

Obsah

1	Cíle disertační práce	5
2	Úvod do problematiky	5
2.1	Slitiny s paměťovým efektem	5
2.1.1	Paměťový efekt	5
2.1.2	Jednocestný paměťový efekt	6
2.1.3	Nitinol – stručný popis a praktické použití	7
2.1.4	Dvojčatění v martenzitické fázi	7
2.2	Teorie funkcionálu hustoty – DFT	8
2.3	Použité programy	10
2.3.1	Program Abinit	10
2.3.2	Program na relaxaci iontových pozic	11
2.4	Počítané mechanické charakteristiky	12
2.4.1	Výpočet elastických konstant c_{ij} použitím ab-initio metod	12
2.4.2	Elastické moduly	13
2.4.3	Teoretické pevnosti	13
3	Tvůrčí část	15
3.1	Strukturní charakteristiky modelovaných fází slitiny NiTi	15
3.1.1	Austenit	15
3.1.2	Martenzit	15
3.1.3	Zhodnocení relevantnosti vypočtených parametrů	18
3.2	Teoretické mechanické charakteristiky slitiny NiTi	18
3.2.1	Elastické konstanty	18
3.2.2	Moduly pružnosti	19
3.3	Teoretické pevnosti	20
3.3.1	Teoretické pevnosti v tahu	20
3.3.2	Teoretické pevnosti ve smyku	21
3.4	Vliv normálového napětí na teoretickou smykovou pevnost	22
3.5	Vliv dvojčatění na mechanické vlastnosti	23
4	Závěry	26
	Literatura	28
	Autorovo Curriculum Vitae	31
	Abstract	32