESTART 2</b>	8
1 . . . 10 . . . 20	LK-Spalte

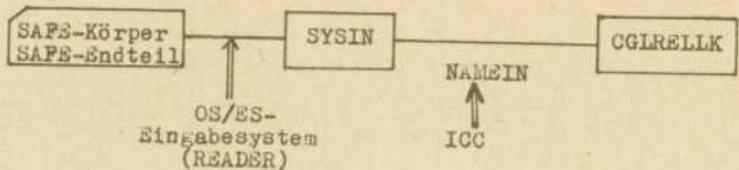
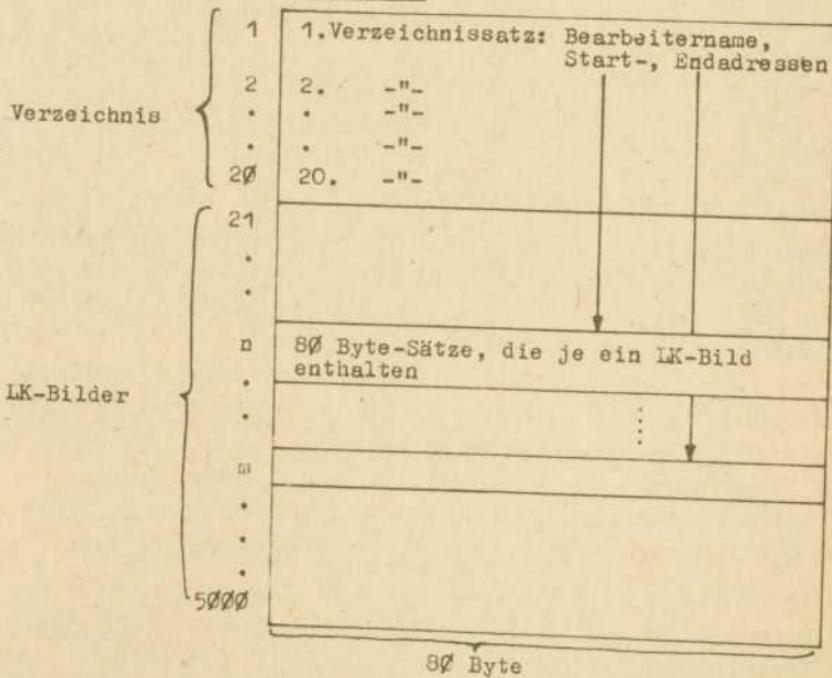

CGLRELLK:


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 Abarbeitung 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 Modulen mit welchem Modulstatus aktiviert werden. Es können maximal 20 Modulen 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 Modulen 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 Modulen dieser Folge werden mit den MCC's überschrieben. Dabei muß innerhalb der MCC's die gleiche Reihenfolge der Modulen 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 Modulen 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)	-R300 CODE (R300)
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	{ 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	{ 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 Formatsteuerung. 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  $E [ + ]$  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.

gen. Der Bearbeiter hat Sorge zu tragen, daß eine gerade Anzahl von J-Spezifikationen verwendet wird, falls A-, E-, D- oder I-Spezifikationen folgen.

Format spezifikation X: Die nächsten m LK-Spalten werden nicht interpretiert.

Format spezifikation /: Die nächste LK wird eingelesen und mit der folgenden Spezifikation beginnend interpretiert. Die Angabe von m ist bedeutungslos und kann entfallen. Diese Spezifikation muß verwendet werden, wenn ein Eingabeelement sich über mehrere LK erstreckt. Dabei ist es nicht möglich, das Symbolfeld für eine Spezifikation über die LK-Spalte 80 hinaus fortzusetzen. Verarbeitet eine FORMAT-PCC mehrere LK, so darf innerhalb dieser LK-Folge keine weitere FORMAT-PCC liegen.

## 2.5 Ende-Anweisungen

Die SCC \*STOP bewirkt, daß das SAFE-Teilprogramm xxxxxx seine Tätigkeit beendet. Dabei werden die zu diesem Jobschritt gehörigen Eintragungen in der LK-Bild-Datei CGLRELLK gelöscht.

Die SCC \*RETURN und die MCC RETURN bewirken, daß das SAFE-Teilprogramm xxxxxx seine Tätigkeit beendet und in das aufrufende Programm gesprungen wird. Dabei bleiben die Eintragungen in der CGLRELLK erhalten.

Mit Hilfe des Ausganges RETURN besteht die Möglichkeit, z.B. nach Aufbau von Überlagerungsstrukturen mehrere Teilprogramme des SAFE-Systems miteinander zu koppeln.

## 2.6 Struktur der SAFE-Dateien

Die SAFE-Teilprogramme arbeiten mit einer Reihe von Direktzugriffsdateien zusammen.

### 2.6.1 CGLRELLA Dateinummer = 10

In dieser Datei befinden sich 10 000 SAFE-Sätze der Länge 176 Byte, die folgenden Aufbau haben:

Byte	1   2	...	1   1   1   1   1   1   1   1   1   1						
		...	6   6   7   7   7   7   7   7   7   7						
		...	8   9   0   1   2   3   4   5   6						
		SAFE-Daten	ISV	ISF	NR				

Die Struktur der Daten in den ersten 168 Byte ist beliebig und wird in den einzelnen Teilprogrammen festgelegt. Alle SAFE-Daten sind in Teilmengen, den Blöcken, zusammengefaßt, wobei jeder

Block eindeutig durch eine Nummer NR (INTEGER\*4-Größe in den Byte 173 - 176 gekennzeichnet ist.  
ISV (INTEGER\*2-Größe in den 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 = Ø.  
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 = Ø.  
Für alle unbelegten SAFE-Sätze gilt NR = Ø.

### 2.6.2 CGLRELAD Dateinummer = 14

In dieser Datei befinden sich 115 Sätze der Länge 176 Byte, die das Adressbuch für die Blöcke der CGLRELDA 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
	IPREI	unbe-	legt	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>	

IPREI ist die Adresse des ersten unbelegten SAFE-Satzes in der CGLRELDA.

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 i der FIXDAT-Nummer i gehört. Das Informationswort Inf<sub>i</sub> wird errechnet zu

$$\text{Inf}_i = 512 * \text{"Anzahl der 4-Byte Worte je FIXDAT-Element"}$$

+ "Anzahl der im FIXDAT-Block enthaltenen Elemente".

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

Aufbau des 2. bis 115. Satzes:

Satz	Byte	Inhalt	
1	1 - 2	Adresse des ersten SAFE-Satzes (KOPF-Satz) zur Datenblocknummer =	1
2	3 - 4	"-"	= 2
	.	.	.
	.	.	.
	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 ... 10000 reserviert sind. Ist ein Daten-Block i nicht definiert, so ist die entsprechende Adresse gleich Ø.

#### 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	Letum (= 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 CGLRGZP 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-Blöckes (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
//FORT.SYSIN DD *
  CALL FIXFIX (&1)
1  STOP
END
/*
//LKED.SYSIN DD *
OVERLAY A
  INSERT STKINP,NAMEIN,XBEGIN,XSTOP,RESTR,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 1.....10.....20...	Beschreibung s. Abschnitt	STK	Modul- name	Modul- nummer	Modul- status
-BESM 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	PIXKAT	6	2
*FIXDAT ADDRESS CATALOG	3.7.2	SCC	PIXAADR	7	0
*RETURN	2.5	SCC		2	0
*STOP	2.5	SCC	XSTOP	1	0

Zum Teilprogramm PIXPIX 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 CGLRELDA 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. verbleibend 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 übergegangen, 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	Ele			N	Worte			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 einge- tragen.

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 befin- det. 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		NBeginn		N	Ende						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.

$N_{\text{Beginn}}$  und  $N_{\text{Ende}}$  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:

$N_{\text{Beginn}} = n$ ,  $N_{\text{Ende}} = n$  oder  $N_{\text{Ende}} = \emptyset$  oder  $N_{\text{Ende}} = \text{Leerz.}$

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

$N_{\text{Beginn}} = n$ ,  $N_{\text{Ende}} = n+k-1$

c) der gesamte FIXDAT-Block soll gestrichen werden:

$N_{\text{Beginn}} = \text{ALL}$ ,  $N_{\text{Ende}} = \text{ALL}$

Diese Anweisung bedeutet, daß alle Informationen für den entsprechenden FIXDAT-Block gelöscht werden. Wird dagegen mit der Variante b) mit  $N_{\text{Beginn}} = 1$ , mit  $N_{\text{Ende}} = \text{Anzahl der Elemente}$  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 Ionenname	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	Bearbeitername 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	...	8Ø
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 Adrefskatalog 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.SATZ). Danach folgen die Adressen dieser FIXDAT-Sätze in der Datei CGLRELDA. 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 Elektrolyttheorien im Teilprogramm ELFIT) geeignet ist.

##### 4.1 Stepaufbau und Datenblock-Definition

Jeder Step zur primären Datenblockverarbeitung hat folgenden Aufbau:

```

//stepname EXEC GCLR001
//FORT.SYSIN DD *
  CALL EINEIN (&1)
1  STOP
  END
Es folgen evtl. die nutzereigenen 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,RESTR
OVERLAY D
  INSERT NAME0,NAMR1,NAME2,NAME3,NAME00,NAME01,NAME02,
        BESMC0D,R300CD
OVERLAY A
  INSERT DATALK
OVERLAY B
  INSERT LKBESM,KZUMXX
OVERLAY B
  INSERT LKESER
OVERLAY B
  INSERT LKMESS

```

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

Start

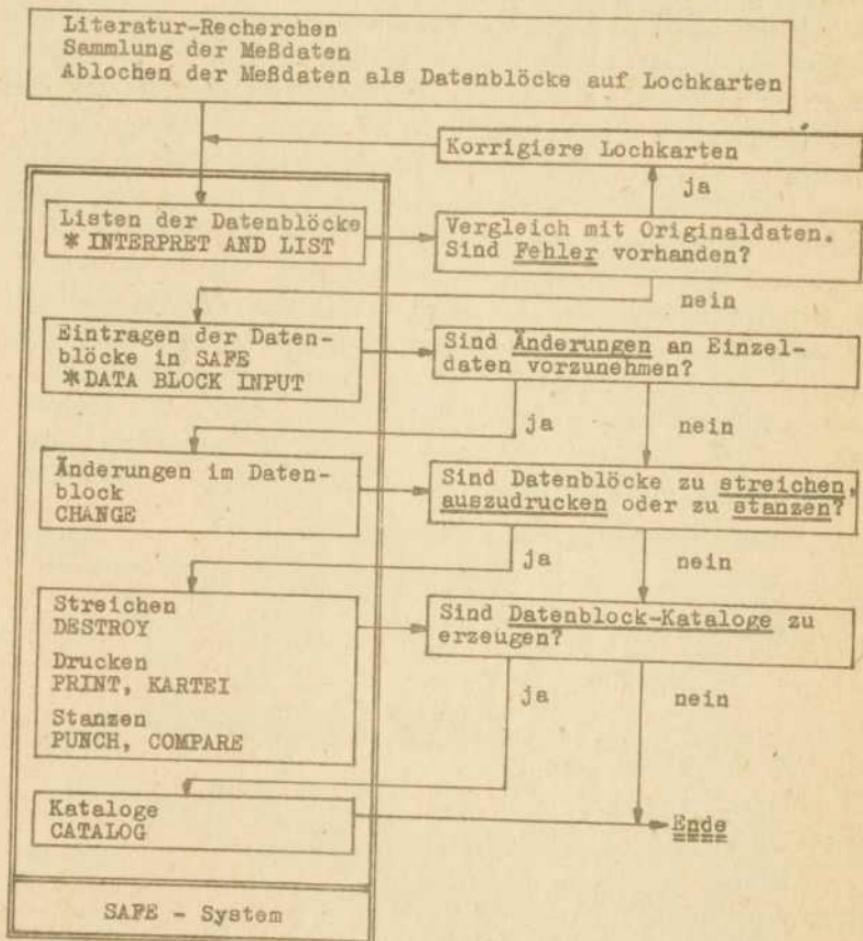


Abb. 4.1: Bearbeitungsschritte bei der primären Datenblockverarbeitung.

```

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 < NUM < 10 000)

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

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

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

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

LSG-MITTEL: Lösungsmittel. Die erlaubten alphanumerischen Schlüsselworte 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:  $I_k = X [(w)][*v]$  mit X: chemisches Ionensymbol

(s. FIXDAT-Katalog) w = j + | j - mit j = 1 ... 9: Wertigkeit  
v: 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.  $Na^2 Na^{+2}$ ) bereits eindeutig bestimmt ist. Gibt es dagegen verschiedenwertige Ionen eines Elements (z.B.  $Fe^{2+}$  oder  $Fe^{3+}$ ), 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 gehörige FIXDAT-Elementnummer. ION ((n+1)...6) = Ø.

LWERT (1...6): Wertigkeit der Ionen X<sub>1...6</sub>.

T: Meßtemperatur (LK: in °C, SAFE: in K). REAL\*4-Größe. Konvention T(K) = T(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. 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. REAL\*4-Größe.

k: Kennzahl für die Überschrift der i. Spalte des Meßdatenblocks. 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 LAENGE<sub>i</sub> > 10, so können die restlichen Meßdatenspalten nicht mit einer Überschrift versehen werden.

CMIN: Minimale Gesamtkonzentration  $c = \sum_a c_a$  im Meßdatenblock. REAL\*4-Größe.

CMAX: Maximale Gesamtkonzentration  $c = \sum_a c_a$  im Meßdatenblock. REAL\*4-Größe.

RELERR: Schätzwert für den relativen Fehler der gesamten Meßserie im Meßdatenblock (kann entfallen). 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 Ø, was besonders bei einer Dezimalexponentenangabe zu beachten ist. Alle 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
-ESER CODE	2.4.3	PCC			
-BESM CODE	2.4.3	PCC			
-R3ØØ 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	XSTOP	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	DESTRY	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, MSNG, LSG, ION(1...6), IWERT(1...6),  
 T, DK, ETA, KZHEAD(1...10), CMIN, CMAX, REVERR, 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	$c_{1,1}$ in Mol/l
.	
n	$c_{n,1}$ in Mol/l (n= Anzahl der verschiedenen Ionen)
$n + 1$	experimenteller Meßwert
$n + 2$	(eventuell) relativer Fehler des exp. Meßwertes
$n + 3$	
...	
LAENGE	beliebiger vom Bearbeiter festgelegter Inhalt

Abb. 4.2: Struktur eines Datenblockes in SAFE.

Abb. 4.41 Die CHANGE-Datenbankkarten

Erläuterung: 11... bzw. jj... Rechtsblindig eingetragene INTEGER<sup>4</sup>-Größen  
 XXXXXXXX yy REAL<sup>4</sup>-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  $m = \lceil 1000/LAENGE \rceil$  (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 Standardablochform 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  $\sum_a c_a / \sum_a \lambda_a$  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).

$k_2$ : Experimenteller Meßwert zur Konzentrationsangabe in Spalte 1

$k_3$  bis  $A_{i,5}$ : beliebig

Gesteuert durch die CCC \*DATA BLOCK INPUT werden solcherart abgelöchte 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

-FSER 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  $(A_{ij})$  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

Da außerdem 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.

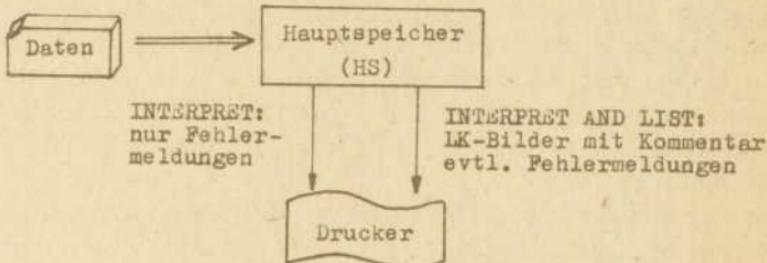
#### 4.4 Einlesen der Datenblock-Lochkarten

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

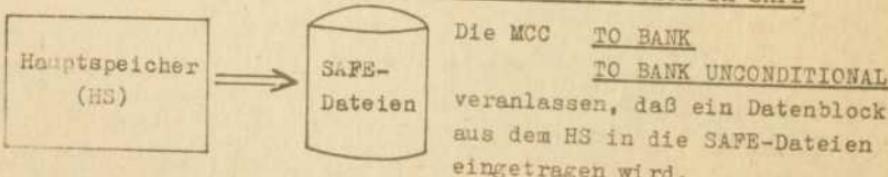
die Kopfblock-Lochkarten unmittelbar vor den Meßdatenblock-Lochkarten liegen oder der Kopfblock wurde schon früher in die SAFE-Dateien eingetragen. Aus dem folgenden Schema ist die unterschiedliche Wirkung der STK zu entnehmen:



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 SAPE



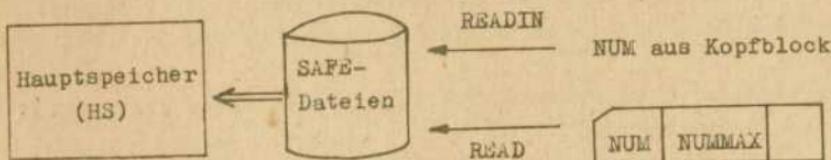
Die MCC NOT TO BANK bewirkt, daß vom TOBANK-Modul kein Schreibversuch unternommen wird.

Wird die MCC TO BANK verwendet und ist unter der Blocknummer, die der Datenblock im HS hat, in SAFE schon ein Datenblock (ist ein Kopfblock) eingetragen, so wird der Schreibversuch abgelehnt. Mit der MCC TO BANK UNCONDITIONAL wird in diesem Fall die Schreibtätigkeit 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.



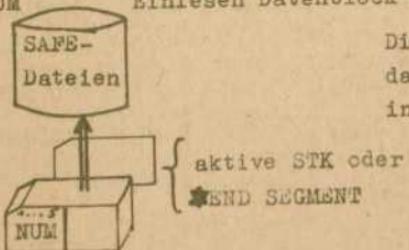
Die MCC NOT READ bewirkt, daß der READ-Modul übergangen wird.

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	NUMMAX	rechts- bündig	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 Ø gesetzt. Ist nur ein Kopfblock gespeichert, so wird der Meßdatenblock im HS gleich Ø gesetzt. Die PCC haben keinen Einfluß auf den READ-Modul.

NUMMAX	Wirkung
Leerzeichen	Einlesen Datenblock NUM
$\geq$ 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 PCC 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 /1/

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

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

###### 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	15020	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)	n(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
Acetophenone	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. Sadrovichaya and V.A. Podolyanko: Elektroshimiya 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. Fowles 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 übergegangen 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 dazu gehörigen Datenspaltenüberschriften KZHEAD  $i,j$  werden gleichartig umsortiert.
3. Die NMESS Meßdatensätze von ( $A_{ij}$ ) werden nach steigender Konzentration bezüglich der  $n, n-1, \dots, 1$ . 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 SAFE 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  $NMESS * LAENGE(neu) \leq 1000$ .

MESS, 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 "IWERT" 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, CMLN, CMAX, RELE: Der Wert von "T", "DK", "ETA", "CMLN", "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 Teste 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 CGLRØØ1-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 A 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.

Abb. 4.3: Ablochvorschrift für Kopfblöcke und Meßdatenblöcke

46

	5	10	15	20	25	30	35	40	45	50	55	60	65	70	75	80
Kopf-Block in ESER-Version																
NUM	HES SUMG		HES SLAENG		REL. ERRI.		K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	K <sub>4</sub>	K <sub>5</sub>	K <sub>6</sub>	K <sub>7</sub>	K <sub>8</sub>	K <sub>9</sub>	
NUM	LSG - MITTEL		T (E)		DK		ETA (P)									
NUM	S AL 2															
NUM	L IT E R A T U R -		Q Q E L L E													
NUMCHIN =	C min		C MAX =		C max											
Standardform der Meßdatensätze (LAENGE = 5 , 1 = 1 . . . NMESS)																
Num	A <sub>i,1</sub>		A <sub>i,2</sub>		A <sub>i,3</sub>		A <sub>i,4</sub>		A <sub>i,5</sub>							

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  $c_+$  und  $c_-$  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	$c_{st} := \frac{c_+ + c_-}{\gamma_+ + \gamma_-}$	$c_a = \gamma_a c_{st}$
2	$c_{ges} := c_+ + c_-$	$c_a = \frac{\gamma_a c_{ges}}{\gamma_+ + \gamma_-}$
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  $\gamma(m)$ ) ins McMillan-Mayer-System (molare Konzentration  $c$ , osmotischer Koeffizient  $g(c)$ , Aktivitätskoeffizient  $\gamma(c)$ ) nach den Formeln:

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

$$g(c) = \frac{\Phi(m)}{1 - \frac{c \Phi_v}{1000} + g \gamma c RT \beta_o}$$

$$\ln \gamma(c) = \ln \gamma_1(m) + \ln \frac{m d_o}{c} - \frac{g^2 \beta_o \gamma c RT}{2} + \frac{g c \Phi_v}{1000}$$

In der letzten Gleichung wurde für den osmotischen Koeffizienten  $g$  näherungsweise  $g=1$  gesetzt.  $\gamma$  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	$\Phi_v^0 \quad [\text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1}]$
22 - 31	$S_v \quad [(\text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1})^{3/2}]$
32 - 41	$B_v \quad [(\text{dm}^3 \cdot \text{mol}^{-1})^2]$

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

Der experimentelle mittlere Aktivitätskoeffizient kann in der Form  $\gamma_i$ ,  $\ln \gamma_i$  bzw.  $1 + \lg \gamma_i$  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  $g^{st}$  bzw.  $\ln \gamma_i$
3. Spalte  $m$
4. Spalte  $\{m\}$  bzw.  $\gamma_i$  bzw.  $\ln \gamma_i$  bzw.  $1 + \lg \gamma_i$
5. Spalte  $\Phi_v$

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

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

#### 4.7 Drucken und Stanzen 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 übergeangen 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 übergeangen 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-PCC gestanzt, wobei LAENGE < 55 gelten muß.

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

wird.

Die PCC haben auf die Tätigkeit der Modulen PRINT, KARTEI und PUNCH keinen Einfluß. Diese Modulen 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  $\sum c_a / \sum n_a$   
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. 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
//FORT.SYSIN DD *
  CALL KATALG(&1)
1  STOP
  END
/*
//LKED.SYSIN DD *
OVERLAY A
  INSERT STKINP,NAMEIN,XBEGIN,XSTOP,RESTR,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 s. Abschnitt	STK	Modul- name	Modul- nummer	Modul- 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 auftreten.

### 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 Kopfblöcke, geordnet nach steigender Blocknummer, ausgegeben.

2. Sortierung nach MLIT: 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. MLIT-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 zweiseitigen Elektrolyten wird also immer zuerst nach dem Kation und dann nach dem Anion sortiert. Bei mehr als zweiseitigen 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 Datenblöcke (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 Elektrolytensystem (bei  $T = \text{const.}$ ) gemessene Daten gleichzeitig mit einer Theorie ausgewertet werden (z. B. Leitfähigkeit von 4 einzelnen Meßdatensätzen von KBr in Methanol mit FHPP). 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  $\psi$ -Theorie). Diese Zyklenanpassung liefert mehr Aussagen als die Summe der einzelnen Auswertungen (z.B. Einzelionenleitfähigkeiten  $\Lambda_{\text{K}^+}^\circ, \Lambda_{\text{Cl}^-}^\circ, \dots$ ).

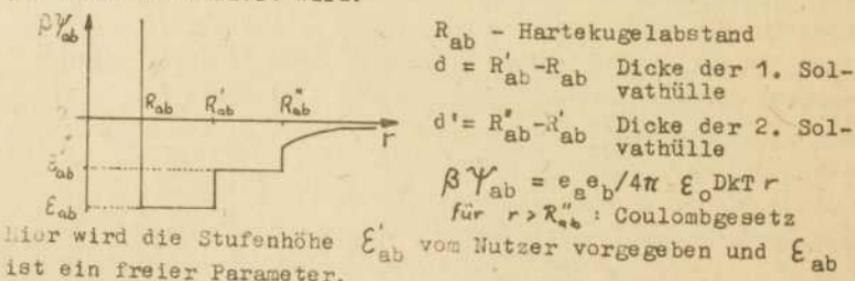
Da die elektrolytische Leitfähigkeit nicht nur von  $\Lambda^\circ$  abhängt, sondern auch von interionischen Wechselwirkungen ( $\varepsilon_{aa}, \varepsilon_{ab}, \varepsilon_{bb}$ ), ist mit dem Anpaßprogrammsystem eine weitere Auswertemethode entwickelt worden. Diese SOFT-Methode (Simultaneous Overlapping 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). (Sbeling, 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 ausgerichtet, in denen die Ion-Ion-Wechselwirkung durch ein Treppenpotential modelliert wird:



Hier wird die Stufenhöhe  $\beta \gamma_{ab}$  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.

1) 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
//FORT.SYSIN DD *
  COMMON//DAT(maxdat)
  EXTERNAL ELFIXi                                (i=1,2,...,9,A)
  CALL ELFIT(maxdat,ELFIXi,&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  $i=1\dots A$  für maximal  $10, 20, \dots 90, 100$  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,  
 STKINP, XBEGIN, XSTOP, RESTRT, SCHUTZ, XDATOH, BESMCD, R300CD, NOTE,  
 ANASTK, ELADIN

OVERLAY A  
 INSERT ELLLOAD, ELLOLK, ELLSCO, DATAIN, DBXCAT, KPFADR, KPFIN, MESIN,  
 LSES

OVERLAY A  
 INSERT ELPREP, ELPRLK, GRUPPE, RADIUS

OVERLAY A  
 INSERT ELCOEF, DINTEG, 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, EIXIN, EIXIN

OVERLAY A  
 INSERT ELFIX, DELFKT, FEIDEC, FEIIMP, FEIPON, FEISOL, FEITUN, MGIB

OVERLAY C  
 INSERT DELYT

OVERLAY C  
 INSERT DELPAN

OVERLAY C  
 INSERT DFTRC1, DFTR01, DSGIB, MGIB03

OVERLAY D  
 INSERT DSGI02

OVERLAY D  
 INSERT DSGI01

OVERLAY D  
 INSERT DSGI02

OVERLAY D  
 INSERT DSGI03, DSGI04, DSGI05

OVERLAY D  
 INSERT DSGI05

OVERLAY D  
 INSERT DSGI16

OVERLAY C  
 INSERT DFOSM1

OVERLAY C  
 INSERT DFOSM2, 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, ELALAL, ELALKB, ELALKE, ELAL<sup>01</sup>, ELAL<sup>02</sup>, ELAL<sup>03</sup>,  
ELAL<sup>04</sup>  
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 SGIB<sup>00</sup>  
OVERLAY F  
INSERT SGIB<sup>01</sup>, ZPCOEF, EA  
OVERLAY F  
INSERT SGIB<sup>02</sup>  
OVERLAY F  
INSERT SGIB<sup>03</sup>, SGIB<sup>04</sup>, SGIB<sup>20</sup>  
OVERLAY F  
INSERT SGIB<sup>05</sup>  
OVERLAY F  
INSERT SGIB16

Tabelle 6.2 Die STK des ELFIT-Teilprogramms

LK-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,FCT)	6.10	MCC	-"-	27	3
RESULT 2 (BLOCK,FCT,GRA)	6.10	MCC	-"-	27	4
RESULT 2 (ALL)	6.10	MCC	-"-	27	5
RESULT 2 (ALL,FCT)	6.10	MCC	-"-	27	6
RESULT 2 (ALL,FCT,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				

### 6.2.1. 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,LAENGT) Theoriebereich

REAL\*4 DATD(NDATEN,LAENGD) Datenbereich

INTEGER\*2 DATI(2,NDATEN) Informationsbereich

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

$$\begin{aligned}
 \text{DATD}(i,1) &:= c_{i,1} && \left. \begin{aligned} &\text{Expt. Konzentration in mol/dm}^3 \text{ der Ionen-} \\ &\text{sorte 1...}(n-1) \text{ mit } n = \text{IFREE}(1) \text{ (in} \end{aligned} \right\} \\
 \text{DATD}(i,n-1) &:= c_{i,n-1} && \text{ELLOAD berechnet)} \\
 \text{DATD}(i,n) &:= f_i^{\text{expt}} && \text{expt. Wert} \\
 (\text{DATD}(i,n+1)) &:= \alpha && \text{Dissoziationsgrad} \\
 \text{DATT}(i,1) &:= r^{\text{th}}(c_i; X) && \text{Theoriewert} \\
 \text{DATT}(i,2) &:= \Delta r^{\text{th}} && \text{Fehlerfortpflanzungstunnel} \\
 \text{DATK}(i,1) &:= K_1(c_i) && \left. \begin{aligned} &\text{Koeffizienten zur Theorie} \\ &\text{DATK}(i,m) := K_m(c_i) \end{aligned} \right\} \\
 \text{DATI}(1,1) &:= \text{Nummer der Zeile im COMMON-Block BLOCK, in der} \\
 &\quad \text{die Kopfblockinformationen (wie Salz, Temperatur, Lösungsmittel usw.) stehen.} \\
 \text{DATI}(2,1) &:= j_1 + j_2 * 10 \\
 &\quad \text{mit } j_1 = 1: \text{ an die Zeile } i \text{ wurde in ELCOEF angepaßt} \\
 &\quad j_2 = 1: \text{ zur Zeile } i \text{ wurden in ELCOEF die} \\
 &\quad \text{Koeffizienten berechnet}
 \end{aligned}$$

Die Gesamtzahl der REAL\*4-Worte je Zeile beträgt  
 $\text{LENGTH}=2*\text{LAENGK}+2*\text{LAENGT}+\text{LAENGD}+1$

Die Anzahl der Zeilen ergibt sich zu  
 $\text{NDATEN}=[\text{MAXDAT}/\text{LENGTH}]$

mit MAXDAT:= maxdat. Die Anzahl der Spalten LAENGi in den Bereichen kann der Nutzer vorgeben (vgl. 6.4), sie können größer sein als in der Standardversion vorgesehen. Die restlichen 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 SLFIX: maximale Schrittweite
	nach Aufruf EL FIX: Streuung von X
RAB(100)	Hartkugelabstand $R_{ab}$
RABS(100)	1. Solvatabstand $R'_{ab}$
RABSS(100)	2. Solvatabstand $R''_{ab}$
EPSABS(100)	2. Stufenhöhe $\xi'_{ab}$
ASCRAB(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, ASCRAB, 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 ASCRAB

die in 6.6 diskutierte Bedeutung und sind somit nur beim Aufruf dieser Theorien festgelegt. Ansonsten kann über diese Fehler 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).

### .3 Passive Steuerkarten

z LK-Codeumwandlung sind die PCC-ESER CODE (Standard), M 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 NORMALIZED FIT dagegen gilt  $p_i = 1/(f_i^{\text{expt}})^2$ .

Im ELFIT-System ist die Sicherung des gesamten Hauptspeicherinhaltes zum Zwecke eines erweiterten Restarts nach anormalen Störbedingungen (etwa infolge Systemabsturz) möglich. Dazu ist die Datei 16 GGLRSAVE 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 i 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 übergegangen. 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=INTEGER\*4, r=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)= i	NX	Ø
N(XA)= i	NXA	1
N(XAA)= i	NXAA	1
N(XAB)= i	NXAB	1
MAXIT= i	MAXIT	50
TIME= r	TIME	600.
EPSIL= r	EPSIL	1.E-6

DAEMF = r	DAEMF	0.5
THEORIE(msng)=	ITHEOR(msng,1)=11	msng ii. jj. kk. ll. mm.
ii.jj.kk.ll.mm	"- 2)=jj	1-5 03. 02. 01. 00. 00
mit:msng=1,2,...	"- 3)=kk	6 03. 50. 00. 00. 00
30 ist die	"- 4)=ll	13-16 03. 02. 01. 00. 00
Schlüsselzahl zur	"- 5)=mm	Rest 00. 00. 00. 00. 00
"Art der Messung"		
(s.5.116)		
FREE(j)=r	FREE(j+10)	Ø Ø
IFREE(j)=1	IFREE(j+10)	Ø
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, wo bei eine Änderung der Reihenfolge der Spalten sowie eine Zeileselektion 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-Blocknummernkarte

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  $\sum_n c_n \geq c_{min}$   
 —“— 16-25: cmax: Laden der Meßdatensätze mit  $\sum_n c_n \leq c_{max}$   
 —“— 26-30: istep: Laden jedes istep.-ten Meßdatensatzes  
 (beginnend mit dem ersten)

—“— 31-33: <1>:  
 —“— 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

in die j. Datenspalte des Datenfeldes des unbenannten COMMON-Blockes wird die <j>. Spalte des Meßdatenblockes geladen.

Standardzustand (beim Modulaufruf hergestellt):  $c_{min}=\emptyset.\emptyset$ ,  $c_{max}=1.E5\emptyset$ ,  $istep=1$ ,  $<1>=1$ ; 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  $c_{min}$  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  $c_{min}$  bis <10> sind nur während des Ladens des Datenblockes NUM gültig. Anschließend gilt wieder der ursprüngliche Ladezustand.

### 6.6 Der Modul ELPREP

Abhängigkeit: ELSTCT (6.4), ELLOAD (6.5)

Dieser Modul bestimmt anhand der Fit-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 (MCC) wird der Modul aufgerufen:

HOT 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=NMSNG

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

FREE(3)=Ø.Ø (=D=Dicke der 2.Solvatationsphäre)

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

Belegung von IREF und JREF

$X(a,1)=5\emptyset.\emptyset$   $DX(a,1)=1\emptyset.\emptyset$

$X(a-a,1)=1.\emptyset$   $DX(a-a,1)=\emptyset.5$

$RAB(a-a,1)=2r_a$   $RABS(a-a,1)=RAB(a-a,1)+D$

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

$X(a-b,1)=-1.\emptyset$   $DX(a-b,1)=\emptyset.5$

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

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

DELTA (alle Indizes)= 1.E-4

alle anderen Elemente= Ø.Ø

(2) C(MIN)=r

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

(3) C(MAX)=r

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

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

- (4.1)  $a=b=*$ : Die Dicke der 1. Solvationsphäre (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. Solvationsphäre 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)  $\text{symbol}[(n)] = r \quad \text{mit symbol} = X | DX | R | R^* | R^{**} | EPS^* | A | \text{DELTA}$ 

- (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)  $\text{symbol}(a[n]) = r \quad \text{mit symbol} = X | DX | R | R^* | R^{**} | EPS^* | A | \text{DELTA}$ 

- (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  $n \in [1, N(XAA)]$  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  $n \in [1, N(XAA)]$  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  $n \in [1, N(XAA)]$  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, ELLLOAD, 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  $\Sigma_{ab}$ ) 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 §3.02.01). Es zeigt sich hier das klassische EDV-Problem: mehr Speicherplatz (für die Koeffizienten) und weniger Rechenzeit (bei der Anpassung in ELLFIKI) oder umgekehrt. In der Leitfähigkeitstheorie §3.02.01 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 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 ELFIGI (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>

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

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

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

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

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

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

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

$$F^{(k)} = \left( \frac{\partial f(c_j; X^{(k)})}{\partial X_1} \right)$$

Setzen wir voraus, daß

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

normal verteilt ist, so erhalten wir das lineare Gleichungssystem

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

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

$$X_n^{(k+1)} = X_n^{(k)} + \begin{cases} \text{DAEMP} \cdot \Delta x_n & \text{falls } \Delta x_n \neq 0 \\ \Delta x_n & \text{sonst} \end{cases}$$

Hier durchläuft  $n$  alle ganzen Zahlen 1 bis NPARAM, für die  $\Delta x_n \neq 0$  gilt. Ist  $\Delta x_n = 0$ , so wird der entsprechende Parameter  $X_n$  festgehalten. Das tritt ein, falls  $\Delta x_n = 0$  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 selbstständig 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

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

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

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

In die erste Spalte des Theoriebereiches des unbenannten COMMON-Blockes werden die Theoriwerte  $f(c_j; X)$  und in die zweite Spalte der Fehlertunnel  $df(c_j; X)$  (lineare Fehlerfortpflanzung von  $DX$  auf  $f$ ) eingetragen. Hieraus folgt LAENGE(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 ELFARA 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 Anpassungsresultate der konzentrationsabhängigen Größen. Er wird durch folgende MCC aktiviert:

NOT RESULT 2	keine Abarbeitung des Moduls
RESULT 2 (BLOCK)	} Resultat druck
" (BLOCK,FCT)	
" (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, Überführungszahlen, 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

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

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

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 chemischen 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 (mol $\cdot$ dm $^{-3}$ )
2. Spalte:  $c_2^* = \mathcal{L} c_2$  freie Anionen-Konzentration (mol $\cdot$ dm $^{-3}$ )
3. Spalte:  $f^{\text{exp}}$  experimenteller Wert
4. Spalte:  $\alpha$  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  $f_i$  werden gemäß der Nutzervorgaben in ll und mm von THEORIE(msng) (§. 7.) bestimmt. Dann ist  $\mathcal{L}$  die kleinste Wurzel (größer Null) des Massenwirkungsgesetzes

$$1 - \mathcal{L} = \mathcal{L}^2 n K f_i^2 (\mathcal{L} n)$$

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

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  $\Delta$  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  $\Delta$  und  $c_{1/2}^*$  (wie unter CHEMICAL MODEL 1)
- 2) Genauigkeitstest für alle  $i$  mit  $DX_i(n=1) \neq \emptyset$ :

$$|X_i(n=1) - X_i(n=2)| < \gamma/2 \text{ DELTA}_i(n=2) \cdot (|X_i(n=1)| + |X_i(n=2)|)$$

- 3) falls Genauigkeit erreicht oder Gesamtzahl von Iterationen MAXIT überschritten: SWITCH 5=OFF;  $\text{DELTA}_i(n=1) := \text{DELTA}_i(n=2)$   
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 Module enthalten. Die Prozedur wird solange wiederholt, bis durch die lesenden Module 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 Modulnfolge 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	= $\emptyset$
SWITCH 2	IST(25)=1	= $\emptyset$
SWITCH 3	IST(26)=1	= $\emptyset$
SWITCH 4	IST(27)=1	= $\emptyset$
SWITCH 5	IST(28)=1	= $\emptyset$

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

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

IF SWITCH i ON REPEAT (i=1,2,3,4,5)  
 Die Schalter können explizit durch die MCC  
 SWITCH i ON (i=1,2,3,4,5)  
 eingeschaltet und durch die MCC  
 SWITCH i 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  $\lambda_K^{\circ}$ ,  $\lambda^{\circ}_{Cl}$ ,  $\varepsilon_{KK}$ ,  $\varepsilon_{ClCl}$ ,  $\varepsilon_{KCl}$ .
- 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). We sentlich ist die PCC -NORMALIZED FIT, da sich die numerischen Werte von  $\lambda$  und  $\varepsilon$  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
IF SWITCH 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 SLFIT-Programmsystem eingearbeiteten Theorien. Das System kann um beliebige andere Theorien erweitert werden. Die Auswahl einer Theorie für eine bestimmte Meßart erfolgt nach der im ELSTC (6.4) einzulesenden Datenkarte.

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

Hier bezeichnet MSNG die Nummer der Meßart (vgl. Tabelle S. ...). Die Kennnummern haben folgende Bedeutung:

### a) ii $\in$ Potentialmodell

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

### b) jj $\in$ Theorien für verschiedene Meßarten

- 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 - KKE bis  $O(c^{3/2})$  + freier  $J^{3/2}$ -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-Wheaston /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 $\in$ 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

07 - Gleichgewichtstheorie

08 - Gleichgewichtstheorie im chemischen Modell

d) 11  $\neq$  Bestimmung der Massenwirkungskonstante

00 - Nutzervariante

01 - Massenwirkungskonstante nach Bjerrum

02 - Massenwirkungskonstante nach Ebeling

03 - Massenwirkungskonstante für ionenspezifische Radien

e) mm  $\neq$  Bestimmung des Aktivitätskoeffizienten im MWG

00 - Nutzervariante

01 - idealer Aktivitätskoeffizient

02 - Grenzgesetz

03 - Debye-Hückel

04 - MSA-a-Parameter

05 - MSA ionenspezifische Radien

Eine Einschätzung der verschiedenen möglichen Kombinationen von  $K_A$  und  $f_2$  im MWG findet man in /8,5/.

Beispiel:

THEORIE(1)=01.14.06.01.03

bedeutet, daß die eingelesenen Leitfähigkeitsmeßdaten (MSNG=1) mit der FHFP-Theorie (jj=14) im chemischen Modell (kk=06) mit einem nichtkonsistenten Massenwirkungsgesetz ausgewertet werden

( $f_2 = f_2^D$ ;  $K_A = K_A^B$ )

THEORIE(1)=01.11.01

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

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

1) Leitfähigkeitstheorien (MSNG=1)

01.04.kk.00.00      kk= 01,02,05

01.04.kk.11.mm      kk= 03,04,06

11= 01,02

mm= 01,02,03,04

01.09.kk.00.00      kk= 01,02,05

01.11.kk.00.00      kk= 01,02,05

01.11.kk.02.04      kk= 03,04,06

01.12.kk.00.00      kk= 01,02,05

01.12.kk.02.04      kk= 03,04,06

01.14.kk.00.00      kk= 01,02,05

01.14.kk.11.mm      kk= 03,04,06

11= 01,02

mm= 01,02,03,04

01.16.kk.00.00      kk= 01,02,05

Ø1.16.kk.ll.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.ll.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. Manuskr. 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 Rostoc 31 (Heft 2), 15 (1982)
- /6/ Fuoss, R.M., Onsager, L. und Skinner, J.P., 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 Heis, K., Proc.Natl.Acad.Sci 57, 1550 (1967)
- Fernandez-Prini, R., Trans.Paraday Soc. 65, 3311 (1969)
- /11/ Quint, J. und Viallard, A., J.Solution Chem. 7, 137, 525, 533 (1978)
- /12/ Lee, W.H. und Wheaton, R.J., Trans.Paraday 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

## 8. Kataloge

Im Datenblockkatalog sind die einzelnen Meßsätze entsprechend dem Lösungsmittel angeordnet. Innerhalb eines Lösungsmittels ist nach wachsender Temperatur und bei konstanter Temperatur weiterhin nach gelösten Salzen, beginnend mit dem Anion, sortiert.

Die im Tabellenkopf verwendeten Abkürzungen haben die folgende Bedeutung:

- NUM Kennnummer des Datenblocks  
Key number of the Data Block
  - C(MIN) minimale totale Ionenkonzentration im Meßdatenblock  
minimum total ion concentration in the Data Set
  - C(MAX) maximale totale Ionenkonzentration im Meßdatenblock  
maximum total ion concentration in the Data Set
  - N Anzahl der Meßpunkte im Meßdatenblock  
number of measured points in the Data Set

Die für die Ionenbezeichnungen benutzten Abkürzungen sind nach dem Datenblockkatalog in einer Tabelle zusammengestellt. (s. S. 13)

ION ELECTRICAL	ION	NUM. T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REFS
M	CL	436 = 20.0	7.12000	26.15999	16	/ 221
M	BR	445 = 20.0	7.69200	14.23000	6	/ 221
M	J	454 = 20.0	6.00000	8.94000	5	/ 221
M	CL	457 = 10.0	4.95600	25.99998	18	/ 221
M	BR	464 = 10.0	4.26400	14.16000	11	/ 221
M	J	455 = 10.0	4.76000	8.90000	7	/ 221
M	CL	458 0.0	1.12480	25.89999	24	/ 221
M	BR	467 0.0	1.33420	14.00000	16	/ 221
M	J	456 0.0	0.85900	8.85800	15	/ 221
L	CL	181 0.0	0.00623	0.46240	12	/ 150
L	J	182 0.0	0.00295	0.50100	13	/ 150
L	ClO <sub>4</sub>	205 0.0	0.00050	0.06847	9	/ 223
L	PI	208 0.0	0.00176	0.05519	5	/ 223
NA	CL	197 0.0	0.00070	0.09775	8	/ 223
		318 0.0	0.00763	0.02001	6	/ 105
		330 0.0	0.19196	0.92639	4	/ 181
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	/ 181
		149 0.0	0.02000	1.99995	3	/ 107
		81 0.0	0.00190	0.10040	36	/ 61
K	BR	314 0.0	0.00050	7.50000	18	/ 106
K	J	184 0.0	0.00095	0.50700	26	/ 150
K	NO <sub>3</sub>	191 0.0	0.00059	0.05045	9	/ 223
K	ClO <sub>3</sub>	217 0.0	0.00190	0.00502	3	/ 223
K	ClO <sub>4</sub>	194 0.0	0.00076	0.12953	15	/ 223
K	BrO <sub>3</sub>	220 0.0	0.00191	0.05938	5	/ 223
K	JO <sub>3</sub>	223 0.0	0.00099	0.02680	6	/ 223
K	PI	211 0.0	0.00053	0.02782	9	/ 223
CS	CL	185 0.0	0.00143	0.20840	19	/ 150
CS	J	180 0.0	0.00121	0.23820	16	/ 150
CS	NO <sub>3</sub>	202 0.0	0.00100	0.05109	8	/ 223
NM <sub>4</sub>	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	232 0.0	0.00540	0.19730	6	/ 149
		65 0.0	0.00298	0.23700	6	/ 149
ET4N	J	233 0.0	0.00478	0.20480	7	/ 149
ET4N	PI	214 0.0	0.00104	0.03763	9	/ 223
PR4N	CL	148 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
BU4N	CL	148 0.0	0.00651	0.16084	6	/ 149
BU4N	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
MO	SO <sub>4</sub>	538 0.0	0.02340	0.11334	4	/ 181
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
UO <sub>2</sub>	SO <sub>4</sub>	516 0.0	0.00080	12.13000	11	/ 241

ION ELECTRICAL CONDUCTANCE	ION CONDUCTANCE IN WATER	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
H	CL	124	5.0	0.00155	0.16684	12	1391
		131		0.15892	24.00200	19	1391
NA	CL	328	5.0	0.19196	0.02608	4	181
K	CL	335	5.0	0.00404	0.01921	4	181
		107		0.00174	0.05479	15	1391
		141		0.02000	0.19999	2	131
K	BR	110	5.0	0.00230	0.01516	5	1391
K	J	113	5.0	0.00196	0.03683	8	1391
MG	SO4	534	5.0	0.02340	0.11355	4	181
CA	SO4	535	5.0	0.00319	0.04459	4	1391
H	CL	439	10.0	1.12420	25.78000	24	181
H	BR	448	10.0	1.30420	14.02600	17	181
H	J	457	10.0	0.85760	8.81600	15	181
NA	ClO4	416	10.0	0.00224	23.49998	38	181
K	CL	327	10.0	0.19190	0.92530	4	181
K	CL	334	10.0	0.00404	0.01920	4	181
		142		0.02000	0.19999	2	1391
		80		0.03190	0.10039	20	61
MEAN	CL	372	10.0	0.00345	0.02400	8	641
MEAN	BR	383	10.0	0.00228	0.02203	8	641
MEAN	J	377	10.0	0.00128	0.01688	8	641
ETAN	BR	384	10.0	0.00119	0.01463	16	641
PRAN	CL	375	10.0	0.00152	0.01411	8	641
PRAN	BR	378	10.0	0.00111	0.01495	8	641
PRAN	J	374	10.0	0.00093	0.01397	16	641
BUAN	CL	382	10.0	0.00197	0.01608	8	641
BUAN	BR	376	10.0	0.00090	0.01533	8	641
BUAN	J	378	10.0	0.00112	0.01533	16	641
MG	SO4	533	10.0	0.02339	0.11352	4	181
CA	SO4	537	10.0	0.03019	0.04458	4	1391
H	CL	125	15.0	0.00211	0.16375	11	1391
		132		0.15879	23.87599	19	1391
NA	CL	254	15.0	0.00075	0.02000	7	1391
		326		0.19177	0.92467	4	181
		86		0.00100	0.02000	5	1391
K	CL	250	15.0	0.00207	0.00948	6	1391
		345		0.00102	0.01943	7	1391
		329		0.00446	0.19842	12	1631
		333		0.00404	0.01919	4	181
		143		0.02100	0.10995	2	1391
K	BR	258	15.0	0.00100	0.02000	5	1391
K	J	90		0.00100	0.02000	5	1391
MG	SO4	114	15.0	0.00181	0.03388	8	1391
CA	SO4	532	15.0	0.02338	0.11345	4	181
CU	SO4	538	15.0	0.03018	0.04455	4	1391
ZN	SO4	943	15.0	0.00020	0.00080	6	12091
MN	SO4	940	15.0	0.00070	0.00080	6	12091
H	CL	6	18.0	0.00200	26.36400	20	14511
H	J	3	18.0	0.20080	8.00000	7	14511
H	NO3	5	18.0	0.00050	0.00200	4	14511
		6		0.00200	19.09998	18	14511
LI	CL	7		2.03400	27.28000	10	14511
LI	BR	8	18.0	0.00020	19.99998	17	14511
LI	J	55	18.0	0.10000	8.00000	7	14511
LI	NO3	9	18.0	0.77400	4.53200	5	14511
		12	18.0	0.00020	2.00000	13	14511

ION	ION	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
ELECTRICAL CONDUCTANCE	IN WATER						
Li	ClO <sub>4</sub>	13	18.0	0.10000	8.00000	8	1/151/
Li	JO2	204	18.0	0.00050	0.06835	13	1/223/
Li	JO3	10	18.0	0.00100	2.00000	13	1/151/
Li	PI	11	18.0	0.00020	2.00000	13	1/151/
Li	PI	207	18.0	0.00176	0.10989	11	1/223/
Na	OH	16	18.0	0.00400	2.00000	8	1/74/
Na		15		0.50400	38.12000	20	1/151/
Na	F	17	18.0	0.00020	2.00000	13	1/43/
Na	Cl	196	18.0	0.00070	0.09761	12	1/223/
		17		0.00020	10.00000	16	1/42/
		18		1.75800	10.84200	7	1/41/
Na	Br	21	18.0	0.10300	8.00000	7	1/151/
Na	J	22	18.0	0.10000	8.00000	7	1/151/
Na	NO <sub>3</sub>	199	18.0	0.00156	0.03383	5	1/223/
		24		0.00020	6.00000	15	1/42/
Na	ClO <sub>3</sub>	19	18.0	0.20000	8.00000	7	1/151/
Na	ClO <sub>4</sub>	20	18.0	1.00000	8.00000	5	1/151/
Na	JO3	23	18.0	0.00020	0.40000	11	1/40/
Na	SO <sub>4</sub>	513	18.0	0.00060	0.03002	6	1/71/
K	F	26	18.0	1.78800	18.93599	5	1/40/
		27		0.00020	2.00000	12	1/43/
		28		0.20000	11.00000	7	1/151/
K	Cl	156	18.0	0.00018	0.00996	22	1/51/
		187		0.00033	0.05207	11	1/223/
		235		0.02000	2.00000	3	1/111/
		150		0.02000	1.99965	3	1/103/
		30		0.00008	0.00269	6	1/56/
		31		0.00002	0.00200	19	1/224/
		32		1.34200	6.42600	5	1/40/
		79		0.00190	0.10028	36	1/6/
K	Br	35	18.0	0.00020	1.00000	12	1/43/
		36		0.10000	8.00000	7	1/151/
K	J	37	18.0	0.00020	2.00000	12	1/43/
		38		0.10000	8.00000	7	1/151/
		39		0.62400	10.80200	7	1/40/
K	NO <sub>3</sub>	190	18.0	0.00059	0.10482	17	1/223/
		40		0.00020	4.00000	14	1/42/
		41		1.01800	4.00200	5	1/40/
K	ClO <sub>3</sub>	216	18.0	0.00120	0.0A319	7	1/223/
		33		0.00020	1.00000	12	1/43/
K	ClO <sub>4</sub>	103	18.0	0.00076	0.12928	16	1/223/
		34		0.00100	0.10000	7	1/223/
K	BrO <sub>3</sub>	219	18.0	0.00191	0.05931	5	1/223/
K	JO3	222	18.0	0.00099	0.05819	7	1/223/
K	PI	210	18.0	0.00053	0.03457	14	1/223/
RB	F	25	18.0	0.40000	8.00000	6	1/51/
RB	Cl	53	18.0	0.00020	8.00000	17	1/151/
RB	Br	54	18.0	0.20000	8.00000	7	1/51/
RB	J	52	18.0	0.20000	8.00000	7	1/51/
RB	Cl	61	18.0	0.00020	0.20000	8	1/42/
CS		62		0.20000	8.00000	6	1/51/
CS	NO <sub>3</sub>	201	18.0	0.00073	0.05101	9	1/223/
NH <sub>4</sub>	F	56	18.0	0.20000	8.00000	7	1/151/
NH <sub>4</sub>	Cl	58	18.0	0.00020	10.00000	19	1/151/
NH <sub>4</sub>	Br	57	18.0	0.10000	8.00000	7	1/51/
NH <sub>4</sub>	J	59	18.0	0.10000	9.04600	9	1/51/
ET <sub>4</sub> N	PI	213	18.0	0.00104	0.03759	11	1/223/
MG	SO <sub>4</sub>	550	18.0	0.00010	5.00000	16	1/51/

ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM	T (°C)	C (MIN)	C (MAX)	N	REF.
	IN WATER						
CA	SO4	551	18.0	0.00010	1.00000	13	1451/
CU	SO4	553	18.0	0.00010	3.00000	14	1451/
ZN	SO4	554	18.0	0.00010	5.00000	16	1451/
CD	SO4	555	18.0	0.00010	1.00000	13	1451/
		501		0.00001	0.00055	7	1561
NI	SO4	558	18.0	0.00010	1.00000	14	1451/
H	CL	440	20.0	1.12420	25.48000	24	1481/
H	BR	449	20.0	1.33720	13.95800	17	1481/
H	J	458	20.0	0.85580	8.77400	15	1481/
NA	CL	324	20.0	0.19159	0.92362	4	1481/
K	CL	246	20.0	0.02300	2.00000	3	1481/
		332		0.03404	0.01917	4	1481/
		337		0.00152	0.19962	14	1481/
		144		0.02700	0.19969	2	1481/
MG	SO4	531	20.0	0.02336	0.11334	4	1481/
CA	SC4	540	20.0	0.00017	0.04451	4	1481/
K	CL	338	22.0	0.00152	0.00742	11	1463/
H	P	849	25.0	0.00036	0.02337	11	611
H	CL	247	25.0	0.00046	0.06219	14	1491/
		303		0.00006	0.00599	11	1461/
		441		1.12280	25.42000	24	1481/
		100		1.97800	14.67400	7	951
		123		0.00072	1.98690	30	1451/
		126		0.03614	0.17273	12	1491/
		133		0.15851	23.74399	19	1491/
		42		0.00010	0.00600	11	1421/
		43		0.00070	0.20000	9	1401/
H	BR	450	25.0	1.33020	13.92000	17	1481/
		101		2.01800	17.51799	8	951
H	J	459	25.0	0.85440	8.75400	14	1481/
LI	OH	242	25.0	0.00278	0.05394	8	1491/
LI	P	138		0.00200	10.01840	22	541
LI		840	25.0	0.00094	0.00848	10	1481/
LI	CL	846		0.03900	0.04000	5	1421/
		238	25.0	0.00011	0.20000	30	1441/
		297		0.00100	0.01000	5	1401/
		344		0.00100	0.20000	7	441
		6223		1.00000	25.90998	10	31/
		44		0.00011	0.12705	8	1441
		45		0.00000	8.00000	10	1441/
LI	BR	841	25.0	0.00043	0.04607	5	1481/
		97		0.00235	0.02080	7	1491
		98		0.00061	0.01067	7	1491
LI	J	842	25.0	0.00091	0.03330	10	1481/
LI	NO3	368	25.0	0.000100	2.00000	10	301
		369		0.01094	18.25999	15	301
		6218		1.00000	12.00000	7	71
		46		0.01094	27.00995	22	271
LI	CL03	367	25.0	0.04376	38.65997	27	321
LI	CL04	167	25.0	0.00136	0.21088	14	1481/
NA	OH	240	25.0	0.00051	0.02103	18	2111
		243		0.00182	0.00434	10	1421/
		139		0.15016	38.25598	27	541
NA	P	847	25.0	0.00000	0.40000	8	1421/
		848		0.00059	0.04485	10	611
NA	CL	226	25.0	0.00393	0.01948	5	1441/
		248		0.00017	0.04480	10	1491/

ION ELECTRICAL CONDUCTANCE	ION IN WATER	NUM T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF:
		255	0.00109	0.01965	7	/ 85/
		317	0.00063	0.02001	0	/ 105/
		324	0.19136	0.92237	4	/ 141/
		463	0.15648	2.08320	24	/ 35/
		465	0.03508	0.21409	33	/ 33/
		6203	0.00209	0.01564	7	/ 211/
		6224	1.00700	8.00000	0	/ 71/
		106	0.22400	9.62280	18	/ 37/
		1	0.00100	10.00000	20	/ 151/
		49	0.00020	0.20000	10	/ 206/
		87	0.00100	0.02000	5	/ 81/
		50	0.20000	10.70000	24	/ 37/
NA	BR	342	25.0	0.00025	0.01000	6 / 205/
		2	0.00100	8.00000	12	/ 151/
		99	0.00171	0.01637	7	/ 191/
NA	J	843	25.0	0.00377	0.05002	10 / 187/
		312	0.00347	0.34100	17	/ 152/
NA	NO3	156	25.0	0.01783	9.49940	15 / 229/
		600	0.02601	0.26155	9	/ 126/
		801	0.00195	0.16374	9	/ 166/
		6219	1.00300	8.00000	0	/ 71/
NA	ClO3	823	25.0	0.01066	0.00414	8 / 125/
		824	0.00504	0.18292	14	/ 125/
		831	0.01442	0.16942	8	/ 125/
NA	ClO4	158	25.0	0.00143	0.19960	13 / 118/
		51	0.00100	0.20000	9	/ 146/
NA	BrO3	172	25.0	0.00102	0.96386	15 / 147/
		808	0.00507	0.06050	7	/ 126/
NA	JO3	813	25.0	0.00699	0.08248	9 / 126/
		816	0.00499	0.06251	7	/ 126/
NA	N3	343	25.0	0.03200	2.00000	11 / 205/
NA	ClAC	249	25.0	0.00132	0.01415	10 / 193/
NA	SO4	514	25.0	0.00031	0.00357	10 / 103/
K	OH	241	25.0	0.00031	0.02233	17 / 211/
		246	0.00118	0.10096	11	/ 192/
		140	0.12162	21.22148	21	/ 54/
K	P	6200	25.0	0.00210	0.01844	7 / 217/
K	Cl	151	25.0	0.01994	1.98892	3 / 107/
		198	0.00040	0.01255	17	/ 55/
		160	0.00029	0.09300	9	/ 72/
		163	0.00387	0.01964	5	/ 155/
		237	0.01998	1.99541	3	/ 141/
		251	0.00101	0.02012	7	/ 85/
		262	0.00063	0.18154	13	/ 212/
		263	0.00100	0.02000	5	/ 81/
		264	0.00093	0.00202	9	/ 53/
		265	0.00080	0.02779	11	/ 163/
		266	0.00025	4.00000	20	/ 205/
		267	0.00100	7.91800	14	/ 33/
		302	0.00007	0.00657	18	/ 206/
		319	0.00067	0.03993	9	/ 105/
		331	0.00403	0.01915	4	/ 181/
		464	0.20538	1.98652	16	/ 39/
		466	0.01008	0.20665	49	/ 39/
		467	0.00055	0.01255	19	/ 60/
		468	0.02120	0.57617	13	/ 60/
		468	0.00768	0.07449	13	/ 122/
		499	0.00811	0.08677	10	/ 122/

ION	ION	NUM	T (°C)	C (MIN)	C (MAX)	N	REF.
	ELECTRICAL CONDUCTANCE IN WATER						
		6202		0.00166	0.01222	6	1211
		6225		1.00000	8.00000	6	71
		105		0.24008	7.40920	17	1371
		108		0.00110	0.03546	7	14201
		78		0.00190	0.10012	30	61
		83		0.00077	0.28704	25	1601
		60		0.00257	0.01258	6	1191
K	BR	259	25.0	0.00100	0.01957	7	861
		313		0.00050	7.50000	17	1061
		6204		0.00149	0.01489	7	1211
		111		0.00270	0.01434	5	14201
		94		0.00213	0.01477	6	1191
		91		0.00100	0.02000	5	81
K	J	209	25.0	0.00100	0.01000	4	14041
		6201		0.00144	0.01435	7	1211
		115		0.00277	0.03169	11	14201
K	NO3	802	25.0	0.0121	0.15467	8	1261
		803		0.03580	0.17979	10	1261
		304		0.00014	0.00734	9	12061
		6220		1.00000	4.00000	4	71
K	ClO3	825	25.0	0.00714	0.11807	10	1251
		826		0.03548	0.14083	10	1251
K	ClO4	169	25.0	0.00103	0.21162	20	1181
		832		0.00746	0.07812	9	1251
K	BrO3	171	25.0	0.00109	0.29548	17	1171
		809		0.00746	0.10007	8	1261
		810		0.00478	0.08657	9	1261
K	JO3	170	25.0	0.00037	0.00782	8	1221
		239		0.00021	0.20252	10	1451
		817		0.00791	0.08478	7	1261
		818		0.00577	0.11120	8	1261
		366		0.00017	0.00338	11	261
K	JO4	323	25.0	0.00099	0.04024	13	1131
K	SO4	515	25.0	0.00034	0.00339	10	1031
K	BENZOAT	6206	25.0	0.00100	0.01328	7	1211
K	TOSTYLAT	6208	25.0	0.00107	0.01125	7	1211
RB	OH	245	25.0	0.00424	0.02319	7	1421
RB	F	844	25.0	0.01140	0.04787	10	1421
RB	CL	227	25.0	0.00355	0.01701	5	1421
		6226		1.00000	6.00000	5	71
RB	BR	480		0.00192	0.02294	10	691
RB	J	229	25.0	0.00404	0.02055	5	1571
RB	NO3	804	25.0	0.00299	0.01550	10	691
		805		0.00467	0.17557	10	1261
		6221		0.00588	0.00753	7	1261
RB	ClO3	827	25.0	0.00602	0.11258	8	1251
RB	ClO4	833	25.0	0.00582	0.14447	7	1251
RB	BrO3	834	25.0	0.00709	0.05850	7	1251
RB	JO3	811	25.0	0.00516	0.07316	8	1251
		812		0.00975	0.13567	10	1261
RB	JO3	810	25.0	0.00495	0.05280	8	1261
		820		0.00881	0.09330	7	1261
CS	OH	246	25.0	0.00130	0.13084	9	1421
CS	F	845	25.0	0.00179	0.01894	10	1421
CS	CL	228	25.0	0.00287	0.01876	5	1231

ION	ION	NUM	T (°C)	C (MIN)	C (MAX)	N	REF:
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN WATER							
		6205		0.00477	0.01488	6	/ 217/
		6227		1.00000	6.00000	5	/ 31
		104		0.00477	0.02361	5	/ 221/
		59A		0.00503	0.09503	8	/ 193/
		95		0.00177	0.00975	7	/ 191
CS	BR	103	25.0	0.00263	0.01986	15	/ 193/
CS	J	164	25.0	0.00499	0.01888	5	/ 196/
CS	NO3	806	25.0	0.00588	0.09835	9	/ 126/
		807		0.01134	0.29062	11	/ 126/
		6222		1.00080	2.00000	2	/ 7/
CS	ClO3	829	25.0	0.00566	0.00047	8	/ 125/
		830		0.01301	0.14051	9	/ 125/
CS	ClO4	835	25.0	0.00537	0.05973	8	/ 125/
		836		0.00594	0.06704	10	/ 125/
CS	BrO3	813	25.0	0.00754	0.07998	10	/ 126/
		814		0.00409	0.08009	9	/ 126/
CS	JO3	821	25.0	0.01131	0.13644	7	/ 126/
		822		0.00423	0.04714	8	/ 126/
NH4	CL	301	25.0	0.20380	10.50400	8	/ 227/
NH4	NO3	300	25.0	0.20400	15.90000	12	/ 227/
		351		0.20000	22.56400	12	/ 29/
		365		0.00200	1.00000	10	/ 30/
NH4	SO4	522	25.0	0.30180	15.00000	8	/ 227/
MEAN	CL	352	25.0	0.00225	0.02228	8	/ 64/
		69		0.00505	0.04902	8	/ 64/
MEAN	BR	71	25.0	0.00058	0.01370	8	/ 64/
		96		0.00099	0.01506	7	/ 19/
MEAN	J	75	25.0	0.00117	0.01683	7	/ 64/
		157		0.00104	0.00942	6	/ 19/
ETAN	CL	580	25.0	0.00276	0.02720	9	/ 19/
ETAN	BR	175	25.0	0.00022	0.03001	10	/ 73/
		72		0.00122	0.02005	7	/ 64/
		581		0.00174	0.01718	9	/ 219/
ETAN	J	582	25.0	0.00587	0.01940	6	/ 219/
ETAN	ClO4	583	25.0	0.00318	0.01857	8	/ 219/
ETAN	PI	178	25.0	0.00008	0.01976	9	/ 73/
		400		0.00068	0.01481	11	/ 225/
PRAN	BR	355	25.0	0.00065	0.01343	8	/ 64/
		388		0.00376	0.01662	5	/ 127/
		73		0.00060	0.02105	11	/ 64/
PRAN	J	353	25.0	0.00092	0.01703	8	/ 64/
		389		0.00424	0.02212	5	/ 127/
BUAN	CL	70	25.0	0.00198	0.01382	8	/ 64/
BUAN	BR	354	25.0	0.00076	0.01531	8	/ 64/
		6207		0.00114	0.00846	8	/ 217/
		74		0.00086	0.01627	8	/ 64/
		A138		0.00062	0.00558	5	/ 203/
		29		0.00199	0.01199	6	/ 19/
BUAN	J	356	25.0	0.00123	0.01657	8	/ 64/
		77		0.00076	0.01970	10	/ 64/
MG	CL	526	25.0	0.00045	0.31199	32	/ 207/
MG	SO4	530	25.0	0.02333	0.11321	4	/ 181
		556		0.00020	2.00000	15	/ 151/
		585		0.00049	0.00202	4	/ 182/
		586		0.00153	0.00771	5	/ 182/
		587		0.000784	0.07379	5	/ 182/
		588		0.04655	0.23254	6	/ 182/
		591		0.00027	0.00177	6	/ 182/

ION ELECTRICAL CONDUCTANCE	ION IN WATER	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REFS
		592		0.00151	0.01004	7	1481
		593		0.01045	0.06974	5	1481
		594		0.04576	0.23814	5	1481
		595		0.01930	0.04710	3	1481
		597		0.00027	0.23814	20	1481
		598		0.00049	0.23254	20	1481
		470		0.00043	0.75873	23	1481
		471		0.00017	0.00177	7	1471
CA	CL	527	25.0	0.00037	0.32563	55	12071
CA	SO4	539	25.0	0.00016	0.04446	4	1291
SR	CL	528	25.0	0.00022	0.35716	36	12071
BA	CL	525	25.0	0.00091	3.01581	20	14031
		529		0.00060	0.41050	32	12071
BA	J	512	25.0	0.00146	0.14750	8	14021
CU	SO4	562	25.0	0.00020	2.00000	15	14511
		944		0.00020	0.00080	6	12091
		469		0.00028	1.06683	18	1401
AG	NO3	305	25.0	0.03006	0.00581	10	12061
		350		0.03300	19.41800	11	1291
		370		0.03100	19.41800	17	1301
ZN	ClO4	524	25.0	0.00017	0.00874	25	1581
ZN	SO4	563	25.0	0.00020	2.00000	14	14511
		947		0.00020	0.00080	6	12091
CD	SO4	564	25.0	0.00020	2.00000	14	14511
HG	ClO4	340	25.0	0.00308	0.85464	18	14201
MN	SO4	523	25.0	0.00055	0.00447	5	1481
		557		0.00020	2.00000	14	14511
		941		0.00020	0.00080	6	12091
FE	SO4	558	25.0	0.00020	2.00000	14	14511
CO	SO4	549	25.0	0.00010	0.40000	12	14511
		560		0.00020	2.00000	15	14511
NI	SO4	561	25.0	0.00020	2.00000	15	14511
UO2	SO4	517	25.0	0.00020	9.42000	10	1211
TL	ON	165	25.0	0.00184	3.75320	30	14611
TL	ClO4	173	25.0	0.00035	0.01960	9	14951
TL	AC	174	25.0	0.00086	0.02947	11	14951
IAM3BUN	BR	47	25.0	0.00733	0.01483	5	14361
IAM3BUN	J	48	25.0	0.03236	0.00935	6	14361
PH4P	BR	82	25.0	0.00122	0.01060	5	12031
H	CL	442	30.0	1.12120	25.35999	24	1481
H	BR	451	30.0	1.29540	13.81400	17	1481
H	J	460	30.0	0.85180	8.73400	12	1481
H	ClO4	423	30.0	0.00223	23.14000	37	1471
H	Cl4	127	35.0	0.00190	0.12424	14	14791
		134		0.15508	23.60999	19	14791
LI	NO3	225	35.0	0.22012	23.59316	9	311
NA	CL	256	35.0	0.00099	0.01976	7	1451
		500		0.03670	0.02113	5	1491
		88		0.00100	0.02000	5	1471
NA	NO3	584	35.0	0.00101	0.01012	9	381
K	CL	161	35.0	0.00028	0.01006	5	721
		252		0.00098	0.02066	7	1451
		84		0.00100	0.02000	5	1471
K	BR	260	35.0	0.00093	0.02006	7	1461
		92		0.00100	0.02000	5	1471
K	J	116	35.0	0.00253	0.03564	8	14201
NH4	CL	275	35.0	0.00087	0.16918	13	1251
NH4	NO3	274	35.0	0.00031	0.15520	15	1251

ION ELECTRICAL	ION CONDUCTANCE	NUM	T(OC)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF
		IN WATER					
		360		0.10760	3.82080	4	/ 30/
		272		0.10760	21.49799	11	/ 28/
BT4N	BR	176	35.0	0.00064	0.02992	9	/ 73/
BT4N	PI	179	35.0	0.00072	0.01970	8	/ 73/
AG	NO3	273	35.0	0.19720	15.32680	10	/ 28/
		363		1.97200	8.46120	6	/ 30/
H	CL	463	40.0	1.11720	25.20000	23	/ 88/
H	BR	453	40.0	1.29200	13.77800	16	/ 88/
H	J	461	40.0	0.84880	8.60600	13	/ 88/
K	CL	360	40.0	0.00194	0.15594	8	/ 163/
CU	SO4	945	40.0	0.00020	0.00080	6	/ 209/
ZN	SO4	948	40.0	0.00020	0.00080	6	/ 209/
MN	SO4	942	40.0	0.00020	0.00080	6	/ 209/
H	CL	128	45.0	0.00414	0.18051	11	/ 179/
		133		0.15755	23.47400	19	/ 179/
NA	CL	247	45.0	0.00104	0.02017	7	/ 85/
		89		0.00100	0.02000	5	/ 85/
K	CL	162	45.0	0.00134	0.01002	4	/ 72/
		253		0.00103	0.01971	7	/ 85/
		85		0.00100	0.02000	5	/ 85/
K	BR	261	45.0	0.00095	0.02019	7	/ 86/
		93		0.00100	0.02000	5	/ 86/
K	J	117	45.0	0.00427	0.03469	7	/ 180/
ME4N	BR	371	45.0	0.00180	0.01388	8	/ 135/
ME4N	J	362	45.0	0.00119	0.01233	8	/ 135/
ET4N	BR	177	45.0	0.00064	0.02981	9	/ 73/
		180		0.00008	0.01982	9	/ 73/
BT4N	BR	357	45.0	0.00154	0.01576	8	/ 135/
PR4N	BR	359	45.0	0.00141	0.00729	5	/ 135/
PR4N	J	358	45.0	0.00101	0.01059	8	/ 135/
BU4N	BR	360	45.0	0.00200	0.00951	7	/ 135/
BU4N	J	361	45.0	0.00084	0.01149	8	/ 135/
H	CL	464	50.0	1.11260	25.06000	24	/ 88/
		122		0.00387	0.04958	21	/ 42/
H	BR	452	50.0	1.28700	13.70400	17	/ 88/
H	J	462	50.0	0.84500	8.65800	13	/ 88/
NA	CL	121	50.0	0.01925	10.15520	20	/ 36/
K	CL	120	50.0	0.02434	8.78960	22	/ 36/
MG	SO4	540	50.0	0.00026	0.00105	5	/ 188/
		500		0.00062	0.00860	7	/ 188/
		599		0.00026	0.00860	12	/ 188/
UO2	SO4	518	50.0	0.00020	14.56000	12	/ 21/
H	CL	129	55.0	0.00366	0.14023	11	/ 179/
		138		0.15492	19.29079	18	/ 179/
K	CL	109	55.0	0.03455	0.05159	14	/ 180/
K	BR	112	55.0	0.00258	0.02645	7	/ 180/
K	J	118	55.0	0.00271	0.03231	8	/ 180/
Li	CL04	435	60.0	0.14880	5.51400	17	/ 223/
H	CL	130	65.0	0.00197	0.14304	12	/ 179/
		137		0.24292	19.19279	15	/ 179/
UO2	SO4	519	90.0	0.00019	9.32000	11	/ 21/
NH4	NO3	367	95.0	0.17580	8.44200	7	/ 30/
AG	NO3	364	95.0	0.10480	23.75200	10	/ 30/
Li	CL04	208	100.0	0.00036	0.06562	12	/ 223/
Li	PI	209	100.0	0.00211	0.03226	6	/ 223/
NA	CL	198	100.0	0.00090	0.04080	8	/ 223/
NA	NO3	200	100.0	0.00149	0.03228	5	/ 223/
K	CL	198	100.0	0.00032	0.08001	9	/ 223/

ION ELECTRICAL CONDUCTANCE	ION CONDUCTANCE IN WATER	NUM T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
K NO3	102 100.0	0.00164	0.04837	11	/ 223/	
K ClO3	21A 100.0	0.00115	0.00479	4	/ 223/	
K ClO4	104 100.0	0.00073	0.04178	13	/ 223/	
K BRO3	271 100.0	0.00183	0.00808	4	/ 223/	
K JO3	224 100.0	0.00095	0.02589	5	/ 223/	
K Pi	212 100.0	0.00172	0.03318	11	/ 223/	
CS NO3	203 100.0	0.00196	0.04895	7	/ 223/	
ETAN Pi	215 100.0	0.00224	0.03608	7	/ 223/	
Li NO3	246 110.0	0.19460	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	0.00200	5.04000	8	/ 21/	
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN HEAVY WATER						
NA CL	6212 25.0	0.00209	0.01998	8	/ 217/	
K P	6209 25.0	0.00291	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 TOSYLAT	6217 25.0	0.00102	0.01135	7	/ 217/	
CS CL	6214 25.0	0.00167	0.01494	7	/ 217/	
BUAN AR	6210 25.0	0.00109	0.00781	7	/ 217/	
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN WATER + METHANOL						
ETAN 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/	
ETAN 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/	
ETAN J	6532	0.00189	0.01725	10	/ 219/	
	6537	0.00257	0.01647	9	/ 219/	
	6529	0.00347	0.01740	7	/ 219/	
ETAN ClO4	6533	0.00269	0.01378	8	/ 219/	
	6538	0.00254	0.01024	9	/ 219/	
	6542	0.00196	0.01761	10	/ 219/	
	6546	0.00268	0.01721	9	/ 219/	
	6534	0.00186	0.01680	10	/ 219/	
	6738	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	0.00213	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	0.00151	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	ION	NUM	T (°C)	G (WATER)	G (ETHANOL)	G (MAX)	N	REF#
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN WATER + ETHANOL								
NA	NO3	6105		0.00069	0.00984	6	/ 185/	
		6559	35.0	0.00100	0.01005	10	/ 32/	
		6561		0.00101	0.01009	8	/ 32/	
		6562		0.00101	0.00809	8	/ 32/	
		6563		0.00101	0.01009	8	/ 32/	
		6564		0.00101	0.01011	10	/ 32/	
		6565		0.00051	0.00612	8	/ 32/	
CS	CL	6007	35.0	0.00063	0.01263	7	/ 185/	
		6100		0.00054	0.01263	6	/ 185/	
		6103		0.00063	0.01605	6	/ 185/	
		6106		0.00069	0.00979	6	/ 185/	
		6008		0.00062	0.01230	7	/ 185/	
		6101		0.00054	0.01250	6	/ 185/	
		6104		0.00063	0.01591	6	/ 185/	
		6107		0.00068	0.00973	6	/ 185/	
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN WATER + NITRANE								
Li	CL	6035	25.0	0.00761	0.02079	4	/ 68/	
		6048		0.00174	0.00715	4	/ 68/	
		6049		0.00136	0.00610	5	/ 68/	
		6050		0.00116	0.00505	5	/ 68/	
		6051		0.00079	0.00379	5	/ 68/	
		6052		0.00068	0.00332	5	/ 68/	
NA	CL	6041	25.0	0.00104	0.00357	8	/ 147/	
		6042		0.00092	0.00412	5	/ 147/	
		6043		0.00118	0.00484	4	/ 147/	
		6044		0.00096	0.00491	5	/ 147/	
		6045		0.00172	0.00732	5	/ 147/	
		6046		0.00168	0.00869	5	/ 147/	
		6047		0.00213	0.01114	4	/ 147/	
NA	BR03	6059	25.0	0.00117	0.01867	5	/ 146/	
		6060		0.00118	0.00944	5	/ 146/	
		6061		0.00119	0.01898	6	/ 146/	
K	CL	6000	25.0	0.00299	0.01432	4	/ 155/	
		6001		0.00233	0.01109	5	/ 155/	
		6002		0.00170	0.00735	5	/ 155/	
		6003		0.00135	0.00656	5	/ 155/	
		6004		0.00097	0.00470	5	/ 155/	
		6005		0.00104	0.00369	4	/ 155/	
		6006		0.00059	0.00291	5	/ 155/	
RB	CL	6036	25.0	0.00048	0.00214	5	/ 148/	
		6037		0.00073	0.00337	5	/ 148/	
		6038		0.00091	0.00419	5	/ 148/	
		6039		0.00111	0.00512	5	/ 148/	
		6040		0.00289	0.01393	5	/ 148/	
RB	BR	6014	25.0	0.00192	0.01004	5	/ 157/	
		6015		0.00157	0.00761	5	/ 157/	
		6016		0.00173	0.00617	5	/ 157/	
		6017		0.00104	0.00521	5	/ 157/	
		6018		0.00062	0.00317	6	/ 157/	
		6034		0.00201	0.01501	5	/ 157/	
RB	I	6053	25.0	0.00223	0.01119	5	/ 69/	
		6054		0.00127	0.00639	4	/ 69/	
		6055		0.00094	0.00489	5	/ 69/	
		6056		0.00066	0.00307	5	/ 69/	
		6057		0.00058	0.00228	5	/ 69/	
CS	CL	6007	25.0	0.00166	0.00901	4	/ 123/	
		6008		0.00164	0.00678	5	/ 123/	
		6009		0.00095	0.00464	5	/ 123/	

ION	ION	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN WATER + DIOXANE							
CS	J	6010		0.00076	0.00386	5	/ 123/
		6011		0.00063	0.00315	5	/ 123/
		6510		0.00072	0.00661	6	/ 143/
		6511		0.00031	0.00471	8	/ 143/
CS	J	6027	25.0	0.00109	0.01475	5	/ 156/
		6028		0.00198	0.00983	5	/ 156/
		6029		0.00186	0.00830	5	/ 156/
		6030		0.00132	0.00619	5	/ 156/
		6031		0.00110	0.00493	5	/ 156/
		6032		0.00088	0.00402	5	/ 156/
		6033		0.00065	0.00319	5	/ 156/
TM4N	N03	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		0.00009	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							
CS	CL	6512	25.0	0.00382	0.10425	8	/ 143/
		6513		0.00501	0.07415	8	/ 143/
		6514		0.00765	0.09964	7	/ 143/
		6515		0.00472	0.07067	8	/ 143/
		6516		0.00201	0.01686	7	/ 143/
		6517		0.00081	0.00966	8	/ 143/
		6518		0.00048	0.00602	8	/ 143/
		6519		0.00066	0.00637	8	/ 143/
		6520		0.00036	0.00559	5	/ 143/
		6521		0.00027	0.00356	7	/ 143/
		6522		0.00023	0.00332	6	/ 143/
		6530		0.00588	0.11203	7	/ 143/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN WATER + TETRAHYDROFURANE							
CS	CL	6523	25.0	0.00435	0.03535	5	/ 143/
		6524		0.00083	0.01103	7	/ 143/
		6525		0.00073	0.00317	6	/ 143/
CS	N03	6526		0.00045	0.00220	5	/ 143/
		6506	24.0	0.00508	0.07512	7	/ 22/
		6507		0.00741	0.04308	7	/ 22/
		6504		0.00575	0.06182	8	/ 22/
		6505		0.00425	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	/ 104/
		6452		0.00055	0.00399	5	/ 75/
		6453		0.00042	0.00290	5	/ 75/
Li	N03	6401	25.0	1.00000	4.00000	3	/ 7/
		6462		0.00035	0.00296	6	/ 75/
		6463		0.00032	0.00326	6	/ 75/
Li	CL04	6488	25.0	0.00096	0.00157	5	/ 43/
		6489		0.00023	0.00186	5	/ 43/
Li	PH4B	6480	25.0	0.00069	0.00376	5	/ 146/
Na	CL	6402	25.0	0.00009	0.00799	13	/ 67/
Na	CL	6403		0.00012	0.00918	10	/ 67/
		6497	25.0	0.00030	0.00374	6	/ 75/

ION	ION	NUP	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN METHANOL							
		6458		0.00022	0.00377	6	/ 75/
		6479		0.00040	0.02000	8	/ 23/
NA	BR	6448	25.0	0.00020	0.01000	7	/ 104/
NA	J	6705	25.0	0.00033	0.00815	7	/ 14/
NA	NO3	6464	25.0	0.00037	0.00348	5	/ 75/
		6465		0.00047	0.00326	5	/ 75/
NA	ClO4	6490	25.0	0.00029	0.00126	5	/ 43/
		6491		0.00023	0.00183	5	/ 43/
NA	PI	6425	25.0	0.00085	0.00420	5	/ 44/
		6426		0.00061	0.00453	5	/ 44/
		6427		0.00089	0.00437	4	/ 44/
		6428		0.00081	0.00406	5	/ 44/
NA	PH4B	6481	25.0	0.00070	0.00299	4	/ 146/
		6482		0.00102	0.00393	5	/ 146/
		6483		0.00098	0.00354	4	/ 146/
K	CL	6404	25.0	0.00015	0.00815	12	/ 67/
		6405		0.00013	0.01030	13	/ 67/
		6434		0.00032	0.00408	7	/ 75/
		6455		0.00022	0.00288	5	/ 75/
		6456		0.00022	0.00319	6	/ 75/
		6478		0.00040	0.02000	8	/ 23/
		6498		0.00094	0.00252	5	/ 51/
		6497		0.00005	0.00051	6	/ 51/
K	BR	6440	25.0	0.00090	0.01000	7	/ 104/
		6474		0.00029	0.00368	6	/ 75/
		6475		0.00076	0.00324	6	/ 75/
		6476		0.00016	0.00322	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	/ 44/
K	NO3	6466	25.0	0.00019	0.00193	5	/ 75/
		6467		0.00029	0.00225	6	/ 75/
K	ClO4	6927	25.0	0.00079	0.00252	8	/ 40/
K	PI	6406	25.0	0.00018	0.00599	6	/ 67/
		6429		0.00089	0.00463	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		0.00067	0.00298	5	/ 146/
K	D8504	6424	25.0	0.00026	0.00123	6	/ 67/
		6425		0.00022	0.00180	6	/ 67/
RB	CL	6459	25.0	0.00042	0.00340	7	/ 75/
RB	J	6707	25.0	0.00034	0.00829	7	/ 14/
RB	NO3	6468	25.0	0.00022	0.00270	7	/ 75/
		6469		0.00036	0.00238	6	/ 75/
CB	CL	6400	25.0	0.00145	0.00971	8	/ 158/
		6460		0.00027	0.00301	6	/ 75/
		6461		0.00032	0.00329	6	/ 75/
CB	J	6708	25.0	0.00031	0.00782	8	/ 14/
CB	NO3	6470	25.0	0.00012	0.00119	6	/ 75/
		6471		0.00010	0.00124	6	/ 75/
CB	ClO4	6928	25.0	0.00084	0.00480	10	/ 40/
ME4N	CL	6709	25.0	0.00026	0.01723	8	/ 139/
ME4N	BR	6710	25.0	0.00098	0.01583	8	/ 139/

ION	ION	NUM	T (°C)	C (MIN)	C (MAX)	N	REF:
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN METANOL							
MEAN	J	0711	25.0	0.00120	0.01440	8	1391
MEAN	PI	0417	25.0	0.00013	0.00475	8	671
		0418		0.00026	0.00433	8	671
		6718		0.00065	0.00935	8	1391
		0589		0.00085	0.00987	8	1391
ET4N	BR	6715	25.0	0.00060	0.01129	8	1391
		0413		0.00019	0.01191	13	671
		0414		0.00022	0.00352	7	671
PR4N	BR	6716	25.0	0.00057	0.00997	8	1391
PR4N	J	6717	25.0	0.00054	0.00977	8	1391
		0590		0.00078	0.00947	8	1391
PR4N	PI	6415	25.0	0.00015	0.00255	8	671
		0416		0.00020	0.00330	7	671
BU4N	CL	6712	25.0	0.00185	0.01304	7	1391
BU4N	BR	6714	25.0	0.00079	0.00889	8	1391
		0615		0.00060	0.00934	8	1391
BU4N	J	6721	25.0	0.00077	0.00945	8	1391
BU4N	PI	6409	25.0	0.00016	0.00238	8	671
		6410		0.00017	0.00191	6	671
		6411		0.00027	0.00854	9	671
		6412		0.00021	0.00633	7	671
		0434		0.00083	0.00413	5	441
		6435		0.00091	0.00414	5	441
		6436		0.00073	0.00365	5	441
		6713		0.00057	0.01004	8	1391
BU4N	PH4B	6439	25.0	0.00034	0.00140	4	441
		6440		0.00058	0.00304	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	0.00121	0.00854	16	671
IAM4N	J	6724	25.0	0.00205	0.00944	7	1361
IAM4N	CL04	6725	25.0	0.00137	0.00408	6	1361
IAM4N	PI	6407	25.0	0.00013	0.00173	7	671
		6608		0.00015	0.00154	6	671
AG	NU3	6472	25.0	0.00035	0.00323	6	751
AG	CL04	6473		0.00032	0.00321	6	751
		6492	25.0	0.00031	0.00283	6	431
		6493		0.00027	0.00278	6	431
		6494		0.00026	0.00147	5	431
IAM3BUN	BR	6495		0.00028	0.00277	5	431
IAM3BUN	J	6722	25.0	0.00108	0.01084	7	1361
		0445	25.0	0.00087	0.00430	5	451
IAM3BUN	PI	0723		0.000118	0.00923	8	1361
IAM3BUN	PH4B	6437	25.0	0.00072	0.00352	5	441
		6441	25.0	0.00042	0.00210	5	441
DBME3N	PI	6442		0.00043	0.00213	5	441
		6420		0.00023	0.00292	6	671
DBME3N	DBS04	6421	25.0	0.00013	0.00247	6	671
		0422		0.00024	0.00254	6	671
AM3BUN	PI	6438	25.0	0.00105	0.00508	5	441
BU4N	PI	0692	25.0	0.00016	0.00238	12	671
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN ETHANOL							
AG	CL04	6629	0.0	0.00034	0.00424	6	461
NA	J	0500	15.0	0.00052	0.00898	8	111
K	J	0501	15.0	0.00033	0.00838	8	111
RB	J	0502	15.0	0.00056	0.01052	8	111
CB	J	0503	15.0	0.00057	0.00934	8	111

ION	ION	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN ETHANOL							
Li	Cl	6613	25.0	0.00020	0.00400	6	/ 84/
		6616		0.00029	0.00283	6	/ 46/
		6617		0.00021	0.00273	6	/ 46/
		6618		0.00021	0.00343	6	/ 46/
		6619		0.00026	0.00325	6	/ 46/
		6620		0.00029	0.00341	6	/ 46/
Li	J	6647	25.0	0.00020	0.00261	6	/ 5/
		6648		0.00025	0.00298	6	/ 5/
Li	NO <sub>3</sub>	6605	25.0	0.00132	0.00998	5	/ 181/
		6621		0.00044	0.00481	6	/ 46/
		6622		0.00044	0.00427	6	/ 46/
		6623		0.00044	0.00474	6	/ 46/
Li	ClO <sub>4</sub>	6624	25.0	0.00040	0.00374	6	/ 46/
		6625		0.00040	0.00376	6	/ 46/
Li	PI	6666	25.0	0.00024	0.00319	6	/ 5/
		6665		0.00014	0.00219	6	/ 5/
Li	SCN	6651	25.0	0.00127	0.00335	6	/ 5/
		6652		0.00019	0.00329	6	/ 5/
Na	Cl	6612	25.0	0.00040	0.00043	5	/ 84/
		6614		0.00070	0.00400	6	/ 84/
		6640		0.00072	0.00138	5	/ 5/
		6641		0.00016	0.00116	5	/ 5/
		6642		0.00017	0.00141	4	/ 5/
Na	Br	6633	25.0	0.00112	0.00157	6	/ 46/
		6634		0.00028	0.00283	6	/ 46/
		6643		0.00024	0.00259	6	/ 5/
		6644		0.00018	0.00255	6	/ 5/
Na	J	6649	25.0	0.00072	0.00249	6	/ 5/
		6650		0.00021	0.00247	6	/ 5/
		6803		0.00044	0.00971	14	/ 14/
Na	ClO <sub>4</sub>	6626	25.0	0.00033	0.00342	6	/ 46/
		6627		0.00036	0.00350	5	/ 46/
Na	PI	6669	25.0	0.00020	0.00248	6	/ 5/
		6670		0.00004	0.00248	16	/ 5/
		6667		0.00014	0.00185	6	/ 5/
Na	SCN	6653	25.0	0.00079	0.00282	6	/ 5/
		6654		0.00070	0.00267	6	/ 5/
K	Cl	6864	25.0	0.00070	0.00400	6	/ 84/
K	Br	6645	25.0	0.00072	0.00166	6	/ 5/
		6646		0.00074	0.00136	5	/ 5/
		6848		0.00096	0.00433	8	/ 137/
K	J	6635	25.0	0.00034	0.00272	5	/ 46/
		6636		0.00042	0.00281	5	/ 46/
		6637		0.00015	0.00272	6	/ 46/
		6864		0.00034	0.00803	16	/ 14/
K	SCN	6655	25.0	0.00070	0.00339	6	/ 5/
RB	J	6638	25.0	0.00013	0.00087	5	/ 46/
		6639		0.00017	0.00102	5	/ 46/
		6865		0.00021	0.00953	17	/ 14/
RB	SCN	6656	25.0	0.00017	0.00257	6	/ 5/
		6657		0.00018	0.00270	6	/ 5/
CB	Cl	6601	25.0	0.00033	0.01094	9	/ 185/
		6607		0.00028	0.00034	7	/ 59/
		6608		0.00035	0.00044	6	/ 59/
		6606		0.00019	0.00027	7	/ 59/
CS	J	6866	25.0	0.00070	0.00789	16	/ 14/
CS	SCN	6659	25.0	0.00015	0.00186	6	/ 5/
		6660		0.00023	0.00181	6	/ 5/

ION ELECTRICAL CONDUCTANCE	ION CONDUCTANCE IN ETHANOL	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
NH <sub>4</sub>	NO <sub>3</sub>	6664	25.0	0.00019	0.00201	6	/ 51
		6663		0.00018	0.00310	6	/ 51
NH <sub>4</sub>	ClO <sub>4</sub>	6671	25.0	0.00022	0.00252	6	/ 51
		6672		0.00020	0.00297	6	/ 51
NH <sub>4</sub>	SCN	6668		0.00025	0.00320	6	/ 51
		6661	25.0	0.00021	0.00279	6	/ 51
ME <sub>4</sub> N	Cl	6852	25.0	0.00066	0.01126	9	/ 62/
ME <sub>4</sub> N	Br	6854	25.0	0.00106	0.00719	6	/ 62/
ET <sub>4</sub> N	Cl	6673	25.0	0.00018	0.00298	6	/ 51
		6674		0.00018	0.00298	11	/ 51
ET <sub>4</sub> N	Br	6675	25.0	0.00019	0.00222	6	/ 51
		6676		0.00016	0.00254	6	/ 51
		6850		0.00153	0.01000	7	/ 134/
		6855		0.00078	0.00788	8	/ 62/
ET <sub>4</sub> N	J	6858	25.0	0.00077	0.00799	8	/ 62/
ET <sub>4</sub> N	NO <sub>3</sub>	6962	25.0	0.00019	0.00338	12	/ 51
ET <sub>4</sub> N	ClO <sub>4</sub>	6963	25.0	0.00016	0.00125	10	/ 51
ET <sub>4</sub> N	PI	6961	25.0	0.00013	0.00189	12	/ 51
PR <sub>4</sub> N	Br	6851	25.0	0.00050	0.00739	7	/ 134/
		6856		0.00086	0.00805	8	/ 62/
PR <sub>4</sub> N	J	6859	25.0	0.00097	0.00962	8	/ 62/
BU <sub>4</sub> N	Cl	6853	25.0	0.00061	0.00848	9	/ 62/
BU <sub>4</sub> N	Br	6857	25.0	0.00095	0.00920	8	/ 62/
		6849		0.00135	0.01087	13	/ 134/
BU <sub>4</sub> N	J	6860	25.0	0.00092	0.00874	8	/ 62/
RP <sub>4</sub> N	J	6862	25.0	0.00067	0.00692	8	/ 62/
MG	Cl	6609	25.0	0.00003	0.00009	8	/ 59/
		6443		0.00009	0.00016	7	/ 59/
AG	NO <sub>3</sub>	6604	25.0	0.00196	0.00023	7	/ 59/
		6631		0.00061	0.00276	5	/ 46/
		6632		0.00043	0.00341	5	/ 46/
AG	ClO <sub>4</sub>	6628	25.0	0.00036	0.00376	5	/ 46/
		6630		0.00038	0.00281	5	/ 46/
IAM3BUN	J	6861	25.0	0.00080	0.00758	8	/ 62/
CS	Cl	6602	35.0	0.00083	0.01079	9	/ 135/
CS	Cl	6603	45.0	0.00082	0.01068	9	/ 135/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN N <sup>o</sup> PROPOANEOL							
Li	Cl	6365	25.0	0.00012	1.00680	14	/ 210/
Na	Br	6921	25.0	0.00033	0.00346	8	/ 99/
Na	J	6920	25.0	0.00045	0.00519	11	/ 99/
		6903		0.00028	0.00707	14	/ 226/
K	Br	6922	25.0	0.00026	0.00144	4	/ 99/
K	J	6919	25.0	0.00021	0.00360	14	/ 99/
		6908		0.00033	0.00784	12	/ 226/
Rb	J	6917	25.0	0.00019	0.00362	14	/ 226/
CS	J	6918	25.0	0.00015	0.00222	12	/ 226/
ME <sub>4</sub> N	Cl	6825	25.0	0.00116	0.00868	7	/ 62/
ME <sub>4</sub> N	Br	6827	25.0	0.00040	0.00548	8	/ 62/
ET <sub>4</sub> N	Br	6828	25.0	0.00086	0.00799	8	/ 62/
ET <sub>4</sub> N	J	6831	25.0	0.00066	0.00793	8	/ 62/
PR <sub>4</sub> N	Br	6829	25.0	0.00117	0.01083	8	/ 62/
PR <sub>4</sub> N	J	6832	25.0	0.00105	0.01011	8	/ 62/
BU <sub>4</sub> N	Cl	6826	25.0	0.00067	0.00898	8	/ 62/
BU <sub>4</sub> N	Br	6830	25.0	0.00085	0.00839	8	/ 62/
BU <sub>4</sub> N	J	6833	25.0	0.00091	0.00862	8	/ 62/
BU <sub>4</sub> N	ClO <sub>4</sub>	6883	25.0	0.00077	0.01007	8	/ 62/

ION	ION	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN N <sup>o</sup> PROPOANOL							
HP4N	J	6835	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	0.00952	8	/ 98/
		6578		0.00118	0.00796	8	/ 98/
Li	RR	6579	25.0	0.00258	0.00832	6	/ 98/
		6329		0.00197	0.00905	6	/ 98/
Li	J	6581	25.0	0.00137	0.00421	7	/ 98/
		6582		0.00106	0.00579	8	/ 98/
Li	SCN	6330	25.0	0.00018	0.00693	9	/ 98/
		6332		0.00020	0.00602	8	/ 98/
Li	ASFO	6588	25.0	0.00183	0.00819	6	/ 98/
		6331		0.00210	0.00865	6	/ 98/
Na	ClO <sub>4</sub>	6900	25.0	0.00083	0.00773	13	/ 137/
Na	PH4B	6334	25.0	0.03213	0.00789	8	/ 98/
		6913		0.00106	0.01059	16	/ 137/
		6333		0.00249	0.00583	8	/ 98/
K	ClO <sub>4</sub>	6910	25.0	0.00144	0.01240	14	/ 137/
		6089		0.00196	0.00648	10	/ 40/
K	PH4B	6914	25.0	0.00102	0.00854	14	/ 137/
RB	ClO <sub>4</sub>	6911	25.0	0.00116	0.00988	13	/ 137/
RB	PH4B	6915	25.0	0.00063	0.00691	10	/ 137/
CS	ClO <sub>4</sub>	6912	25.0	0.00110	0.00950	14	/ 137/
		6094		0.00101	0.00489	10	/ 40/
CS	PH4B	6916	25.0	0.00086	0.00766	16	/ 137/
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	0.00856	7	/ 66/
BA	ClO <sub>4</sub>	6941	25.0	0.00033	0.00849	7	/ 222/
AG	NO <sub>3</sub>	6950	25.0	0.00017	0.00457	7	/ 222/
AG	ClO <sub>4</sub>	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	0.00347	5	/ 45/
K	ClO <sub>3</sub>	6592	25.0	0.00181	0.01659	5	/ 3/
K	ClO <sub>4</sub>	6591	25.0	0.00318	0.02492	5	/ 3/
ME4N	BR	6505	25.0	0.00215	0.02321	5	/ 3/
ME4N	J	6745	25.0	0.00000	0.00355	5	/ 3/
ET4N	BR	6506	25.0	0.00205	0.02349	5	/ 3/
ET4N	J	6504	25.0	0.00145	0.02297	5	/ 3/
ET4N	ClO <sub>4</sub>	6507	25.0	0.00213	0.02165	5	/ 3/
BU4N	ClO <sub>4</sub>	6731	25.0	0.00132	0.01212	5	/ 3/
PH4P	Cl	6126	25.0	0.00098	0.00991	5	/ 203/
PH4P	BR	6503	25.0	0.00005	0.00967	5	/ 203/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN FORMAMIDE							
Li	NO <sub>3</sub>	A308	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	/ 71
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		0.00020	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		0.00197	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	0.00450	5	/ 40/
		6093		0.00114	0.00490	5	/ 40/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN METHANOL + ACETONITRILE							
IAM3BUN	J	A310	25.0	0.00004	0.00474	5	/ 45/
		A312		0.00101	0.00471	5	/ 45/
		A313		0.00100	0.00426	4	/ 45/
IAM3BUN	PI	A318	25.0	0.00099	0.00487	5	/ 45/
		A319		0.00088	0.00448	5	/ 45/
		A320		0.00100	0.00478	5	/ 45/
		A321		0.00088	0.00441	5	/ 45/
IAM3BUN	RH4B	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	0.00571	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 <sup>PRO</sup> 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	0.00066	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	0.00061	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	0.00480	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/
BU4N	ClO4	6840	25.0	0.00032	0.00446	8	/ 167/
MP4N	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	0.00160	0.03208	11	/ 20/
NA	J	6575	25.0	0.00064	0.00687	32	/ 10/

ION	ION	NUM	T (°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF#
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN BUTANOL							
RH	J	6572	25.0	0.00040	0.00247	6	101
		6611		0.00038	0.00240	6	101
NM4	J	6948	25.0	0.00132	0.02652	11	1201
ME4N	CL	6867	25.0	0.00060	0.00962	7	631
		6647		0.00041	0.00704	8	631
ME4N	BR	6868	25.0	0.00023	0.00357	8	631
ET4N	BR	6871	25.0	0.00080	0.00783	8	631
ET4N	J	6869	25.0	0.00072	0.00807	8	631
PR4N	BR	6875	25.0	0.00074	0.00806	8	631
PR4N	J	6872	25.0	0.00095	0.00924	8	631
BU4N	CL	6874	25.0	0.00048	0.00797	8	631
BU4N	BR	6840	25.0	0.00054	0.00701	8	631
BU4N	J	6870	25.0	0.00071	0.00743	8	631
BU4N	CL04	6873	25.0	0.00064	0.00974	8	631
MP4N	J	6870	25.0	0.00053	0.00694	9	631
IM3BUN	J	6877	25.0	0.00066	0.00806	8	631
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN PENTANOL							
BU4N	BR	6878	25.0	0.00067	0.00824	8	631
BU4N	J	6879	25.0	0.00065	0.00797	8	631
MP4N	J	6880	25.0	0.00047	0.00601	8	631
IM3BUN	J	6881	25.0	0.00049	0.00694	8	631
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN 1-PENTANOL							
LI	CL	0507	25.0	0.00003	0.92188	10	12101
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN HEXANOL							
LI	CL	0508	25.0	0.00003	0.97964	10	12101
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN HEPTANOL							
LI	CL	0509	25.0	0.00002	0.39134	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	40	121
NA	J	6610	25.0	0.00017	0.00054	5	101
		6658		0.00013	0.00057	15	101
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN DECANOL							
LI	CL	6571	25.0	0.00008	0.07080	8	101
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN ACETONE							
LI	CL	6894	25.0	0.00005	0.00635	11	1381
LI	BR	6895	25.0	0.00001	0.00275	7	1381
LI	J	6897	25.0	0.00002	0.00360	8	1381
LI	PI	6940	25.0	0.00007	0.00410	6	1381
NA	PI	6943	25.0	0.00011	0.00460	6	1381
K	J	6945	25.0	0.00010	0.00488	6	1381
		6896		0.00005	0.00342	7	1381
K	PI	6944	25.0	0.00000	0.00463	6	1381
K	SGN	6946	25.0	0.00005	0.00347	5	1381
NM4	PI	6980	25.0	0.00010	0.00104	5	1681
ME4N	PI	6981	25.0	0.00013	0.00120	5	1681
ET4N	PI	6939	25.0	0.00008	0.00384	6	1381
BU4N	CL	6898	25.0	0.00003	0.00331	7	1381
		6983		0.00005	0.00040	4	1381
BU4N	BR	6937	25.0	0.00007	0.00434	6	1381
BU4N	J	6938	25.0	0.00006	0.00520	6	1381
RU4N	NO3	6930	25.0	0.00008	0.00505	6	1381
BU4N	CL04	6935	25.0	0.00006	0.00403	6	1381
BU4N	PI	6984	25.0	0.00008	0.00340	6	1381
AM4N	BR	6982	25.0	0.00006	0.00112	5	1681
PM4P	CL	6132	25.0	0.00049	0.00385	5	2031
PM4P	BR	6598	25.0	0.00057	0.00370	5	2031

ION	ION	NUM	T (°C)	C (MIN)	C (MAX)	N	REF:
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN WATER + ACETONE							
PH4P	BR	6599	25.0	0.00092	0.00985	6	/ 203/
PH4P	BR	6600	25.0	0.00098	0.01034	6	/ 203/
		6121		0.00096	0.01009	6	/ 203/
		6120		0.00095	0.00973	6	/ 203/
ET4N	ClO <sub>4</sub>	6025	25.0	0.00032	0.01267	19	/ 4/
ET4N	ClO <sub>4</sub>	6026	30.0	0.00066	0.01281	16	/ 4/
ET4N	ClO <sub>4</sub>	6058	40.0	0.00031	0.01286	15	/ 4/
ET4N	ClO <sub>4</sub>	6062	50.0	0.00031	0.01252	17	/ 4/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN PROPYLENE CARBONATE							
MEAN	PHAC	6548	25.0	0.00027	0.00685	12	/ 144/
ET4N	NO <sub>3</sub>	6558	25.0	0.00025	0.00632	12	/ 144/
ET4N	BENZOAT	6550	25.0	0.00138	0.02207	7	/ 144/
ET4N	DIPHAC	6549	25.0	0.00020	0.00726	12	/ 144/
ET4N	PNIBAT	6551	25.0	0.00025	0.00757	12	/ 144/
ET4N	PNCLPHAT	6556	25.0	0.00003	0.00673	11	/ 144/
ET4N	METSUAT	6557	25.0	0.00025	0.00826	12	/ 144/
BU4N	AC	6547	25.0	0.00045	0.00786	12	/ 144/
BU4N	PNIPHAT	6553	25.0	0.00043	0.00732	11	/ 144/
BU4N	DINIPHAT	6554	25.0	0.00018	0.00557	12	/ 144/
BU4N	DICLPHAT	6555	25.0	0.00024	0.00456	12	/ 144/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN DIOXANE							
BU4N	ClO <sub>4</sub>	6892	25.0	0.00001	0.02090	26	/ 165/
BU4N	AC	6893	25.0	0.00002	0.00092	7	/ 165/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN BENZENE							
BU4N	BR	6886	25.0	0.00002	1.48400	25	/ 216/
BU4N	ClO <sub>4</sub>	6890	25.0	0.00000	0.02588	27	/ 165/
BU4N	AC	6891	25.0	0.00002	0.00110	20	/ 165/
BU4N	SCN	6884	25.0	0.00004	4.10800	23	/ 216/
BU4N	PI	6888	25.0	0.43400	2.38000	8	/ 216/
BU4N	SCN	6885	25.0	0.00007	2.27600	18	/ 216/
AG	ClO <sub>4</sub>	6889	25.0	0.00005	0.28200	18	/ 165/
BU3MEN	SCN	6887	25.0	0.00020	0.03838	7	/ 216/
BU4N	CL	6728	30.0	0.00004	0.00050	18	/ 100/
		6729		0.00002	0.00066	13	/ 100/
BU4N	NO <sub>3</sub>	6578	30.0	0.00002	0.00200	22	/ 100/
BU4N	ClO <sub>4</sub>	6727	30.0	0.00002	0.00080	26	/ 100/
		6730		0.00005	0.00050	11	/ 100/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN TETRAHYDROFURAN							
Li	ClO <sub>4</sub>	6794	25.0	0.00010	1.29035	16	/ 60/
Li	PH4B	6934	25.0	0.00001	0.00022	6	/ 15/
Na	PH4B	6932	25.0	0.00000	0.00016	13	/ 15/
K	PN4B	6931	25.0	0.00000	0.00016	11	/ 15/
CE	PH4B	6933	25.0	0.00000	0.00040	21	/ 15/
BU4N	PH4B	6930	25.0	0.00000	0.00040	13	/ 15/
BU3MEN	PH4B	6929	25.0	0.00001	0.00019	7	/ 15/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN ETHYLACETATE							
	ClO <sub>4</sub>	6818	25.0	1.00000	9.80000	12	/ 176/
		6819		0.00526	5.26000	28	/ 176/
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN METHANOL + DIOXANE							
Li	ClO <sub>4</sub>	6801	25.0	0.00283	0.39200	23	/ 176/
		6806		0.00132	1.41200	17	/ 176/
		6802		0.00073	0.54800	29	/ 176/
		6803		0.00046	2.16000	22	/ 176/
		6805		0.00011	2.74000	33	/ 176/
		6807		0.00004	3.94000	20	/ 176/
		AB09		0.00007	4.00000	29	/ 176/
		AB04		0.00006	5.04000	27	/ 176/

ION	ION	NUM	T (°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN METHANOL + VIOXANE							
		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		0.00014	0.32000	25	11761
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN CHLOROBENZENE							
PR4N	PI	6882	25.0	0.00001	0.00300	21	11581
BU4N	PI	6574	25.0	0.00002	0.00300	11	1131
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN DIMETHYLSULFOXIDE + ACETON							
PR4N	BR	6133	25.0	0.00120	0.00560	6	12031
		6134		0.00070	0.00572	7	12031
		6135		0.00039	0.00545	6	12031
		6130		0.00025	0.00314	5	12031
BU4N	BR	6134	25.0	0.00110	0.00480	4	12031
		6140		0.00173	0.00434	4	12031
		6137		0.00057	0.00560	5	12031
PH4P	CL	6127	25.0	0.00102	0.00484	6	12031
		6128		0.00079	0.00580	5	12031
		6129		0.00060	0.00582	6	12031
		6130		0.00140	0.00624	5	12031
		6131		0.00073	0.00687	5	12031
PH4P	BR	6752	25.0	0.00101	0.00437	5	12031
		6753		0.00058	0.00404	6	12031
		6754		0.00070	0.00884	6	12031
		6755		0.00071	0.00594	5	12031
ELECTRICAL CONDUCTANCE IN WATER + DIMETHYLSULFOXIDE							
PR4N	BR	6740	25.0	0.00130	0.00740	5	12031
PH4P	CL	6122	25.0	0.00102	0.01034	5	12031
		6123		0.00100	0.01043	5	12031
		6124		0.00107	0.01070	5	12031
		6125		0.00101	0.00990	6	12031
PH4P	BR	6751	25.0	0.00047	0.01004	5	12031
		6738		0.00103	0.01063	5	12031
		6739		0.00093	0.00984	5	12031
		6741		0.00107	0.01027	5	12031
Li	ClO <sub>4</sub>	6817	25.0	0.00017	2.73400	55	11761
		6816		0.00047	1.08000	31	11761
		6874		0.00120	0.13760	13	11761
		6875		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	34	11761
		6822		0.00004	8.92000	32	11761
CATION TRANSFERENCE NUMBER IN WATER							
Na	Cl	4020	25.0	0.03005	0.20050	6	12311
OSMOTIC COEFFICIENT IN WATER							
K	SO <sub>4</sub>	2216	0.0	0.0	0.0	27	11511
Li	Cl	21070	0.0	0.0	0.0	33	12011
		2001		0.0	0.0	19	11511
		2135		0.00401	0.20240	26	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	0.22440	10	11501
Li	NO <sub>3</sub>	2188	0.0	0.0	0.0	33	12011

ION	ION	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF!
OSMOTIC COEFFICIENT IN WATER							
Li	ClO <sub>3</sub>	2082	0.0	0.0	0.0	41	1/2021
Li	ClO <sub>4</sub>	2085	0.0	0.0	0.0	33	1/2021
Na	Cl	2070	0.0	0.0	0.0	20	1/1911
		2075		0.0	0.0	28	1/2011
		2095		0.0	0.0	20	1/1911
Na	Br	2078	0.0	0.0	0.0	31	1/2011
Na	NO <sub>3</sub>	2087	0.0	0.0	0.0	33	1/2001
Na	ClO <sub>3</sub>	2081	0.0	0.0	0.0	38	1/2021
Na	ClO <sub>4</sub>	2084	0.0	0.0	0.0	32	1/2021
Na	SO <sub>4</sub>	2217	0.0	0.0	0.0	11	1/1911
K	Cl	2071	0.0	0.0	0.0	16	1/1911
		2074		0.0	0.0	27	1/2011
		2058		0.0	0.0	21	1/781
		2134	0.00319	0.20940	0	1/1911	
K	Br	2077	0.0	0.0	0.0	30	1/2011
K	J	2137	0.0	0.00523	0.13784	20	1/1501
K	NO <sub>3</sub>	2086	0.0	0.0	0.0	28	1/2001
K	ClO <sub>3</sub>	2080	0.0	0.0	0.0	26	1/2021
K	ClO <sub>4</sub>	2083	0.0	0.0	0.0	15	1/2021
CS	Cl	2056	0.0	0.0	0.0	15	1/1541
		2138	0.00350	0.15294	20	1/1501	
CS	J	2139	0.0	0.00310	0.17704	16	1/1501
MEAN	Cl	2103	0.0	0.0	0.0	53	1/781
MEAN	Br	2104	0.0	0.0	0.0	23	1/781
MEAN	Cl	2105	0.0	0.00280	0.18304	7	1/1911
MEAN	Br	2016	0.0	0.03487	0.14444	0	1/2041
MEAN	J	2106	0.0	0.00176	0.14864	4	1/1911
ETAN	Cl	2147	0.0	0.00298	0.23704	0	1/1441
ETAN	Br	2017	0.0	0.15630	0.23511	4	1/2041
ETAN	J	2148	0.0	0.00357	0.13264	3	1/1491
EPAN	Cl	2109	0.0	0.04238	0.17284	5	1/1491
EPAN	Br	2018	0.0	0.01024	0.17577	4	1/2041
EPAN	J	2123	0.0	0.00262	0.06370	8	1/1491
EPAN	Cl	2124	0.0	0.00168	0.05744	4	1/1491
BUAN	J	2125	0.0	0.00344	0.03412	5	1/1491
MG	SO <sub>4</sub>	2400	0.0	0.0	0.0	14	1/1911
		2401		0.0	0.0	10	1/2201
NI	SO <sub>4</sub>	2402	0.0	0.0	0.0	14	1/2201
NA	Cl	2061	15.0	0.0	0.0	4	1/1961
H	F	2140	25.0	0.64000	20.70097	45	1/901
H	Cl	2010	25.0	0.14903	27.01233	36	1/1901
		2141		0.90000	19.03000	39	1/901
H	Br	2019	25.0	0.0	0.0	33	1/1701
		2142		0.98000	14.21400	34	1/901
	J	2025	25.0	0.0	0.0	29	1/1701
		2143		0.98200	13.24704	33	1/901
	NO <sub>3</sub>	2035	25.0	0.0	0.0	47	1/1301
		2144		0.97400	29.44998	51	1/901
H	ClO <sub>4</sub>	2114	25.0	0.98000	20.00904	39	1/901
Li	Na	2599	25.0	0.0	0.29746	31	1/1901
Li	Cl	2502	25.0	0.0	5.32680	84	1/1911
Li	K	2503		0.0	5.32080	84	1/1911
Li	Cl	2508	25.0	0.0	2.82720	72	1/1911
		2504		0.0	4.53004	78	1/1911

ION OSMOTIC COEFFICIENT IN LI	TON CL	NUM CS	T(°C) 25.0	C(MIN) 0.0	C(MAX) 5.32084	N 84	REF# 1971
		2506	0.0	0.01124	40	1971	
Li	OH	2041	25.0	0.14450	9.43594	21	1971
		2110	0.97104	5.43304	26	1901	
Li	CL	2013	25.0	0.14405	27.52150	37	1971
		2145	0.04194	26.75217	43	1901	
Li	BR	2020	25.0	0.14892	25.51474	37	1971
		2146	0.04194	1.94528	16	1901	
Li	J	2020	25.0	0.14869	16.46134	29	1971
		2153	0.04194	1.92417	16	1901	
Li	NOS	2036	25.0	0.14882	23.15904	37	1971
		2112	0.97100	21.80990	43	1901	
Li	Cl04	2120	25.0	0.98100	0.18300	26	1901
Li	BA	2518	25.0	0.0	3.67532	30	1961
Na	K	2500	25.0	0.0	4.52750	78	1971
Na	CL	2501	0.0	4.51313	78	1971	
Na	K	2531	25.0	0.0	0.47252	36	1981
Na	Cl	2507	25.0	0.0	5.52320	84	1971
Na	OH	2042	25.0	0.14457	42.42773	46	1971
		2111	0.97100	31.64697	52	1901	
Na	F	2031	25.0	0.14445	1.99445	10	1971
		2154	0.04194	1.99408	16	1901	
Na	CL	2002	25.0	0.14403	7.34044	12	1961
		2000	0.14403	10.04044	35	1961	
		2012	0.14900	10.00857	23	1971	
		2147	0.04194	1.95802	16	1901	
Na	BR	2021	25.0	0.14892	14.31994	26	1971
		2148	0.04194	1.94543	16	1901	
Na	J	2027	25.0	0.14870	10.52264	24	1971
		2155	0.04194	1.92417	16	1901	
Na	NOS	2037	25.0	0.14882	14.18004	27	1971
		2116	0.97100	12.20404	34	1901	
Na	Cl03	2130	25.0	0.97800	3.88004	23	1901
Na	Cl04	2127	25.0	0.97800	7.00204	24	1901
Na	Br03	2165	25.0	0.97800	3.40904	23	1901
K	CS	2509	25.0	0.0	4.31250	84	1971
K	OH	2043	25.0	0.14432	29.06650	38	1971
		2112	0.97100	23.07898	43	1901	
K	F	2032	25.0	0.14423	25.176506	34	1971
		2156	0.04194	1.97417	16	1901	
K	CL	2004	25.0	0.14883	8.54374	14	1961
		2008	0.14883	8.32880	29	1961	
		2113	0.0	7.87747	20	1971	
		2149	-194	1.93564	16	1901	
K	BR	2022	20	0.14872	9.08153	22	1971
		2150	0.04194	1.92533	18	1901	
K	J	2028	25.0	0.14849	11.46382	25	1971
		2157	0.04194	1.90544	16	1901	
K	NOS	2038	25.0	0.14863	0.08337	18	1971
		2117	0.97100	4.07904	24	1901	
K	Cl03	2134	25.0	0.97500	1.50304	13	1901
K	Br03	2166	25.0	0.97400	1.31904	11	1901

ION	ION	NUMBER	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF
OSMOTIC	SUPERFICIENT	IN WATER					
K	CA	2526	25.0	0.0	4.31121	78	14971
CL							
RB	F	2033	25.0	0.14714	28.56612	39	14701
		2158		0.00199	1.96481	16	1401
RB	CL	2014	25.0	0.14875	11.08764	24	14701
		2159		0.00199	1.92873	16	1401
RB	BR	2023	25.0	0.14862	9.50923	23	14701
		2160		0.00199	1.91637	16	1401
RB	J	2024	25.0	0.14839	10.14110	24	14701
		2161		0.00199	1.89583	16	1401
RB	NO3	2034	25.0	1.00300	5.01600	20	14701
		2118		0.97200	5.02100	26	1401
CS	OH	2044	25.0	0.0	0.0	11	14701
		2113		0.96000	2.22900	17	1401
CS	F	2034	25.0	0.14900	30.50983	47	14701
		2162		0.00199	1.95112	16	1401
CS	CL	2015	25.0	0.14861	14.08239	28	14701
		2151		0.00199	1.91530	16	1401
CS	BR	2024	25.0	0.14847	8.60223	22	14701
		2163		0.00199	1.90316	16	1401
CS	J	2030	25.0	0.14825	5.00853	17	14701
		2164		0.00199	1.88251	16	1401
CS	NO3	2040	25.0	0.14839	2.59442	12	14701
		2119		0.97200	2.19000	19	1401
CS	BA	2519	25.0	0.0	3.40262	36	14601
NM4	CL	2007	25.0	0.14868	10.94932	24	14701
		2152		0.00199	1.92227	16	1401
NM4	BR	2073	25.0	0.0	0.0	23	1471
NM4	NO3	2009	25.0	0.14845	22.73270	44	14701
		2122		0.97300	20.40098	49	1401
NM4	ClO4	2129	25.0	0.97100	3.57604	22	1401
ME4N	CL	2045	25.0	0.14728	12.08384	36	14591
ME4N	BR	2049	25.0	0.14714	6.73984	22	14591
ME4N	J	2053	25.0	0.14692	0.48324	4	14591
ET4N	CL	2046	25.0	0.14614	7.53967	26	14591
ET4N	BR	2050	25.0	0.14600	8.18884	29	14591
ET4N	J	2062	25.0	0.0	0.0	13	1461
		2054		0.14578	2.80824	19	14591
PR4N	CL	2047	25.0	0.14489	7.89464	35	14591
PR4N	BR	2072	25.0	0.0	0.0	30	1231
		2059		0.14476	6.11109	26	14591
BURN	CL	2055	25.0	0.14454	3.65767	9	14591
BURN	BR	2048	25.0	0.14374	6.17360	32	14591
CL	BR	2052	25.0	0.14561	6.02504	38	14591
NA	CL	2534	25.0	0.0	0.97891	48	1481
K	BR	2533	25.0	0.0	0.96916	48	1481
CL	NO3	2532	25.0	0.0	5.30429	84	14971
NA	SO4	2526	25.0	0.0	5.30424	84	14971
CL	NA	2525	25.0	0.0	5.30424	84	14971
CL	CL	2520	25.0	0.0	1.90474	84	14971
MG	NA	2521	25.0	0.0	1.90474	84	14971
CL	CL	2204	25.0	0.00499	8.37924	36	1811

ION OSMOTIC COEFFICIENT	ION IN WATER	NUM T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
MG	BR	2205	25.0	0.00299	5.00284	30 / 811
MG	J	2206	25.0	0.00299	7.04265	36 / 811
MG	SO4	2405	25.0	0.0	U.U	13 / 2231
CA	NA	2522	25.0	0.0	1.89405	90 / 1971
CL						
CA	CL	2200	25.0	0.24850	22.24490	27 / 14701
		2203		0.01495	10.69822	35 / 811
		2207		0.00299	8.27404	36 / 811
CA	BR	2208	25.0	0.00299	8.00871	36 / 811
CA	J	2209	25.0	0.00299	5.13383	38 / 811
BR	CL	2201	25.0	0.29847	10.39889	19 / 1961
		2210		0.00299	8.23827	36 / 811
SR	BR	2211	25.0	0.00299	5.85536	40 / 811
SR	J	2215	25.0	0.00299	5.25676	38 / 811
BA	NA	2523	25.0	0.0	1.57784	78 / 1971
CL						
BA	K	2527	25.0	0.0	1.57784	78 / 1971
CL						
BA	CL	2202	25.0	0.24835	5.10806	14 / 1961
		2212		0.00299	5.04924	36 / 811
BA	BR	2213	25.0	0.00299	6.28361	42 / 811
BA	J	2214	25.0	0.00299	5.27351	38 / 811
CU	CL	2221	25.0	0.29877	8.51881	17 / 2141
AG	NO3	2120	25.0	0.97200	15.13470	38 / 901
LA	CL	2300	25.0	0.37802	13.04764	19 / 1701
MN	SO4	2404	25.0	0.0	U.U	12 / 2281
FE	CL	2222	25.0	0.90000	3.43894	35 / 821
CO	CL	2226	25.0	0.94730	6.05284	41 / 821
CO	BR	2227	25.0	0.91760	8.65404	48 / 821
CO	J	2228	25.0	0.94630	13.25294	65 / 821
CO	NO3	2229	25.0	0.94390	8.11956	49 / 821
NI	CL	2220	25.0	0.24871	8.14651	17 / 2141
		2223		0.90850	8.11080	48 / 821
NI	BR	2224	25.0	0.91380	7.04504	43 / 821
NI	NO3	2225	25.0	0.94680	6.87164	43 / 821
SO4	CL	2528	25.0	0.0	1.47082	90 / 1971
MG						
TL	CL	2132	25.0	0.96300	0.98800	4 / 901
TL	NO3	2121	25.0	0.90000	1.17600	10 / 901
TL	ClO4	2128	25.0	0.97100	1.30300	11 / 901
TL	NO2	2133	25.0	0.94300	2.02400	18 / 901
NA	CL	2090	35.0	0.0	U.U	4 / 1961
NA	CL	2089	45.0	0.0	U.U	4 / 1961
K	CL	2101	50.0	0.0	U.U	5 / 941
NA	CL	2091	60.0	0.0	U.U	10 / 1961
K	BR	2094	60.0	0.0	U.U	16 / 1961
NA	CL	2092	70.0	0.0	U.U	5 / 941
K	CL	2102	70.0	0.0	U.U	14 / 1961
K	BK	2095	70.0	0.0	U.U	14 / 1961
NA	CL	2057	75.0	0.0	U.U	17 / 2301
NA	CL	2093	80.0	0.0	U.U	16 / 1961
K	BR	2090	80.0	0.0	U.U	14 / 1961
NA	CL	2100	90.0	0.0	U.U	16 / 1961
K	BK	2097	90.0	0.0	U.U	14 / 1961
NA	CL	2059	100.0	0.0	U.U	18 / 2301
		2099		0.0	U.U	16 / 1961
K	BR	2098	100.0	0.0	U.U	14 / 1961
NA	CL	2060	125.0	0.0	U.U	18 / 2301

ION	ION	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REF.
DINOTIC COEFFICIENT IN WATER							
NA	CL	2063	150.0	0.0	0.0	19	/ 2301
NA	CL	2064	175.0	0.0	0.0	19	/ 2301
NA	CL	2065	200.0	0.0	0.0	19	/ 2301
NA	CL	2066	225.0	0.0	0.0	20	/ 2301
NA	CL	2067	250.0	0.0	0.0	20	/ 2301
NA	CL	2068	275.0	0.0	0.0	21	/ 2301
NA	CL	2069	300.0	0.0	0.0	22	/ 2301
MEAN ACTIVITY COEFFICIENT IN WATER							
M	CL	1004	0.0	0.88460	0.00600	17	/ 921
M	NO <sub>3</sub>	1031	25.0	0.89100	3.90400	9	/ 921
M	SO <sub>4</sub>	1202	25.0	0.36500	18.97298	29	/ 921
LI	CL	1003	25.0	0.194905	5.62118	10	/ 921
LI	BR	1011	25.0	0.89400	4.35200	10	/ 921
LI	J	1021	25.0	0.91100	4.73900	10	/ 921
LI	NO <sub>3</sub>	1037	25.0	0.88800	4.55200	11	/ 921
NA	F	1047	25.0	0.80400	1.57200	6	/ 921
NA	CL	1001	25.0	0.87800	4.79200	12	/ 921
		1002		0.00497	7.38149	21	/ 921
		1051		0.87110	0.93330	10	/ 921
		1057		0.004199	10.63273	61	/ 1961
		1061		0.87100	0.95864	8	/ 1961
NA	BR	1013	25.0	0.88100	4.93800	12	/ 921
NA	J	1023	25.0	0.80800	4.56000	11	/ 921
NA	NO <sub>3</sub>	1039	25.0	0.82800	0.37300	10	/ 921
K	F	1049	25.0	0.87400	4.74000	12	/ 921
K	CL	1005	25.0	0.80900	5.09000	13	/ 921
		1053		0.80500	4.58200	15	/ 921
		1055		0.80700	4.58100	11	/ 921
		1059		0.90640	5.56930	24	/ 1961
		1063		0.80330	0.95844	4	/ 1961
K	BR	1015	25.0	0.87100	4.01500	12	/ 921
K	J	1025	25.0	0.87600	5.19200	13	/ 921
K	NO <sub>3</sub>	1041	25.0	0.83300	3.74400	11	/ 921
RB	CL	1007	25.0	0.80400	5.54700	14	/ 921
RB	BR	1017	25.0	0.80300	5.51800	14	/ 921
RB	J	1027	25.0	0.80200	5.52000	14	/ 921
RB	NO <sub>3</sub>	1043	25.0	0.85000	4.70000	13	/ 921
CS	CL	1009	25.0	0.82500	5.47600	14	/ 921
CS	BR	1019	25.0	0.82400	5.46004	14	/ 921
CS	J	1029	25.0	0.82300	3.43400	10	/ 921
CS	NO <sub>3</sub>	1045	25.0	0.82900	1.85400	7	/ 921
NH <sub>4</sub>	CL	1033	25.0	0.87000	4.56000	10	/ 921
NH <sub>4</sub>	NO <sub>3</sub>	1035	25.0	0.84000	4.33000	10	/ 921
SR	CL	1201	25.0	0.61400	2.69400	24	/ 921
BA	CL	1200	25.0	0.54200	2.25000	20	/ 921
ZN	SO <sub>4</sub>	1100	25.0	0.25000	3.54780	16	/ 921
LA	CL	1300	25.0	0.43600	2.05400	16	/ 921
M	CL	1006	50.0	0.87110	2.93270	15	/ 921
HEAT OF DILUTION IN WATER							
LI	CL	3050	25.0	0.00022	2.09782	30	/ 1481
LI	BR	3051	25.0	0.00022	2.07430	30	/ 1481
LI	J	3052	25.0	0.00022	2.12774	29	/ 1481
NA	F	3053	25.0	0.00022	2.21320	29	/ 1481
NA	CL	3054	25.0	0.00022	2.09720	30	/ 1481
NA	BR	3055	25.0	0.00022	2.07362	30	/ 1481
NA	J	3056	25.0	0.00022	2.03420	30	/ 1481
K	F	3057	25.0	0.00022	2.72690	30	/ 1481
K	CL	3058	25.0	0.00022	2.65978	30	/ 1481

ION HEAT OF DILUTION IN WATER	ION IN WATER	NUM	T(°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	HEAT
K	BR	3059	25.0	0.00022	2.63704	30	14831
K	J	3060	25.0	0.00022	2.54926	50	14831
RB	F	3061	25.0	0.00022	1.00821	20	14831
RB	CL	3062	25.0	0.00022	1.08683	20	14831
RB	BR	3063	25.0	0.00022	0.22034	14	14831
RB	J	3064	25.0	0.00022	0.22011	14	14831
CS	F	3065	25.0	0.00022	0.27004	20	14831
CS	CL	3066	25.0	0.00022	2.11704	24	14831
CS	BR	3067	25.0	0.00022	0.22021	19	14831
CS	J	3068	25.0	0.00022	0.21493	19	14831
VISCOSITY IN WATER							
NA	CL	7059	0.0	0.0	4.03532	11	1421
K	BR	7061	0.0	0.0	7.50000	17	14141
K	MNO4	7074	0.0	0.0	0.30149	14	14101
K	SO4	7104	0.0	0.0	0.90414	11	1401
K	FeCl6	7058	0.0	0.0	1.00000	13	14131
K	CH34	7090	0.0	0.0	7.03260	15	1401
CS	J	7072	0.0	0.0	2.87994	22	14101
AG	NO3	7092	0.0	0.0	10.10000	16	14031
LA	CL	7063	0.0	0.0	3.148813	14	14141
NA	CL	7000	12.5	0.0	1.00000	9	14311
K	CL	7120	12.5	0.0	1.00150	11	14321
K	SO4	7133	12.5	0.0	0.27043	7	14321
NH4	CL	7028	12.5	0.0	1.20150	11	14291
NA	CL	7001	12.0	0.0	1.00050	4	14371
NA	SO4	7033	12.0	0.0	0.42040	10	14291
K	CL	7127	15.0	0.0	1.00104	11	14321
K	SO4	7134	15.0	0.0	0.27033	7	14321
NH4	CL	7024	15.0	0.0	1.20111	11	14291
SE	SO4	7146	15.0	0.0	0.20042	9	14321
MG	CL	7140	15.0	0.0	0.48046	9	14321
MG	SO4	7152	15.0	0.0	0.40090	11	14321
CE	CL	7017	15.0	0.0	1.16108	10	14311
LI	SO4	7005	15.1	0.0	0.52046	4	14311
FE	CL	7011	15.5	0.0	0.84314	10	14311
H	NO3	7078	18.0	0.0	2.22004	15	14211
K	CL	7076	18.0	0.0	2.00004	25	14211
K	J	7022	18.0	0.0	0.40018	8	14291
K	CLO3	7082	18.0	0.0	0.80004	20	14211
RB	NO3	7080	18.0	0.0	0.20004	15	14211
ET4N	P1	7086	18.0	0.0	0.01000	10	1491
MO	SO4	7084	18.0	0.0	0.02024	11	1491
		7153		0.0	0.00004	11	14321
BA	CL	7037	18.0	0.0	1.42534	7	1461
LA	CL	7085	18.0	0.0	0.02420	10	1491
FE	CL	7012	18.0	0.0	0.84254	14	14371
CE	CL	7018	18.0	0.0	1.16030	10	14371
LI	SO4	7006	20.0	0.0	0.51490	9	14371
NA	F	7039	20.0	0.0	0.20244	5	14371
K	CL	7120	20.0	0.0	1.00004	11	14321
		7101		0.0	7.96943	10	1431
K	J	7023	20.0	0.0	0.140004	8	14291
K	SO4	7135	20.0	0.0	0.27000	7	14321
RE	SO4	7147	20.0	0.0	0.20024	9	14321
MG	CL	7141	20.0	0.0	0.48004	9	14321
NA	SO4	7034	22.0	0.0	0.42004	11	14291
H	AC	7050	25.0	0.0	0.0	10	14531
LI	CL	7045	25.0	0.0	0.43714	19	14531

ION	ION	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	0.18780	8	14531
Li	PI	7053	25.0	0.0	0.07164	14	14531
Na	SO4	7007	25.0	0.0	0.51427	9	14311
Na	CL	7002	25.0	0.0	1.00000	9	14311
		7060		0.0	6.00420	11	14211
Na	JO4	7097		0.0	10.32976	15	1831
		7038	25.0	0.0	0.19360	9	14771
K	CL	7065	25.0	0.0	5.92415	5	14161
		7067		0.0	0.40086	11	14151
		7129		0.0	0.44866	11	14321
		7142		0.0	7.95453	10	1831
K	BR	7064	25.0	0.0	7.49852	16	14161
		7024	25.0	0.0	0.34948	8	14291
K	CL	7048		0.0	0.19392	16	14531
		7068	25.0	0.0	0.20000	8	14531
		7066	25.0	0.0	0.20000	7	14531
		7069	25.0	0.0	0.20000	7	14531
		JO3	25.0	0.0	0.08916	9	14531
		MNO4	25.0	0.0	0.40074	16	14101
		AC	25.0	0.0	0.12594	10	14531
		SO4	25.0	0.0	1.50000	12	14081
		7136		0.0	0.20967	7	14321
Cs	FECNO	7057	25.0	0.0	2.50000	14	1431
		7095	25.0	0.0	7.56627	14	14081
CS	J	7073	25.0	0.0	3.99930	22	14101
CS	NO3	7070	25.0	0.0	0.04000	7	14151
Na	CL	7030	25.0	0.0	1.19864	11	14291
		7071		0.0	0.40000	8	14531
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
CA	FECNO	7120		0.0	0.071034	17	121
		7125	25.0	0.0	0.01901	14	121
CA	FECNO	7124	25.0	0.0	0.03792	17	121
CA	SO4	7118	25.0	0.0	0.01848	16	121
AG	NO3	7091	25.0	0.0	0.99010	15	14081
Zn	SO4	7119	25.0	0.0	0.01740	12	121
CD	SO4	7122	25.0	0.0	0.01033	25	121
LA	CL	7062	25.0	0.0	3.146253	13	14141
CH	SO4	7106		0.0	10.125527	17	1231
		7123	25.0	0.0	0.105043	17	121
CH	SO4	7121	25.0	0.0	0.02864	25	121
		7015	25.0	0.0	0.089086	10	14311
CH	SO4	7113	25.0	0.0	0.050000	13	1341
		7019	25.0	0.0	1.15804	10	14311
S	CL	7107	25.0	0.0	13.76271	17	1231
		7108	25.0	0.0	12.90413	17	1231
TE	CL	7109	25.0	0.0	12.04601	17	1231
DT	CL	7110	25.0	0.0	12.182530	16	1231
MO	CL	7111	25.0	0.0	12.10710	17	1231
ER	CL	7112	25.0	0.0	13.33700	17	1231
Li	CL	708	30.0	0.0	0.51834	8	14311
Na	CL	706	30.0	0.0	10.30013	15	1831

ION	ION	NUM	T (°C)	C (MIN)	C (MAX)	N	REF:
VISCOSITY IN WATER							
NA	SO <sub>4</sub>	7035	30.0	0.0	0.41920	9	14291
K	CL	7130	30.0	0.0	0.99712	11	14321
		7103		0.0	7.93094	10	1431
K	J	7025	30.0	0.0	0.39894	8	14291
K	SO <sub>4</sub>	7137	30.0	0.0	0.20420	7	14321
RE	SO <sub>4</sub>	7149	30.0	0.0	0.19470	4	14321
MG	CL	7143	30.0	0.0	0.47874	9	14321
MG	SO <sub>4</sub>	7155	30.0	0.0	0.34932	11	14321
FE	CL	7014	30.0	0.0	0.88467	10	1431
H	NO <sub>3</sub>	7079	35.0	0.0	2.24004	13	14291
LI	SO <sub>4</sub>	7009	35.0	0.0	0.51754	8	14311
NA	CL	7003	35.0	0.0	0.99474	9	14311
K	CL	7077	35.0	0.0	2.00004	22	14291
		7131		0.0	0.99540	11	14321
K	J	7026	35.0	0.0	0.39820	8	14291
KK	ClO <sub>3</sub>	7083	35.0	0.0	0.80004	23	14291
K	SO <sub>4</sub>	7138	35.0	0.0	0.26883	7	14321
RR	NO <sub>3</sub>	7081	35.0	0.0	2.00004	17	14291
NH <sub>4</sub>	CL	7031	35.0	0.0	1.19458	11	14291
BE	SO <sub>4</sub>	7150	35.0	0.0	0.19438	9	14321
MG	CL	7144	35.0	0.0	0.47790	9	14321
		7117		0.0	1.20004	14	1351
MG	SO <sub>4</sub>	7156	35.0	0.0	0.34854	11	14321
RA	CL	7116	35.0	0.0	0.15004	18	1351
FE	CL	7015	35.0	0.0	0.06780	10	14311
CO	CL	7114	35.0	0.0	0.00004	18	1351
NI	CL	7115	35.0	0.0	0.00004	17	1351
CE	CL	7020	35.0	0.0	1.15404	10	14311
NA	CL	7099	40.0	0.0	0.05121	4	1431
NA	SO <sub>4</sub>	7036	40.0	0.0	0.41760	10	14291
K	CL	7104	40.0	0.0	7.90673	10	1431
K	J	7027	40.0	0.0	0.19272	8	14291
FE	CL	7016	40.0	0.0	0.88617	10	14311
LI	SO <sub>4</sub>	7010	42.5	0.0	0.51004	9	14311
NA	CL	7004	42.5	0.0	0.49960	9	14311
K	CL	7182	42.5	0.0	0.99264	11	14321
K	SO <sub>4</sub>	7134	42.5	0.0	0.26808	7	14321
NH <sub>4</sub>	CL	7032	42.5	0.0	1.19164	11	14291
BE	SO <sub>4</sub>	7151	42.5	0.0	0.19884	9	14321
MG	CL	7145	42.5	0.0	0.47064	9	14321
MG	SO <sub>4</sub>	7157	42.5	0.0	0.59728	11	14321
CE	CL	7021	42.5	0.0	1.15020	10	14311
NA	CL	7100	50.0	0.0	0.03515	9	1431
K	CL	7105	50.0	0.0	7.90673	10	1431
VISCOSITY IN ETHER							
NA	J	7088	25.0	0.0	0.03364	13	491
VISCOSITY IN ACETONE							
LI	CL	7089	18.0	0.0	0.54780	7	971
LI	CL	71190	25.0	0.0	0.54240	6	971
VISCOSITY IN NITROBENZENE							
ET <sub>4</sub> N	PI	7087	18.0	0.0	0.01584	10	491
MASS DENSITY IN WATER							
NA	CL	8001	12.5	0.0	1.00068	9	14311
NA	CL	8002	15.0	0.0	1.00050	9	14311
CE	CL	8018	15.0	0.0	1.16108	10	14311
LI	SO <sub>4</sub>	8006	15.1	0.0	0.52044	9	14311
FE	CL	8012	15.5	0.0	0.89319	10	14311
BA	CL	8000	18.0	0.0	1.42534	7	961

ION MASS DENSITY IN WATER	ION	NUM	T (°C)	C(MIN)	C(MAX)	N	REFs
FE	CL	8013	18.0	0.0	12.28770	10	1/331
CE	CL	8019	18.0	0.0	1.16030	10	1/331
LI	SO4	8007	20.0	0.0	0.51903	9	1/331
K	CL	8027	20.0	0.0	8.42487	10	1/331
LI	SO4	8008	25.0	0.0	0.51927	9	1/331
NA	CL	8003	25.0	0.0	1.00000	9	1/331
		8023		0.0	10.32721	15	1/331
K	CL	8028	25.0	0.0	8.47990	10	1/331
LA	CL	8032	25.0	0.0	10.25131	17	1/231
FE	CL	8014	25.0	0.0	0.84086	10	1/331
CU	SO4	8039	25.0	0.0	0.50000	11	1/341
CE	CL	8020	25.0	0.0	1.15804	10	1/331
NU	CL	8033	25.0	0.0	13.17588	17	1/231
SM	CL	8034	25.0	0.0	12.89948	17	1/231
TH	CL	8035	25.0	0.0	12.04090	17	1/231
DY	CL	8036	25.0	0.0	12.82204	16	1/231
HU	CL	8037	25.0	0.0	12.11264	17	1/231
ER	CL	8038	25.0	0.0	13.33494	17	1/231
LI	SO4	8009	30.0	0.0	0.51834	8	1/331
NA	CL	8024	30.0	0.0	10.30268	15	1/331
K	CL	8029	30.0	0.0	8.39490	10	1/331
FE	CL	8015	30.0	0.0	0.88447	10	1/331
LI	SO4	8010	35.0	0.0	0.51754	8	1/331
NA	CL	8004	35.0	0.0	0.94470	9	1/331
MG	CL	8043	35.0	0.0	1.05090	10	1/331
BA	CL	8042	35.0	0.0	2.24230	12	1/331
FE	CL	8010	35.0	0.0	0.86788	10	1/331
CO	CL	8040	35.0	2.0	0.60000	14	1/351
NI	CL	8041	35.0	0.0	0.60000	17	1/351
NA	CL	8025	40.0	0.0	0.60000	17	1/351
K	CL	8030	40.0	0.0	4.07094	4	1/331
FE	CL	8017	40.0	0.0	0.30320	10	1/331
LI	SO4	8011	42.5	0.0	0.51610	9	1/331
NA	CL	8005	42.5	0.0	0.99450	9	1/331
CF	CL	8022	42.5	0.0	1.15020	10	1/331
NA	CL	8020	50.0	0.0	9.03247	9	1/331
K	CL	8031	50.0	0.0	8.32688	10	1/331

Symbol	Name (englisch)	Wertigkeit	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
ASP6	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	Tributylmethylammonium	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
CR04	Chromate	- 2		
CR207	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
DSME3N	Octadecyltrimethylammonium	1		
DSSO4	Octadecylsulfate	- 1		
ER	Erbium	3	0.96	186
ET4N	Tetraethylammonium	1	4.00	124

ETNH3	Ethylammonium	1		
ETOHNH3	Ethanolammonium	1		
P	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		
PECN6(4-)	Hexacyanoferrate II (4-)	- 4		
PO	Formiate (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		
HP04	Hydrogen Phosphate	- 2		
HS	Hydrogen Sulfide	- 1		
HX4B	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
J02	Iodite	- 1	3.30	
J03	Iodate	- 1	3.39	
J04	Periodate	- 1	4.00	
K	Potassium	1		
LA	Lanthanum	3	1.33	186
LI	Lithium	1	1.15	186
MENH3	Methylammonium	1	0.60	186
MEOHNH3	Methanolammonium	1		
METSUAT	Methylsulfonate	- 1		
ME2BU2N	Dimethylidibutylammonium	1		
ME2NH2	Dimethylammonium	1		
ME3AMN	Trimethylammonium	1		
ME3BUN	Trimethylbutylammonium	1		
ME3ETN	Trimethylethylammonium	1		
ME3NH	Trimethylammonium	1		
ME3PHN	Trimethylphenylammonium	1		
ME3PRN	Trimethylpropylammonium	1		
ME4N	Tetramethylammonium	1		
MG	Magnesium	2	3.47	124
MN	Manganese II	2	0.65	186
MN04	Permanganate	- 1	0.80	186
MO04	Molybdate	- 2	3.09	
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

H02	Nitrite	- 1		
N03	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		
PBOHHH3	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
PROHHH3	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		
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	Wolframate	- 2		
Y	Yttrium	3	0.93	186
ZN	Zinc	2	0.74	186
ZRO	Zirconyl	2		

Tabelle der Meßarten

Abkürzung	Meßart	Kennnummer
LEITFAEH.	Leitfähigkeit	1
KATION-LEIT.	Kationen-Leitfähigkeit	2
ANION-LEIT.	Anionen-Leitfähigkeit	3
KAT.UEBERPZ	Kationen-Überführungszahl	4
AN.UEBERPZ	Anionen-Überführungszahl	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 Diffusionskoeffizient	12
T.DIFF.KOEF.	Thermodynamischer Diffusionskoeffizient	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, F., 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/ Banewicz, 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., Neusder, R., Wachter, R.: *J.Sol.Chem.* 2, 209 (1980)
- /7/ Behret, H., Schmitthals, 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., Venkatasetty, H.V.: *J.Phys.Chem.* 66, 2075 (1962)
- /21/ Brown, R.D., Bunger, 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. Faraday Soc.* 35, 1466 (1939)
- /36/ Chambers, J.P.: *J. Phys. Chem.* 62, 1136 (1958)
- /37/ Chambers, J.P., 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., Wolfenden, J.H.: *Proc. Roy. Soc. London A* 1145, 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., Jolicoeur, 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-Aggar, A.M., Bradley, D.C., Wardlaw, W.: *J. Chem. Soc.* 2002 (1958)
- /60/ Ishnazy, S., Schmelzer, N.: *Sektion Physik, W.-Pieck-Univ. Rostock, unveröffentlicht*
- /61/ Litt-Gruz, T., Majthenyi, L., Kugler, E.: *Acta Chim. Hung.* 51, 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., Zawoyski, C., Kay, R.L.: *J. Phys. Chem.* 69, 3678 (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., Frue, J.E.: *Trans. Faraday Soc.* 62, 1252 (1966)
- /71/ Pink, W., Gross, P.: *Monatsheft Chemie* 63, 271 (1933)
- /72/ Foster, N.G., Amis, S.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., Frue, J.E.: Trans.Faraday 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., Dicker, K.-H.: Z.Phys.Chemie N.P. 46, 140 (1965)
- /88/ Haase, R., Sauermann, P.-F., Dicker, K.-H.: Z.Phys.Chemie N.P. 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.P. 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/ Jervis, 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, 619 (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, Universität 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, 8608 (1966)  
 /128/ Kahlweit, M.: *Z.Phys.Chem.* (N.F.) 21, 436 (1959)  
 /129/ Kaminsky, M.: *Z.Phys.Chem.* (N.F.) 5, 154 (1955)  
 /130/ Kalfoglou, 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 Leitvermögen Der Elektrolyte*, 2. Auflage, Leipzig 1916  
 /142/ Kohlrausch, F., Maltby, U.: *Berl.Sitzber.* 665 (1899)  
 /143/ Kohlrausch, F., Steinwehr, A.: *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.Therodyn. 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.Therodyn. 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.Therodyn. 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.Faraday 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 Kaischi 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.Farad.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.Faraday 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., Longsworth, L.G.: Principles of electro-chemistry (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.: Electrochimiya 4, 718 (1968)
- /211/ Sivertz, V., Reitmeier, R.B., 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., Isaacson, 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)

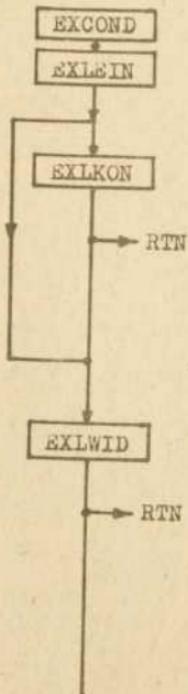
- /229/ Gellings, P.J.: Reicueil Trav.Chim. Pays-Bas 75, 209 (1956)  
/230/ Liu, C., Lindsay, W.T. jr.: J.Solution Chem. 1, 45 (1972)  
/231/ Longsworth, L.G.: J.Amer.Chem.Soc. 54, 274 (1932)  
/232/ Pepela, C.N., Dunlop, P.J.: J.Chem.Thermodyn. 6, 115 (1974)

## 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 ( $IPR_i$  mit  $i=1,2,\dots,10$ ) dienen als Schalter für die Programmverzweigungen. Standard ist  $IPR_i = 0$  für  $i=1,2,\dots,10$ .

### Programmablaufplan

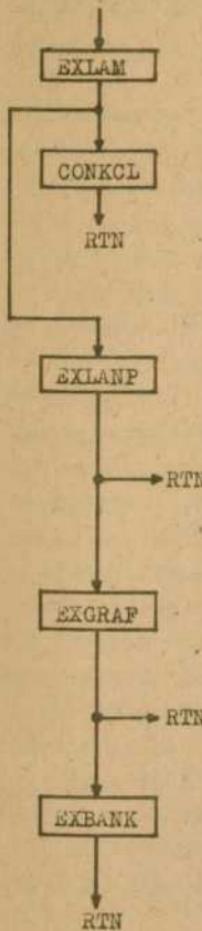


#### Hauptprogramm

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 Auswerteprogramme 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)= $\varnothing 1.09.06.02.04$ ) vorgenommen. Es werden durch Anpassung  $A_0$ ,  $a$  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 Zugeabe 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 FLXDAT-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 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  $(\Lambda_i^{\text{th}} - \Lambda_i^{\text{ex}}) / \Lambda_i^{\text{th}}$  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 whyt things go zuojm"  
 "Murphy's Law Book Two more reasons why things go zuojm"

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







$\eta$ (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)

inter 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)

Sadrovichaya and V.A. Podolyanko: Electro-  
68)

C.A. Kraus: J. Amer. Chem. Soc. 70, 1709 (1948)

Chem. Soc. 47, 626 (1924)

F. 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)

ighes 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.



Patch Reference numbers on LUT  
Instrument Engineering Scan Reference Chart T2693 Serial No.

