

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Elektronische Struktur der dreiwertigen f-Elemente	9
2.1	Niveauschema von Pr^{3+}	12
2.2	Niveauschema von Nd^{3+}	15
2.3	Niveauschema von U^{3+}	16
3	Experimentelle Aspekte	21
3.1	Untersuchte Proben	21
3.2	Diamantstempeltechnik	22
3.3	Die Meßapparatur	25
4	Pr^{3+}, Nd^{3+} und U^{3+} in LnCl_3 unter Druck	29
4.1	Wirtsgitter	30
4.2	Pr^{3+}	36
4.2.1	$\text{Pr}^{3+}:\text{LaCl}_3$	39
4.2.2	$\text{Pr}^{3+}:\text{PrCl}_3$	42
4.3	Nd^{3+}	45

4.3.1	$\text{Nd}^{3+}:\text{LaCl}_3$	49
4.3.2	$\text{Nd}^{3+}:\text{NdCl}_3$	51
4.4	$\text{U}^{3+}:\text{LaCl}_3$	57
5	Quantitative Berechnung der Energiezustände von f-Elektronen	71
5.1	Freies Ion	71
5.2	Nephelauxetischer Effekt	75
5.2.1	Kovalenzmodell	76
5.2.2	Dielektrisches Modell	77
5.3	Kristallfeld	78
5.3.1	Ein-Elektronen-Näherung	79
5.3.2	Korrelationseffekte	83
5.3.3	Superpositionsmodell	86
6	Auswertung und Diskussion	89
6.1	Freie-Ionen- und Kristallfeldparameter	89
6.1.1	Pr^{3+}	91
6.1.2	Nd^{3+}	95
6.1.3	U^{3+}	100
6.2	Nephelauxetischer Effekt	104
6.3	Superpositionsmodell	107
6.3.1	Lokale Verzerrungen	108
6.3.2	Intrinsische Kristallfeldparameter	113
6.3.3	Vergleich mit <i>ab initio</i> Rechnungen	117

<i>Inhaltsverzeichnis</i>	3
7 Zusammenfassung	123
Literaturverzeichnis	125