

EATPAN : オイラー角ートレンド・プランジ変換プログラム

生形貴男¹・杉野智子¹

EATPAN: a computer software for coloring of crystal orientation by trend-plunge angles

Takao UBUKATA¹ and Satoko SUGINO¹

Abstract An original computer software EATPAN was developed as a utility program for SEM-EBSD analysis of crystal orientation. It transforms original Euler-angle data into trends and plunges of crystal axes to depict crystal orientations as a more intuitive color map than have hitherto been available. It was designed for crystallographic studies of molluscan shell in which *c*-axes of aragonite crystals are preferably oriented. Hue and brightness of a color map displayed on the EATPAN interface represents trends of *a*-axes and plunges of *c*-axes, respectively.

Key words: crystal orientation map, SEM-EBSD

はじめに

近年、生物骨格や化石の微小領域の結晶方位分布を解析するために、電子線後方散乱回折を利用したSEM-EBSDシステムが用いられ始めた (Checa & Rodriguez-Navarro, 2005; Checa *et al.*, 2006, 2007; Parmentier *et al.*, 2007; Perez-Huerta & Cusack, 2007; Perez-Huerta *et al.*, 2007). SEM-EBSDシステムでは、電子顕微鏡内部で試料に対して低角に電子線を入射させ、結晶格子内で非弾性散乱した電子線が二次的にブラッグ回折した反射電子から得られる菊池図形から結晶方位を特定するシステムである (小暮・立川, 2002). このシステムによる結晶方位解析ソフトウェアは幾つか存在するが、地球科学分野ではOxford Instruments社によるHKL Channel5[®]が最も良く用いられている。Channel5のソフトウェアTangoには、結晶方位のオイラー角に基づいて測定点を色分けするカラーマップの作成機能がある。オイラー角は、固定座標軸と結晶軸との関係を定める三つの角度からなり、結晶学では良く用いられる表示法である。しかしながら、貝殻結晶の場合には、一般に*c*軸が高い配向性を示すために、*c*軸に垂直な面内での他の結晶軸の方位を主に問題とする場合が多い。その場合、オイラー角表示では結晶同士の方角関係を直感的に読み取りにくい。む

しろこのようなケースでは、岩石中の線構造の方向と同様にトレンドとプランジによって結晶方位を表示するほうが便利である。拙稿では、貝殻中のアラレ石結晶の結晶方位を解析するために、Channel5で得られるオイラー角データをトレンド-プランジデータに変換し、これに基づいて結晶方位のカラーマップを作成・表示するために開発したソフトウェアEATPANとそのソースコードを公開し、その概要と使用法について記す。

原理

オイラー角からトレンド・プランジへの変換

まず、固定座標系 (x, y, z) と結晶軸の方位とオイラー角 $\{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$ の関係について考える。アラレ石は斜方晶系なので、*a*軸、*b*軸、*c*軸の方向をそれぞれ単位ベクトル $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$ で表すことにする。図1のように、 (x, y, z) に置かれた正規直交系 $\{a, b, c\}$ を原点の周りに回転させて $\{\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}\}$ を得る場合、その回転角を与えるのが $\{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$ である。 $\{a, b, c\}$ を *c* の周りに行列 A_1 によって反時計回りに φ_1 回転して $\{a', b', c\}$ を得、次にこれらを *a'* の周りに行列 B' によって反時計回りに Φ 回転して $\{a', b^*, c\}$ を得、さらにこれらを *c* の周りに行列 A_1' によって反時計回りに φ_2 回転して、最終的に $\{\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}\}$ を得るとする。

¹ 静岡大学理学部地球科学教室, 422-8529 静岡市駿河区大谷836

¹ Institute of Geosciences, Shizuoka University, 836 Oya, Suruga-ku, Shizuoka 422-8529, Japan
E-mail: sbtubuk@ipc.shizuoka.ac.jp

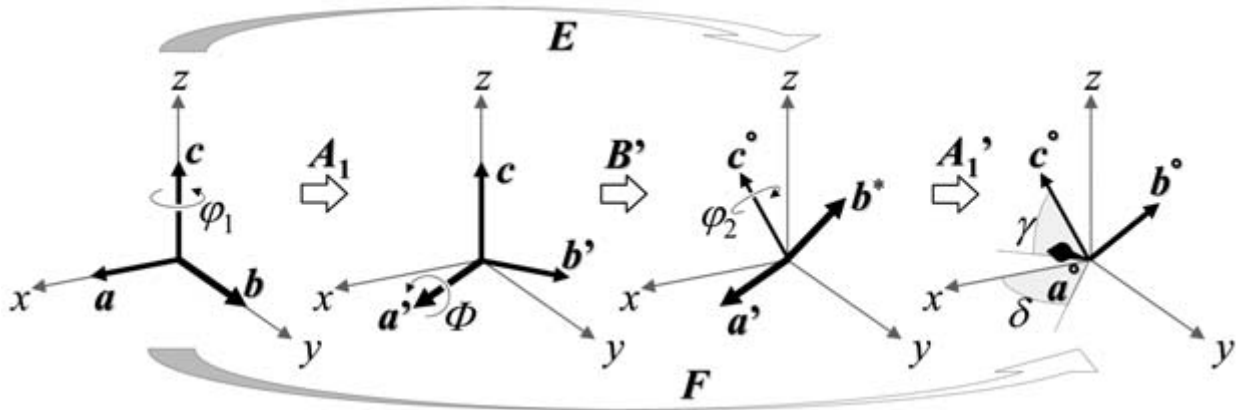


図1 固定座標系と結晶軸とオイラー角の関係。

Fig. 1 Geometric relationship between the fixed coordinate system, crystal orientations $\{a, b, c\}$ and Euler angles $\{\varphi_1, \Phi, \varphi_2\}$. Revolution of the orthonormal system initially installed as $\{a, b, c\}$ around the origin is defined by the Euler angles.

このとき、 B' による変換は、 $\{a', b', c\}$ を A_1 の逆行列によって $\{a, b, c\}$ に戻した上で、 x 軸を中心に反時計回りに Φ 回転させ（この回転を行う行列を B と表す）、それをもう一度 A_1 によって反時計回りに φ_1 回転して戻す変換に等しい。よって、

$$B' = A_1 B A_1^{-1}$$

従って、 $\{a, b, c\}$ を $\{a', b^*, c\}$ に変換する行列 E は、

$$E = B' A_1 = A_1 B A_1^{-1} A_1 = A_1 B$$

同様に、 A_1' による変換は、 $\{a'', b'', c\}$ を E の逆行列によって $\{a, b, c\}$ に戻した上で、 z 軸を中心に反時計回りに φ_2 回転させ（この回転を行う行列を A_2 と表す）、それをもう一度 E によって反時計回りに φ_2 回転して戻す変換に等しい。よって、

$$A_1' = E A_2 E^{-1} = A_1 B A_2 (A_1 B)^{-1} = A_1 B A_2 B^{-1} A_1^{-1}$$

従って、 $\{a, b, c\}$ を $\{a'', b'', \{a', b^*, c\}\}$ に変換する行列 F は、

$$F = A_1' E = A_1 B A_2 B^{-1} A_1^{-1} A_1 B = A_1 B A_2$$

反時計回りを正の向きとすれば、回転行列 A_1, A_2, B は、

$$A_1 = \begin{pmatrix} \cos \varphi_1 & -\sin \varphi_1 & 0 \\ \sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} \cos \varphi_2 & -\sin \varphi_2 & 0 \\ \sin \varphi_2 & \cos \varphi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \varphi_1 \\ 0 & \cos \varphi_2 & -\sin \varphi_2 \\ 0 & \sin \varphi_2 & \cos \varphi_2 \end{pmatrix}$$

$$\therefore F = \begin{pmatrix} \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \Phi & -\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \Phi & \sin \varphi_1 \sin \Phi \\ \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \Phi & -\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \Phi & -\cos \varphi_1 \sin \Phi \\ \sin \varphi_2 \sin \Phi & \cos \varphi_2 \sin \Phi & \cos \Phi \end{pmatrix}$$

また、 $a = (1, 0, 0)'$ 、 $c = (0, 0, 1)'$ だから、

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \Phi \\ \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \Phi \\ \sin \varphi_2 \sin \Phi \end{pmatrix},$$

$$\hat{c} = \begin{pmatrix} c_x \\ c_y \\ c_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \varphi_1 \sin \Phi \\ -\cos \varphi_1 \sin \Phi \\ \cos \Phi \end{pmatrix}$$

ここで、図1のように、 \hat{a} のトレンド角を δ 、 \hat{c} のプランジ角を γ とおけば、

$$\tan \delta = \frac{a_y}{a_x}, \quad \tan \gamma = \frac{c_z}{\sqrt{c_x^2 + c_y^2}}$$

a 軸や c 軸の姿勢は、方向にのみ意味があり、向きには意味が無いので、

$$\delta = \begin{cases} \arctan \left(\frac{a_y}{a_x} \right) & a_x a_y \geq 0 \\ \arctan \left(\frac{a_y}{a_x} \right) + \pi & a_x a_y < 0 \end{cases}, \quad \gamma = \arctan \left(\frac{c_z}{\sqrt{c_x^2 + c_y^2}} \right)$$

ただし、 $0 \leq \delta \leq \pi$ 、 $0 \leq \gamma \leq \pi/2$ である。

色の表現

色を定量的に表現するために古くから使われてきたマンセル表色系では、赤や青などの色の種類を指す色相 (Hue)、色の明るさを表す明度 (Value)、色の鮮やかさを示す彩度 (chroma) の三つのパラメーターによって色彩を表現する。このうち色相は、順番に円状に並んだ色相環と呼ばれる循環構造によって表現されるので、方位を表すのに都合が良い。一方、明度は通常1 (黒) ~ 9.5 (白) の間の数値で表現され、有彩色は明るさによってそれらの中間の値をとるので、傾きを表すのに向いている。彩度は0 ~ 14の間の数値で表され、無彩色 (黒、グレー、白) では0となる。一方、コンピュータ言語では、基本三原色 (赤・緑・青) の加法混色によるRGB表色系が

用いられるので、マンセル表色系のパラメーターをそのまま使うわけにはゆかない。Visual Basicでは、赤・緑・青の強さをそれぞれ R, G, B (0 ~ 255) で表すRGB関数 [RGB (R, G, B)] によって色を指定する。RGB関数では、各パラメーターの混合比によって色相が決まり、

全体的に値が大きいほど明度が上がり、また各色のバランスが均等に近いほど彩度が落ちてグレーに近づく。RGB (255, 255, 255) は白、RGB(0, 0, 0) は黒を表す。色相環に沿って彩度を最大にするように色彩スペクトルを構成すると、基本三原色とそれらの中間色はそれぞれ、赤 RGB (255, 0, 0), 黄 RGB (255, 255, 0), 緑 RGB (0, 255, 0), 水色 RGB (0, 255, 255), 青 RGB (0, 0, 255), 桃色 RGB (255, 0, 255) のように表される。EATPAN では、 a 軸のトレンド δ ($0 \sim \pi$) によって色相環上の各色相を割り当てるよう、 R, G, B の3変数を δ の関数として表す。また、マンセル色立体では、彩度最大を与える明度が色相によって異なり、例えば最も鮮やかな赤は最も鮮やかな黄色よりも暗いので、EATPAN では色相毎に最大彩度を与える明度を1とした輝度 (luminance) L ($0 \sim 1$) を代わりに用いた。輝度は、 c 軸のプランジ γ によって以下のように決める。

$$L = \frac{\gamma}{\pi/2}$$

EATPAN では、赤・緑・青の相対的な強さにこの輝度を掛けることによって R, G, B の値を表す。すなわち、 R, G, B の各変数を δ と γ の関数として以下のように定義する。

$$R = \begin{cases} 255L & 0 \leq \delta \leq \frac{\pi}{6}, \frac{5\pi}{6} \leq \delta \leq \pi \\ 255 \left(2 - \frac{\delta}{\pi/6} \right) L & \frac{\pi}{6} \leq \delta \leq \frac{\pi}{3} \\ 0 & \frac{\pi}{3} \leq \delta \leq \frac{2\pi}{3} \\ 255 \left(\frac{\delta}{\pi/6} - 4 \right) L & \frac{2\pi}{3} \leq \delta \leq \frac{5\pi}{6} \end{cases},$$

$$G = \begin{cases} 0 & 0 \leq \delta \leq \frac{\pi}{3} \\ 255 \left(\frac{\delta}{\pi/6} - 2 \right) L & \frac{\pi}{3} \leq \delta \leq \frac{\pi}{2} \\ 255L & \frac{\pi}{2} \leq \delta \leq \frac{5\pi}{6} \\ 255 \left(6 - \frac{\delta}{\pi/6} \right) L & \frac{5\pi}{6} \leq \delta \leq 2\pi \end{cases},$$

$$B = \begin{cases} 255 \frac{\delta}{\pi/6} L & 0 \leq \delta \leq \frac{\pi}{6} \\ 255L & \frac{\pi}{6} \leq \delta \leq \frac{\pi}{2} \\ 255 \left(4 - \frac{\delta}{\pi/6} \right) L & \frac{\pi}{2} \leq \delta \leq \frac{2\pi}{3} \\ 0 & \frac{2\pi}{3} \leq \delta \leq \pi \end{cases}$$

このとき、 a 軸のトレンドと c 軸のプランジを極座標で表すと、色の凡例は図版 1a のようになる。

	A	B	C	D	E	F	G
1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0.5	0	0	0	0	0
3	0	1	0	0	0	0	0
4	0	1.5	0	0	0	0	0
5	0	2	0	0	0	0	0
6	0	2.5	0	0	0	0	0
7	0	3	0	0	0	0	0
8	0	3.5	0	0	0	0	0
9	0	4	0	0	0	0	0
10	0	4.5	0	0	0	0	0
11	0	5	0	0	0	0	0
12	0	5.5	0	0	0	0	0
13	1	6	0	7.022059	67.81308	178.6819	
14	1	6.5	0	7.022059	67.81308	178.6819	
15	1	7	0	8.041305	67.70948	179.1737	
16	1	7.5	0	27.15489	167.7521	129.2592	
17	1	8	0	24.14509	167.7921	126.1701	
18	0	8.5	0	0	0	0	0
19	0	9	0	0	0	0	0
20	1	9.5	0	129.5418	101.8443	173.428	
21	1	10	0	129.4123	101.4671	172.9474	
22	1	10.5	0	166.9852	14.07658	85.835	
23	1	11	0	166.9852	14.07658	85.835	
24	0	11.5	0	0	0	0	0
25	0	12	0	0	0	0	0
26	0	12.5	0	0	0	0	0
27	0	13	0	0	0	0	0
28	1	13.5	0	109.0465	88.25559	169.2267	
29	1	14	0	109.0465	88.25559	169.2267	
30	1	14.5	0	108.6243	90.71995	169.3926	

図2 EATPAN で用いるデータファイルの形式。

Fig. 2 An example of data file for EATPAN. Locations of measurements are shown by x and y coordinates (2nd and 3rd columns) and crystal orientations are indicated by Euler angles (4th, 5th and 6th columns). The "0" label observed in a cell of the first column indicates that there is no data available for the measurement location.

使用方法

本ソフトウェアを用いるには、まず図2に示すような csv 形式のデータファイルを用意する必要がある。各測定点の結晶方位は、Channel5のソフトウェア Flamenco が菊池図形から判定するが、自動マッピングによる測定では Flamenco が判定できない測定点も少なくない。データファイルの1列目では、各点の結晶方位を判定できたか (1) 否か (0) を示す。2列目3列目にはそれぞれ測定点の x, y 座標値を入れる。4-6列目にオイラー角 $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ の値が入る。データファイルの行数は、測定値の数に一致する。

EATPAN を起動すると図3のようなインターフェースが現れるが、その右上にあるドライブリストボックス (図3A) でドライブを選び、その下のディレクトリリストボックス (図3B) でデータファイルのあるフォルダーをダブルクリックする。すると、その下のファイルリストボックス (図3C) にファイル一覧が現れるので、ここからデータファイルを選んでクリックすると反転表示される。以下、この状態を「ファイルを選択する」と呼ぶ。付録1の1, 2段目は、これらファイルシステムコントロールのためのコードである。

実際に計算する際には、図3Cのファイルリストからデータファイルを選択し、その下のテキストボックス（図3D）に測定点のグリッド数（行数と列数）を入力する。次に、その右にあるテキストボックス（図3E）に測定間隔を入力し、下の“start”ボタンをクリックすると計算が始まり、計算が終わると左のピクチャボックスにカラーマップが描画される。これらの処理を行うためのコードが付録1の3段目である。ピクチャボックスの下にあるテキストボックス（図3F）にファイル名を入力して右の“Save”ボタンをクリックすれば、ピクチャボックスに描画したカラーマップをビットマップ（bmp）ファイルとして保存することができる。付録1の4段目は、カラーマップを保存するためのコードである。

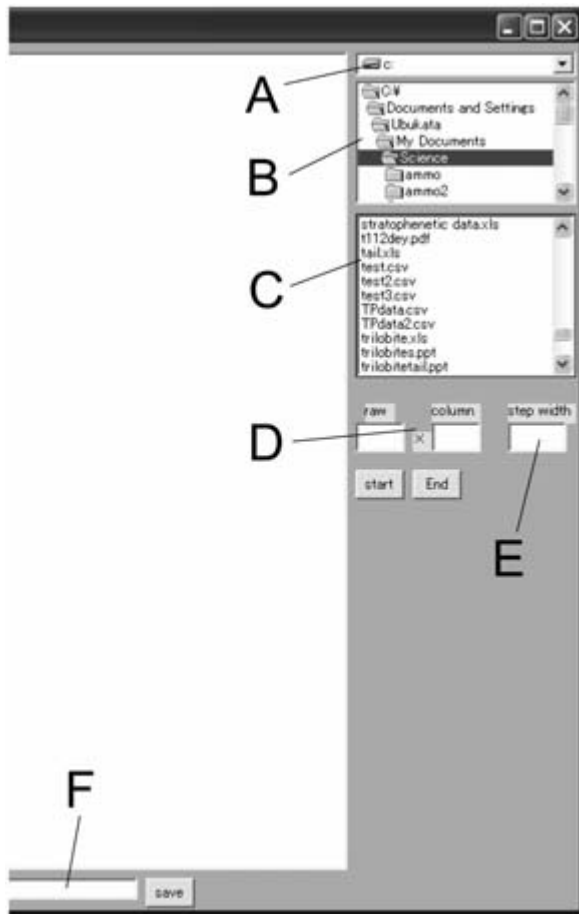


図3 EATPANのインターフェース。
Fig. 3 Graphical user interface of the EATPAN. See text for details.

使用例

EATPANによるカラーマップをTangoによるカラーマップと比較するために、例として淡水性二枚貝 *Unio biwae* の貝殻について、真珠層とよばれる殻層を構成するアラレ石の結晶方位解析の結果を図版1b, cに示す。結晶方位解析には、静岡大学機器分析センターの走査型電子顕微鏡 JEOL JSM-6300 に搭載された Oxford Instruments

Channel5システムを用いた。Tangoによるカラーマップ（図版1b）では、図中央から左側に掛けて緑から水色の色相が卓越し、一見結晶方位が似たような傾向を示すように見えるが、EATPANによるカラーマップ（図版1c）では、これらは赤、緑、青の3原色に近い色相に弁別される。向きに意味の無い（0～180°の範囲で方向を表す）EATPANのカラーマップでは、基本3原色は互いに60度をなす関係にあるので、これらの結晶は互いに双晶の関係にあることが示唆される。

おわりに

拙稿で紹介したEATPANは、Microsoft Visual Basic 6.0で開発された。EATPANは <http://www.ipc.shizuoka.ac.jp/~sbtubuk/downloadHP.htm> からダウンロードできる。

静岡大学理学部地球科学教室の道林克禎博士と道林研究室の皆様には、SEM-EBSDシステムの使用方法と結晶方位解析についてご指導いただいた。道林博士には粗稿の校閲をしていただいた。Flamencoで使用するアラレ石用のパターンファイルは、モンペリエ大学のDavid Mainprice博士に作成していただいた。ここに記して謝意を表する。

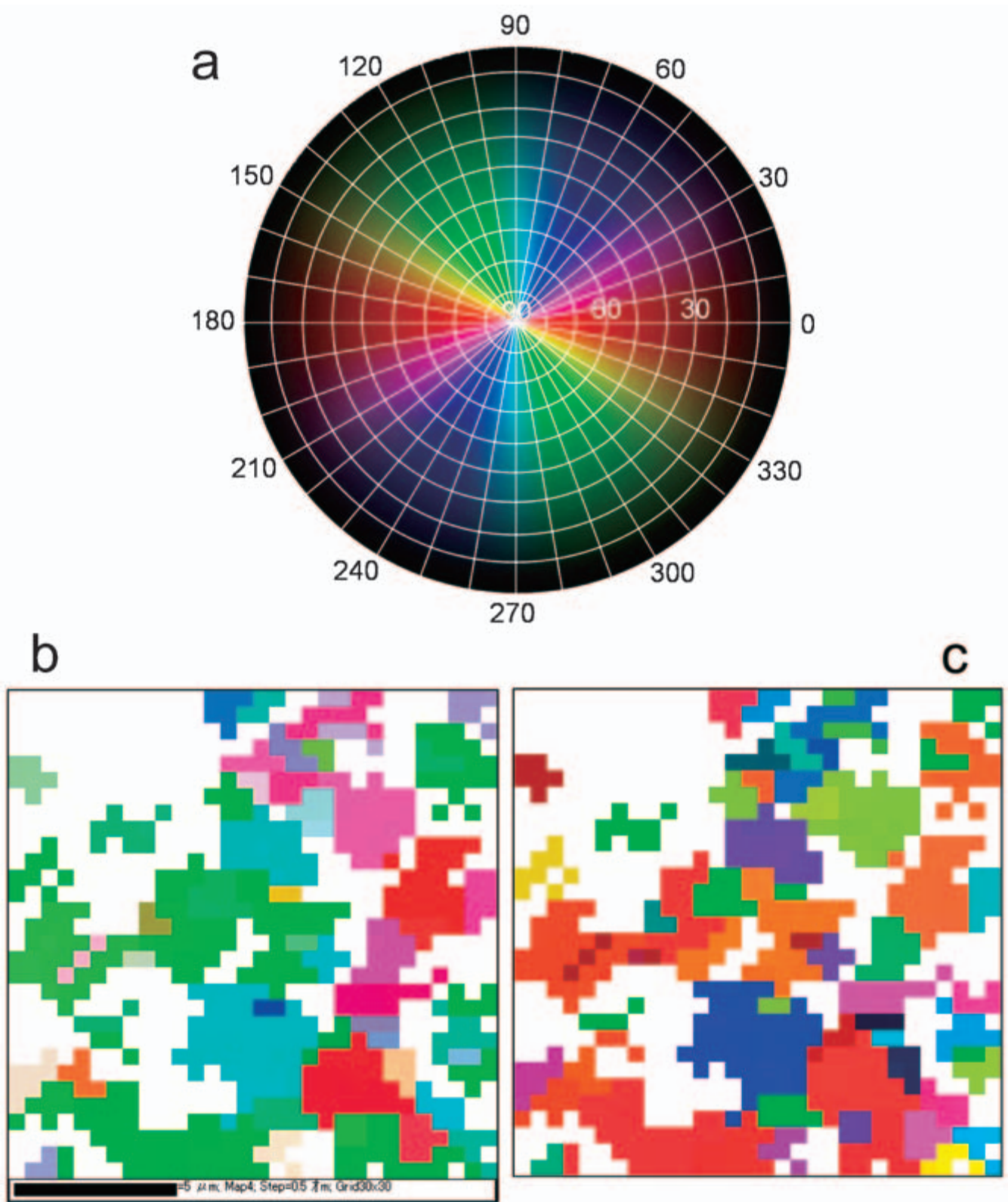
引用文献

- Checa A. G. & Rodriguez-Navarro A. B. (2005), Self-organisation of nacre in the shells of Pterioidea (Bivalvia: Mollusca). *Biomaterials*, **26**, 1071-1079.
- Checa A. G., Okamoto T. & Ramirez J. (2006), Organization pattern of nacre in Pteriidae (Bivalvia: Mollusca) explained by crystal competition. *Proceedings of the Royal Society B, Biological Science*, **273**, 1329-1337.
- Checa A. G., Esteban-Delgado F. J. & Rodriguez-Navarro A. B. (2007), Crystallographic structure of the foliated calcite of bivalves. *Journal of Structural Biology*, **157**, 393-402.
- 小暮敏博・立川 統 (2002), 電子線後方散乱回折 (EBSD) の鉱物学への応用. 岩石鉱物科学, **31**, 275-282.
- Parmentier E., Cloots R., Warin R. & Henrist C. (2007), Otolith crystals (in Carapidae): growth and habit. *Journal of Structural Biology*, **159**, 462-473.
- Pérez-Huerta A. and Cusack M. (2007), Common crystal nucleation mechanism in shell formation of two morphologically distinct calcite brachiopods. *Zoology*, **111**, 9-15.
- Pérez-Huerta A., Cusack M. & England J. (2007), Crystallography and diagenesis in fossil craniid brachiopods. *Palaeontology*, **50**, 757-763.


```

Next i
Close #1
t = raw/Xmax
'Main routine *****
Open Dir1.Path & "/TPdata.csv" For Output As #1
For i = 1 To n
  If phase(i) = 1 Then
    'Calculate trend and plunge of crystal axis =====
    ua(i) = Cos(ph1(i))*Cos(ph2(i)) - Sin(ph1(i))*Sin(ph2(i))*Cos(th(i))
    va(i) = Sin(ph1(i))*Cos(ph2(i)) + Cos(ph1(i))*Sin(ph2(i))*Cos(th(i))
    wa(i) = Sin(ph2(i))*Sin(th(i))
    uc = Sin(ph1(i))*Sin(th(i))
    vc = -Cos(ph1(i))*Sin(th(i))
    wc = Cos(th(i))
    If ua(i) * va(i) >= 0 Then
      trend = Atn(va(i)/ua(i))
    Else
      trend = Atn(va(i)/ua(i)) + Pi
    End If
    plunge = Abs(Atn(wa(i)/Sqr(ua(i)^2 + va(i)^2)))
    lum = (Pi/2 - plunge) / (Pi/2)
    'Determine colors =====
    Select Case trend
      Case 0 To Pi/6
        R(i) = lum*255
        G(i) = 0
        B(i) = lum*255*6*trend/Pi
      Case Pi/6 To Pi/3
        R(i) = lum*255*(2 - 6*trend/Pi)
        G(i) = 0
        B(i) = lum*255
      Case Pi/3 To Pi/2
        R(i) = 0
        G(i) = lum*255*(6*trend/Pi - 2)
        B(i) = lum*255
      Case Pi/2 To 2*Pi/3

```

図版 1 結晶方位のカラーマップ。

Plate 1 Color map showing crystal orientations. (a) Color index of the EATPAN crystal orientation map representing trend (black) and plunge (white) angles in degrees. (b) An example of color map obtained by the Tango program of the Oxford Instruments Channel5 ©. (c) A color map depicted using the EATPAN program based on the identical data as b.