

OBSAH

1 METODY VÝPOČTŮ ELEKTRONOVÉ STRUKTURY 5

1.1 Historický úvod do výpočtů elektronové struktury..... 5

1.2 Standardní výstupy ab initio metod 6

1.2.1 Hustota náboje 6

1.2.2 Hustota stavů..... 7

1.2.3 Magnetické momenty..... 7

1.2.4 Energie, síly, napětí 8

1.3 Omezení ab initio metod 8

2 MECHANICKÉ CHARAKTERISTIKY PREDIKOVATELNÉ Z ELEKTRONOVÉ STRUKTURY 9

2.1 Mikroskopické charakteristiky..... 9

2.1.1 Lomová energie..... 9

2.1.2 Energie vrstevné chyby 11

2.2 Makroskopické charakteristiky 13

2.2.1 Pružnost 13

2.2.2 Pevnost..... 16

2.2.3 Tvrdost 19

2.2.4 Houževnatost..... 20

2.2.5 Inherentní křehkost a tvárnost 21

3 ZÁVĚR..... 22

4 LITERATURA..... 23