

ODF解析から正確なEuler角度を算出する

ODF Euler Angle

Ver. 1.11M

2016年09月08日



HelperTex Office

<http://www.geocities.jp/helpertex2>

- * version 1.00 2010/10/11
- * Version 1.001 2010/10/12 Euler 角度表示順序を f1,F,f2 とする。
- * 出来るだけ I n d e x を整数化する。
- * Version 1.002 2010/10/26 Index から再計算する E u l e r 角度の ϕ 2 マイナスに
- * 入力 E u l e r 角度を参考にし、270度以上、以下を判別
- * Version 1.003 2010/11/01 判断基準変更 EulerAngletoIndex
- * Version 1.004 2011/04/13 stdlib.EulerAngletoIndex 修正 (35,0,55)->Cube

概要

結晶性の良い試料を解析し、結晶方位を決定しようとする、再現性のある最大の Euler 角度を決定する事が難しい。又、結晶方位の最大指数に制限があり、Euler 角度を決定してもその位置の結晶方位がうまく決まらない。この対応策として、ODF解析した結果を Export し、ODFの外部で、Exportされたデータから自動的に Euler 空間位置を決定する事が必要。

計算式

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

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

$$l = n \cos \Phi$$

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

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

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

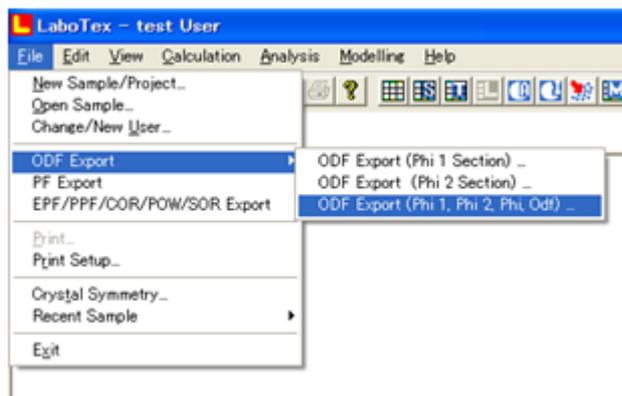
$$\phi_1 = \arccos (l / \sqrt{h^2 + k^2 + l^2})$$

$$\Phi = \arccos (k / \sqrt{h^2 + k^2}) = \arcsin (h / \sqrt{h^2 + k^2})$$

$$\phi_2 = \arcsin (w / \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}) * \sqrt{((h^2 + k^2 + l^2) / (h^2 + k^2))}$$

入力データ

ODF処理結果のExport



テキストデータとして出力される。

PHI1	PHI2	PHI	ODF↓
0.00	0.00	0.00	0.673627E-01↓
2.50	0.00	0.00	0.566039E-01↓
5.00	0.00	0.00	0.839214E-01↓
7.50	0.00	0.00	0.107493E+00↓
10.00	0.00	0.00	0.620714E-01↓
12.50	0.00	0.00	0.334899E-01↓
15.00	0.00	0.00	0.342208E-01↓
17.50	0.00	0.00	0.367870E-01↓
20.00	0.00	0.00	0.256399E-01↓
22.50	0.00	0.00	0.111497E+00↓
25.00	0.00	0.00	0.277767E+00↓
27.50	0.00	0.00	0.183303E+00↓
30.00	0.00	0.00	0.489561E-01↓
32.50	0.00	0.00	0.322755E-01↓
35.00	0.00	0.00	0.621432E-01↓
37.50	0.00	0.00	0.578999E-01↓
40.00	0.00	0.00	0.635904E-01↓

このデータから最大Euler角度を計算する。

計算結果のEuler角度が

272.47775631775966 27.315674504920448 62.47202173630386

の場合のhkluvwは

0.4069392224368036 0.212091778074968 0.8884917258565372

0.8071455535770252 0.3719236124466867 -0.4584636101649117

になる。

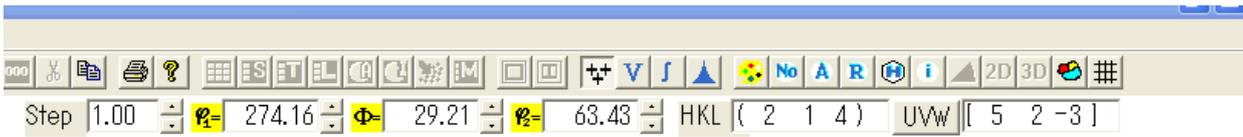
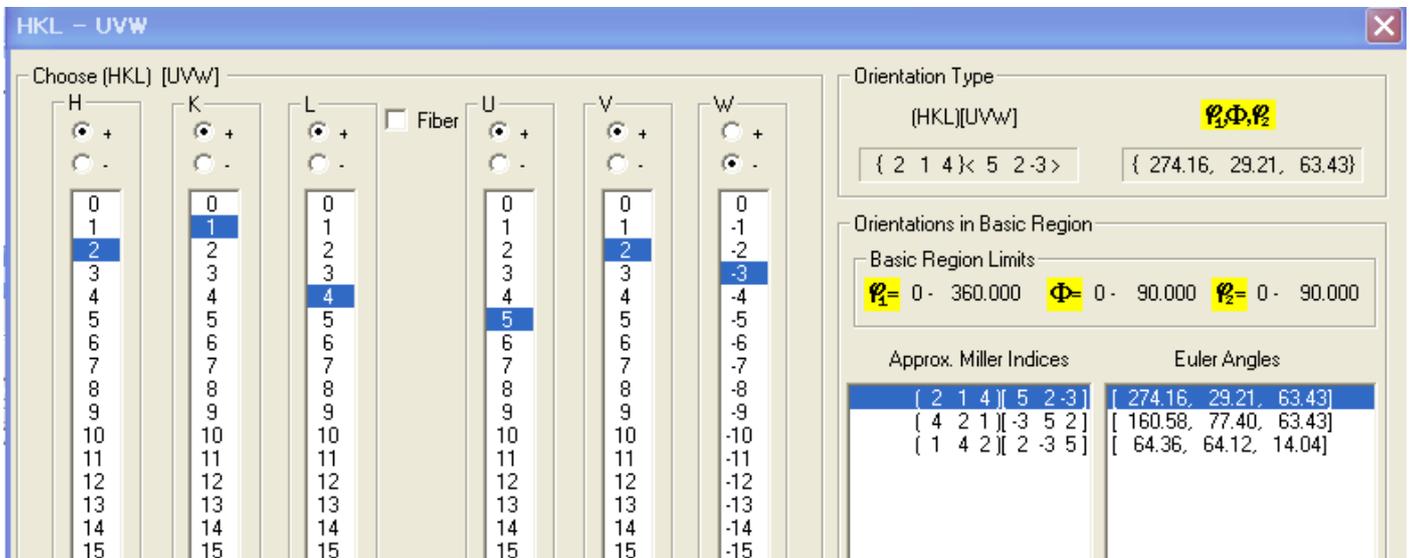
LaboTexに上記Euler角度を入力すると



NO3
Levels
36625.6
34183.9
31742.2
24417.1
21975.4
17092.0
14650.2
Max=39067.
Min=0.002



をクリックすると



NO3
Levels
36625.6
34183.9
31742.2
24417.1
21975.4
17092.0
14650.2
Max=39067.
Min=0.002

とカーソルがずれてしまう。

そこで、

272.47775631775966 27.315674504920448 62.47202173630386

の場合の h k l u v w は

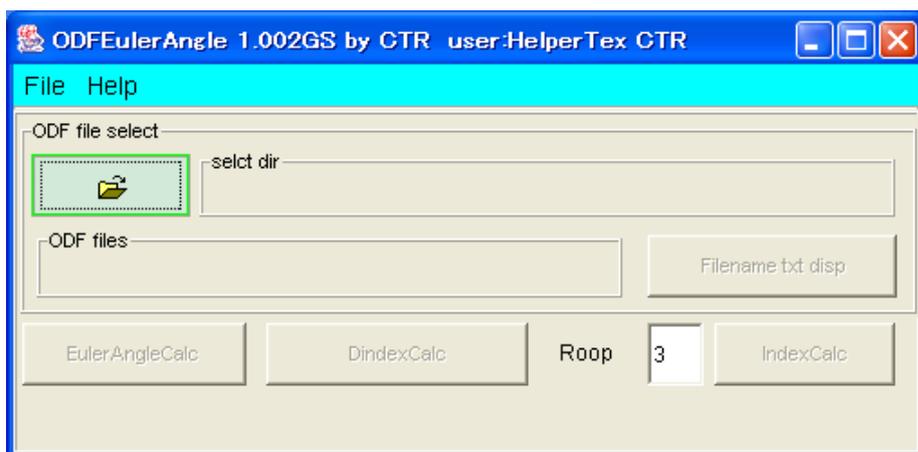
0.4069392224368036 0.212091778074968 0.8884917258565372

0.8071455535770252 0.3719236124466867 -0.4584636101649117 とする。

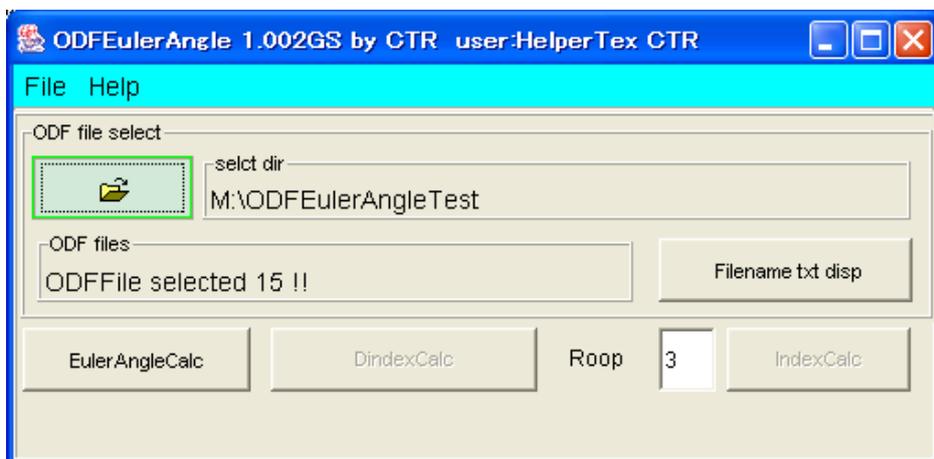
又整数化未機能も行う。

ODFEulerAngleプログラムの使い方

c:\CTR\bin\ODFEulerAngle.jar で起動



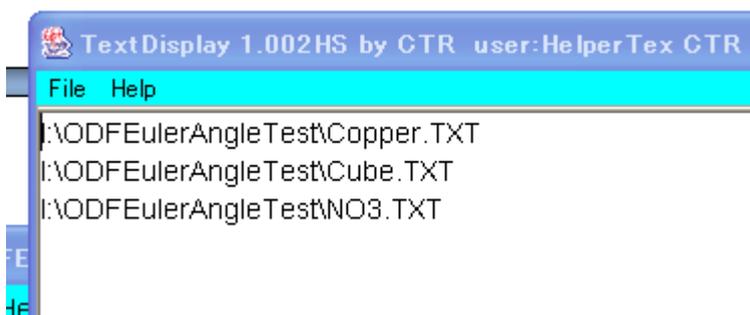
LaboTexのODFExportファイルが集められているディレクトリを指定



選択したディレクトリとファイル数が表示される。



で処理されるファイル名が表示される。



EulerAngleを計算する。

計算には若干の時間がかかる。

計算終了で結果が表示される。(ファイル名 resultangle.txt)

```

TextDisplay 1.002HS by CTR user:Helpe
File Help
Filename (f1 ,F, f2)
Copper.TXT ( 90.0, 35.19, 45.0 )
Cube.TXT ( 0.0, 0.0, 0.0 )
NO05.TXT ( 294.98, 20.25, 24.97 )
NO06.TXT ( 270.05, 32.61, 67.55 )
NO07.TXT ( 10.05, 29.14, 25.22 )
NO08.TXT ( 175.0, 44.97, 9.72 )
NO09.TXT ( 175.0, 44.98, 9.86 )
NO15.TXT ( 237.5, 50.01, 65.0 )
NO16.TXT ( 319.73, 7.17, 59.67 )
NO17.TXT ( 237.64, 50.01, 65.06 )
NO18.TXT ( 132.5, 52.09, 37.5 )

```

ファイル名は r e s u l e t i n d e x . t x t



で I n d e x を計算

```

TextDisplay 1.002HS by CTR user:HelperTex CTR
File Help
Filename (f1, F, f2) { h, k, l } < u, v, w >
Copper.TXT ( 90.0, 35.19, 45.0 ) { 0.408, 0.408, 0.817 } < -0.577, -0.577, 0.576 >
Cube.TXT ( 0.0, 0.0, 0.0 ) { 0.0, 0.0, 1.0 } < 1.0, 0.0, 0.0 >
NO05.TXT ( 294.98, 20.25, 24.97 ) { 0.146, 0.314, 0.938 } < 0.742, 0.593, -0.313 >
NO06.TXT ( 270.05, 32.61, 67.55 ) { 0.498, 0.206, 0.842 } < 0.779, 0.321, -0.538 >
NO07.TXT ( 10.05, 29.14, 25.22 ) { 0.207, 0.441, 0.873 } < 0.826, -0.556, 0.085 >

```



で I n d e x の整数化 R o o p は 3 で計算する。

TextDisplay 1.002HS by CTR user:HelperTex CTR

Filename	(f1, F, f2)	IndextoEulerAngle	{h, k, l}<u, v, w >	FitValue
Copper.TXT	(90.0, 35.19, 45.0)	(90.0, 35.26, 45.0)	{ 1, 1, 2 }< -1, -1, 1 >	0.01
Cube.TXT	(0.0, 0.0, 0.0)	(0.0, 0.0, 0.0)	{ 0, 0, 1 }< 1, 0, 0 >	0.0
NO05.TXT	(294.98, 20.25, 24.97)	(287.35, 20.44, 26.57)	{ 1, 2, 6 }< 2, 2, -1 >	60.92
NO06.TXT	(270.05, 32.61, 67.55)	(270.0, 32.31, 71.57)	{ 3, 1, 5 }< 3, 1, -2 >	16.18
NO07.TXT	(10.05, 29.14, 25.22)	(9.63, 29.21, 26.57)	{ 1, 2, 4 }< 10, -7, 1 >	1.99
NO08.TXT	(175.0, 44.97, 9.72)	(175.56, 45.39, 9.46)	{ 1, 6, 6 }< -18, 2, 1 >	0.56
NO09.TXT	(175.0, 44.98, 9.86)	(175.56, 45.39, 9.46)	{ 1, 6, 6 }< -18, 2, 1 >	0.64
NO15.TXT	(237.5, 50.01, 65.0)	(243.43, 48.19, 63.43)	{ 2, 1, 2 }< 1, 2, -2 >	40.94
NO16.TXT	(319.73, 7.17, 59.67)	(318.09, 7.96, 63.43)	{ 2, 1, 16 }< 10, -4, -1 >	17.49
NO17.TXT	(237.64, 50.01, 65.06)	(243.43, 48.19, 63.43)	{ 2, 1, 2 }< 1, 2, -2 >	39.58
NO18.TXT	(132.5, 52.09, 37.5)	(123.42, 54.74, 45.0)	{ 1, 1, 1 }< -15, 1, 14 >	145.67
NO19.TXT	(20.05, 44.99, 27.52)	(15.26, 48.19, 26.57)	{ 1, 2, 2 }< 4, -3, 1 >	34.07
NO20.TXT	(240.0, 50.01, 65.0)	(243.43, 48.19, 63.43)	{ 2, 1, 2 }< 1, 2, -2 >	17.55
NO3.TXT	(272.48, 27.32, 62.47)	(270.0, 24.09, 63.43)	{ 2, 1, 5 }< 2, 1, -1 >	17.44
NO4.TXT	(192.5, 52.04, 10.07)	(191.45, 51.89, 11.31)	{ 1, 5, 4 }< -6, 2, -1 >	2.66

入力データから計算した Euler 角度

Euler 角度から計算した Index

Index から再計算した Euler 角度

入力 Euler 角度と再計算 Euler 角度の差

入力 Euler 角度と再計算 Euler 角度の差の計算

$$\Sigma (Euler1 - Euler2) * (Euler1 - Euler2)$$

入力 Euler 角度を Euler 1

再計算 Euler 角度を Euler 2

Ver1.003 にて

Filename	(f1, F, f2)	IndextoEulerAngle	{h, k, l}<u, v, w >	FitValue
Copper.TXT	(90.0, 35.19, 45.0)	(90.0, 35.26, 45.0)	{ 1, 1, 2 }< -1, -1, 1 >	0.01
Cube.TXT	(0.0, 0.0, 0.0)	(0.0, 0.0, 0.0)	{ 0, 0, 1 }< -2, -3, 0 >	0.0
NO05.TXT	(294.98, 20.25, 24.97)	(295.1, 20.44, 26.57)	{ 1, 2, 6 }< 0, 3, -1 >	2.58
NO06.TXT	(270.05, 32.61, 67.55)	(270.0, 32.31, 71.57)	{ 3, 1, 5 }< 3, 1, -2 >	16.18
NO07.TXT	(10.05, 29.14, 25.22)	(9.63, 29.21, 26.57)	{ 1, 2, 4 }< 10, -7, 1 >	1.99
NO08.TXT	(175.0, 44.97, 9.72)	(175.56, 45.39, 9.46)	{ 1, 6, 6 }< -18, 2, 1 >	0.56
NO09.TXT	(175.0, 44.98, 9.86)	(175.56, 45.39, 9.46)	{ 1, 6, 6 }< -18, 2, 1 >	0.64
NO15.TXT	(237.5, 50.01, 65.0)	(243.43, 48.19, 63.43)	{ 2, 1, 2 }< 1, 2, -2 >	40.94
NO16.TXT	(319.73, 7.17, 59.67)	(318.09, 7.96, 63.43)	{ 2, 1, 16 }< 10, -4, -1 >	17.49
NO17.TXT	(237.64, 50.01, 65.06)	(243.43, 48.19, 63.43)	{ 2, 1, 2 }< 1, 2, -2 >	39.58
NO18.TXT	(132.5, 52.09, 37.5)	(133.57, 51.34, 36.87)	{ 3, 4, 4 }< -16, 1, 11 >	2.11
NO19.TXT	(20.05, 44.99, 27.52)	(15.26, 48.19, 26.57)	{ 1, 2, 2 }< 4, -3, 1 >	34.07
NO20.TXT	(240.0, 50.01, 65.0)	(243.43, 48.19, 63.43)	{ 2, 1, 2 }< 1, 2, -2 >	17.55
NO3.TXT	(272.48, 27.32, 62.47)	(274.16, 29.21, 63.43)	{ 2, 1, 4 }< 5, 2, -3 >	7.33
NO4.TXT	(192.5, 52.04, 10.07)	(191.45, 51.89, 11.31)	{ 1, 5, 4 }< -6, 2, -1 >	2.66

若干改善された。