

# Inhaltsverzeichnis

<b>Danksagung</b>	<b>1</b>
<b>1 Einf[Pleaseinsertintopreamble]hrung</b>	<b>1</b>
<b>2 Theorie</b>	<b>2</b>
2.1 Grundlagen der Monte Carlo Simulation . . . . .	2
2.2 Cluster Expansion . . . . .	2
2.3 ATAT Code . . . . .	2
2.4 Der Formgedächtniseffekt . . . . .	2
<b>3 Ein einführendes Beispiel</b>	<b>3</b>
3.1 Grundzustandsrechnungen mit Wien2k . . . . .	3
3.2 Cluster Entwicklung mit ATAT:MAPS . . . . .	3
3.3 Monte Carlo Simulation mit ATAT:Emc2 . . . . .	3
<b>4 Ergebnisse</b>	<b>4</b>
<b>5 Zusammenfassung</b>	<b>5</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>6</b>
<b>Anhang</b>	<b>6</b>

# Kapitel 1

## Einführung

Thema der Arbeit: was wird berechnet/was ist der Stand des Wissens

Warum NiTiHf, Formgedächtniseffekt?

Warum Simulation und nicht experiment?

Welche Modelle/Programme wurden verwendet

Kurze Beschreibung der einzelnen Kapitel

Axel van de Walle: Self-driven lattice Monte Carlo [1]

Axel van de Walle: The Alloy-Theoretic Automated Toolkit (ATAT): A User Guide [2]

Axel van de Walle: Automating first-principles phase diagram calculations [3]

# Kapitel 2

## Theorie

2.1 Grundlagen der Monte Carlo Simulation

2.2 Cluster Expansion

2.3 ATAT Code

2.4 Der Formgedächtniseffekt

# Kapitel 3

## Ein einführendes Beispiel

**3.1 Grundzustandsrechnungen mit Wien2k**

**3.2 Cluster Entwicklung mit ATAT:MAPS**

**3.3 Monte Carlo Simulation mit ATAT:Emc2**

# Kapitel 4

## Ergebnisse

# Kapitel 5

## Zusammenfassung

# Literaturverzeichnis

- [1] A. van de Walle, M. Asta, *MODELLING AND SIMULATION IN MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING* **10**, 521 (2002).
- [2] A. van de Walle, M. Asta, G. G. Ceder, *Calphad* **26**, 539 (2002).
- [3] A. van de Walle, G. Ceder, *Journal of Phase Equilibria* **23**, 348 (2002).  
10.1361/105497102770331596.