

ODF図の Euler 角度と Miller Indices

Euler 角度から計算された実数の MillerIndices に対し、整数化した MillerIndices から計算した Euler 角度は異なった角度になり、断面も事かるケースがあります。

2014年08月01日



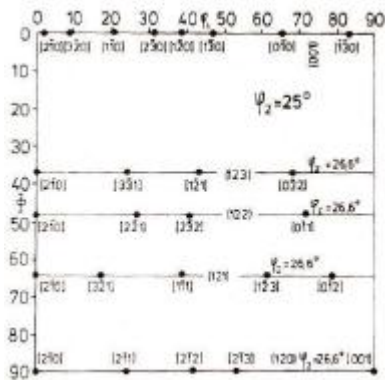
HelperTex Office

山田 義行

odftex@ybb.ne.jp

概要

H. - J. Bunge の *Texture Analysis in Materials Science* の中に ODF 図上の Miller Indices の表記があります。例えば、 $\phi_2 = 25$ 度の断面は Φ の 10 度から 30 度は空白です。



Euler 角度と Miller Indices の関係は

$$h = n \sin \Phi \sin \varphi_2$$

$$k = n \sin \Phi \cos \varphi_2$$

$$l = n \cos \Phi$$

$$u = n' (\cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \Phi)$$

$$v = n' (-\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \Phi)$$

$$w = n' \sin \varphi_1 \sin \Phi$$

$$\Phi = \arccos \frac{v}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$$\varphi_2 = \arccos \frac{k}{\sqrt{h^2 + k^2}} = \arcsin \frac{h}{\sqrt{h^2 + k^2}}$$

$$\varphi_1 = \arcsin \left[\frac{w}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}} \cdot \sqrt{\frac{h^2 + k^2 + l^2}{h^2 + k^2}} \right]$$

Miller Indices を限られた整数で表記すると、全ての ODF 図を網羅する事は出来ません。この問題を実際の ODF ソフトウェアで確かめてみます。

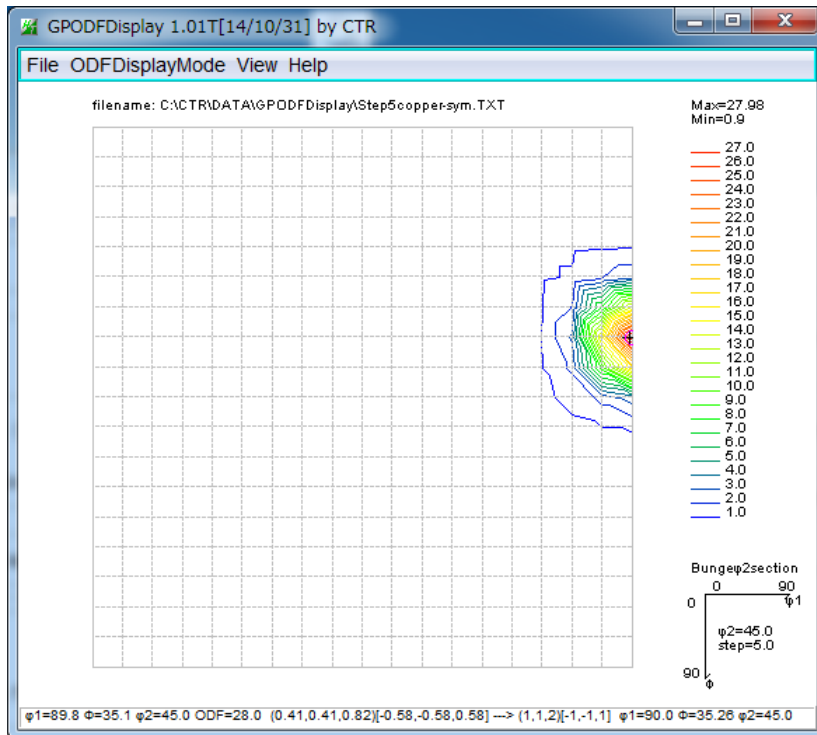
Copper 方位に関して

$\{112\} \langle 1-11 \rangle$ の Euler 角度は $[90.0, 35.26, 45.0]$ である。

ODF 図を 5 度間隔で描画すると、 $\Phi = 35.26$ 度は正確に描画出来ません。

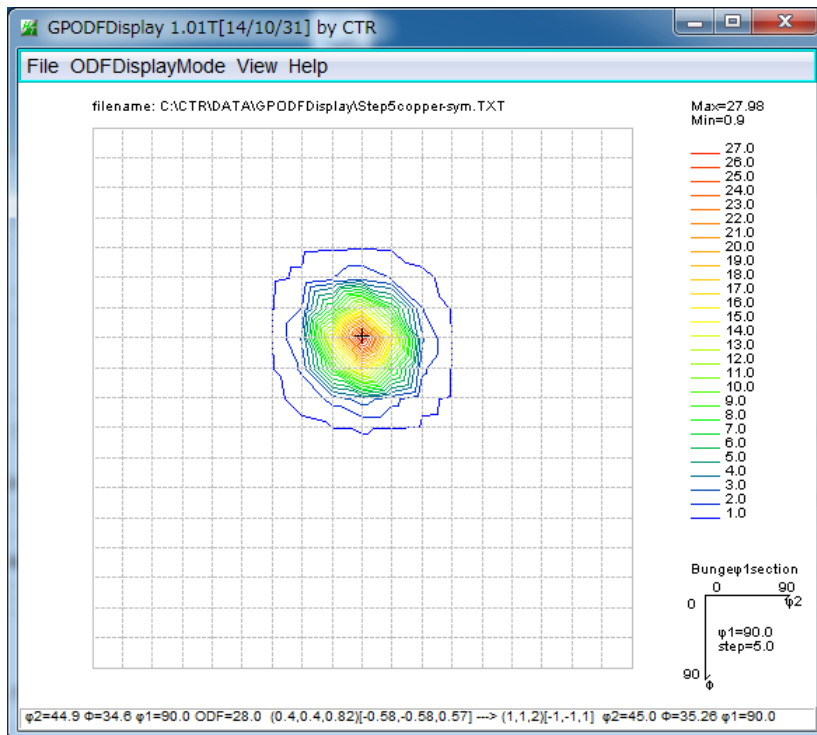
このような場合、 $[90.0, 35.0, 45.0]$ が最大密度になるように描画されます。

$\phi 2$ 断面



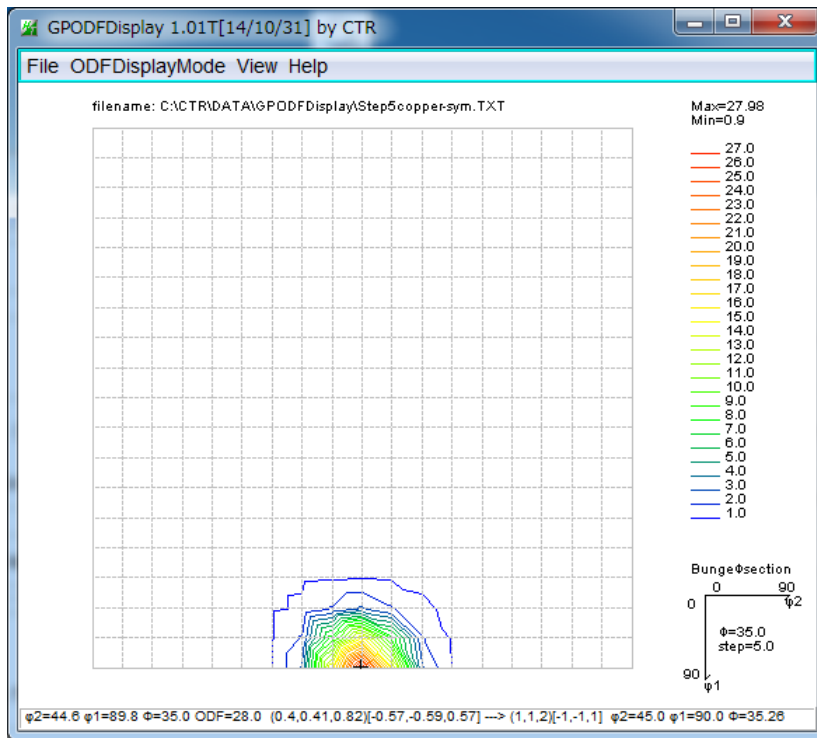
$\phi 2 = 45$ 断面では、 $\phi 1$ 、 Φ は読み取れます。

$\phi 1$ 断面



$\phi 1$ 断面でも $\phi 2$ 、 Φ は読み取れます。

Φ断面

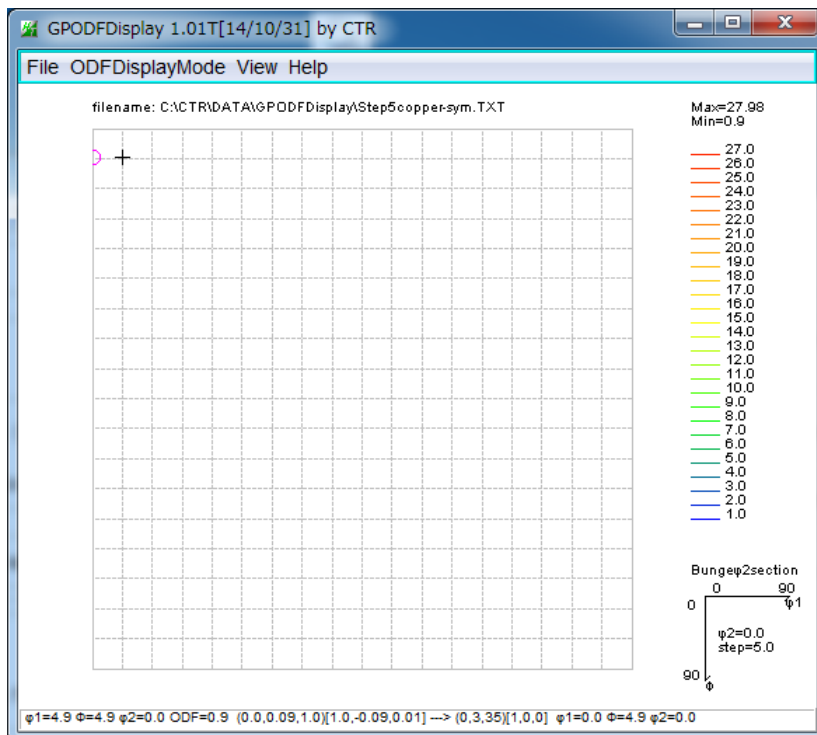


Φ = 35 度の断面から Φ = 3 5 度として読み取られます。

しかし、整数化された時に、運よく copper として認識されました。

φ2=44.6 φ1=89.8 φ=35.0 ODF=28.0 (0.4,0.41,0.82)[-0.57,-0.59,0.57] --> (1,1,2)[-1,-1,1] φ2=45.0 φ1=90.0 φ=35.26

ODF図が空白領域では、Euler角度[5,5,0]の場合



φ1=4.9 φ=4.9 φ2=0.0 ODF=0.9 (0.0,0.09,1.0)[1.0,-0.09,0.01] --> (0,3,35)[1,0,0] φ1=0.0 φ=4.9 φ2=0.0

マウスクリックを行った位置+に対し、再計算すると、赤丸位置になります。

ODFソフトウェアによりこの整数化アルゴリズムが異なり、同じ結果にはなりません。