

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Physikalische Grundlagen</b>	<b>7</b>
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
<b>3</b>	<b>Molekulardynamik</b>	<b>17</b>
3.1	Velocity-Verlet-Algorithmus . . . . .	17
3.2	Nosé-Hoover-Thermostat . . . . .	18
3.3	Simulationen im $NPT$ -Ensemble . . . . .	20
3.4	Randbedingungen . . . . .	24
3.5	Berechnung der Freien Energie . . . . .	26
<b>4</b>	<b>Interatomare Vielteilchenpotentiale</b>	<b>29</b>
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
<b>5</b>	<b>Strukturanalyse</b>	<b>47</b>
5.1	Paarkorrelationsfunktion . . . . .	47
5.2	Bindungsorientierungsparameter . . . . .	48
5.3	Ordnungsparameter für B19' und B2 . . . . .	49
<b>6</b>	<b>Simulationsergebnisse für Fe- und FeNi-Legierungen</b>	<b>53</b>
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

<b>7</b>	<b>Simulationsergebnisse für NiTi-Legierungen</b>	<b>65</b>
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
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>93</b>
<b>A</b>	<b>Anhang</b>	<b>97</b>
A.1	Numerische Lösung der velocity-Verlet-Gleichungen . . . . .	97
A.1.1	Kanonisches Ensemble . . . . .	97
A.1.2	$NPT$ -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>B</b>	<b>Veröffentlichungen</b>	<b>107</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>109</b>