

8 Ausblick

Die rein elektrostatische Betrachtungsweise der Bindungsverhältnisse in Festkörpern mit Hilfe von Potentialflächen erweitert die klassischen Modelle zur Diskussion von Kristallstrukturen wie zum Beispiel Kugelpackungs- und Polymermodelle um eine interessante Variante.

Im Bereich des Kristall-Bulk bleibt weiterhin die Frage interessant, wie viele verschiedene POPS-Typen es überhaupt gibt und wie groß diese Zahl ist. Eine systematische Untersuchung ist bislang nur für kubische Systeme erfolgt, da hier die Zahl der freien Strukturparameter begrenzt ist. Im Bereich niedersymmetrischer Raumgruppen nimmt die Zahl der Freiheitsgrade stark zu. Hier erscheint eine Beschränkung auf reale Kristallstrukturen, wie es in dieser Arbeit gemacht wurde, angebracht, da die Natur aus der unendlichen Zahl von Möglichkeiten, Atome oder Ionen im Raum anzuordnen, nur eine verschwindend kleine Menge auswählt. Diese Beschränkung sollte auch die Zahl der dann möglichen POPS-Typen stark einschränken.

Im Bereich der Oberflächenuntersuchungen bleiben noch einige Fragen offen. Neben der Integration von Defekten und anderen Oberflächengeometrien wäre zur Diskussion der Kristallmorphologie auch eine Einbindung anderer Energierterme in die Berechnung interessant. Das Problem liegt hier jedoch in der Verfügbarkeit von Parametern für Kristalloberflächen, da die Bulk-Werte nicht ohne weiteres auf Oberflächen übertragen werden können. Ein weiteres Problem ist die Einbindung von Relaxationen und Rekonstruktionen in die Berechnungen, die die Oberflächenenergie und damit die Stabilität verschiedener Oberflächen in entscheidendem Maß beeinflussen können. Weiterhin wäre eine Erweiterung auf andere Phasengrenzen interessant, für die dann spezielle Modelle für die Art der Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Phasen notwendig wären.

In diesem Zusammenhang wäre auch eine Automatisierung der Oberflächenuntersuchungen im Programmpaket COUPOT mit Hilfe des MAPSE-Konzepts wünschenswert. Dazu wäre ein Algorithmus nötig, der die Kristallstruktur für alle gewünschten Oberflächenberechnungen transformiert und stabile Oberflächen selbstständig bestimmt. Dies würde zu einem erheblichen Geschwindigkeitsgewinn führen und auch die Bedienung des Programms erleichtern. Außerdem ließe sich einiges implementieren, was die Handhabung vereinfachen würde. Dazu gehören die Integration einer Routine zur automatischen Erzeugung symmetrieäquiva-

lenter Atome und eine Benutzeroberfläche, die den heutigen Standards eher entspricht.

Nicht zuletzt wegen der besonderen Eigenschaften nanokristalliner Systeme wäre eine Betrachtung der Elektrostatik in solchen Systemen interessant. Hier ist an eine Berechnung durch Summation der Beiträge aller Ionen im direkten Raum gedacht, durch die der Madelung-Anteil der Gitterenergie (MAPLE) in Abhängigkeit von der Teilchengröße gewonnen würde. Problematisch wäre in diesem Zusammenhang jedoch der sehr große Zeitaufwand für solche Berechnungen, da die hier vorgestellten Verfahren nur für unendlich ausgedehnte Systeme angewendet werden können, so daß man bei der Simulation von sehr kleinen Kristallen auf die langwierige Summation mit Hilfe des Coulomb-Gesetzes angewiesen ist. Da die heutigen Rechnersysteme aber immer leistungsfähiger werden und der Einsatz von Parallelrechnern in Netzwerken zu ungeheuren Geschwindigkeitssteigerungen führen wird, sollten solche komplexen Berechnungen schon bald in vernünftigen Zeiträumen möglich sein.