

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
2 Grundlagen	3
2.1 Allgemeine Thermodynamische Grundlagen	3
2.1.1 Die Hauptsätze der Thermodynamik.....	5
2.2 Berechnung von Phasendiagrammen.....	12
2.3 Thermodynamische Modellrechnungen	20
2.3.1 Assessment und Optimierung thermodynamischer Daten	21
2.3.2 Die Erstellung konsistenter thermodynamischer Datenbanken	30
2.4 Grundlagen der ab initio-Berechnungen zur Elektronenstruktur	34
2.4.1 Grundlegende Gleichungen der ab initio-Berechnungen	35
2.4.2 Die Dichte-Funktional-Theorie	36
2.4.3 Das Programm ADF.....	39
3 Experimentelle Grundlagen.....	42
3.1 Grundlagen und Methoden der Thermischen Analyse.....	42
3.1.1 Kalorimetrie	42
3.1.2 Knudsen-Effusions-Massenspektrometrie (KEMS).....	50
Bestimmung von Partialdrücken.....	53
Bestimmung von Aufttrittspotentialen durch Ionisationsausbeutemessungen	58
Fragmentierung	59
Bestimmung thermodynamischer Daten.....	60
4 Thermodynamische Betrachtung neuer Werkstoffe in der Anwendung	68
4.1 Lampenchemie.....	68
4.1.1 Das System NaI-CeI ₃	74
4.2 Intermetallische Phasen - Bestimmung thermodynamischer Daten im System Al-Fe-Ni.....	86
4.2.1 Stand der Forschung.....	87
4.2.2 Experimentelle Vorgehensweise	92
4.2.3 Ergebnisse	96
4.3 Chrom-Verdampfung bei Hochtemperaturwerkstoffen in wasserdampfhaltigen Atmosphären.....	108

4.3.1	Literaturübersicht und Stand der Forschung.....	108
4.3.2	Ergebnisse	111
5	Zusammenfassung	118
6	Tabellenverzeichnis.....	120
7	Abbildungsverzeichnis	121
8	Literaturverzeichnis.....	124