

原子吸收限附近完整晶体内的能流方向^{*}

徐章程 郭常霖

(中国科学院上海硅酸盐研究所, 上海 200050)

赵宗彦 周圣明

(安徽大学物理系, 合肥 230039)

深町共荣 根岸利一郎

(日本埼玉工业大学电子工学科, 埼玉, 冈部 369-02)

(1997 年 1 月 13 日收到)

研究了原子吸收限附近对称劳厄和布拉格情况下完整晶体内的能流方向. 发现在对称劳厄情况下, 只有当原子散射因子的虚部对衍射的贡献可以与实部的贡献相比较时, 晶体内与色散面上某一结点相对应的能流会偏离色散面的实部的法向; 而在对称布拉格情况下, 即使在原子散射因子的虚部对衍射的贡献可以忽略时, 在所谓的“全反射”区内也会偏离. 当衍射仅由原子的虚部引起时, 这种偏离在对称劳厄情况下最大, 而在对称布拉格情况下最小.

PACC: 6110D

1 引 言

色散面是一个用来描述完整晶体内部 X 射线波场传播的非常重要的概念. 利用它可以得到晶体内部入射波和衍射波的振幅比, 以及波场的传播方向. 与可见光情形一样, 波场的能量方向并不沿着波矢的方向, 而是沿着坡印廷矢量的方向. Ewald 和 Kato 于 1958 年指出, 无吸收完整晶体内的能流与色散面垂直^[1,2]. 该结论常被称作 Ewald-Kato 定理^[3], 而且适用于多波散射情形^[4]. 1993 年 Hung 又将它推广到布拉格衍射的整个区域^[5].

就吸收晶体而言, Batterman 和 Cole 于 1964 年指出, 当 $|F_{hi}| \ll |F_{hr}|$ 时, 坡印廷矢量与色散面的实部垂直^[6]. 这里 F_{hr} 和 F_{hi} 分别为原子散射因子的实部和虚部对结构因子 F_h 的贡献 (h 表示密勒指数 $[h\ k\ l]$).

同步辐射光的诞生, 高强度能量可调的 X 射线的获得, 为异常散射的研究提供了非常便利的条件. 在晶体的某一组成原子的某吸收限附近, 可以选择 F_{hr} 和 F_{hi} 的比例, 使得 $|F_{hi}| > |F_{hr}|$, 甚至 $F_{hr} = 0$ ^[7-9]. 1993 年, Fukamachi 和 Kawamura 通过引入一套新的参数, 给出了劳厄情况和布拉格情况 (仅就半无限厚晶体) 的一般衍射通式. 这些公式即使在 $F_{hr} = 0$ 时也适用^[10]. 他们发现了仅由原子散射因子虚部引起的 Pendellösung 条纹及劳厄

^{*} 国家自然科学基金及安徽省自然科学基金资助的课题.

情况的不透明效应等^[11]. 有限厚平板晶体在布拉格情况下的一般衍射通式由徐章程等人给出^[12]. 他们首次在理论上发现, 当 $|F_{hr}| \leq |F_{hi}|$ 时, 布拉格情况下在严格的布拉格角处有异常透射现象发生.

为了讨论 $|F_{hr}| \leq |F_{hi}|$ 时的动力学衍射, Fukamachi 等人研究了吸收限附近的复色散面, 并发现复色散面的形状与 F_{hr} 和 F_{hi} 的比例密切相关^[13]. 本文将详细研究原子吸收限附近对称劳厄和布拉格情况下完整晶体内的能流方向.

2 色散面与坡印廷矢量

在原子单位制下 ($\hbar = m = e = 1$), 晶体复极化率傅里叶系数的 4π 倍可表示为

$$\chi_h = \chi_{hr} + i\chi_{hi}, \quad (1)$$

其中

$$\chi_{hr} = |\chi_{hr}| \exp(i\alpha_{hr}) = -\frac{4\pi e^2}{Vm\omega^2} F_{hr}, \quad (2)$$

$$\chi_{hi} = |\chi_{hr}| \exp(i\alpha_{hi}) = -\frac{4\pi e^2}{Vm\omega^2} F_{hi}. \quad (3)$$

在(2)和(3)式中, V 为晶胞体积, ω 为入射 X 射线能量, m 和 e 分别为电子质量和电荷. 相差为

$$\delta = \alpha_{hi} - \alpha_{hr}. \quad (4)$$

χ_h 和 $\bar{\chi}_h$ 的乘积可写成

$$\chi_h \bar{\chi}_h = |\bar{\chi}_h|^2 (1 - b^2 + i2p \cos \delta), \quad (5)$$

其中

$$|\bar{\chi}_h|^2 = |\chi_{hr}|^2 + |\chi_{hi}|^2, \quad (6)$$

$$b = \sqrt{2} |\chi_{hi}| / |\bar{\chi}_h|, \quad (7)$$

$$p = |\chi_{hr}| |\chi_{hi}| / |\bar{\chi}_h|^2. \quad (8)$$

如果定义参数 $q = \frac{1}{1 + |\chi_{hr}/\chi_{hi}|^2}$, 则 $b = \sqrt{2q}$, $p = \sqrt{q(1-q)}$.

在两波近似的情况下^[3], 晶体内的电位移场为一布洛赫波, 可表示为

$$D = e^{-i\omega t} (D_0 e^{-i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} + D_h e^{-i\mathbf{k}_h \cdot \mathbf{r}}), \quad (9)$$

其中 $\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h}$ ($\mathbf{h}$ 为倒格矢量). 振幅满足系统方程

$$2(\xi_0 - i\kappa_{0i}) D_0 - P\bar{\chi}_h \kappa_{0r} D_h = 0, \quad (10)$$

$$-P\chi_h \kappa_{0r} D_0 + 2(\xi_h - i\kappa_{hi}) D_h = 0. \quad (11)$$

共振偏差 ξ_0 和 ξ_h 分别定义为

$$\xi_0 = (\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{k}_0)^{1/2} - \kappa_{0r}, \quad (12)$$

$$\xi_h = (\mathbf{k}_h \cdot \mathbf{k}_h)^{1/2} - \kappa_{0r}, \quad (13)$$

其中 $\kappa_{0r} = K \left(1 + \frac{1}{2} \chi_{0r} \right)$, $\kappa_{0i} = \frac{1}{2} K \chi_{0i}$, K 为入射波的波矢, P 为偏光因子. 令该系统方程的行列式为零, 便可得到倒易空间的色散面方程如下:

$$(\xi_0 - i\kappa_{0i})(\xi_h - i\kappa_{0i}) = \kappa_{0r}^2 P^2 \chi_h \chi_{\bar{h}}. \quad (14)$$

利用切向连续边界条件, 吸收晶体内的波矢可写成

$$\mathbf{k}_0 = \mathbf{k}_{0r} + i\mathbf{k}_{0i} \mathbf{v}, \quad (15)$$

$$\mathbf{k}_h = \mathbf{k}_0 + \mathbf{h} = \mathbf{k}_{hr} + i\mathbf{k}_{0i} \mathbf{v}, \quad (16)$$

其中 $\mathbf{v}$ 为垂直晶体表面向下的单位矢量, 如图 1 所示. 由于 $|\mathbf{k}_{0r}| \gg |\mathbf{k}_{0i}|$ 和 $|\mathbf{k}_{hr}| \gg |\mathbf{k}_{0i}|$ (该关系即使在 $|\mathbf{F}_{hr}| \leq |\mathbf{F}_{hi}|$ 时也成立), 根据 (12), (13), (15) 和 (16) 式, 有

$$\xi_0 = |\mathbf{k}_{0r}| - \kappa_{0r} + i\mathbf{k}_{0i} \cos \theta_1, \quad (17)$$

$$\xi_h = |\mathbf{k}_{hr}| - \kappa_{0r} + i\mathbf{k}_{0i} \cos \theta_2. \quad (18)$$

可以看出, ξ_0 和 ξ_h 的实部分别表示色散面上的结点到以 O 和 H 为圆心, 以 $R = \kappa_{0r}$ 为半径的劳厄球的距离, 虚部正比于波矢方向上的吸收系数.

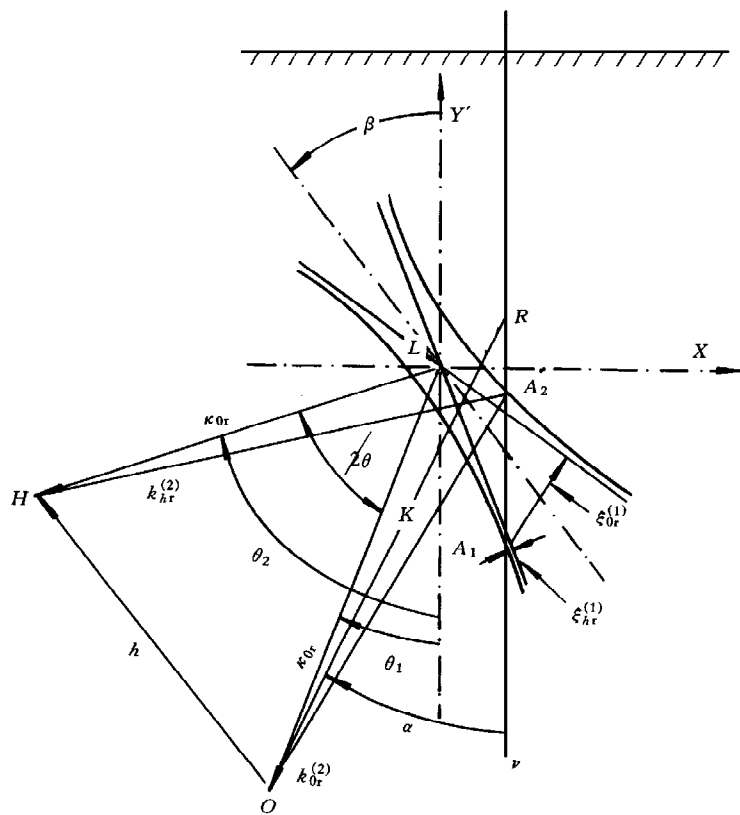


图 1 色散面示意图

在 Batterman 和 Cole 的处理中(文献[3]第 696 页), 做了两个另外的近似: (1) $|\mathbf{F}_{hr}|$

$\gg |\mathbf{F}_{hi}|, (2)(|\kappa_{hr}| - \kappa_{0r})(|k_{0r}| - \kappa_{0r}) \gg (k_{hi} \cos \theta_2 - \kappa_{0i})(k_{0i} \cos \theta_1 - \kappa_{0i})$. 在这些近似下, 劳厄情况的色散面的实部形状与无吸收情形的相同. 然而, 在原子吸收限附近原子散射因子虚部对衍射的贡献有可能与实部的相比较^[7-9], 所以在我们的处理中舍弃了这些近似.

如图 1 所示, X 和 Y 的实部分别表示劳厄点到结点的水平和垂直距离, Y 的虚部正比 ν 方向上吸收系数. (ξ_0, ξ_h) 和 (X, Y) 的关系可写成

$$\xi_0 = X \sin \theta_1 + Y \cos \theta_1, \quad (19)$$

$$\xi_h = X \sin \theta_2 + Y \cos \theta_2, \quad (20)$$

其中

$$\theta_1 = \frac{\pi}{2} - \theta - \beta, \quad (21)$$

$$\theta_2 = \frac{\pi}{2} + \theta - \beta, \quad (22)$$

θ 为布拉格角, β 为衍射格子面和晶体表面之间的夹角.

将 (19) 和 (20) 式代入 (13) 式, 有

$$\begin{aligned} & X^2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 + Y^2 \cos \theta_1 \cos \theta_2 + XY \sin 2\beta \\ & - 2i \kappa_{0i} \cos \theta (X \cos \beta + Y \sin \beta) - \kappa_{0i}^2 = \frac{\kappa_{0r}^2 P^2}{4} \chi_h \chi_{\bar{h}}. \end{aligned} \quad (23)$$

这就是直角坐标系 (X, Y) 中的色散面方程, 如图 1 所示. 与结点 (X, Y) 相对应的平均能流 $\langle \mathbf{S} \rangle$ 为

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{c}{8\pi} \exp(4n\mathbf{k}_{0i} \cdot \mathbf{r}) \left[|D_0|^2 \frac{\mathbf{k}_0}{|k_0|} + |D_h|^2 \frac{\mathbf{k}_h}{|k_h|} \right], \quad (24)$$

$\langle \mathbf{S} \rangle$ 的方向仅由色散面所决定, 而其大小则由色散面和边界条件所决定.

3 对称劳厄情况

在对称劳厄情况下, $\beta = \pi/2$, (23) 式可简化成

$$Y^2 \cos^2 \theta - X^2 \sin^2 \theta - 2i \kappa_{0i} Y \cos \theta - \kappa_{0i}^2 = \frac{P^2 \kappa_{0r}^2}{4} \chi_h \chi_{\bar{h}}. \quad (25)$$

对上式求导, 可得

$$Y \frac{dY}{dX} \cos^2 \theta - X \sin^2 \theta - i \kappa_{0i} \frac{dY}{dX} \cos \theta = 0. \quad (26)$$

如果令

$$Y = Y' + iZ', \quad Y', Z' \in R, \quad (27)$$

则有

$$\frac{dY}{dX} = \frac{dY'}{dX} + i \frac{dZ'}{dX}. \quad (28)$$

利用 (25) — (28) 式, 有

$$\frac{dX}{dY'} = \frac{(\kappa_{0i} - Z' \cos \theta)^2 + (Y' \cos \theta)^2}{Y' X \sin \theta \cos \theta} \cot \theta. \quad (29)$$

在结点 (X, Y) 处色散面实部的法线与 X 轴的夹角 σ 由以下条件决定:

$$\tan \sigma = -\frac{dX}{dY}. \quad (30)$$

如图 2 所示, 与 (X, Y) 相对应的 $\langle S \rangle$ 的方向是由 Δ 或 Ω 所决定.

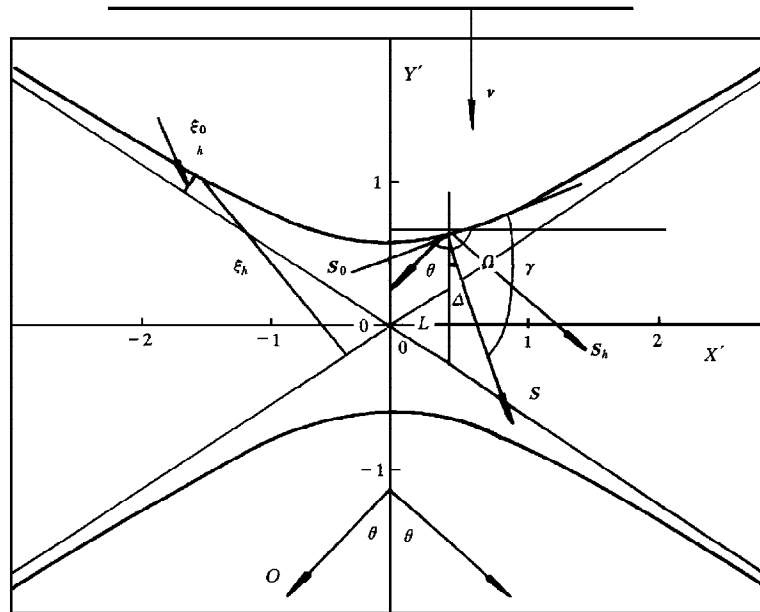


图 2 对称劳厄情况下能流和色散面

根据图 2 和 (10), (11), (24) 式, 可得

$$\begin{aligned} \tan \Omega &= \frac{1 + |D_h|^2 / |D_0|^2}{1 - |D_h|^2 / |D_0|^2} \cot \theta \\ &= \frac{\sqrt{(Y' \cos \theta + X \sin \theta)^2 + (Z' \cos \theta - \kappa_{0i})^2} + \sqrt{(Y' \cos \theta - X \sin \theta)^2 + (Z' \cos \theta - \kappa_{0i})^2}}{4 Y' X \sin \theta \cos \theta} \cot \theta. \end{aligned} \quad (31)$$

由 (25) 式, 有

$$Y' \cos \theta = (\pm) \frac{\kappa_{0r} |\bar{\chi}_h|}{2} \operatorname{Re}[X'^2 + (1 - b^2 + i2 p \cos \delta)]^{1/2}, \quad (32)$$

$$\kappa_{0i} - Z' \cos \theta = (\pm) \frac{\kappa_{0r} |\bar{\chi}_h|}{2} \operatorname{Im}[X'^2 + (1 - b^2 + i2 p \cos \delta)]^{1/2}, \quad (33)$$

其中符号 $(\pm)$ 与色散面上的两个结点相对应, $X' = \frac{2 \sin \theta}{\kappa_{0r} |\bar{\chi}_h|} X$. 不失一般性, 我们只需就一个结点进行讨论. 因此方程 (30) 和 (31) 可分别写成

$$\frac{dX}{dY'} = \frac{4 \{ [\operatorname{Im} \sqrt{L}]^2 + [\operatorname{Re} \sqrt{L}]^2 \}}{4 X' \operatorname{Re} \sqrt{L}} \cot \theta, \quad (34)$$

和

$$\tan \Omega = \frac{\left[\sqrt{(\operatorname{Re} \sqrt{L} + X')^2 + (\operatorname{Im} \sqrt{L})^2} + \sqrt{(\operatorname{Re} \sqrt{L} - X')^2 + (\operatorname{Im} \sqrt{L})^2} \right]^2}{4 X' \operatorname{Re} \sqrt{L}} \cot \theta, \quad (35a)$$

其中

$$L = X'^2 + (1 - b^2 + i2p \cos \delta), \quad (35b)$$

$$\operatorname{Re} \sqrt{L} = \left[\frac{1}{2}(A + L_1) \right]^{1/2}, \quad (35c)$$

$$\operatorname{Im} \sqrt{L} = \left[\frac{1}{2}(-A + L_1) \right]^{1/2}, \quad (35d)$$

$$L_1 = (A^2 + B^2)^{1/2}, \quad (35e)$$

$$A = X'^2 + 1 - b^2, \quad (35f)$$

$$B = 2p \cos \delta. \quad (35g)$$

坡印廷矢量与色散面实部的切平面的夹角 γ 可表示为

$$\gamma = |\sigma - \Delta|. \quad (36)$$

如图 3 所示,就各种情形计算了 γ . 当 $q=0$ 时,即 $|\chi_{hi}| \ll |\chi_{hr}|$, 不论 χ_{oi} 是否为零, $\gamma=90^\circ$, 这与 Kato, Ewald, Batterman 和 Cole 的结论一致. 该情形通常被认为只在入射 X 射线的能量远离吸收限时发生. 但 Fukamachi 等人发现,就 GaAs(200) 准禁制反射而言,当入射 X 射线在 Ga 的 K 吸收限以下 -7 eV 附近时,该情形也会发生^[8]. 当 $|\chi_{hi}|$ 与 $|\chi_{hr}|$ 可相比较时,从图 3 可看出,在 $|X'|=1$ 附近,坡印廷矢量逐渐偏离色散面实部的法向. q 越大偏离越大. 对于某个给定的 q 而言, $|X'|=1$ 处偏离最大. 在 $|X'| \gg 1$ 区域中,坡印廷矢量垂直于色散面的实部.

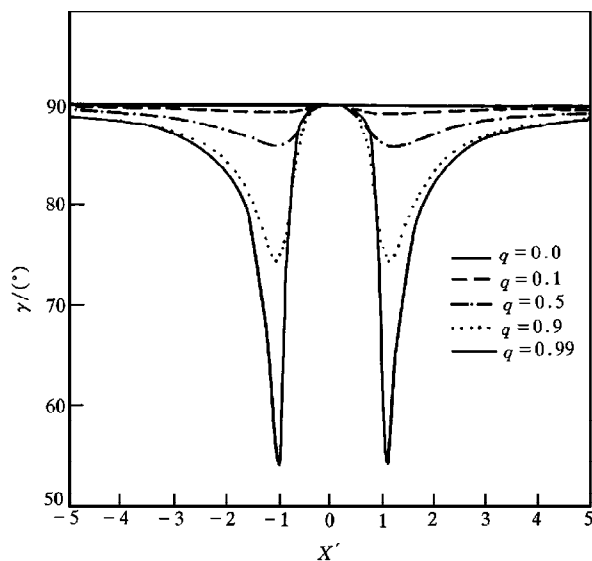


图 3 对称劳厄情况下能流相对色散面实部的关系

4 对称布拉格情况

对称布拉格情况下 ($\beta=0$), 根据(23)式可得色散面方程为

$$X^2 \cos^2 \theta - Y^2 \sin^2 \theta - 2i \kappa_{0i} X \cos \theta - \kappa_{0i}^2 = \frac{P^2 \kappa_{0r}^2}{4} \chi_h \chi_{\bar{h}}. \quad (37)$$

在结点 (X, Y) 处色散面实部的法线与 X 轴的夹角 σ 由以下条件决定:

$$\frac{dX}{dY} = - \frac{(Y'^2 + Z'^2) \sin \theta}{\kappa_{0i} Z' - XY' \cos \theta} \tan \theta. \quad (38)$$

如图 4 所示, 与 (X, Y) 相对应的 $\langle S \rangle$ 的方向是由 Δ 或 Ω 所决定.

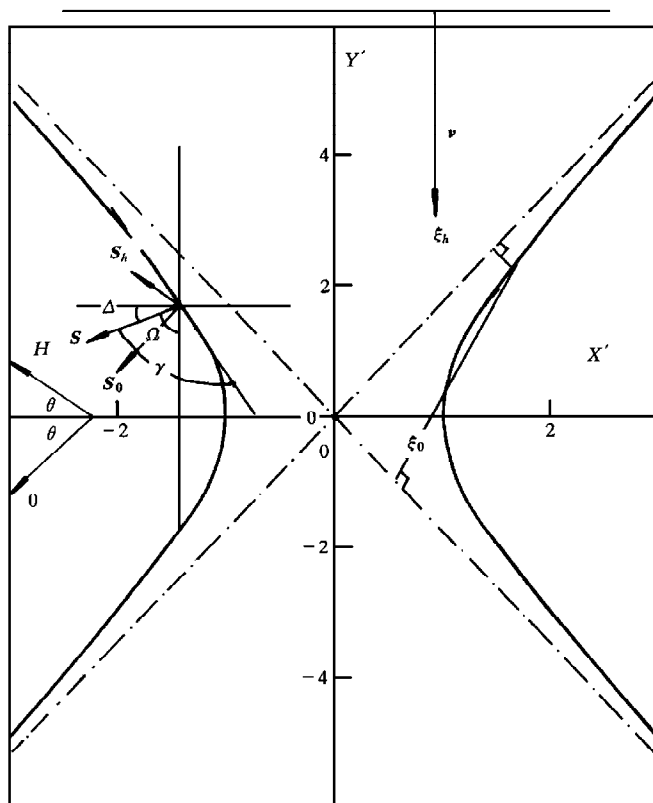


图 4 对称布拉格情况下能流和色散面

根据图 4 和(10), (11), (24)式, 可得

$$\tan \Delta = - \frac{P_1}{-4XY' \sin \theta \cos \theta + 4Z' \kappa_{0i} \sin \theta} \tan \theta, \quad (39a)$$

其中

$$P_1 = \{[(X \cos \theta - Y' \sin \theta)^2 + (Z' \sin \theta + \kappa_{0i})^2]^{1/2} - [(X \cos \theta + Y' \sin \theta)^2 + (Z' \sin \theta - \kappa_{0i})^2]^{1/2}\}^2. \quad (39b)$$

根据方程(43), 有

$$Y' = \frac{\kappa_{0i} |\chi_h|}{2 \sin \theta} \operatorname{Re} \sqrt{B}, \quad (40a)$$

$$Z' = \frac{\kappa_{0i} |\chi_h|}{2 \sin \theta} \operatorname{Im} \sqrt{B}, \quad (40b)$$

$$\operatorname{Re} \sqrt{B} = \left[\frac{1}{2} (C + B_1) \right]^{1/2}, \quad (40c)$$

$$\operatorname{Im} \sqrt{B} = \pm \left[\frac{1}{2} (-C + B_1) \right]^{1/2}, \quad (40d)$$

$$B_1 = C^2 + D^2, \quad (40e)$$

$$C = X'^2 - g^2 - 1 + b^2, \quad (40f)$$

$$D = -2X'g - 2p \cos \delta, \quad (40g)$$

$$X' = \frac{2 \cos \theta}{\kappa_{0r} |\chi_h|} X, \quad (40h)$$

$$g = \frac{\chi_{0i}}{P |\chi_h|} = g_0 \sqrt{q}. \quad (40i)$$

(40d)式中当 $D < 0$ 时取“ $-$ ”, 因为我们只处理方向向下的能流. 由(38), (39)和(40)式, 有

$$\frac{dX}{dY'} = - \frac{(\operatorname{Re} \sqrt{B})^2 + (\operatorname{Im} \sqrt{B})^2}{g \operatorname{Im} \sqrt{B} - X' \operatorname{Re} \sqrt{B}} \tan \theta \quad (41)$$

和

$$\begin{aligned} \tan \Delta &= \frac{\{[(X' - \operatorname{Re} \sqrt{B})^2 + (\operatorname{Im} \sqrt{B} + g)^2]^{1/2} - [(X' + \operatorname{Re} \sqrt{B})^2 + (\operatorname{Im} \sqrt{B} - g)^2]^{1/2}\}^2}{-4X' \operatorname{Re} \sqrt{B} + 4g \operatorname{Im} \sqrt{B}}. \end{aligned} \quad (42)$$

坡印廷矢量与色散面实部的切平面之间的夹角 γ 可表示成

$$\gamma = 90^\circ - |\sigma - \Delta|. \quad (43)$$

如图5所示, 就各种情形计算了 γ . 当 $q=0$, $g=-0.1$ 时, 原子散射因子的虚部对衍射的贡献可以忽略, 但吸收仍存在, 可以看出在所谓的“全反射”区内能流偏离复色散面实部的法向. 该情形的色散面已由 Fukamachi 等人给出^[13]. 随 q 增大, 原子散射因子的虚部对衍射的贡献与实部的贡献相比较, 偏离逐渐减小. 当衍射仅由原子散射因子的虚部引起

时^[8,10,12,14], 偏离最小.

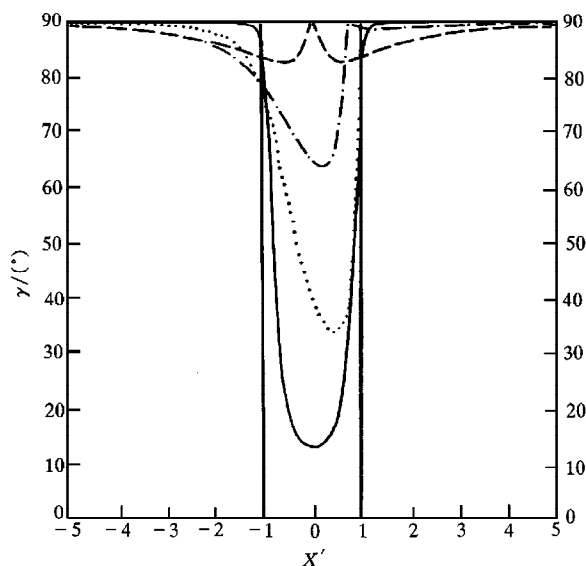


图5 对称布拉格情况下能流相对复色散面实部的关系 ——为 $q = 0, g = -0.1$;为 $q = 0.1, g_0 = -1.1$; -·-·-为 $q = 0.5, g_0 = -1.1$; ---为 $q = 1, g_0 = -1.1$; ———为 $q = 0, g = 0$

5 结 论

本文详细研究了原子吸收限附近对称劳厄和布拉格情况下完整晶体内的能流方向. 我们发现, 对称劳厄情况下只有当原子散射因子的虚部对衍射的贡献可以与实部的贡献相比较时, 晶体内与色散面上某一结点相对应的能流会偏离色散面实部的法向; 而在对称布拉格情况下, 即使在原子散射因子的虚部对衍射的贡献可以忽略时, 也会偏离. 当衍射仅由原子散射因子的虚部引起时, 这种偏离在对称劳厄情况下最大, 而在对称布拉格情况下最小.

由于异常透射和异常吸收现象, 晶体内的整个波场的能流方向将会随离开晶体表面的距离而改变, 所以对吸收晶体内的能流的观测非常困难^[15]. 但当衍射仅由原子散射因子的虚部引起时, 在劳厄情况下, 在偏离严格布拉格条件的一个小角度区域内, 整个波场的能流方向都沿格子面向下. 该特征也许会对吸收晶体内的能流观测有帮助.

作者之一(徐章程)对东京大学床次正安教授的有益启示和帮助表示衷心的感谢. 对中国科学院上海硅酸盐研究所郭荣发、吴毓琴、黄月鸿等老师和刘红超同志的大力协助, 在此一并表示感谢.

[1] P. P. Ewald, *Acta Cryst.*, 11(1958), 888.

[2] N. Kato, *Acta Cryst.*, 11(1958), 885.

[3] Z. G. Pinsker, *Dynamical Scattering of X-Rays in Crystals* (Springer, Berlin, 1978).

- [4] S. L. Chang, Multiple Diffraction of X-Rays in Crystals (Springer-Verlag, Berlin, 1984), Sec. 4.4.1.
- [5] H. H. Hung, *Acta Cryst.*, **A49**(1993), 793.
- [6] B. W. Batterman and H. Cole, *Rev. Mod. Phys.*, **36**(1964), 681.
- [7] Z. Zhao, J. Han, T. Fukamachi *et al.*, *J. Phys. : Condens. Matter*, **6**(1994), 1619.
- [8] T. Fukamachi, R. Negishi, M. Yoshizawa *et al.*, *Acta Cryst.*, **A49**(1993), 573.
- [9] T. Fukamachi, R. Negishi, S. Zhou *et al.*, *Acta Cryst.*, **A52**(1996), 669.
- [10] T. Fukamachi and T. Kawamura, *Acta Cryst.*, **A49**(1993), 384.
- [11] T. Fukamachi, R. Negishi and T. Kawamura, *Acta Cryst.*, **A50**(1994), 475.
- [12] Xu Zhangcheng, Zhao Zongyan, Guo Changlin *et al.*, *J. Phys. : Condens. Matter*, **7**(1995), 8089.
- [13] T. Fukamachi, R. Negishi and T. Kawamura, *Acta Cryst.*, **A51**(1995), 253.
- [14] Z. Zhao, J. Han, S. Zhou *et al.*, *Physica*, **B216**(1995), 96.
- [15] G. Borrmann, *Z. Phys.*, **127**(1950), 297.

DIRECTION OF THE ENERGY FLOW IN PERFECT CRYSTALS NEAR THE ATOMIC ABSORPTION EDGE

XU ZHANG-CHENG GUO CHANG-LIN

(Shanghai Institute of Ceramics, Academia Sinica, Shanghai 200050)

ZHAO ZONG-YAN ZHOU SHENG-MING

(Department of Physics, Anhui University, Hefei 230039)

T. FUKAMACHI R. NEGISHI

(Department of Engineering, Saitama Institute of Technology, Okabe, Saitama, Japan 369-02)

(Received 13 January 1997)

ABSTRACT

The direction of the energy flow in perfect crystals near the atomic absorption edge is studied in detail in the symmetrical Laue and Bragg cases. It is found that in the symmetrical Laue case, the direction of the energy flow corresponding to a tie point on the dispersion surface deviates from the normal of the real part of the dispersion surface, only when the contribution of the imaginary part of the atomic scattering factor to the diffraction is comparable to that of the real part. However, in the symmetrical Bragg case, the deviation takes place in the so-called "total reflection" region even when the contribution of the imaginary part of the atomic scattering factor to the diffraction is negligible. When diffraction is induced only by the imaginary part of the atomic scattering factor, the deviation becomes the largest in the Laue case, but the least in the Bragg case.

PACC: 6110D