研　究　速　報
UDC 548.12

結晶粒方位関係の〝距離″表示

Metrization of the Grain Orientation Relationship

高　橋　　裕*・森　　　実*・石　田　洋　一*
Yutaka TAKAHASHI, Minoru MORI and Yoichi ISHIDA

1. は　じ　め　に

2つの結晶間の方位関係を議論するとき,「Σ5の方位関係に近い」などという表現がよく使われる.これは2つの方位関係 O_1, O_2 の間に〝距離″の概念を導入しているのにほかならない. しかし, この〝距離″は現在のところ数学的に不明僚な意味でしか使われていない.

本稿は, 2つの方位関係の間の〝距離″を厳密に定義しようとするものである.

ところが, 結晶が対称性を持つ場合, 少々やっかいな問題を生ずる. つまり, 結晶の対称性から等価な表現を生じ, これらすべてを含む部分集合に対して1つの方位関係が対応する. したがって, 2つの方位関係を議論することは, 2つの集合の関係を議論することであり, 幾何学的イメージはかなり希薄なものとなる.

この空間に（距離）位相を導入することは, 空間の幾何学的イメージを描きやすくすることである. さらに, 幾何学的に便利なように〝距離″を定義しておけば, 実用的にも十分使える概念になると期待される.

2. 方位関係の〝距離″の概念

2つの結晶の方位関係を記述することを考える.

2つの結晶に適当な右手系の直交座標系を定め, 基底変換の行列 T を与えると, 2つの結晶の方位関係は定まる.〔ここで, 方位関係を表す行列 T は正格直交行列になる〕

立方晶の場合, 直交座標を〔100〕,〔010〕,〔001〕軸にとっておくのが便利である.

次に2つの方位関係が近いとはどういうことかを考える.

2つの方位関係 O_1, O_2 を考え, それぞれの方位関係を表す行列を T, T' とする. このとき

$$T \simeq T' \tag{1}$$

つまり

$$T^{-1}T' \simeq I \text{（単位行列）} \tag{2}$$

表1　軸の入れ換えを表現する行列と4元数

行列	4元数				
$\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}$	$\langle(1\,0\,0\,0)\rangle$	$\begin{bmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/2\,(1\,-1\,-1\,-1)\rangle$	$\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&-1\end{bmatrix}$	$\langle 1/\sqrt{2}(0\,1\,1\,0)\rangle$
$\begin{bmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{bmatrix}$	$\langle(0\,1\,0\,0)\rangle$	$\begin{bmatrix}0&0&1\\0&-1&0\\1&0&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/\sqrt{2}(0\,1\,0\,1)\rangle$	$\begin{bmatrix}0&1&0\\0&0&-1\\-1&0&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/2(1\,1\,1\,-1)\rangle$
$\begin{bmatrix}-1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{bmatrix}$	$\langle(0\,0\,1\,0)\rangle$	$\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&-1&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/\sqrt{2}(1\,-1\,0\,0)\rangle$	$\begin{bmatrix}0&-1&0\\0&0&-1\\1&0&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/2(1\,1\,-1\,1)\rangle$
$\begin{bmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{bmatrix}$	$\langle(0\,0\,0\,1)\rangle$	$\begin{bmatrix}0&0&1\\0&1&0\\-1&0&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/\sqrt{2}(1\,0\,1\,0)\rangle$	$\begin{bmatrix}0&-1&1\\0&0&0\\-1&0&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/2(1\,-1\,1\,1)\rangle$
$\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&-1\\0&1&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/\sqrt{2}(1\,1\,0\,0)\rangle$	$\begin{bmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&1\end{bmatrix}$	$\langle 1/\sqrt{2}(1\,0\,0\,-1)\rangle$	$\begin{bmatrix}0&0&-1\\1&0&0\\0&-1&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/2(1\,-1\,-1\,1)\rangle$
$\begin{bmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{bmatrix}$	$\langle 1/\sqrt{2}(1\,0\,0\,1)\rangle$	$\begin{bmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{bmatrix}$	$\langle 1/\sqrt{2}(0\,1\,-1\,0)\rangle$	$\begin{bmatrix}0&0&-1\\-1&0&0\\0&1&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/2(1\,1\,-1\,-1)\rangle$
$\begin{bmatrix}0&0&-1\\0&1&0\\1&0&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/\sqrt{2}(1\,0\,-1\,0)\rangle$	$\begin{bmatrix}-1&0&0\\0&0&-1\\0&-1&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/\sqrt{2}(0\,0\,1\,-1)\rangle$	$\begin{bmatrix}0&0&1\\-1&0&0\\0&-1&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/2(1\,-1\,1\,-1)\rangle$
$\begin{bmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/2\,(1\,1\,1\,1)\rangle$	$\begin{bmatrix}0&0&-1\\0&-1&0\\-1&0&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/\sqrt{2}(0\,-1\,0\,1)\rangle$	$\begin{bmatrix}-1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}$	$\langle 1/\sqrt{2}(0\,0\,1\,1)\rangle$

のとき, 方位関係 O_1 と O_2 が近いと考えるのが自然である.〔これを,〝距離1″の定義とよんでおく〕

ところで, 立方晶の場合, 結晶の対称性からそれぞれの軸は等価であり, 行列表現に任意性が生じてくる. この任意性は24通り存在し, 方位関係を表すとき, それぞれの結晶の任意性から 24^2 個の等価な表現を生じる.

つまり, T と E_iTE_j は表現は異なっていても, 同一の方位関係を示す.〔$E_i(1 \leq i \leq 24)$ は表1参照〕したがって

$$\exists\tilde{T}: T \text{ の等価な表現}(i.e.\ \ \tilde{T} = \exists E_i T \exists E_j)$$
$$\exists\tilde{T}': T' \text{ の等価な表現}(i.e.\ \ \tilde{T}' = \exists E_k T' \exists E_l)$$
$$\tilde{T} \simeq \tilde{T}' \tag{3}$$

のとき, 2つの方位関係は近いと考えねばならない.〔これを,〝距離2″の定義とよんでおく〕

ここで注意すべきことは,〝距離2″の定義は方位関係について2つの結晶に向きを考えていることである. ところが, 結晶1から2への変換が T であることと T^{-1} であることは同じものと考えねばならない. したがって

$$\exists\tilde{T}: T \text{ または } T^{-1} \text{ の等価な表現}$$
$$\exists\tilde{T}': T' \text{ または } T'^{-1} \text{ の等価な表現}$$
$$\tilde{T} \simeq \tilde{T}' \tag{4}$$

のとき, 2つの方位関係は近いと考えねばならない.〔これを,〝距離3″の定義とよんでおく〕

以上, 3つの距離を考えたが,〝距離1″から〝距離3″

* 東京大学生産技術研究所　第4部

研 究 速 報

になるにつれて広義の解釈になる．通常よく使われているのは〝距離3″の意味においてであるが，場合に応じて使い分ける必要がある．

3. Hamiltonの4元数と同形定理

【3-1】 3次元の回転（3次特殊直交群）

2. において，方位関係を表現するのに直交行列を用いたが，さらに，この直交行列を適当なパラメータで表現しておくのが便利である．

直交行列のなかで，純粋に回転のみを表す行列，つまり

$$det\ \boldsymbol{T}=1 \tag{5}$$

なる行列を正格直交行列といい，これの集合

$$SO(3)=\{\boldsymbol{T}\mid det\ \boldsymbol{T}=1\quad \boldsymbol{T}:\text{直交行列}\} \tag{6}$$

を，〔3次〕特殊直交群という．

$SO(3)$の任意の要素 $\boldsymbol{T}$ に対して，適当な $\boldsymbol{q}=(q_0,\ q_1,\ q_2,\ q_3)$〔$\neq \boldsymbol{0}$〕が存在して

$$T=\frac{1}{q_0^2+q_1^2+q_2^2+q_3^2}\begin{bmatrix} q_0^2+q_1^2-q_2^2-q_3^2 & 2(-q_0q_3+q_1q_2) & 2(q_0q_2+q_1q_3) \\ 2(q_0q_3+q_2q_1) & q_0^2-q_1^2+q_2^2-q_3^2 & 2(-q_0q_1+q_2q_3) \\ 2(-q_0q_2+q_3q_1) & 2(q_0q_1+q_3q_2) & q_0^2-q_1^2-q_2^2+q_3^2 \end{bmatrix} \tag{7}$$

と書ける．この，$(q_0,\ q_1,\ q_2,\ q_3)$をEuler-Olinde-Rodriguesのパラメーターという[1]．

ただし，このパラメーターはスカラー倍の不定さを持つ．つまり

$$(q_0,\ q_1,\ q_2,\ q_3) \longrightarrow \boldsymbol{T} \tag{8}$$

なら

$$(\alpha q_0,\ \alpha q_1,\ \alpha q_2,\ \alpha q_3) \longrightarrow \boldsymbol{T} \qquad \forall\alpha\neq 0 \tag{9}$$

となる．

【3-2】 Hamiltonの4元数

直交行列の積について考えるとき，**3-1**で述べたEuler-Olinde-Rodriguesのパラメータを Hamiltonの4元数で考えておくのが便利である．

4元数の定義を述べると，4つの実数の順序組$(a,\ b,\ c,\ d)$に対して

$$\text{和}:(a,\ b,\ c,\ d)+(a',\ b',\ c',\ d') =(a+a',\ b+b',\ c+c',\ d+d') \tag{10}$$

$$\text{スカラー倍}:\alpha(a,\ b,\ c,\ d) =(\alpha a,\ \alpha b,\ \alpha c,\ \alpha d) \tag{11}$$

$$\begin{aligned}\text{積}:(a,\ b,\ c,\ d)\ (a',\ b',\ c'd') = (&aa'-bb'-cc'-dd',\\ &ab'+ba'-dc'+cd',\\ &ac'+ca'-bd'+db',\\ &ad'+da'-cb'+bc')\end{aligned} \tag{12}$$

とすると，この集合 $\boldsymbol{H}$ は体になる．これを，Hamiltonの4元数体という[2]．また，$\boldsymbol{H}$ の要素 $\boldsymbol{q}=(a,\ b,\ c,\ d)$ $\boldsymbol{q}'=(a',\ b',\ c',\ d',)$ に対して，共役元 ${}^c\boldsymbol{q}$ を

$${}^c\boldsymbol{q}=(a,\ -b,\ -c,\ -d) \tag{13}$$

で，長さ $|\boldsymbol{q}|$ を

$$|\boldsymbol{q}|=(a^2+b^2+c^2+d^2)^{\frac{1}{2}} \tag{14}$$

内積 $(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}')$ を

$$(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q}')=aa'+bb'+cc'+dd' \tag{15}$$

で定義しておくと

$${}^c(\boldsymbol{pq})={}^c\boldsymbol{q}\,{}^c\boldsymbol{p} \tag{16}$$

$$|{}^c\boldsymbol{q}|=|\boldsymbol{q}| \tag{17}$$

$$|\boldsymbol{pq}|=|\boldsymbol{p}|\,|\boldsymbol{q}| \quad (\text{Euler の恒等式}) \tag{18}$$

$$(\boldsymbol{pq},\boldsymbol{r}) = (\boldsymbol{q},{}^c\boldsymbol{p}\boldsymbol{r}) \tag{19}$$

$$(\boldsymbol{pq},\boldsymbol{r}) =(\boldsymbol{p},\boldsymbol{r}\,{}^c\boldsymbol{q}) \tag{20}$$

等の公式が成り立つ．

$\boldsymbol{H}$から零元を除いた集合を (21)

$${}^{\#}\boldsymbol{H}=\{\boldsymbol{q}\in\boldsymbol{H}|\boldsymbol{q}\neq\boldsymbol{0}\}$$

とすると，群になる．これを4元数群という．

さらに，${}^{\#}\boldsymbol{H}$の中で長さが1である要素の部分集合

$$\tilde{\boldsymbol{H}}=\{\boldsymbol{q}\in{}^{\#}\boldsymbol{H}|\,|\boldsymbol{q}|=1\} \tag{22}$$

も群になる．［群であることは(17)(18)より示される］これを，単位4元数群といい，${}^{\#}\boldsymbol{H}$の部分群である．

以上の定義をしておくと直交行列の積に関して便利な定理が成り立つ．

【3-3】 同 型 定 理

(7)のEuler-Olinde-Rodriguesのパラメータを $\tilde{\boldsymbol{H}}$ の要素に限定すると

$$\pm\boldsymbol{q}=\pm(q_0,\ q_1,\ q_2,\ q_3) \tag{23}$$

の2価になる．したがって，(+)と(−)の符号の区別をしないと，(7)の対応により $SO(3)$と $\tilde{\boldsymbol{H}}$ は1対1対応する．

この符号を区別しないことは数学的には以下のように表現される．

$\tilde{\boldsymbol{H}}$ 上の同値関係″$\tilde{\text{1}}$″を

$$\boldsymbol{p}\,\tilde{1}\,\boldsymbol{q} \Leftrightarrow (\boldsymbol{p},\ \boldsymbol{q}) =\pm 1 \tag{24}$$

と定義しておき，$\boldsymbol{q}$ の同値類を

$$\langle\boldsymbol{q}\rangle=\{\boldsymbol{p}\in\tilde{\boldsymbol{H}}|\boldsymbol{p}\,\tilde{1}\,\boldsymbol{q}\}=\{\boldsymbol{q},\ -\boldsymbol{q}\} \tag{25}$$

と書くと約束しておく．このとき，直交行列 $\boldsymbol{T}$ と同値類$\langle\boldsymbol{q}\rangle$は1対1対応する．

また，類 $\langle\boldsymbol{p}\rangle$と$\langle\boldsymbol{q}\rangle$の積$\langle\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{q}\rangle$を

$$\langle\boldsymbol{p}\rangle\ni{}^{\exists}\boldsymbol{p}'\quad\langle\boldsymbol{q}\rangle\ni{}^{\exists}\boldsymbol{q}'$$

に対して

$$\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{p}'\boldsymbol{q}'\quad{}^{\exists}\langle\boldsymbol{r}\rangle\ni\boldsymbol{r}'$$

とすると

$$\langle\boldsymbol{r}\rangle=\langle\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{q}\rangle \tag{25}$$

と定義しておく．同値関係″$\tilde{\text{1}}$″の意味から，(25)の定義は

代表元 $\boldsymbol{p}'$, $\boldsymbol{q}'$のとり方によらず, $\langle \boldsymbol{r} \rangle$は一意的に定まる. したがって, (25)は

$$\langle \boldsymbol{p} \rangle \langle \boldsymbol{q} \rangle = \langle \boldsymbol{pq} \rangle \tag{26}$$

と書いてもよい.

以上の定義をしておくと, 次の定理が成り立つ.

$$\boldsymbol{T}_1 \longleftrightarrow \langle \boldsymbol{q}_1 \rangle \qquad \boldsymbol{T}_2 \longleftrightarrow \langle \boldsymbol{q}_2 \rangle$$

$$\text{なら}\quad \boldsymbol{T}_1 \boldsymbol{T}_2 \longleftrightarrow \langle \boldsymbol{q}_1 \rangle \langle \boldsymbol{q}_2 \rangle = \langle \boldsymbol{q}_1 \boldsymbol{q}_2 \rangle \tag{27}$$

これを,「同型定理」[3),4)]といい, 1対1対応することから, [全単射(7)により] 乗法に関して $SO(3)$ と $\tilde{\boldsymbol{H}}$ は同じ構造を持つ. つまり, 直交行列の積は4元数の積におきかえて議論できる.

この定理を使うことにより, 以下の〝距離〟の定義では, この4元数表示が中心的役割りをはたす.

4. 距 離 空 間

【4-1】 位相空間

方位関係を表す集合は直感的には把握しにくい空間である. しかし, この空間に位相を導入すると, かなり幾何学的イメージがはっきりしてくる.

問題は, いかに数学的にも実用的にも便利な位相を定義するかである.

【4-2】 距 離 空 間

数学的には種々の位相が定義されているが[5)], このなかで〝距離位相〟は, 一般に使っている〝距離〟と一致した概念である.

〝距離〟の定義を述べると,

集合 X の直積 $X \times X$ から実数への写像 d が定義され

(a) $d(x,\ y) \geq 0 \quad \forall x,\ \forall y \in X$ (28)

特に $d(x,\ y)=0 \Leftrightarrow x=y$ (29)

(b) $d(y,\ x)=d(x,\ y) \quad \forall x,\ \forall y \in X$ (30)

(c) $d(x,\ y)+d(y,\ z) \geq d(x,\ z)$

$\forall x,\ \forall y,\ \forall z \in X$ (31)

を満足するとき, $(X,\ d)$を距離空間という.

この定義は

(a)距離は負にならない. 特に距離が0のとき2点は一致する.

(b)x の y に対する距離は, y の x に対する距離に等しい.

(c)2辺の和は他の1辺より大きい. [三角不等式] を表現しているにすぎない.

5. において, **2.** で述べた3つの距離ついて, 〝距離〟の定義を満足するように, 距離1, 2, 3を定める.

5. 方位関係の〝距離〟の定義

【5-1】 〝距離1〟の定義

2. で3つの意味の距離を考えたが, これを数学的に表現する.

〝距離1〟については, 2つの直交行列 $\boldsymbol{T}_1$, $\boldsymbol{T}_2$ に関して

$$\boldsymbol{T}_1 \longleftrightarrow \langle \boldsymbol{p} \rangle \qquad \boldsymbol{T}_2 \longleftrightarrow \langle \boldsymbol{q} \rangle \tag{32}$$

とすると

$$\langle \boldsymbol{p} \rangle \ni {}^{\exists}\boldsymbol{p}' \quad \langle \boldsymbol{q} \rangle \ni {}^{\exists}\boldsymbol{q}'$$

に対して

$$d_1(\langle \boldsymbol{p} \rangle, \langle \boldsymbol{q} \rangle) = \{1-(\boldsymbol{p}',\ \boldsymbol{q}')^2\}^{\frac{1}{2}} \tag{33}$$

と定義する. [(33)が〝距離〟の定義を満足することは, 〝Schwarz の不等式〟を使って証明できる] 1対1対応することから, (33)は $\boldsymbol{T}_1$ と $\boldsymbol{T}_2$ の距離を考えてよい.

(33)から明らかなように, 代表元 $\boldsymbol{p}'$, $\boldsymbol{q}'$のとり方に依存しないため, (33)は

$$d_1(\langle \boldsymbol{p} \rangle, \langle \boldsymbol{q} \rangle) = \{1-(\boldsymbol{p},\ \boldsymbol{q})^2\}^{\frac{1}{2}} \tag{34}$$

と書き直してもよい.

(34)の意味は

$$\boldsymbol{T} \simeq \boldsymbol{T}' \tag{35}$$

のとき, $\boldsymbol{p}$ と $\boldsymbol{q}$ はほとんど平行になるため

$$(\boldsymbol{p},\ \boldsymbol{q})^2 \simeq 1 \tag{36}$$

となる. したがって, (34)から$\langle \boldsymbol{p} \rangle$と$\langle \boldsymbol{q} \rangle$の距離は

$$d_1(\langle \boldsymbol{p} \rangle, \langle \boldsymbol{q} \rangle) \simeq 0 \tag{37}$$

となることを示している.

また, この定義は別の形でも表せ

$$\boldsymbol{r}_1 = {}^{c}\boldsymbol{p}\boldsymbol{q} \tag{38}$$

$$\boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{p}^{c}\boldsymbol{q} \tag{39}$$

$$\boldsymbol{r}_3 = {}^{c}\boldsymbol{q}\boldsymbol{p} \tag{40}$$

$$\boldsymbol{r}_4 = \boldsymbol{q}^{c}\boldsymbol{p} \tag{41}$$

とすると, $\boldsymbol{r}_1$, $\boldsymbol{r}_2$, $\boldsymbol{r}_3$, $\boldsymbol{r}_4$ の第1成分 $r_0^{(1)}$, $r_0^{(2)}$, $r_0^{(3)}$, $r_0^{(4)}$ はすべて $(\boldsymbol{p},\ \boldsymbol{q})$ に等しいため

$$d_1(\langle \boldsymbol{p} \rangle, \langle \boldsymbol{q} \rangle) = (1-r_0^{(i)2})^{\frac{1}{2}} \quad 1 \leq i \leq 4 \tag{42}$$

とも書くことができる.

【5-2】 〝距離1〟とずれ角

従来, 直交行列 $\boldsymbol{T}_1$, $\boldsymbol{T}_2$ が近いということを表現するのに $\boldsymbol{T}_1$ と $\boldsymbol{T}_2$ の〝ずれ角〟がよく使われた.

ずれ角 $\varDelta\theta$ とは

$$\tilde{\boldsymbol{I}} = {}^{t}\boldsymbol{T}_1 \boldsymbol{T}_2 \tag{43}$$

とすると, $\tilde{\boldsymbol{I}}$ の回転角, つまり

$$\varDelta\theta = \cos^{-1}[\{tr(\tilde{\boldsymbol{I}})-1\}/2] \tag{44}$$

である. ただし, tr はトレースを表し, $\cos^{-1}$ の値域は $[0,\ \pi]$ とする.

また, $\varDelta\theta$ は $\boldsymbol{T}_1^{t}\boldsymbol{T}_2$, ${}^{t}\boldsymbol{T}_2\boldsymbol{T}_1$, $\boldsymbol{T}_2^{t}\boldsymbol{T}_1$ の回転角でもある. $\boldsymbol{T}_1$ と $\boldsymbol{T}_2$ が近いときには, $\varDelta\theta$ は0に近い.

このずれ角 $\varDelta\theta$ と **5-1** で定義した距離 d_1 の間には簡単な関係が成り立ち

$$\boldsymbol{T}_1 \longleftrightarrow \langle \boldsymbol{p} \rangle \qquad \boldsymbol{T}_2 \longleftrightarrow \langle \boldsymbol{q} \rangle$$

研究速報

として

$$\varDelta\theta=\varDelta\theta(\boldsymbol{T}_1,\boldsymbol{T}_2) \tag{45}$$

$$d_1=d_1(\langle\boldsymbol{p}\rangle,\langle\boldsymbol{q}\rangle) \tag{46}$$

とすると

$$\varDelta\theta=2\sin^{-1}d_1 \tag{47}$$

なる関係が成り立つ．特に，$0^\circ\le\varDelta\theta\le30^\circ[0\le d_1\le0.25]$の領域において

$$\varDelta\theta=2d_1(rad)=115d_1(degree) \tag{48}$$

なる近似式が成り立つ．［誤差は1%以下である］

したがって，従来使われてきた$\varDelta\theta$と新しく定義した距離d_1の間の換算は，(47)［または(48)］により簡単におこなえる．

【5-3】　〝距離2″の定義

立方晶の場合，結晶の対称性から結晶軸の入れ換えに対して方位関係は不変である．したがって，$\boldsymbol{T}$と$\boldsymbol{E}_i\boldsymbol{T}\boldsymbol{E}_j$は同一視しなければならない．

これを，4元数で表すと

$$\boldsymbol{E}_i\longleftrightarrow\langle\boldsymbol{e}_i\rangle \tag{49}$$

として，$\langle\boldsymbol{q}\rangle$と$\langle\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{q}\boldsymbol{e}_j\rangle$は同一視しなければならない．〔表1〕

この同一視を数学的に表現する．$\tilde{\boldsymbol{H}}$上の同値関係を

$$\boldsymbol{p}\tilde{_2}\boldsymbol{q}\Leftrightarrow\boldsymbol{p}=\pm{}^{\exists}\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{q}{}^{\exists}\boldsymbol{e}_j \tag{50}$$

と新しく定義する．［これは，"$\tilde{_1}$"の定義を拡張したものである］そして，$\boldsymbol{q}$の同値類を

$$(\boldsymbol{q})=\{\boldsymbol{p}\in\tilde{H}|\boldsymbol{p}\tilde{_2}\boldsymbol{q}\}$$
$$=\{\langle\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{q}\boldsymbol{e}_j\rangle\quad(1\le i,j\le24)\} \tag{51}$$

と書くと約束すると，$\langle\boldsymbol{q}\rangle$の等価な表現全体は$(\boldsymbol{q})$で示される．

2.で述べた〝距離2″を表すと

$$d_2((\boldsymbol{p}),(\boldsymbol{q}))=\inf_{\langle p'\rangle\in(p)\ \langle q'\rangle\in(q)}d_1(\langle\boldsymbol{p}'\rangle,\langle\boldsymbol{q}'\rangle)$$
$$=\min_{1\le i,j,k,l\le24}d_1(\langle\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{p}\boldsymbol{e}_j\rangle,\langle\boldsymbol{e}_k\boldsymbol{q}\boldsymbol{e}_l\rangle) \tag{52}$$

となる．これは，$\langle\boldsymbol{p}\rangle$と$\langle\boldsymbol{q}\rangle$の等価な表現の中で，〝距離1″のもっとも短いものをとったことに相当する．

(52)の定義に従えば，24^4通りの場合について調べることになるが，実際は24^2通りでよい．これは

$$d_2((\boldsymbol{p}),(\boldsymbol{q}))=\min_{1\le i,j\le24}d_1(\langle\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{p}\boldsymbol{e}_j\rangle,\langle\boldsymbol{q}\rangle)$$
$$=\min_{1\le k,l\le24}d_1(\langle\boldsymbol{p}\rangle,\langle\boldsymbol{e}_k\boldsymbol{q}\boldsymbol{e}_l\rangle) \tag{53}$$

なる命題が成り立つためである．［この命題の証明には$\{\langle\boldsymbol{e}_i\rangle\}$が乗法に関して閉じていることと(19)，(20)を使う］

なお，(52)が距離の定義を満足することは，(53)を使って示される．

【5-4】　〝距離3″の定義

〝距離2″を定義しておくと，〝距離3″への拡張は容易である．

$\tilde{H}$上の同値関係をさらに拡張して

$$\boldsymbol{p}\tilde{_3}\boldsymbol{q}\Leftrightarrow\boldsymbol{p}=\pm{}^{\exists}\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{q}{}^{\exists}\boldsymbol{e}_j$$
$$\text{または }\boldsymbol{p}=\pm{}^{\exists}\boldsymbol{e}_i{}^{c}\boldsymbol{q}{}^{\exists}\boldsymbol{e}_j \tag{54}$$

と定義し，$\boldsymbol{q}$の同値類を

$$\{\boldsymbol{q}\}=\{\boldsymbol{p}\in\tilde{\boldsymbol{H}}|\boldsymbol{p}\tilde{_3}\boldsymbol{q}\}=\{(\boldsymbol{q}),({}^{c}\boldsymbol{q})\} \tag{55}$$

と書くと約束する．

このとき，〝距離3″は

$$d_3(\{\boldsymbol{p}\},\{\boldsymbol{q}\})=\min\{d_2((\boldsymbol{p}),(\boldsymbol{q}))$$
$$d_2(({}^{c}\boldsymbol{p}),(\boldsymbol{q})),d_2((\boldsymbol{p}),({}^{c}\boldsymbol{q})),d_2(({}^{c}\boldsymbol{p}),({}^{c}\boldsymbol{q}))\} \tag{56}$$

と定義できる．

ところが

$$d_2(({}^{c}\boldsymbol{p}),({}^{c}\boldsymbol{q}))=d_2((\boldsymbol{p}),(\boldsymbol{q})) \tag{57}$$

$$d_2((\boldsymbol{p}),({}^{c}\boldsymbol{q})=d_2(({}^{c}\boldsymbol{p}),(\boldsymbol{q})) \tag{58}$$

なる命題が成り立つため，(51)は

$$d_3(\{\boldsymbol{p}\},\{\boldsymbol{q}\})=\min\{d_2((\boldsymbol{p}),(\boldsymbol{q})),d_2((\boldsymbol{p}),({}^{c}\boldsymbol{q}))\} \tag{59}$$

と書いてよい．

以上で，〝距離1″から〝距離3″は全て定義された．

6．まとめ

以上，方位関係を表す集合に，3つの同値関係

（1）　表現が等しい．

（2）　等価な表現である．

（3）　等価な表現である．または逆変換が等価である．

を考え，それぞれの場合について同値類の間の距離を定義した．これは，従来使われてきた角度にかわるもので，両者には簡単な変換式が成り立つ．

この理論は，結晶粒界［粒界の方位関係．特に対応方位からのずれ］，集合組織［組織の分布］，異相界面の研究のための数学的基礎を与えるものである．今後，実際の材料における界面分布の解析にこの表現を応用してみるのが課題である．　(1984年12月13日)

参考文献

1) 山内恭彦：回転群とその表現，(1965)，岩波書店
2) 横田一郎：群と位相，(1971)，裳華房
3) 「同型」については都筑俊郎：群論への入門，(1977)，サイエンス社
4) 証明については，野沢豊吉：ベクトル・テンソルおよびその対用(2)，(1977)，コロナ社
5) たとえば　児玉之宏：位相幾何学，(1971)，森北出版