

ODF Euler 角度と結晶方位

2015年01月11日

HelperTex Office

山田 義行

odftex@ybb.ne.jp

不明な点をご質問下さい。

DOC資料¥HKLUVW¥ODFEulerAngleandHKLUVW

概要

ODF解析結果 (ϕ_1 、 Φ 、 ϕ_2) から整数の結晶方位 $\{hkl\} \langle uvw \rangle$ を計算する場合可逆性は失われるが、整数化の最大数を大きくすれば、誤差は少なくなる。

一般的には最大指数を15程度としている。

ある論文に記載されているEuler角度からこの誤差を計算してみる。

Cubic, Tetragonal, Orthorhombicに於いては格子定数を (a, b, c, 90, 90, 90) とした場合、

Euler角度 (ϕ_1 、 Φ 、 ϕ_2) と結晶方位(hkl)[uvw]との関係は

Euler角度 \rightarrow (hkl)[uvw]を求める

$$h = n \sin \Phi \sin \phi_2 * a$$

$$k = n \sin \Phi \cos \phi_2 * b$$

$$l = n \cos \Phi * c$$

$$u = m (\cos \phi_1 \cos \phi_2 - \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \Phi) / a$$

$$v = m (-\cos \phi_1 \sin \phi_2 - \sin \phi_1 \cos \phi_2 \cos \Phi) / b$$

$$w = m \sin \phi_1 \sin \Phi / c$$

(hkl)[uvw]からEuler角度を求める

$$H = h/a$$

$$K = k/b$$

$$L = l/c$$

$$U = u*a$$

$$V = v*b$$

$$W = w*c$$

$$\Phi = \arccos(L/\sqrt{H^2+K^2+L^2})$$

$$\phi_2 = \arccos(K/\sqrt{H^2+K^2}) = \arcsin(H/\sqrt{H^2+K^2})$$

$$\phi_1 = \arcsin\{W/\sqrt{U^2+V^2+W^2}\sqrt{((H^2+K^2+L^2)/(H^2+K^2))}\}$$

最大指数15は、L a b o T e x で採用されている。

従来、CTRでも最大指数を15としていたが、以降99とし、比較してみます。

Euler角度を参考にした文献 (Web上で検索)

日本金属学会誌 第77巻 第10号 (2013) 440-447

強い $\{111\} \langle 112 \rangle$ 集合組織をもった高純度フェライト系
ステンレス鋼の深絞り成型時の肌荒れ発生機構

文献では、Bunge Euler 角度として

(167.5, 54.7, 45) (162.5, 54.7, 45) (122.5, 54.7, 45) (117.5, 54.7, 45)が現れる。

このEuler 角度を最大指数15で整数化すると、

$$\varphi_1 = 167.50 \quad \Phi = 54.70 \quad \varphi_2 = 45.00 \quad \text{HKL } (1 \ 1 \ 1) \quad \text{UVW } [-9 \ 7 \ 2]$$

$$\varphi_1 = 167.78 \quad \Phi = 54.74 \quad \varphi_2 = 45.00 \quad \text{HKL } (1 \ 1 \ 1) \quad \text{UVW } [-9 \ 7 \ 2]$$

$$167.50 \rightarrow (111)[-972] \rightarrow 167.78$$

$$\varphi_1 = 162.50 \quad \Phi = 54.70 \quad \varphi_2 = 45.00 \quad \text{HKL } (1 \ 1 \ 1) \quad \text{UVW } [-13 \ 9 \ 4]$$

$$\varphi_1 = 162.52 \quad \Phi = 54.74 \quad \varphi_2 = 45.00 \quad \text{HKL } (1 \ 1 \ 1) \quad \text{UVW } [-13 \ 9 \ 4]$$

$$162.50 \rightarrow (111)[-1394] \rightarrow 162.52$$

$$\varphi_1 = 122.50 \quad \Phi = 54.70 \quad \varphi_2 = 45.00 \quad \text{HKL } (1 \ 1 \ 1) \quad \text{UVW } [-15 \ 11 \ 4]$$

$$\varphi_1 = 123.42 \quad \Phi = 54.74 \quad \varphi_2 = 45.00 \quad \text{HKL } (1 \ 1 \ 1) \quad \text{UVW } [-15 \ 11 \ 4]$$

$$122.50 \rightarrow (111)[-1594] \rightarrow 123.42$$

$$\varphi_1 = 117.50 \quad \Phi = 54.70 \quad \varphi_2 = 45.00 \quad \text{HKL } (1 \ 1 \ 1) \quad \text{UVW } [-14 \ -1 \ 15]$$

$$\varphi_1 = 116.58 \quad \Phi = 54.74 \quad \varphi_2 = 45.00 \quad \text{HKL } (1 \ 1 \ 1) \quad \text{UVW } [-14 \ -1 \ 15]$$

$$117.50 \rightarrow (111)[-14-115] \rightarrow 116.58$$

整数化による誤差が発生する

最大指数 9 9 による整数化では、

最大指数 1 5 の場合 $167.50 \rightarrow (111)[-972] \rightarrow 167.78$

Material
Material Cubic A-IronDISP
1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0

Miller Indices
(hkl)[uvw] 1 1 1 -22 17 5 Calc

Euler Angle
(p1 P p2) <=90 167.4802 54.7356 45.0 Calc

Present Condition
Euler Angle
167.5 54.7 45.0
Double Miller Indices
0.5771 0.5771 0.5779 -0.7788 0.6019 0.1766

入力、(167.5, 54.7, 45.0)から計算したミラー指数 整数化、整数化ミラー指数から計算した Euler 角度再計算 Euler 角度誤差が、ミラー指数を大きくする事で、少なくなっています。

同様に

最大指数 1 5 の場合 $162.50 \rightarrow (111)[-1394] \rightarrow 162.52$

Material
Material Cubic A-IronDISP
1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0

Miller Indices
(hkl)[uvw] 1 1 1 -29 20 9 Calc

Euler Angle
(p1 P p2) <=90 162.3525 54.7356 45.0 Calc

Present Condition
Euler Angle
162.5 54.7 45.0
Double Miller Indices
0.5771 0.5771 0.5779 -0.7973 0.5515 0.2454

最大指数15の場合 1 2 2 . 5 0 → (1 1 1)[-15 9 4] → 1 2 3 . 4 2

Material						
Material	Cubic	A-IronDISP				
1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0						
Miller Indices						
(hkl)[uvw]	1	1	1	-18	1	17
						Calc
Euler Angle						
(p1 P p2) <=90	122.8331	54.7356	45.0			
						Calc
Present Condition						
Euler Angle						
122.5 54.7 45.0						
Double Miller Indices						
0.5771 0.5771 0.5779 -0.7245 0.0353 0.6883						

最大指数15の場合 1 1 7 . 5 0 → (1 1 1)[-14 -1 15] → 1 1 6 . 5 8

Material						
Material	Cubic	A-IronDISP				
1.0 1.0 1.0 90.0 90.0 90.0						
Miller Indices						
(hkl)[uvw]	1	1	1	-19	-1	20
						Calc
Euler Angle						
(p1 P p2) <=90	117.4571	54.7356	45.0			
						Calc
Present Condition						
Euler Angle						
117.5 54.7 45.0						
Double Miller Indices						
0.5771 0.5771 0.5779 -0.6889 -0.0359 0.7239						

このような理由で、CTRパッケージソフトウェアでは
201年01月10日以降、最大指数を99とした。

結晶方位図の表現では、指数間にカンマを入れています。

