

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	IX
Tabellenverzeichnis	XIII
Abkürzungsverzeichnis	XV
Symbolverzeichnis	XVII
Zusammenfassung	1
1 Einleitung	3
2 Konzepte und Methoden	7
2.1 Chemische Transportreaktionen	7
2.2 Thermodynamik und Modellierung	8
2.3 Modellierung chemischer Transporte	11
2.4 Abschätzung thermodynamischer Daten und Konsistenzprüfung des Datensatzes	16
2.5 Ampullentechnik	19
2.6 Röntgendiffraktometrie	20
2.6.1 Die <i>Bragg</i> 'sche Reflexionsbedingung	20
2.6.2 Aufbau und Funktionsweise eines Röntgendiffraktometers	21
3 Das System Cr/Sb	25
3.1 Einfache Betrachtungen	25
3.2 Erste Abschätzung des Transportverhaltens von CrSb ₂	27
3.2.1 Transport unter Zusatz von CrCl ₃	27
3.2.2 Transport unter Zusatz von I ₂	28
3.3 Erste Schlussfolgerungen	32
3.4 Modellierung des Systems Cr/Sb	33
3.5 Das Barogramm als einfaches Hilfsmittel	39
3.6 Verbesserte Transportberechnungen	42
3.7 Experimente zur Kristallisation von CrSb ₂	53
3.7.1 Kristallisation aus der Schmelze	53
3.7.2 Chemische Transportreaktion	57
3.8 Schlussfolgerungen zur Modellierung und Kristallisation von CrSb ₂ ..	61
4 Das System U/Te/P	63
4.1 Abschätzung der thermodynamischen Daten	65
4.2 Modellierung des Systems U/Te	66
4.3 Modellierung des Systems U/P	70
4.4 Modellierung des Systems U/Te/P	71

4.5	Modellierung des Systems U/Te/P/I.....	73
4.6	Abschätzung des Transportverhaltens von UPTe.....	75
4.7	Erweiterung des Systems um Sauerstoff	84
5	Ergebnisse und Ausblick	87
6	Literaturverzeichnis	89
A	Anhang	93
A.1	Tabellen der verwendeten thermodynamische Daten	93
A.2	Mit <i>TRAGMIN</i> berechnete ternäre Zustandsdiagramme.....	99
A.2.1	Ternäre Zustandsdiagramme im System Cr/Sb/Cl/O bei 298 K.....	99
A.2.2	Ternäre Zustandsdiagramme im System Cr/Sb/I/O bei 298 K	101
A.2.3	Ternäre Zustandsdiagramme im System U/Te/P/I/O bei 298 K	103
A.3	Messmethode für Diffraktometer <i>D2 Phaser (Bruker AXS)</i>	108
A.4	Diffraktogramme der Kristallisationsexperimente von CrSb ₂	109