

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	3
2 Physikalische Grundlagen	7
2.1 Martensitische Phasenübergänge	7
2.1.1 Rekonstruktive Übergänge am Beispiel Fe	9
2.1.2 Thermoelastische Übergänge am Beispiel NiTi	12
2.2 Der Formgedächtniseffekt	14
3 Molekulardynamik	17
3.1 Velocity-Verlet-Algorithmus	17
3.2 Nosé-Hoover-Thermostat	18
3.3 Simulationen im <i>NPT</i> -Ensemble	20
3.4 Randbedingungen	24
3.5 Berechnung der Freien Energie	26
4 Interatomare Vielteilchenpotentiale	29
4.1 Paarpotentiale	29
4.2 Quantenmechanische Beschreibung	31
4.2.1 Tight-binding	32
4.2.2 Bindungsenergie und elektronische Zustandsdichte	33
4.2.3 Näherung des zweiten Moments	34
4.2.4 Finnis-Sinclair-Potential	36
4.3 Ein Potential für Nickel-Titan	37
4.3.1 Phononendispersionsrelation von B2-NiTi	40
4.4 Embedded-atom-Potential für Eisen-Nickel	43
5 Strukturanalyse	47
5.1 Paarkorrelationsfunktion	47
5.2 Bindungsorientierungsparameter	48
5.3 Ordnungsparameter für B19' und B2	49
6 Simulationsergebnisse für Fe- und FeNi-Legierungen	53
6.1 Simulationen des bulk-Systems	53
6.1.1 Bindungsenergie	53
6.1.2 Strukturelle Phasenübergänge	54
6.2 Simulationen von Fe-Nanopartikeln	61
6.2.1 Einfluss externer Oberflächenfelder	63

7 Simulationsergebnisse für NiTi-Legierungen	65
7.1 Simulationen des bulk-Systems	65
7.1.1 Strukturelle Eigenschaften und Phasenübergänge	65
7.1.2 Abhängigkeit von der Systemgröße	69
7.1.3 Abhängigkeit von der Konzentration	69
7.1.4 Thermodynamische Aspekte des Phasenübergangs	73
7.2 Simulationen von Nanopartikeln	76
7.2.1 Systemgrößenabhängigkeit der Übergangstemperatur T_A	76
7.2.2 Mechanismus der Transformation	80
7.2.3 Quaderförmige Nanopartikel	81
7.3 Simulationen des Formgedächtniseffekts	83
7.3.1 Martensitische Grundzustandsstruktur	84
7.3.2 Verhalten unter Zugbelastung	87
7.3.3 Verhalten bei Temperaturerhöhung	89
8 Zusammenfassung und Ausblick	93
A Anhang	97
A.1 Numerische Lösung der velocity-Verlet-Gleichungen	97
A.1.1 Kanonisches Ensemble	97
A.1.2 <i>NPT</i> -Ensemble	98
A.2 Parameter des EAM-Potentials für Fe und Ni	100
A.3 Kraftberechnung	101
A.4 EAM-Potential mit festem Untergrund	102
A.5 Dynamische Matrix	103
B Veröffentlichungen	107
Literaturverzeichnis	109