

und liegt innerhalb des Schwankungsbereichs von experimentell ermittelten Werten. Messtechnisch lassen sich Oberflächenrelaxationen beispielsweise aus Beugungsexperimenten mit Elektronen bzw. Röntgenstrahlung ermitteln.

Die berechneten Oberflächenenergien zeigen, dass die (001)- und (012)-Oberflächen die stabilsten Kristallfacetten von Hämatit sind. Diese Oberflächenorientierungen treten auch als dominierende Wachstumsfacetten bei natürlichen Hämatit-Funden auf. Anhand der berechneten Oberflächenenergien haben wir eine Wulff-Gibbs-Konstruktion durchgeführt (Abb. 2). Dabei wird eine eingeschlossene Form aus verschiedenen Oberflächenorientierungen so konstruiert, dass die Überschussenergie der gesamten einhüllenden Oberfläche des Kristalls minimal ist und somit die Gleichgewichtsform eines Hämatit-Kristalls bestimmt. Die (001)-, (012)- und (110)-Oberflächen bedecken den größten Anteil der Gesamtoberfläche.

Insgesamt gelang es in der aktuellen Arbeit zu zeigen, dass sich die Hartree-Fock-Methode mit a-posteriori-Berechnungen der Korrelationsenergie eignet, um Metalloxide mit starker Elektronenkorrelation wie Hämatit effizient zu simulieren [2, 5]. Als nächstes gilt es, die Adsorption von Atomen oder Molekülen an den stabilsten Hämatit-Oberflächen sowie die Einlagerung von Lithium-Ionen in Hämatit zu simulieren, um potenzielle Anwendungen in der Katalyse, Sensorik und für Lithium-Ionen-Akkus zu untersuchen.

#### Literatur

- [1] R. M. Cornell und U. Schwertmann, *The Iron Oxides*, Wiley, Weinheim (2003)
- [2] T. Stirner, D. Scholz und J. Sun, *Surf. Sci.* **671**, 11 (2018)
- [3] *Crystal 2014*, [www.crystal.unito.it/index.php](http://www.crystal.unito.it/index.php)
- [4] T. Stirner, D. Scholz und J. Sun, *J. Phys.: Condens. Matter* **32**, 185002 (2020)
- [5] T. Stirner, D. Scholz und J. Sun, *Comput. Mater. Sci.* **137**, 340 (2017)
- [6] A. Rohrbach, J. Hafner und G. Kresse, *Phys. Rev. B* **70**, 125426 (2004)
- [7] C. Ruberto, Y. Yourdshahyan und B. I. Lundqvist, *Phys. Rev. B* **67**, 195412 (2003)
- [8] I. G. Batirev et al., *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1510 (1999)
- [9] N. C. Wilson und S. P. Russo, *Phys. Rev. B* **79**, 094113 (2009)

#### Der Autor



**David Scholz** absolvierte an der Technischen Hochschule Deggendorf den Bachelorstudiengang Physikalische Technik und den Masterstudiengang Elektro- und Informationstechnik. Die Ergebnisse dieses Artikels entstanden im Rahmen der Bachelorarbeit mit nachfolgender Tätigkeit als studentische Hilfskraft an der TH Deggendorf. Aktuell arbeitet David Scholz am Technologie Campus Teisnach Sensorik als wissenschaftlicher Mitarbeiter. In seiner Freizeit ist er ein leidenschaftlicher Gitarrist, sportbegeistert und geht gerne wandern.

**David Scholz, M.Sc.**, Technische Hochschule Deggendorf, Technologie Campus Teisnach Sensorik, Technologiecampus 3, 94244 Teisnach

Deutsche Physikalische Gesellschaft  DPG

Physik im Kopf?



DPG  
Schüler-  
tagung



Jetzt anmelden!

München: 12.09.2020

Heidelberg: 07.11.2020

Göttingen: 21.11.2020

[schulertagung.dpg-physik.de](http://schulertagung.dpg-physik.de)