## 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 Auftrittspotentialen 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-CeI₃ ........................................................................................ 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