

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 ca. 3700 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

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.
(NH₃, 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

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

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: umfangreiche Reinstoffdaten-Sammlung; 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: C₁ – C₆; Part II: C₆ – C₃₃)

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 (2nd 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 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
2nd 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

2nd 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 zhidkостей.

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 (C₅ and C₆ with C₅...C₂₀)

Vol. 2: hydrocarbons – Part 2 (C₇...C₁₈)

Vol. 3: alcohols + aliphatic hydrocarbons (C₁...C₁₄-alc. with C₃...C₁₂-HC)

Vol. 4: alcohols + non-aliphatic hydrocarbons (C₁...C₁₀-alc. with C₅...C₁₀-HC)

Vol. 5: alcohols and ethers (C₁...C₁₂-alc. with C₃...C₁₀-ethers)

Vol. 6: esters + esters, alcohols, hydrocarbons (C₃...C₁₈-esters, C₁...C₆-alc.)

Vol. 7: hydrocarbons – Part 3 (C₁...C₄ with C₂...C₄₀)

Vol. 8: hydrocarbons + halogenated hydrocarbons – Part 1 (C₆...C₁₆-HC with C₁...C₇ 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

<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: H₂S, D₂S 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 einigun 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:

Halogen 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**: b-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**: NH₃, 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 (C₅ bis C₇)

Vol. 38: **Shaw, D.G.**: Kohlenwasserstoffe mit Wasser und Seewasser (C₈ bis C₃₆)

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