

Gerd Hradetzky  
Dieter A. Lempe †

**Nachschlagewerke und Datensammlungen für  
physikalisch-chemische Stoffdaten  
*Sources of Physico-Chemical Data***

1. Daten reiner Stoffe .....	2
Data of pure substances .....	2
2. Daten von Gemischen .....	13
Data of mixtures .....	13
2.1 Exzessdaten, Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichte, kalorische Daten .....	13
Excess data, VLE, caloric data .....	13
2.2 Gaslöslichkeiten .....	17
Gas solubilities .....	17
2.3 Flüssigkeit-Flüssigkeit-Gleichgewichte und Feststoff-Löslichkeiten .....	19
LLE and solubilities of solids .....	19
2.4 Transporteigenschaften .....	22
Transport properties .....	22
3. Daten über Polymere .....	23
Polymer data .....	23
4. Kinetische Daten .....	24
Kinetic data .....	24
5. Elektrochemische Daten .....	25
Electrochemical data .....	25
6. Berechnung von Stoffdaten .....	26
Prediction of data .....	26

Ein erheblicher Teil der unten aufgeführten Datenquellen wurde für die

**Merseburger Datenbank für thermophysikalische Reinstoffeigenschaften - MDB**

ausgewertet.

Diese Datenbank bildet die Datenbasis für die Merseburger Software „Physikalische Chemie /  
Prozessgrundlagen“ und umfasst gegenwärtig 4100 Stoffe.

Für weitere Informationen siehe <http://physchem.hs-merseburg.de>

## **1. Daten reiner Stoffe**

Data of pure substances

### **ACD – Advanced Chemistry Development Software (Internet-Quelle)**

Berechne(!) Stoffdaten, u. a. Dampfdruck bei 25 °C, Normalsiedetemperatur, Flammpunkt, Brechungsindex, Dichte, Verdampfungsenthalpie unter Normaldruck-Siedebedingungen, log P  
[www.chemspider.com](http://www.chemspider.com)

### **Altmann, R.; G. Brandes; O. Regen; J. Schneider:**

Chemisch-technische Stoffwerte.  
Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1987

### **Aylward, G.H.:**

Datensammlung Chemie.  
VCH Physik Verlag, 1986

### **Baer, H. D.; R. Tillner-Roth:**

Thermodynamische Eigenschaften umweltverträglicher Kältemittel.  
(NH<sub>3</sub>, R22, R134a, R152a, R123)  
Springer Verlag, Berlin, Heidelberg und New York, 1995

### **Barin, I.:**

Thermochemical Data of Pure Substances.  
VCH Weinheim, 1989

### **Beaton, C.F. ; G.F. Hewitt:**

Physical Property Data for the Design Engineer.  
Hemisphere Publ. Corp., New York u. a., 1989

### **Beilsteins Handbuch der organischen Chemie**

Springer Verlag, Berlin, Heidelberg und New York

### **Beilstein:**

International Critical Tables. (7 Bde)  
McGraw-Hill Inc., 1928

### **Berghoff, W.:**

Erdölverarbeitung und Petrolchemie. Tafeln und Tabellen.  
Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1968  
(Daten für Alkane)

### **Binnewies, M; E. Milke:**

Thermochemical Data of Elements and Compounds.  
*Melting T, normal boiling T heat of formation, entropy, heat capacity  
of elements and (inorganic) compounds*  
Wiley-VCH, Weinheim u. a., 1999

**Blanke, W. (Herausgeber):**

Thermophysikalische Stoffgrößen.  
thermodynamische Eigenschaften von Gasen  
thermodynamische und mechanische Eigenschaften von Flüssigkeiten  
Brennwerte  
Diffusionskoeffizienten  
Wärmeleitfähigkeiten  
Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg und New York, 1989

**Boublik, T.; V. Fried; E. Hala:**

The Vapour Pressures of Pure Substances:  
Selected Values of the Temperature Dependence on the Vapour  
Pressures of some Pure Substances in the Normal or Low Pressure Region  
Elsevier Science Publ. Comp., Amsterdam, 1984

**Chickos, J. S.; W. E. Acree Jr.:**

Enthalpies of Vaporization of Organic and Organometallic Compounds, 1880 - 2002.  
J. Phys. Chem. Ref. Data 32(2003)2, 519 -878  
[www.umsl.edu/~chickosj/JSCPUBS/vap2003.pdf](http://www.umsl.edu/~chickosj/JSCPUBS/vap2003.pdf)

**CODATA-Bulletin Nr. 11**

Pergamon Press, Oxford, 1973  
(Kritisch bewertete Bildungsgrößen)

**Cox, J. D.; D. D. Wagman und V. A. Medvedev:**

CODATA Key values for Thermodynamics.  
(thermodynamische Funktionen von wässrigen Lösungen und anorganischen Stoffen)  
Hemisphere Publ. Corp., New York u. a., 1989

**D'Ans, J.; E. Lax:**

Taschenbuch für Chemiker und Physiker.  
Springer-Verlag (1949 (1 Bd.), 1964-67 (3 Bde), 1983 (2. Bd. org. Verbindungen))

**Daubert, T. E.; R. B. Danner:**

Physical and Thermodynamic Properties of Pure Compounds.  
Data Compilation (DIPPR-Projekt).  
Hemisphere Publ. Corp., New York u.a., 1989

**Delcroix, J. D.:**

Gas Phase Chemical Physics Data Base.  
Part A, B, C 1988

**Dreisbach**

Pressure-Volume-Temperature Relationships of Organic Compounds.  
Handbook Publ., Sandusky, Ohio, 1952

**Dykyj, J.; M. Repas:**

Tlak nasytenej pary organických zlucenin. (Dampfdruck organischer Verbindungen)  
VEDA Bratislava, 1979

**Dykyj, J.; M. Repas; J. Svoboda:**

Tlak nasytenej pary organických zlucenin (pokracovanie). (Dampfdruck organischer Verbindungen)  
VEDA Bratislava, 1984 (Ergänzungsband)  
(neben dem "Ohe" die umfangreichste Sammlung von ANTOINE-Konstanten. Beide Sammlungen, ergänzt durch TRC-eigene Daten, sind Bestandteil der Computerdatenbank für Reinstoff-Dampfdrücke TRCV des Thermodynamics Research Center der USA (CRT), 1989)

**Dykyj, J.; J. Svoboda; R .C. Wilhoit; M. Frenkel; K. R. Hall:**

Vapor Pressure of Chemicals.  
s. u. Landolt-Börnstein

**Dymond, J. H.; E .B. Smith:**

The Virial Coefficients of Gases.  
Clarendon Press, Oxford, 1968

**Dymond, J .H.; E. B. Smith:**

The Second Virial Coefficients of Pure Gases and Mixtures.  
Oxford University Press, New York, 1979, 1980

**Engineering Sciences Data**

(Item Number 84021)  
Vapor Pressures and Critical Points of Liquids. ISBN 0 85679 485 6  
(WAGNER vapour-pressure parameters of >200 hydrocarbons)  
ESDU International Ltd, London, 1984

**Elsner, N.; S. Fischer; J. Klinger:**

Thermophysikalische Stoffeigenschaften von Wasser.  
Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1982

**Ferris, S. W.:**

Handbook of Hydrocarbons. (u.a. Siedepunkte zahlreicher isomerer Kohlenwasserstoffe)  
Acad. Press Inc. Publ., New York 1955

**Fratzcher, W; H.-P. Picht:**

Stoffdaten und Kennwerte der Verfahrenstechnik.  
Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1993

**Gallant, R. W.:**

Physical Properties of Hydrocarbons.  
J.M. Houston, Railey, 1984

**Gallant, R. W.; C .L. Yaws:**

Physical Properties of Hydrocarbons. (nicht nur Kohlenwasserstoffe!)

Gulf Publ. Comp., Houston, 1992

Gmelin:

Handbuch der anorganischen Chemie.

Springer-Verlag

Gurvich, L.V.; I.V. Veyts; C.B. Alcock:

Thermodynamic properties of individual systems.

Hemisphere Publ. Corp., New York u. a., 1989

**Harrison, R. D.:**

Datenbuch Chemie, Physik.

Vieweg, 1982

**Horvath, A. L.:**

Physical properties of Inorganic Compounds.

E. Arnold, London, 1975

**Howard, P. H.; W. M. Meylan:**

Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals.

CRC Lewis Publishers, Boca Raton - New York - London - Tokyo, 1997

(ca. 13000 organic chemicals;

melting point, boiling-T at p, water solubility, Henry constants (Water),  $\log P_{\text{Oct}} / \text{Water}$ )

**Kaye, G. W .C.; T. H. Laby:**

Tables of Physical and Chemical Constants.

Longmans Green and Co. Ltd., 1959

**Kireev, V. A.:**

Metody prakticheskikh raschotov v termodinamike khimicheskikh reaktsij.

Izd. Khimia, Moskva, 1975

**Knacke, O.; O. Kubaschewski; K. Hesselmann:**

Thermodynamical Properties of Inorganic Substances.

Springer-Verlag, Berlin u.a., 1991

**Koglin, W.:**

Kurzes Handbuch der Chemie.

Vandenhoeck u. Ruprecht, Göttingen, 1951

**Kudchadker, A. P.; G.H. Alani; B. J. Zwolinski:**

The critical constants of organic substances.

Chem. Reviews 68 (1968), S. 659 - 735

**Landolt-Börnstein:**

Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaft und Technik.  
Transportphänomene I: Diffusion in Gasen, Diffusion in Flüssigkeiten.  
6. Auflage, Gruppe II, Vol. 5a  
Springer Verlag Berlin – Heidelberg – New York, 1969

**Landolt-Börnstein**

Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology.  
Group IV: Physical Chemistry  
Vol. 8: Thermodynamic Properties of Organic Compounds and their Mixtures.  
M. Frenkel, X. Hong, R. C. Wilhoit, K. R. Hall:  
Subvol. H: Densities of Esters and Ethers; Subvol. G: Densities of Alcohols  
Springer Verlag Berlin – Heidelberg – New York, 2000

**Landolt-Börnstein**

Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology.  
Group IV: Physical Chemistry  
Vol. 18: Viscosities of Organic Liquids and Binary Liquid Mixtures.  
Ch. Wohlfarth, B. Wohlfarth:  
Subvol. A: Pure Organometallic and Organononmetallic Liquids, Binary Liquid Mixtures.  
Springer Verlag Berlin – Heidelberg – New York, 2001

**Landolt-Börnstein**

Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology.  
Group IV: Physical Chemistry  
Vol. 20: Vapor Pressure of Chemicals  
J. Dykyj, J. Svoboda, R. C. Wilhoit, M. Frenkel, K. R. Hall:  
Subvol. A: Vapor Pressure and Antoine Constants for Hydrocarbons, and S, Se, Te and Halogen  
Containing Compounds  
Subvol. B: Vapor Pressure and Antoine Constants for Oxygen Containing Compounds.  
Subvol. C: Vapor Pressure and Antoine Constants for Nitrogen Containing Compounds  
Springer Verlag Berlin – Heidelberg – New York, 1999 - 2001

**Landolt-Börnstein**

Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology.  
Group IV: Physical Chemistry  
J. H. Dymond, K. N. Marsh, R. C. Wilhoit, K. C. Wong:  
Vol. 21: The Virial Coefficients of Pure Gases and Mixtures, Subvol. A: Virial Coeff. of Pure Gases  
Springer Verlag Berlin – Heidelberg – New York, 2002

**Lide, D. R.; H. V. Kehiaian:**

CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data.  
(mit Diskette, die aber nur in Verbindung mit dem Buch sinnvoll angewandt werden kann)  
CRC Press, Boca Raton u. a., 1994

**Lide, D. R. (Herausgeber):**

CRC Handbook of Chemistry and Physics

umfassendstes Datenwerk für Reinstoffdaten (erscheint in jährlicher oder 2-jährlicher Folge)

CRC Press, Boca Raton u. a.

auch online frei verfügbar / free download as PDF (edition 2005, 2006/2007) via

[www.general-search.net](http://www.general-search.net)

**Liley, P. E.; T. Makita; Y. Tanaka:**

Properties of Inorganic and Organic Fluids.

(CIN DAS Data Series on Material Properties)

Hemisphere Publ. Corp., New York u. a., 1988

**Lencka, M; A. Szafranski; A. Maczynski:**

Verified Vapor Pressure Data.

Vol. 1: Organic Compounds Containing Nitrogen

PWN-Polish Scientific Publishers, Warszawa, 1984

**Morachevskij, A. G.; I. B. Sladkow:**

Fiziko-khimicheskie svojstva molekuljarnykh neorganicheskikh soedinenij.

Izd. Khimija, Leningrad, 1987

**NIST-Reinstoffdatenbank** (freie Internet-Quelle (free download)

bietet nur ausgewählte „Stoffdaten-Häppchen“; häufig Normalsiede- und Schmelztemperaturen; gut geeignet auch für die Suche nach CAS-Nummern aus Summenformeln.

(zuverlässige Regel: Die Daten, die man gerade sucht, sind nicht verfügbar)

<http://webbook.nist.gov>

National Institute of Standards and Technology, Boulder, USA

**NIST Ionic Liquids Database ILThermo**

Thermophysical data of ionic liquids (IL)

Ionische Flüssigkeiten: aktuelle umfangreiche Reinstoffdaten-Sammlung (Original-Literaturdaten);

vgl. auch => Daten von Gemischen

<http://ilthermo.boulder.nist.gov/ILThermo/>

National Institute of Standards and Technology, Boulder, USA

**Ohe, S.:**

Computer Aided Data Book of Vapor Pressure.

Data Book Publ., Tokyo, 1976

(vgl. die Bemerkung zum "Dykyj/ Repas")

**Palczewska-Tulinska, M.; D. Wyrzykowska-Stankiewicz; A. M. Szafranski; J. Cholinski:**

Chemical Engineering Practice, Vol. 4:

Solid and Liquid Heat Capacity.

(Part I: C<sub>1</sub> – C<sub>6</sub>; Part II: C<sub>6</sub> – C<sub>33</sub>)

DECHEMA, Frankfurt/M., 1997

**Pedley, J. B.; R.D. Naylor; S. P. Kirby:**

Thermochemical Data of Organic Compounds.

Chapman and Hall, London - New York, 1986

(Standard-Bildungsenthalpien auch für einige anorganische Verbindungen)

**Perelman, V. J.:**

Taschenbuch der Chemie.

Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1956

**Perry, R. H; D. Green:**

Perry's Chemical Engineer's Handbook (6th edition).

McGraw-Hill Inc., 1984

**D. L. Perry:**

Handbook of Inorganic Compounds (2<sup>nd</sup> edition)

CRC Press, 2011

**Platzer, B.; A. Polt; G. Maurer:**

Thermophysical Properties of Refrigerants.

Springer-Verlag Berlin - Heidelberg, 1990

**Rau, H.; J. Rau:**

Chemische Gleichgewichtsthermodynamik

(Datenanhang mit  $\Delta^B H_{298}$ ,  $\Delta^B G_{298}$  und  $S_{298}$ )

Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden, 1995

**Reid, R. C.; J .M. Prausnitz; B .E. Poling:**

The properties of Gases and Liquids. (4th ed.)

(umfangreiche Reinstoffdatensammlung, Berechnungsmethoden)

Mc Graw-Hill Book Company, New York, 1987

**Riddick, J. A.; W. B. Bunger; Th. K. Sakano:**

Organic Solvents Physical Properties and Methods of Purification.

John Wiley & Sons Inc. - Interscience, New York, 1986

**Rossini, F. D. u.a. (API):**

Selected Values of Physical and Thermodynamic Properties of Hydrocarbons and Related Compounds.

Carnegie Press, Pittsburgh, 1953

**Rossini, F. D. u.a. (NBS):**

Selected Values of Chemical Thermodynamic Properties

( $C_p$ ,  $\Delta^F H$ ,  $\Delta^F G$ ,  $S$ )

US - Government Printing Office, Washington D. C., 1952



**Sangster, J.:**

Octanol-Water Partition Coefficients of Simple Organic Compounds.

(umfangreiche, bewertete Daten)

J. Phys. Chem. Ref. Data 18(1989) 3,1111 - 1229

**Simmrock; K. H.; R. Janowsky; A. Ohnsorge:**

Critical Data Of Pure Substances.

DECHEMA Chemistry Data Series Vol. II (Part 1/2)

DECHEMA, Frankfurt/M., 1986

**Smith, D. B.; R. Srivastava:**

Thermodynamics Data for Pure Compounds.

A. Hydrocarbons and Ketones

B. Halogenated Hydrocarbons and Alcohols

Elsevier Science Publ. Comp., Amsterdam, 1986

**Stephan, K.; H. Hildwein:**

Recommended Data of Selected Compounds and Binary Mixtures.

DECHEMA Chemistry Data Series Vol. IV, Parts 1 + 2.

DECHEMA, Frankfurt/M., 1987

(kritisch geprüfte Reinstoffdaten für 14 organische Flüssigkeiten)

**Stull, D.; E. Westrum; G. Sinke:**

The Chemical Thermodynamics of Organic Compounds.

John Wiley & Sons Inc., New York, 1969

**Tabellenbuch Chemie**

Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie

Leipzig, 1973

**Timmermans, J.:**

Physico-Chemical Constants of Pure Organic Compounds.

Elsevier Science Publ. Comp., Amsterdam, 1950 und 1965

**Touloukian, Y. S; C. Y. Ho:**

Properties of Inorganic and Organic Fluids.

1988

Vargaftik, N. B.:

Spravochnik po teplofizicheskikh svojstvam gazov i zhidkostej.

Izd. Nauka, Moskva, 1972

**VDI-Wärmeatlas**

Kalorische und kritische Daten  
Siede- und Sublimationstemperaturen  
L-Dichten  
L/V-spez. Wärmekapazitäten  
L/V-Wärmeleitfähigkeiten  
L/V-Viskositäten  
Springer-Verlag Berlin – Heidelberg, 10. Auflage 2006

**Vedenejev, V. J. u. a.:**

Energien chemischer Bindungen, Ionisationspotentiale und Elektronenaffinitäten.  
Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1971

**Viswanath, D. S.; G. Natarajan:**

Data Book on the Viscosity of Liquids.  
Hemisphere Publ. Corp., New York u. a., 1989

**Weast, R. C.:**

Handbook of Chemistry and Physics: A Readyreference Book of Chemical and Physical Data.  
CRC Press, Boca Raton u. a., 1954 bis 2002

**Weast, R. C.; J. G. Grasselli:**

Handbook of Data on Organic Compounds.  
CRC Press, Boca Raton u. a., 1989/1990

**Westmeier, S. u. a.:**

Verfahrenstechnische Berechnungsmethoden, Teil 7: Stoffwerte  
Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1986  
Wichterle, I.; J. Linek:  
Antoine Vapor Pressure Constants of Pure Compounds.  
Academia Prag, 1971

**Wilhoit, R. C.; V. Zwolinski:**

Handbook of Vapor Pressures and Heat of Vaporization of Hydrocarbons and Related Compounds.  
API 44 - TRC, Publ. No. 101  
College Station, Texas, 1971

**Wilhoit, R. C. u. a.:**

I) Enthalpies of Fusion and Transition of Organic Compounds. (Subvol. A)  
II) Densities of Aliphatic Hydrocarbons: Alkanes. (Subvol. B)  
III) Densities of Aliphatic Hydrocarbons: Alkenes, Alkadienes, Alkynes and Misc. Compounds.  
(Subvol. C)  
In: Landolt/Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology.  
New Series, Group IV, Vol. 8  
Springer Verlag Berlin – Heidelberg – New York, 1995/1996

**Wohlfarth, Ch.:**

Statische Dielektrizitätskonstanten reiner Flüssigkeiten und binärer Gemische.  
s. u. Landolt-Börnstein

**Wohlfarth, Ch.; B. Wohlfarth:**

I ) Refractive Indices of Inorganic, Organometallic and Organononmetallic Liquids. (Subvol. A)  
II) Refractive Indices of Organic Liquids. (Subvol. B)  
In Landolt/Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology.  
New Series, Group III, Vol. 38  
Springer Verlag Berlin – Heidelberg – New York, 1996

**Yaws, C. L.:**

Thermodynamic and Physical Property Data.  
Gulf Publ. Comp., Houston u. a., 1992

**Yaws, C. L.:**

The Yaws Handbook of Thermodynamic Properties for Hydrocarbons and Chemicals.  
Heat capacities, enthalpies of formation, Gibbs energies of formation, entropies, and other  
thermodynamic properties. Gases, liquids, and solids. Coverage for more than 12800  
Organic and inorganic chemicals. C1 to C100 organics and Ac to Zr inorganics.  
Gulf Pub., 2006, Houston

**Yaws, C. L.:**

The Yaws Handbook of Vapor Pressure. Antoine Coefficients.  
Antoine Konstanten für Stoffe C1 bis C100 (p/Torr)  
2nd Edition 2015  
Elsevier, Amsterdam

**Yaws, C. L.:**

The Yaws Handbook of Physical Properties for Hydrocarbons and Chemicals.  
(Daten für 54 000 organische und anorganische Stoffe; spezielle Kapitel für Wasser und Luft;  
Verwendung von CAS-RN)  
- Normalsiedepunkt / normal boiling point  
- Schmelzpunkt / freezing point  
- Dichte / density  
- Brechungsindex / refractive index  
2<sup>nd</sup> Edition; 821 pages  
Elsevier, Amsterdam, 2015

**Yaws, C. L.:**

Thermophysical Properties of Chemicals and Hydrocarbons.  
(Daten für 7800 organische und anorganische Stoffe)

Chapter 1 - Critical properties and acentric factor—Organic compounds

Chapter 2 - Critical properties and acentric factor—Inorganic compounds

Chapter 3 - Density of liquid—Organic compounds

Chapter 4 - Density of liquid—Inorganic compounds

Chapter 5 - Density of solid—Organic compounds  
Chapter 6 - Density of solid—Inorganic compounds  
Chapter 7 - Enthalpy of vaporization—Organic compounds  
Chapter 8 - Enthalpy of vaporization—Inorganic compounds  
Chapter 9 - Enthalpy of vaporization at boiling point—Organic compounds  
Chapter 10 - Enthalpy of vaporization at boiling point—Inorganic compounds  
Chapter 11 - Enthalpy of fusion at freezing point—Organic compounds  
Chapter 12 - Enthalpy of fusion at freezing point—Inorganic compounds  
Chapter 13 - Solubility parameter and liquid volume—Organic compounds  
Chapter 14 - Solubility parameter and liquid volume—Inorganic compounds  
Chapter 15 - Van der Waals area and volume—Organic compounds  
Chapter 16 - Van der Waals area and volume—Inorganic compounds  
Chapter 17 - Radius of gyration—Organic compounds  
Chapter 18 - Radius of gyration—Inorganic compounds  
Chapter 19 - Dipole moment—Organic compounds  
Chapter 20 - Dipole moment—Inorganic compounds  
Chapter 21 - Surface tension—Organic compounds  
Chapter 22 - Surface tension—Inorganic compounds  
2<sup>nd</sup> Edition; Elsevier, Amsterdam, 2014

**Yungman, V. S.; V.P. Glushko; V. A. Medvedev; L. V.Gurvich:**

Thermal Constants of Substances.

(8 volumes; esp. inorganic substances)

J. Wiley & Sons Inc., New York u. a., 1999

- critical constants; phase transitions
- enthalpy of formation at  $T = 0$  K in the standard state
- enthalpy of formation and Gibbs energy of format. at 298.15 K from elements in their stand. states
- energy of dissociation of the gaseous or condensed substance into atoms at  $T = 0$  K
- conventional standard entropy
- heat capacity at 298.15 K
- boiling temperature and enthalpy of change
- melting temperature and enthalpy of change

**Zeise, H.:**

Thermodynamik.

Band III/1: Tabellen (cp, H, S, G)

S. Hirzel Verlag, Leipzig, 1954

## **2. Daten von Gemischen**

Data of mixtures

### **2.1 Exzessdaten, Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichte, kalorische Daten**

Excess data, VLE, caloric data

#### **Aseyev, G. G.:**

Thermal Properties of Electrolyte solutions.

(Methods for calculation of multicomponent systems and experimental data)

temperaturabhängige Wärmekapazitäten wässriger Elektrolytlösungen

begell house, inc., New York - Wallingford, 1996

#### **Barthel, J; R. Neueder:**

Electrolyte Data Collection.

Conductivities, Transference Numbers, Limiting Ionic Conductivities

DECHEMA Chemistry Data Series Vol. XII

Part 1: Methanol

Part 1a: Ethanol

DECHEMA, Frankfurt/M., 1992-1993

#### **Belousov, V. P.; A. G. Morachevskij:**

Teploty smesheniya zhidkostej.

Izd. Khimija, Leningrad, 1970

#### **Christensen, C.; J. Gmehling; P. Rasmussen; U. Weidlich; T. Holderbaum:**

Heats of Mixing Data Collection.

DECHEMA Chemistry Data Series Vol. III.

1. Binary Systems

2. Binary and Multicomponent Systems

3. Supplements

DECHEMA, Frankfurt/M., 1984 -1991

#### **Gmehling, J.; J. Menke; K. Fischer; J. Krafczyk:**

Azeotropic Data. Part I + II

VCH Weinheim, 1994

#### **Figurski, G:**

Vapor-Liquid Equilibrium Data for Electrolyte Solutions.

DECHEMA Chemistry Data Series Vol. XIII

DECHEMA, Frankfurt/M.

**Gmehling, J.; U. Onken; W. Arlt u. a.:**

Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection.

DECHEMA Chemistry Data Series

DECHEMA, Frankfurt/M., 1978-1994

Vol. I : Vapor-Liquid Equilibrium Data Collection

Part 1: Aqueous Systems

Part 2: Alcohols and Phenols

Parts 3,4: Aldehydes, Ketones, Ethers

Part 5: Carboxylic Acids, Anhydrides, Esters

Part 6: Aliphatic Hydrocarbons

Part 7: Aromatic Hydrocarbons

Part 8: Halogen, Nitrogen, Sulfur and other Compounds

Vol. II : Critical Data of Pure Substances

Vol. III : Heats of Mixing Data Collection

Vol. IV : Recommended Data of Selected Compounds and Binary Mixtures

Vol. V : Liquid-Liquid Equilibrium Data Collection

Vol. VI : Vapor-Liquid Equilibrium for Mixtures of Low Boiling Substances

Vol. VIII: Solid-Liquid Equilibrium Data Collection

Vol. IX : Solid-Liquid Equilibrium Data Collection

Vol. X : Thermal Conductivity and Viscosity of Fluid Mixtures

Vol. XI : Phase Equilibria and Phase Diagrams of Electrolytes

Vol. XII : Electrolyte Data Collection

Vol. XIII: Vapor-Liquid Equilibrium Data for Electrolyte Solutions

Vol. XIV: Polymer Solution Data Collection

**Hicks, C. P.; C. L. Young:**

The Gas-Liquid Properties of Binary Mixtures.

Chem. Reviews 75 (1975) S. 119 - 175 (kritische Daten)

**Hiza, M. J.; A. J. Kidnay; R. C. Miller:**

Equilibrium Properties of Fluid Mixtures

(A bibliography of experimental data on selected fluids)

LLE, LLVE, SVE, SLE, SLVE, Gas-Gas-E, Gashydrates, volumetric properties, calorimetric properties

IFI/Plenum, New York - Washington - London, 1982

**Hiza, M. J.; A. J. Kidnay and R. C. Miller:**

Equilibrium Properties of Fluid Mixtures - 2

A bibliography of experimental data on selected fluids (of cryogenic interest).

IFI Plenum, New York – Washington – London, 1975 und 1982

**Horsley, L.H.:**

Azeotropic Data.

Bd. I: Advances in Chemistry Series, No. 6

American Chemical Society, Washington D.C., 1952

Bd. II: Advances in Chemistry Series, No. 35

American Chemical Society, Washington D.C., 1962

Bd. III: Advances in Chemistry Series, No. 116

(Revision der Ausgaben I und II)

American Chemical Society, Washington D.C., 1973

**Hradetzky, G.; I. Hammerl u. a.:**

Selective Solvents. Data on Dimethylformamide, N-Methylcaprolactam and N-Methylpyrrolidone.

Physical Sciences Data, Vol. 31.

(VLE Selektivlösungsmittel/Kohlenwasserstoffe, auch Reinstoffdaten)

Elsevier Science Publ. Comp., Amsterdam, 1989

**Knapp, H.; R. Dörig; L. Oellrich; U. Plöcker; J.M. Pausnitz; R. Langhorst; S. Zeck:**

Vapor-Liquid Equilibria for Mixtures of Low Boiling Substances.

DECHEMA Chemistry Data Series Vol. VI.

Part 1: Binary systems

Part 2: Ternary systems

Part 3: Ternary systems

Part 4: Ternary systems

DECHEMA, Frankfurt/M., 1982-1989

**Kogan, V.B.; V.M. Fridman; V.V. Kafarov:**

Ravnovesie mezhdyy zhidkostju i parom.

Nauka, 1966

**Lide, D. R.; H. V. Kehiaian:**

CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data.

(mit Diskette, die aber nur in Verbindung mit dem Buch sinnvoll angewandt werden kann)

CRC Press, Boca Raton u. a., 1994

**Maczynski, A.; A. Skrzecz u. a.:**

Vapor-Liquid Equilibria

(exper. Daten und Modellparameter; viele WILSON-Parameter; EOS-Parameter)

Vol. 1: hydrocarbons – Part 1 (C<sub>5</sub> and C<sub>6</sub> with C<sub>5</sub>...C<sub>20</sub>)

Vol. 2: hydrocarbons – Part 2 (C<sub>7</sub>...C<sub>18</sub>)

Vol. 3: alcohols + aliphatic hydrocarbons (C<sub>1</sub>...C<sub>14</sub>-alc. with C<sub>3</sub>...C<sub>12</sub>-HC)

Vol. 4: alcohols + non-aliphatic hydrocarbons (C<sub>1</sub>...C<sub>10</sub>-alc. with C<sub>5</sub>...C<sub>10</sub>-HC)

Vol. 5: alcohols and ethers (C<sub>1</sub>...C<sub>12</sub>-alc. with C<sub>3</sub>...C<sub>10</sub>-ethers)

Vol. 6: esters + esters, alcohols, hydrocarbons (C<sub>3</sub>...C<sub>18</sub>-esters, C<sub>1</sub>...C<sub>6</sub>-alc.)

Vol. 7: hydrocarbons – Part 3 (C<sub>1</sub>...C<sub>4</sub> with C<sub>2</sub>...C<sub>40</sub>)

Vol. 8: hydrocarbons + halogenated hydrocarbons – Part 1 (C<sub>6</sub>...C<sub>16</sub>-HC with C<sub>1</sub>...C<sub>7</sub> hal. HC)

Vol.9/10: N-compounds

Vol. 11/12: Ketones

Thermodynamic Data Center, Warsaw, Poland, 1997 - 2002

**Marsh, K.:**

A Bibliography of Isothermal Vapour-Liquid Equilibrium Data of Binary Non-Electrolyte Mixtures.  
Armidale, Australia, 1971

**NIST Ionic Liquids Database ILThermo**

Thermophysical data of ionic liquids (IL)

Eigenschaften binärer und höherkomponentiger Systeme (Original-Literaturdaten)

<http://ilthermo.boulder.nist.gov/ILThermo/>

National Institute of Standards and Technology, Boulder, USA

**Ogorodnikov, S. K.; T. M. Lesteva; V. B. Kogan:**

Azeotropnye smesi. Spravochnik.

Izd. Khimija, Leningrad, 1971

**Ohe, S.:**

Vapor-Liquid Equilibrium Data.

Physical Sciences Data, 37. (WILSON-Konstanten)

Elsevier Science Publ. Comp., Amsterdam, 1989

**Ohe, S.:**

Vapor-Liquid Equilibrium Data at High Pressure.

Physical Sciences Data 42.

Elsevier Science Publ. Comp., Amsterdam, 1990

**Stephan, K.; H. Hildwein:**

Recommended Data of Selected Compounds and Binary Mixtures.

DECHEMA Chemistry Data Series Vol. IV, Parts 1 + 2.

DECHEMA, Frankfurt/M., 1987

(14 binäre Testmischungen für Destillationskolonnen)

**Tamir, A.; E. Tamir; K. Stephan:**

Heats of Phase Change of Pure Components and Mixtures.

Physical Sciences Data, 14.

(nur Bibliographie !)

Elsevier Science Publ. Comp., Amsterdam, 1983

**Tiegs, D.; J. Gmehling u.a.:**

Activity Coefficients at Infinite Dilution.

DECHEMA Chemistry Data Series Vol. IX, Part 1-4

DECHEMA, Frankfurt/M., 1986-1994



**Timmermans, J.:**

Physico-Chemical Constants of Binary Systems in Concentrated Solutions. (4 volumes)  
Interscience, New York, 1959/60  
Wichterle, I.; J. Linek ; E. Hala:  
Vapor-Liquid Equilibrium Data Bibliography.  
(+ Supplement I and supplement II)  
Elsevier Science Publ. Comp., Amsterdam, 1973 - 1982

**Wisniak, J.; A. Tamir:**

Mixing and excess thermodynamic properties.  
(nur Bibliographie!)  
Elsevier Science Publ. Comp., Amsterdam, 1978

**Wohlfarth, Ch.:**

Statische Dielektrizitätskonstanten reiner Flüssigkeiten und binärer Gemische.  
In: Landolt-Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology.  
Neue Serie, Gruppe IV, Band 6  
Springer Verlag Berlin – Heidelberg – New York, 1991

**2.2 Gaslöslichkeiten**

Gas solubilities

**Fogg, P. G. T.; W. Gerrard:**

Solubility of Gases in Liquids.  
(Monographie mit Datenanhang)  
J. Wiley & Sons, Cichester, 1991

**Fogg, P. G. T.; J. Sangster:**

Chemicals in the Atmosphere: Solubilities, Sources and Reactivities  
J. Wiley & Sons, Cichester, 2003

**Gerrard, W.:**

Gas Solubility  
(Berechnung, Messung, Daten)  
Pergamon Press, Oxford u. a., 1989

**Howard, P. H.; W.M. Meylan:**

Handbook of Physical Properties of Organic Chemicals.  
CRC Lewis Publishing, Boca Raton - New York - London - Tokyo, 1997  
(Normalsiedepunkte, Wasserlöslichkeiten, Henry-Konstanten (Wasser),  $\log P_{OW}$ )

**Kertes, A. S. (Herausgeber):**

IUPAC Solubility Data Series

Pergamon Press, Oxford - New York

Vol. 1: Klever, H.L.: Helium, Neon

Vol. 2: Clever, H.L.: Krypton, Xenon, Radon

Vol. 4: Clever, H.L.: Argon

Vol. 5/6: Young, C.L.: Wasserstoff, Deuterium

Vol. 7: Battino, R.: Sauerstoff, Ozon

Vol. 8: Young, C.L.: Stickoxide

Vol. 9: Hayduk, W.: Ethan

Vol. 10: Battino, R.: Stickstoff, Luft

Vol. 12: Young, C.L.: Schwefeldioxid, Chlor, Fluor, Chloroxide

Vol. 24: Hayduk, E.: Propan, Butan, 2-Methylpropan

Vol. 27/28: Clever, H.L. und C.L. Young: Methan

Vol. 32: Fogg, P.G.T. und C.L. Young: H<sub>2</sub>S, D<sub>2</sub>S und Selenwasserstoff

**Linke, W.F.:**

Solubilities: Inorganic and metal-organic compounds. (2 volumes)

Van Nostrand Company, Inc., Princeton u. a., 1958

**Sander, R.:**

Compilation of Henry's Law Constants (version 4.0) for water as solvent.

(most actual compilation (2014) for 4632 species; PDF document)

Air Chemistry Department, Max-Planck Institute of Chemistry, Mainz

<http://www.atmos-chem-phys.net/15/4399> (data collection)

<http://www.henrys-law.org> (comment, FAQ, errata)

**Wilhelm, E; R. Battino; R. J. Wilcock:**

Low-pressure solubilities of gases in liquid water.

Chem. Rev. 77(1977), 219 - 262

**Wisniak, J.; M. Herskowitz:**

Solubility of Gases and Solids, a Literature Source Book,

Physical Sciences Data, Vol. 18a, 18b

Elsevier Science Publ. Comp., Amsterdam, 1984

**Yaws, C.L.:**

Thermodynamic and Physical Property Data.

Gulf Publ. Comp., Houston u. a., 1992

(neben Reinstoffdaten auch Henry-Koeffizienten für Wasser als Lösungsmittel)

**Yaws, C. L.:**

Chemical Properties Handbook.

(u. a. von einigen Hundert Stoffen Henry-Konstanten in Wasser)

McGraw-Hill, New York u. a., 1999

## **2.3 Flüssigkeit-Flüssigkeit-Gleichgewichte und Feststoff-Löslichkeiten**

LLE and solubilities of solids

**Arlt, W.; M. E. A. Macedo; P. Rasmussen; N. Soerensen:**

Liquid-Liquid Equilibrium Data Collection.

DECHEMA Chemistry Data Series, Vol. V.

Part 1: Binary systems, 1979

Part 2: Ternary systems, 1980

Part 3: Ternary and quaternary systems, 1980

Part 4: Supplement 1

DECHEMA, Frankfurt/M.

Barton, A.F.M.:

Alcohols with Water.

(Solubility Data Series, Vol. 15)

Pergamon Press, Oxford - New York, 1984

Engels, H.:

Phase Equilibria and Phase Diagrams of Electrolytes.

DECHEMA Chemistry Data Series, Vol. XI

DECHEMA, Frankfurt/M., 1990

**Francis, A.W.**

Critical Solution Temperatures

Amer. Chem. Society, Washington D. C., 1961

**Freier, R. K.:**

Aqueous Solutions / Wässrige Lösungen.

Data of Inorganic and Organic Compounds. (2 volumes)

(Löslichkeiten (auch T-abhängig), Diss.-konstanten, Dichten, Redoxpotentiale)

Walter de Gruyter, Berlin – New York, 1976

**Hiza, M. J.; A. J. Kidnay; R. C. Miller:**

Equilibrium Properties of Fluid Mixtures (A bibliography of experimental data on selected fluids)

LLE, LLVE, SVE, SLE, SLVE, Gas-Gas-E, Gashydrates, volumetric properties, calorimetric propert.

IFI/Plenum, New York u. a., 1982

**Horvath, A. L.; F. W. Getzen:**

Halog. Benzenes, Toluens, Phenols with Water.

(Solubility Data Series, Vol. 20)

Pergamon Press, Oxford - New York, 1984

**Hradetzky, G.; I. Hammerl u. a.:**

Selective Solvents. Data on Dimethylformamide, N-Methylcaprolactam and N-Methylpyrrolidone.

Physical Sciences Data, Vol. 31.

(LLE Selektivlösungsmittel/Kohlenwasserstoffe)

Elsevier Science Publ. Comp., Amsterdam, 1989

**Kertes, A. S.** (Herausgeber):

IUPAC Solubility Data Series

Pergamon Press, Oxford - New York

Vol. 3: **Salomon, M.**: Silberazid, Cyanide, Cyanamide, Cyanate, Selenocyanate, Thiocyanate

Vol. 11: **Scrosati, B. und C.A. Vincent**: Alkalimetalle, Erdalkalimetalle, Ammoniumhalogenide in  
Amid-Lösungsmitteln

Vol. 13: **Siekierski, S., T. Mioduski und M. Salomon**: Scandium-, Yttrium-, Lanthan- und  
Lanthanidennitrate

Vol. 14: **Miyamoto, H, M. Salomon und H.L. Clever**: Alkaline Earth Metal Halates

Vol. 15: **Barton, A.F.M.**: Alkohole mit Wasser

Vol. 16/17: **Tomlinson, E. und A. Regosz**:  $\beta$ -Lactam-Antibiotica

Vol. 18: **Popovych, O.**: Tetraphenylborate

(Vol. 19 = Sammelindex der Bände 1 - 18)

Vol. 20: **Horvath, A.L. und F.W. Getzen**: Halogenierte Benzene, Toluene und Phenole mit Wasser

Vol. 21: **Young, C.L. und P.G.T. Fogg**:  $\text{NH}_3$ , Amine, Phosphin, Arsin, Stibin, Silan, German und  
Stannan in organischen Lösungsmitteln

Vol. 22: **Mioduski, T. und M. Salomon**: Scandium-, Yttrium-, Lanthan-, und Lanthanidenhalogenide  
in nichtwässrigen Lösungsmitteln

Vol. 23: **Dirkse, T.P.**: Kupfer-, Silber-, Gold-, Zink-, Cadmium- und Quecksilberoxide und Hydroxide

Vol. 25: **Hirayama, C., Z. Galus und C. Guminski**: Metalle in Quecksilber

Vol. 26: **Masson, M.R., H.D. Lutz und B. Engelen**: Sulfite, Selenite und Tellurite

Vol. 29: **Clever, H.L.**: Quecksilber in Flüssigkeiten, komprimierten Gasen, geschmolzenen Salzen  
und in anderen Elementen

Vol. 30: **Miyamoto, H. und M. Salomon**: Alkali Metal Halates, Ammonium Iodates and Iodic Acid

Vol. 31: **Eysseltova, J. und T.P. Dirkse**: Alkalimetall-Orthophosphate

Vol. 33: **Franzosini, P.**: Geschmolzene Alkalimetall-Alkanoate

Vol. 34/35/36: **Paruta, A.N. und R. Piekos**: 4-Aminobenzensulfonamide

Vol. 37: **Shaw, D.G.**: Kohlenwasserstoffe mit Wasser und Seewasser ( $\text{C}_5$  bis  $\text{C}_7$ )

Vol. 38: **Shaw, D.G.**: Kohlenwasserstoffe mit Wasser und Seewasser ( $\text{C}_8$  bis  $\text{C}_{36}$ )

**Knapp, H.; R. Langhorst; M. Teller:**

Solid-Liquid Equilibrium Data Collection.

DECHEMA Chemistry Data Series Vol. VIII.

DECHEMA, Frankfurt/M., 1987

**Linke, W.F.:**

Solubilities: Inorganic and metal-organic compounds. (2 volumes)

van Nostrand Company, Inc., Princeton u. a., 1958

**Seidell, A.:**

Solubilities of organic compounds. Vol. II. (Daten bis 1939)

van Nostrand, New York 1941

**Seidell, A.; W.F. Linke:**

Solubilities of inorganic and organic compounds.

Supplem. Vol. (Daten 1939 -1949)

van Nostrand, New York, 1952

Stephen, H.; T. Stephen:

Solubilities of Inorganic and Organic Compounds.

Pergamon Press, New York, 1963

**s. a. Timmermans** (Binary systems)

**Wisniak, J.; M. Herskowitz:**

Solubility of Gases and Solids, a Literature Source Book,

Physical Sciences Data, Vol. 18a, 18b

Elsevier Science Publ. Comp., Amsterdam, 1984

**Wisniak, J.; A. Tamir:**

Liquid - Liquid Equilibrium and Extraction, a Literature Source Book,

Physical Sciences Data, Vol. 7, 7a, 23, 28

Elsevier Science Publ. Comp., Amsterdam, 1980 - 1987

**Yalkowsky, S.H.; Y. He:**

Handbook of Aqueous Solubility Data.

CRC Press, Boca Raton u. a., 2003

## **2.4 Transporteigenschaften**

Transport properties

### **Stephan, K.; T. Heckenberger:**

Thermal Conductivity and Viscosity Data of Fluid Mixtures.

DECHEMA Chemistry Data Series Vol. X

DECHEMA, Frankfurt/M., 1989

### **S. Westmeier u. a.:**

Verfahrenstechnische Berechnungsmethoden. Teil 7: Stoffwerte

(u. a. Diffusionskoeffizienten in Luft)

Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1981

### **3. Daten über Polymere**

Polymer data

**Brandrup, J.; E.H. Immergut:**

Polymer Handbook (3rd Ed.)

John Wiley & Sons Inc., New York, 1989

**Van Krevelen, D.W.:**

Properties of Polymers. Their Correlation with Chemical Structure, their Numerical Estimation and Prediction from Additive Group Contributions. 3rd Ed.

Elsevier Science Publ. Comp., Amsterdam, 1990

**Wen Hao; H.S. Elbro; P. Alessi:**

Polymer Solution Data Collection.

DECHEMA Chemistry Data Series Vol. XIV

Part 1: VLE

Part 2 + 3: Solvent activity, LLE

DECHEMA, Frankfurt/M., 1992

**Wohlfarth, Ch.:**

Vapour-Liquid Equilibrium Data of Binary Polymere Solutions.

(Physical Sciences Data 44)

Elsevier Science Publ. Comp., Amsterdam, 1994

## **4. Kinetische Daten**

Kinetic data

### **Allara, D.L.; R. Shaw:**

(Pyrolysedaten)

J. Phys. Chem. Ref. Data 9 , 523 (1980)

### **Atkinson, R. u. a.:**

(extensive Datensammlung zur Atmosphärenchemie,  
vorangegangene Artikel sind angegeben)

J. Phys. Chem. Ref. Data 18 , 881 (1989)

### **Benson, S.W. ; H.E. O'Neal:**

Kinetic Data on Unimolecular Gas Phase Reactions

NSRDS - NBS 21, Washington, 1970

### **Robinson, P.J.; K.A. Holbrook:**

Unimolecular reactions.

John Wiley & Sons Inc. - Interscience, New York, 1972

### **Tsang, W.:**

J. Phys. Chem. Ref. Data 15, 1087 (1986)

ibid. 16, 471 (1987)

ibid. 17, 887 (1988)

ibid. 19, 1 (1990)

Chemical Kinetic Data Base for Combustion Chemistry

Part 1 bis 4 (wird fortgesetzt)



## **5. Elektrochemische Daten**

Electrochemical data

### **Dobos, D.:**

Electrochemical Data.

Akademiai Kiado, Budapest, 1975

### **Milazzo, G.; S. Caroli**

Tables of Standard Electrode Potentials. (IUPAC-Projekt)

(neben Wasser auch andere Lösungsmittel)

J. Wiley & Sons, Chichester u. a., 1978

## **6. Berechnung von Stoffdaten**

Prediction of data

### **Danner, R.P., T.E. Daubert:**

Data Prediction Manual.

Design Institute for Physical Property Data (DIPPR),

American Institute of Chemical Engineers AICHE;

Dep. of Chemical Engineering, Pennsylvania State University, 1983

ISBN 0-8169-0233-X

critical properties

vapour pressure

density

thermal properties

phase equilibria

surface tension

viscosity

thermal conductivity

diffusivity

combustion

environmental data

### **Gmehling et al.**

**Publizierte Parameter für Modified UNIFAC (Dortmund), 1993 - 2014**

1. J. Gmehling; J. Li; M. A. Schiller:

**A Modified UNIFAC Model.**

**2. Present Parameter Matrix and Results for Different Thermodynamic Properties.**

Ind. Eng. Chem. Res. **32** (1993) 178

2. J. Gmehling; J. Lohmann; A. Jakob; J. Li und R. Joh:

**A Modified UNIFAC (Dortmund) Model. 3. Revision and Extension.**

Ind. Eng. Chem. Res. **37** (1998) 4876 - 4882

3. J. Lohmann; R. Joh und J. Gmehling :

**From UNIFAC to Modified UNIFAC (Dortmund).**

Ind. Eng. Chem. Res. **40** (2001) 957 - 964

4. J. Lohmann and J. Gmehling:

**Modified UNIFAC (Dortmund): Reliable Model for the Development of Thermal Separation Processes.**

J. Chem. Eng. Jpn **34** (2001) 43 - 54

5. R. Wittig; J. Lohmann; R. Joh; S. Horstmann und J. Gmehling:

**VLE and Enthalpies of Mixing in a Temperature Range from 298.15 to 413.15 for the Further Development of Modified UNIFAC (Dortmund).**

Ind. Eng. Chem. Res. **40** (2001) 5831 - 5838

6. J. Gmehling; R. Wittig; J. Lohmann und R. Joh:  
**A Modified UNIFAC (Dortmund) Model. 4. Revision and Extension.**  
Ind. Eng. Chem. Res. 41 (2002) 1678 - 1688
7. B. Nienhaus:  
**Erweiterung und Weiterentwicklung der Gruppenbeitragsmethode  
Modified UNIFAC (Dortmund) zur Beschreibung und Vorhersage des  
Phasengleichgewichtsverhaltens aromatischer und kältemittelhaltiger Systeme.**  
Dissertation, Universität Oldenburg, 1999  
veröffentlicht: Shaker-Verlag, Aachen, 2001 (ISBN 3-8265-8929-7)
8. R. Wittig, J. Lohmann, J. Gmehling:  
**Prediction of Phase Equilibria and Excess Properties for Systems with Sulfones.**  
AIChE J. 49 (2003), 530 - 537
9. A. Jakob, H. Grensemann, J. Lohmann, J. Gmehling:  
**Further Development of Modified UNIFAC (Dortmund), Revision and Extension 5.**  
Ind. Eng. Chem. Res. 45 (2006), 7924 – 7933
10. T. Hector and J. Gmehling:  
**Present status of the modified UNIFAC model for the prediction of phase equilibria  
and excess enthalpies for systems with ionic liquids.**  
Fluid Phase Equilibria 371 (2014) 82 - 92

**Hecht, G.:**

Berechnung thermodynamischer Stoffwerte von Gasen und Flüssigkeiten.  
Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1965

**Westmeier, S. u. a.:**

Verfahrenstechnische Berechnungsmethoden, Teil 7: Stoffwerte.  
Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, 1981