

Theorie der Feuchte – Dalton'sches Gesetz

Luft ist eine Mischung aus verschiedenen Gasen mit den Hauptbestandteilen:

Gaskomponente	Volumsanteil [%]	Gewichtsanteil [%]
Stickstoff N ₂	78,03	75,47
Sauerstoff O ₂	20,99	23,20
Argon Ar	0,93	1,28
Kohlendioxid CO ₂	0,03	0,04
Rest: H ₂ , Ne, He, Kr	0,02	0,01

Unter normalen Umgebungsbedingungen verhalten sich diese Gase praktisch „ideal“, das heißt jedes Gasmolekül kann völlig unabhängig von allen anderen agieren. Das führt zum **Dalton'schen Gesetz** :

„Der Gesamtdruck eines idealen Gasgemisches ist die Summe der Einzeldrücke der Komponenten“

Der Einzeldruck einer Komponente heißt auch „Partialdruck“, der Gesamtdruck ist damit die Summe der Partialdrücke d.h.

$$p = p_{N_2} + p_{O_2} + p_{Ar} + \dots$$

Einheit von p in [mbar],[hPa]

Wasserdampf, also Wasser in gasförmiger Form, verhält sich meist ebenfalls wie ein ideales Gas und tritt daher als zusätzliche Komponente im Dalton'schen Gesetz auf :

$$p = p_{N_2} + p_{O_2} + p_{Ar} + \dots + e = p_{da} + e$$

e Wasserdampfpartialdruck [mbar]
p_{da} Partialdruck der trockenen Luft

Theorie der Feuchte - Dampfdruck

Dampfdruck über Wasser

Wasserdampfdruck kann nicht jeden beliebigen Wert annehmen, es existiert je nach Temperatur ein maximaler Wert, der nicht überschritten werden kann. Qualitativ gesprochen kann warme Luft mehr Wasserdampf aufnehmen als kalte.

Das erklärt sich physikalisch so :

Moleküle in einer Flüssigkeit wie Wasser bewegen sich mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten ständig durch das Medium, wobei ihre durchschnittliche kinetische Energie proportional zur Wassertemperatur ist. Die Energien der Moleküle sind statistisch verteilt wie in Fig.1 illustriert.

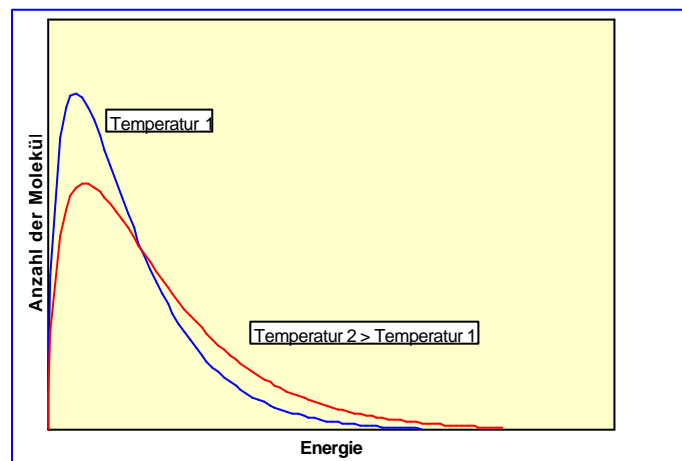


Fig. 1: Energieverteilung der Moleküle in einer Flüssigkeit bei verschiedenen Temperaturen

Die kinetische Energien der Moleküle im Wasser hängen also im Mittel von der Temperatur des Mediums ab, sind aber statistisch verteilt. Liegt die Molekülenergie unterhalb der Bindungsenergie der Flüssigkeit so kann das Molekül das Wasser nicht verlassen, liegt sie im Einzelfall darüber so dampft das Molekül von der Wasseroberfläche ab und erhöht den Dampfdruck.

Die Moleküle in der Wasserdampfphase verhalten sich ähnlich: ihre kinetischen Energien sind wiederum statistisch verteilt, wobei Moleküle mit unterdurchschnittlicher Energie aus dem Dampf ausfallen d.h. an der Wasseroberfläche kondensieren und den Dampfdruck erniedrigen.

In einem geschlossenen Behälter, der teilweise mit Wasser gefüllt ist (Fig.2), stellt sich ein Gleichgewicht zwischen diesen beiden Prozessen der Verdampfung und Kondensation ein. Jede lokale Unterkonzentration an Wassermolekülen im Dampf führt zu gesteigerter Verdampfung, die den Dampfdruck erhöht, jede Überkonzentration hingegen senkt den Dampfdruck durch Kondensation.

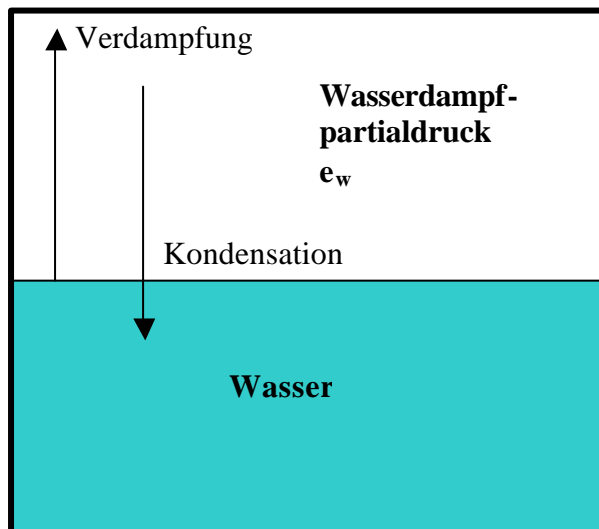


Fig. 2 : Behälter mit Wasser bei konstanter Temperatur

Das Gleichgewicht zwischen Verdampfung und Kondensation führt wiederum zu einem Dampfdruck der nur von der Temperatur im Behälter abhängt. Erhöht man die Temperatur, dann erlangen im Schnitt mehr Moleküle eine höhere Energie d.h. mehr Moleküle verlassen die Wasseroberfläche und erhöhen damit den Dampfdruck.

Unter Normalbedingungen verhält sich Wasserdampf wie ein ideales Gas d.h. die Moleküle zeigen keine Wechselwirkung mit anderen idealen Gasen. Deshalb ist die Wasserdampfkonzentration praktisch unabhängig von anderen Gasen, die noch oberhalb der Wasseroberfläche vorhanden sind.

Im thermischen Gleichgewicht ist der Wasserdampfpartialdruck e , der sich im Behälter bei der Temperatur t einstellt der maximale Wert bei dieser Temperatur und heißt deshalb

Sättigungsdampfdruck e_w über Wasser bei der Temperatur t .

Der Sättigungsdampfdruck über Wasser hängt näherungsweise exponentiell von der Temperatur t ab, Werte für e_w sind in Tab.1^[1] für verschiedene Temperaturen angeführt.

t [°C]	e _w [mbar]	t [°C]	e _w [mbar]
100	1014.19	0	6.112
90	701.82	-10	2.8652
80	474.16	-20	1.2559
70	312.02	-30	0.5103
60	199.48	-40	0.1903
50	123.53	-50	0.0644
40	73.853	-60	0.0195
30	42.470	-70	5.187E-03
20	23.392	-80	1.190E-03
10	12.281	-90	2.298E-04
0.01	6.117	-100	3.622E-05

Tab. 1: Sättigungsdampfdruck e_w über Wasser

Dampfdruck über Eis

Unterhalb von t=0.01°C (Tripelpunkt von Wasser) kann Wasser in flüssiger Form oder fester Form als Eis vorliegen wobei die flüssige Phase meist instabil ist. Die Physik der Verdampfung über einer Eisoberfläche bleibt qualitativ dieselbe wie über Wasser.

t [°C]	e _i [mbar]
0.01	6.117
0	6.112
-10	2.5989
-20	1.0324
-30	0.3800
-40	0.1284
-50	0.0394
-60	0.0108
-70	2.615E-03
-80	5.472E-04
-90	9.670E-05
-100	1.402E-05

Tab. 2 : Sättigungsdampfdruck e_i über Eis

Entsprechend der festen und flüssigen Phase findet man zwei unterschiedliche Dampfdruckkurven unterhalb von $t=0.01^\circ\text{C}$, diese sind in Fig. 3 auf einer logarithmischen Skala dargestellt. Bemerkenswert ist dabei, dass sich der Dampfdruck zwischen -100°C und 100°C um 8 Größenordnungen ändert !

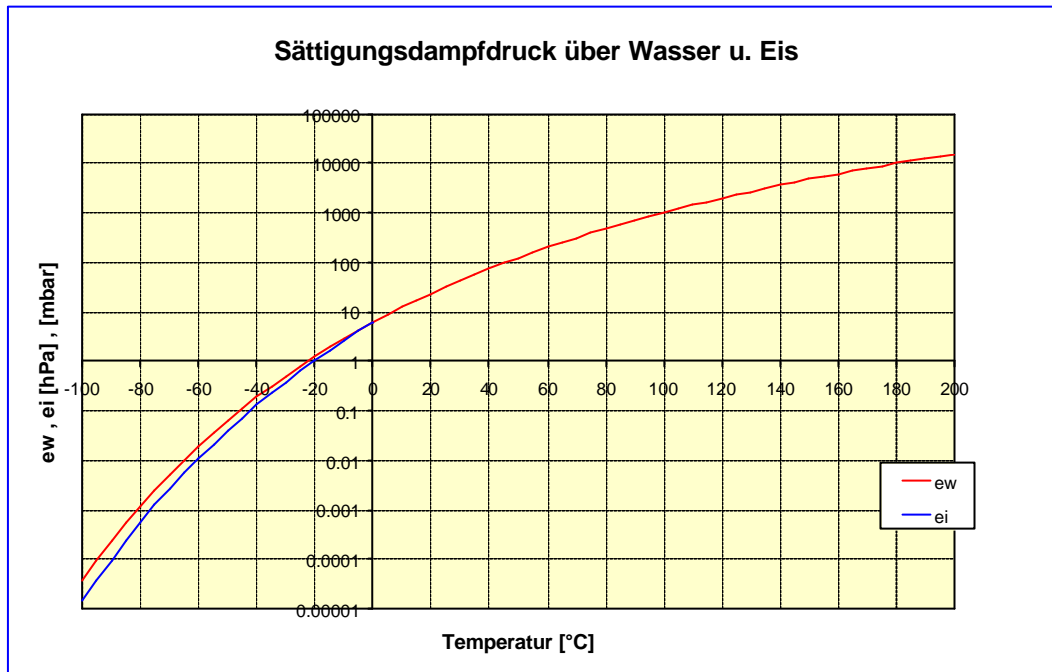


Fig. 3 : Dampfdruckkurven über Wasser und Eis. Unterhalb des Tripelpunkts ($t=0.01^\circ\text{C}$) vergabelt sich die Kurve in einen Ast für Wasser und in einen Ast für Eis.

Realgaskorrektur

Für gewöhnlich wird Wasserdampf als ideales Gas behandelt d.h. die Wassermoleküle verhalten sich unabhängig von der umgebenden Luft. In Wirklichkeit existiert jedoch eine schwache Wechselwirkung zwischen den Molekülen des Wassers und denen von Luft, was zu einer leichten Erhöhung des Sättigungsdampfdrucks führt. Dieser Einfluss wird durch den sogenannten „enhancement-“ (=Verstärkungs-) Faktor $f(p,t)$ berücksichtigt.

Der tatsächliche Sättigungsdampfdruck in Luft e'_w ist damit gegeben durch

$$e'_w = e_w(t) \cdot f(p,t)$$

Unter Normalbedingungen ($p < 1100 \text{ mbar}$) ist der Faktor $f(p,t) \approx 1$, die Realgaskorrektur ist damit vernachlässigbar. Deshalb verhält sich Wasserdampf in der Regel wie ein ideales Gas.

Sind höhere Genauigkeiten erwünscht, so muss der enhancement-Faktor berücksichtigt werden. Werte für seine Abhängigkeit von Temperatur und Luftdruck sind in Tab. 3^[2] gegeben.

t [°C]	-40	-20	0	10	20	30	40	60	80
p [bar]									
0.25	1.0013	1.0012	1.00131	1.00148	1.00173	1.00202	1.00223	1.00111	
0.5	1.0026	1.0022	1.00217	1.00229	1.00251	1.00284	1.00323	1.00362	1.00051
1	1.0052	1.0044	1.0039	1.00388	1.004	1.00426	1.00467	1.00571	1.00564
1.5	1.0078	1.0065	1.0056	1.0055	1.00547	1.00564	1.00599	1.00713	1.00801
2	1.0104	1.0086	1.0074	1.0071	1.0069	1.00701	1.00728	1.00839	1.00968
2.5	1.013	1.0108	1.0091	1.0087	1.0084	1.0084	1.0086	1.00959	1.01108
3	1.0156	1.0129	1.0108	1.0103	1.0099	1.0097	1.0098	1.0108	1.01234
3.5	1.0183	1.015	1.0126	1.0119	1.0114	1.0111	1.0111	1.0119	1.01351
4	1.0209	1.0172	1.0144	1.0135	1.0128	1.0125	1.0124	1.013	1.0146
4.5	1.0236	1.0194	1.0161	1.0151	1.0143	1.0138	1.0136	1.0142	1.0157
5	1.0262	1.0215	1.0179	1.0167	1.0158	1.0152	1.0149	1.0153	1.0168
10	1.0533	1.0435	1.0356	1.033	1.0308	1.029	1.0277	1.0265	1.0271
20	1.11	1.089	1.072	1.066	1.0615	1.0573	1.0539	1.0493	1.0474
30	1.171	1.138	1.111	1.101	1.093	1.087	1.081	1.073	1.068
40	1.237	1.189	1.151	1.138	1.126	1.117	1.109	1.096	1.089
50	1.307	1.243	1.193	1.175	1.161	1.148	1.137	1.121	1.111
60	1.38	1.3	1.237	1.215	1.196	1.18	1.167	1.146	1.133
70	1.46	1.36	1.282	1.256	1.233	1.213	1.197	1.172	1.155
80	1.55	1.42	1.33	1.298	1.271	1.248	1.228	1.198	1.178
90	1.64	1.49	1.381	1.343	1.311	1.284	1.261	1.226	1.202
100	1.75	1.56	1.43	1.389	1.352	1.32	1.294	1.254	1.226

Tab. 3 : Enhancement-Faktor f(p,t)

Theorie der Feuchte – Die Magnus Formel

Werte für den Sättigungsdampfdruck über Wasser und Eis können mit hinreichend guter Genauigkeit mit der Magnus Formel ^[1] berechnet werden:

$$e_{w,i} = A \exp\left(\frac{m \cdot t}{T_n + t}\right)$$

Die Magnus-Parameter A, m, T_n sind unterschiedlich für Wasser und Eis wie man der Tabelle 4 entnimmt.

Temperaturbereich t [°C]	A	m	T _n
Über Eis : -80 bis 0.01	6.112	22.46	272.62
Über Wasser : -45 bis 50	6.112	17.62	243.12

Tab. 4 : Magnus-Parameter ^[1]

Theorie der Feuchte – Relative Feuchte

Relative Feuchte U_w [%]

In den Tabellen 1 und 2 (im Abschnitt “Dampfdruck”) werden Werte für den Sättigungsdampfdruck als Funktion der Temperatur angegeben. Es handelt sich dabei um maximale Werte, in der Praxis kommen meist niedrigere vor.

Die relative Feuchte U_w ist definiert als das Verhältnis zwischen dem aktuellen Wasserdampfdruck e und dem Sättigungsdampfdruck e_w über Wasser

$$U_w = \frac{e}{e_w} \cdot 100 \quad [\%]$$

Da der Wasserdampfpartialdruck e den Sättigungsdampfdruck e_w nie überschreiten kann, ist der höchste mögliche Wert für $U_w = 100 \%$.

Relative Feuchte unterhalb des Tripelpunkts

Die Definition der relativen Feuchte bei niedrigeren Temperaturen als dem Tripelpunkt von Wasser $t=0.01^\circ\text{C}$ erfolgt ebenfalls in Bezug auf den Sättigungsdampfdruck e_w über Wasser. In diesem Temperaturbereich kann aber sowohl Wasser mit dem Sättigungsdampfdruck e_w als auch Eis mit dem kleineren Sättigungsdampfdruck $e_i < e_w$ auftreten. Dabei ist Eis die stabile Phase und liegt als solche in der technischen Praxis für $t < 0.01^\circ\text{C}$ meist vor. Somit sind die Werte für die relative Feuchte mit $e=e_i$ nach oben begrenzt:

$$t < 0.01^\circ\text{C}: U_{w,\max} = \frac{e_i}{e_w} \cdot 100 \quad [\%]$$

t [$^\circ\text{C}$]	0	-5	-10	-15	-20	-25	-30	-35	-40
e_i [mbar]	6.108	4.015	2.597	1.652	1.032	0.633	0.380	0.223	0.128
e_w [mbar]	6.108	4.212	2.857	1.905	1.246	0.799	0.502	0.308	0.184
$U_{w,\max}$ [%]	100%	95%	91%	87%	83%	79%	76%	73%	70%

Tab. 5 : Maximale relative Feuchten über Eis

Theorie der Feuchte – Taupunkt, Frostpunkt

Beim Abkühlen von Luft, die ungesättigt ist mit Wasserdampf, bleibt der Partialdruck e zunächst unverändert, während die relative Feuchte wegen der Abnahme des Sättigungsdampfdrucks mit der Temperatur zunimmt.

$$U_w = \frac{e}{e_w} \cdot 100 \quad [\%]$$

t Abnahme $\rightarrow e_w(t)$ Abnahme $\rightarrow U_w$ Zunahme

Beim „Taupunkt t_d “ erreicht der Sättigungsdampfdruck den Wert des aktuellen Partialdruck d.h. $e_w(t_d)=e$ und damit 100% maximale relative Luftfeuchte.

Der Taupunkt t_d ist somit jene Temperatur auf die feuchte Luft bei konstantem Druck herabgekühlt werden muss um eine Kondensation einzuleiten. Der Taupunkt kann bei gegebener Temperatur und Feuchte mit Hilfe der Magnus Formel berechnet werden:

t [°C] \rightarrow Sättigungsdampfdruck e_w

$$e_w[\text{mbar}], U_w[\%] \rightarrow e = \frac{e_w \cdot U_w}{100}$$

$$e \rightarrow t_d = T_n \cdot \frac{\ln\left(\frac{e}{A}\right)}{\left(m - \ln\left(\frac{e}{A}\right)\right)}$$

Die Magnus Parameter A , m , T_n sind im Abschnitt “Die Magnus Formel” in Tabelle 4 angeführt.

Wird die Temperatur unter die Taupunktstemperatur gesenkt, so übersteigt der Partialdruck den Sättigungswert und Kondensation tritt auf bis es wieder zu einem Gleichgewicht kommt.

Unterhalb des Tripelpunkts von Wasser $t < t_d = 0.01^\circ\text{C}$ bildet sich in den meisten technischen Anwendungen Eis mit dem Sättigungsdampfdruck e_i anstelle von e_w für Wasser. Wenn der Wasserdampfpartialdruck e den Sättigungsdampfdruck e_i erreicht spricht man vom „Frostpunkt“ t_f bei dem Reifbildung einsetzt, wobei gilt $t_d < t_f$.

Theorie der Feuchte – Absolute Feuchte

Absolute Feuchte d_v [g/m³]

Gibt die Masse an Wasser in 1 m³ feuchter Luft an und kann aus der Temperatur t [°C] und dem Wasserdampfpartialdruck e [mbar] berechnet werden :

t [°C] → Sättigungsdampfdruck e_w → $e = e_w \cdot U_w$

$$d_v = 216.7 \cdot \left(\frac{e}{273.15 + t} \right) \text{ [g / m}^3\text{]}$$

Theorie der Feuchte – Mischungsverhältnis

Mischungsverhältnis r [g/kg]

Gibt die Masse von Wasser an, die verdampft und mit 1 kg trockener Luft gemischt werden muss, um eine bestimmte relative Feuchte U_w bzw. einen Wasserdampfpartialdruck e zu erzeugen :

t [°C] → Sättigungsdampfdruck e_w → $e = e_w \cdot U_w$

$$r = \frac{622 \cdot e}{(p - e)} \quad [g / kg]$$

p Luftdruck [mbar]

Theorie der Feuchte – Spezifische Enthalpie

Spezifische Enthalpie h [kJ/kg]

Die spezifische Enthalpie von Luft mit der Temperatur t , relativer Feuchte U_w und entsprechendem Mischungsverhältnis r ist die Summe der Energien um diesen Zustand wie folgt zu erzeugen :

- Aufwärmen von 1 kg trockener Luft von 0°C auf t
- Verdampfen des Feuchtegehalts
- Aufwärmen des Wasserdampfes von 0°C auf t

Ⓜ Spezifische Enthalpie pro kg trockener Luft:

$$h = [c_{pa} \cdot t + (l_w + c_{pv} \cdot t) \cdot r] \quad [\text{kJ/kg}]$$

$c_{pa} = 1.00545 \text{ kJ/kg}$ spezifische Wärmekapazität von trockener Luft bei konstantem Druck

$c_{pv} = 1.85894 \text{ kJ/kg}$ spezifische Wärmekapazität von Wasserdampf bei konstantem Druck

$l_w = 2500.827 \text{ kJ/kg}$ latente Wärme von Wasser

Dabei ist die spezifische Enthalpie eine relative Größe d.h. nur Differenzen sind ausschlaggebend.

Allgemeiner gibt die Enthalpie jene Energie an, die man benötigt, um feuchte Luft aus einem thermischen Zustand 1 in einen anderen Zustand 2 zu bringen.

Beispiel 1 :

Für das Aufwärmen von Luft von 20 auf 25°C und Befeuchten von 40 auf 60% relativer Feuchte benötigt man 20.2 kJ/kg .

Beispiel 2 :

Für das Aufwärmen von Luft von 20 auf 25°C bei gleichgehaltener relativer Feuchte U_w benötigt man nur 10.3 kJ/kg .

Beispiel 3 :

Für das Aufwärmen von Luft von 20 auf 25°C bei gleich gehaltenem Wasserdampfpartialdruck e ($r=\text{konstant}$, $t_d=\text{konstant}$) benötigt man nur 5.1 kJ/kg wobei die relative Feuchte auf $U_w=29.5\%$ fällt.

Diese Beispiele sind zur besseren Deutlichkeit nochmals in Tabelle 6 angeführt und finden sich auch eingezeichnet in Fig. 4 als Prozess 1, 2, 3 im Abschnitt „Mollier-Diagramm“.

Beispiel 1	t [°C]	U_w [%]	h [kJ/kg]
Zustand 1	20	40	34.6
Zustand 2	25	60	54.8
		<i>Differenz</i>	20.2

Beispiel 2	t [°C]	U_w [%]	h [kJ/kg]
Zustand 1	20	40	34.6
Zustand 2	25	40	44.9
		<i>Differenz</i>	10.3

Beispiel 3	t [°C]	U_w [%]	h [kJ/kg]
Zustand 1	20	40	34.6
Zustand 2	25	29.5	39.7
		<i>Differenz</i>	5.1

Tab. 6: Enthalpiedifferenzen bei unterschiedlichen Zustandsänderungen

Theorie der Feuchte - Mollier Diagramm

In Tabelle 7 sind Feuchtefunktionswerte bei unterschiedlichen Temperaturen zusammengestellt. Ein Mollier-Diagramm dient dazu, thermodynamische Probleme in der Klimatechnik graphisch zu lösen. Dabei werden verschiedene Feuchtefunktionen in einer gemeinsamen Darstellung zusammengefasst. Das Mischungsverhältnis r und die Temperatur t sind über eine Beziehung verbunden welche die relative Feuchte als Parameter enthält :

$$r = \frac{622 \cdot e}{p - e} \rightarrow e = \frac{p \cdot r}{622 + r} = \frac{e_w(t) \cdot U_w}{100}$$

Unter Einbeziehung der Magnus Formel lassen sich damit Kurven konstanter relativer Feuchte U_w als Funktionen $t(r)$ auftragen. Solche Kurvenscharen bilden ein Mollier-Diagramm, wobei das Diagramm durch Kurven konstanter Enthalpie

$$h = [c_{pa} \cdot t + (l_w + c_{pv} \cdot t) \cdot r] \rightarrow t = (h - l_w \cdot r) / (c_{pa} + c_{pv} \cdot r)$$

ergänzt werden kann (Fig. 4). Damit lassen sich thermodynamische Prozesse wie Beispiele 1, 2, 3 im Abschnitt „Spezifische Enthalpie“ anschaulich darstellen. In einem professionellen Mollier Diagramm werden häufig noch weitere Feuchtefunktionen eingezeichnet.

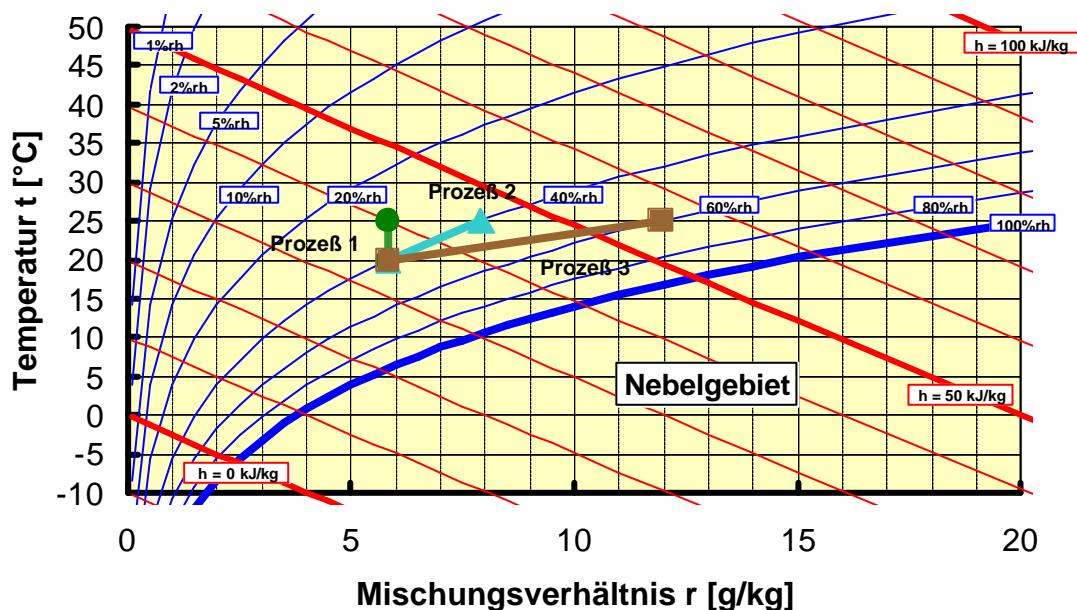


Fig. 4 : Mollier Diagramm: Kurven konstanter relativer Feuchte bzw. Enthalpien. Beispiele 1-3 aus dem Abschnitt „Spezifische Enthalpie“ sind als Prozesse 1-3 eingezeichnet.

Tab. 7: Feuchteffunktionswerte bei unterschiedlichen Temperaturen
(p =1013.25 mbar, Realgaskorrekturen sind mitberücksichtigt) :

-20 °C					
U_w [%]	t_d [°C]	e [mbar]	d_v [g/m³]	r [g/kg]	h [kJ/kg]
80	-22.56	1.013	0.867	0.622	-18.56
70	-24.07	0.886	0.758	0.544	-18.76
60	-25.78	0.759	0.650	0.467	-18.95
50	-27.78	0.633	0.542	0.389	-19.14
40	-30.17	0.506	0.433	0.311	-19.34
30	-33.17	0.380	0.325	0.233	-19.53
20	-37.26	0.253	0.217	0.155	-19.72
10	-43.90	0.127	0.108	0.078	-19.92

0 °C					
U_w [%]	t_d [°C]	e [mbar]	d_v [g/m³]	r [g/kg]	h [kJ/kg]
100	0.00	6.139	4.870	3.791	9.45
90	-1.45	5.525	4.383	3.410	8.50
80	-3.04	4.911	3.896	3.029	7.55
70	-4.82	4.297	3.409	2.649	6.61
60	-6.85	3.683	2.922	2.269	5.66
50	-9.20	3.069	2.435	1.890	4.72
40	-12.02	2.456	1.948	1.511	3.77
30	-15.55	1.842	1.461	1.133	2.83
20	-20.35	1.228	0.974	0.755	1.89
10	-28.11	0.614	0.487	0.377	0.94
5	-35.34	0.307	0.243	0.188	0.47

20°C					
U_w [%]	t_d [°C]	e [mbar]	d_v [g/m³]	r [g/kg]	h [kJ/kg]
100	20.00	23.431	17.318	14.723	56.64
90	18.31	21.088	15.586	13.220	52.96
80	16.44	18.745	13.854	11.723	49.28
70	14.36	16.402	12.123	10.234	45.62
60	12.00	14.059	10.391	8.751	41.95
50	9.26	11.715	8.659	7.276	38.30
40	5.98	9.372	6.927	5.807	34.65
30	1.88	7.029	5.195	4.345	31.00
20	-3.67	4.686	3.464	2.890	27.36
10	-12.60	2.343	1.732	1.442	23.73
5	-20.89	1.172	0.866	0.720	21.92

40 ° C					
U_w [%]	t_d [°C]	e [mbar]	d_v [g/m³]	r [g/kg]	h [kJ/kg]
100	40.00	74.052	51.237	49.041	158.72
90	38.04	66.647	46.113	43.791	146.57
80	35.89	59.242	40.989	38.623	134.49
70	33.48	51.836	35.866	33.535	122.47
60	30.76	44.431	30.742	28.525	110.52
50	27.61	37.026	25.618	23.590	98.64
40	23.84	29.621	20.495	18.730	86.83
30	19.14	22.216	15.371	13.943	75.08
20	12.79	14.810	10.247	9.226	63.39
10	2.62	7.405	5.124	4.579	51.77
5	-6.78	3.703	2.562	2.281	45.99

60 °C					
U_w [%]	t_a [°C]	e [mbar]	d_v [g/m³]	r [g/kg]	h [kJ/kg]
100	60.00	200.610	130.470	153.543	400.02
90	57.74	180.549	117.423	134.859	363.59
80	55.26	160.488	104.376	117.055	327.75
70	52.50	140.427	91.329	100.069	292.48
60	49.38	120.366	78.282	83.846	257.75
50	45.79	100.305	65.235	68.337	223.57
40	41.51	80.244	52.188	53.494	189.91
30	36.17	60.183	39.141	39.276	156.77
20	28.99	40.122	26.094	25.644	124.14
10	17.51	20.061	13.047	12.563	91.99
5	6.97	10.030	6.523	6.219	76.10

Theorie der Feuchte - Literatur

[1] Sonntag D.: Important New Values of Physical Constants of 1986, Vapour Pressure Formulations based on the ITS-90 and Psychrometer Formulae; Z.Meteorol.70 (1990) 5, 340-344

[2] Hyland R.W.: A Correlation for the second Interaction Virial Coefficients and Enhancement Factors for Moist air; J.Research NBS, A.Physics and Chemistry 79A (1975) 551-560