

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 Bragg'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