Aufgabe 4.1

- hexagonal: $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4\left(h^2+hk+k^2\right)}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2}$
- orthorhombisch: $\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$
- fcc: $\frac{1}{d_{111}^2} = \frac{3}{a^2} \Rightarrow d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}}$
- hcp: $\frac{1}{d_{001}^2} = \frac{3}{8a^2} \Rightarrow d_{001} = 2a\sqrt{\frac{2}{3}} = 2d_{111}^{\text{fcc}} \cdot \sqrt{2}$

Der Ebenenabstand bei fcc und hcp ist nicht wie erwartet doppelt so groß (hcp: ABA, fcc: AB). Dies ist offensichtlich dadurch begründet, dass nur im hcp Fall die Gitterkonstante auch den Abstand der nächsten Nachbarn angibt. Im fcc Fall gilt $a = \sqrt{2}$NND, was obigen Sachverhalt erklärt.

Aufgabe 4.2

a) Nach der Bragg-Bedingung werden alle Neutronen gestreut, für die gilt:$2d\sin\theta = n\lambda, n \in \mathbb{N}, \quad \lambda = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}|}$
In einem Pulver werden alle möglichen Winkel angenommen, entsprechend werden alle Neutronen gestreut, für deren Comptonwellenlänge gilt: $\lambda < 2d_{\max}$, man hat somit einen Tiefpassfilter für die Energie der Neutronen, denn:

$$E = \frac{h^2}{2m_N\lambda^2} \Rightarrow E \leq \frac{h^2}{8m_N d_{\max}^2} \tag{1}$$

b) Das Auftreten von Streuprozessen höherer Ordnung wird durch das Aussortieren von Neutronen mit höherer Energie vermieden, welche sonst das Messsignal verfälschen.

c) Die Abstände der Ebenen sind entlang der c-Achse geringer als bei idealer Packung, der maximale Ebenenabstand folgt also aus d_{100} oder d_{010} zu $d_{\max} = \sqrt{\frac{3}{4}}a$, es folgt: $E_{\max} = 5.219\,\text{meV}$

Aufgabe 4.3

Aufgabe

Die geforderte Isotropie liegt vor, falls der Tensor im gewählten xyz-Koordinatensystem die Gestalt $\sigma = \text{diag}(a, a, b)$ hat. Die erzeugenden der Symmetriegruppe (bzgl. Drehung) sind $R_z(\pi/2), R_x(\pi) \in$SO(3) (womit das Inverse trivial ist). Größen des Kristalls müssen den gleichen Symmetriebedingungen unterliegen, somit folgt:

$$\sigma = R_z(\pi/2)\sigma R_z^{-1}(\pi/2) = R_x(\pi)\sigma R_x^{-1}(\pi) \tag{2}$$

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{22} & -\sigma_{21} & -\sigma_{23} \\ -\sigma_{12} & \sigma_{11} & \sigma_{13} \\ -\sigma_{32} & \sigma_{31} & \sigma_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & -\sigma_{12} & -\sigma_{13} \\ -\sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ -\sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \tag{3}$$

Es folgt:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{33} \end{pmatrix} \tag{4}$$

Womit die Isotropie gezeigt ist.

Zusatz

$$M_{yz}R_z(180^\circ) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = M_{xz} \tag{5}$$