

# VASPによる粒界エネルギーの第一原理計算

関西学院大学

理工学部 情報科学研究科 0523 村上成那

平成 26 年 2 月 17 日

## 概 要

小傾角粒界エネルギーの粒界エネルギーは、Read-Shockley の式により求まるとされている。Hasson らによる Morse ポテンシャルを用いた粒界エネルギーの角度依存性のシミュレーション結果は  $0^\circ$  付近の回転角及び  $90^\circ$  で立ち上がりの傾きが異なり、Read-Shockley の式を支持する結果となった。しかし大槻が行った実験的観測の結果は、 $0^\circ$  及び  $90^\circ$  付近の立ち上がりの傾きが同じであるという相違が生じている。

本研究では、Hasson らのシミュレーション結果と大槻による実験結果との相違を解明するため、第一原理計算によるシミュレーションで小傾角粒界の粒界エネルギーの角度依存性を求めることを目的としている。第一原理計算には VASP を用いた。そのため  $0^\circ$  付近及び  $90^\circ$  付近の粒界モデルを VASP の入力ファイルとして作成した。

作成した粒界モデルを用いて、第一原理計算による粒界エネルギーの角度依存性を求めた。その結果、VASP による解析結果は、Hasson らによるシミュレーションに類似した結果となった。

# 目次

<b>第1章 序論</b>	<b>3</b>
1.1 小傾角粒界	3
1.2 転位	4
1.3 刃状転位	5
1.4 バーガースベクトル	6
1.5 Read-Shockley の式による粒界エネルギーの算出	8
1.6 粒界エネルギーの角度依存性	8
<b>第2章 計算手法及び使用モデルの概要</b>	<b>11</b>
2.1 VASP による第一原理計算	11
2.2 Sutton Vitek の粒界モデル	11
2.3 モデル作成の補足	14
2.3.1 周期的境界条件	14
2.3.2 粒界モデルの回転角	15
2.3.3 作成モデルの確認	16
<b>第3章 粒界モデルの計算結果</b>	<b>17</b>
3.1 90° 付近の粒界モデル	17
3.1.1 Sutton の論文を参考にした粒界モデル	17
3.1.2 原子座標の重なりを解消した粒界モデル	19
3.1.3 90° モデルの構造の見直し	19
3.2 0° 付近の粒界モデル	22
3.2.1 Sutton Vitek の粒界モデルを参考にした粒界モデル	22
3.2.2 簡易な構造の粒界モデルの安定構造を元にした粒界モデル	24
<b>第4章 検証結果と今後</b>	<b>29</b>
4.0.3 作成モデルの幾何学的相違	29
4.1 角度依存性の検証	30
4.1.1 小傾角粒界の角度依存性	30
4.1.2 log を用いた検証	30
4.2 今後の課題	31
<b>第5章 総括</b>	<b>32</b>

<b>第 6 章</b>	<b>付録</b>	<b>34</b>
6.1	3.1.1 小節で作成した粒界モデル . . . . .	34
	6.1.1 回転角 $77.4^\circ$ ( $\arctan(1/9)$ ) . . . . .	34
	6.1.2 回転角 $79.6^\circ$ ( $\arctan(1/11)$ ) . . . . .	37
	6.1.3 回転角 $81.2^\circ$ ( $\arctan(1/13)$ ) . . . . .	42
6.2	3.1.2 小節で作成した粒界モデル . . . . .	47
	6.2.1 回転角 $77.4^\circ$ ( $\arctan(1/9)$ ) . . . . .	47
	6.2.2 回転角 $79.6^\circ$ ( $\arctan(1/11)$ ) . . . . .	50
	6.2.3 回転角 $81.2^\circ$ ( $\arctan(1/13)$ ) . . . . .	54
6.3	3.1.3 小節で作成した粒界モデル . . . . .	59
	6.3.1 回転角 $77.4^\circ$ ( $\arctan(1/9)$ ) . . . . .	59
	6.3.2 回転角 $79.6^\circ$ ( $\arctan(1/11)$ ) . . . . .	63
	6.3.3 回転角 $81.2^\circ$ ( $\arctan(1/13)$ ) . . . . .	67
6.4	3.2.1 小節で作成した粒界モデル . . . . .	73
	6.4.1 回転角 $12.6^\circ$ ( $\arctan(1/9)$ ) . . . . .	73
	6.4.2 回転角 $10.4^\circ$ ( $\arctan(1/11)$ ) . . . . .	77
	6.4.3 回転角 $8.8^\circ$ ( $\arctan(1/13)$ ) . . . . .	81
6.5	3.2.2 小節で作成した粒界モデル . . . . .	87
	6.5.1 回転角 $12.6^\circ$ ( $\arctan(1/9)$ ) . . . . .	87
	6.5.2 回転角 $10.4^\circ$ ( $\arctan(1/11)$ ) . . . . .	90
	6.5.3 回転角 $8.8^\circ$ ( $\arctan(1/13)$ ) . . . . .	95

# 第1章 序論

## 1.1 小傾角粒界

世の中に存在する物質は，単結晶，多結晶，非晶質に分けられる．それぞれの例として，宝石，セトモノ，ガラスがあり，多くの物質は多結晶に属する．多結晶とは，図 1.1 に示すように複数の単結晶の粒がランダムに隣接しているような状態である．

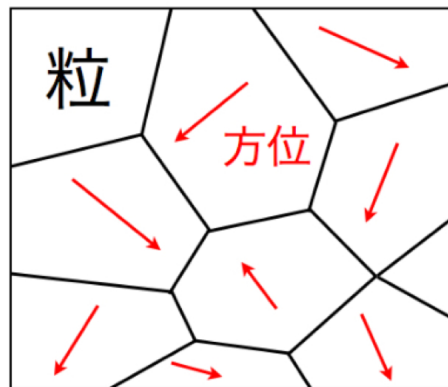


図 1.1: 粒，粒界，結晶方位の模式図 [1].

それぞれの粒には方位があり，方位が異なる粒同士が隣接している部分に形成される境界を粒界という．本研究では，いくつかの種類がある粒界のうち，小傾角粒界を取り扱う．粒界のうち，2つの立方晶が左右対称に回転角  $\theta/2$  ずつ，すなわち図 1.2 に示すように回転角  $\theta$  ずれて結合したものを対称傾角粒界と呼び， $\perp$  で表される転位が周期的に並ぶことによって構成される．また，(100) 面に対称である場合  $[100]$  対称傾角粒界と呼ばれる．対称傾角粒界のうち角度  $\theta$  が  $0^\circ \sim 30^\circ$  程度の物を小傾角粒界と呼ぶ．

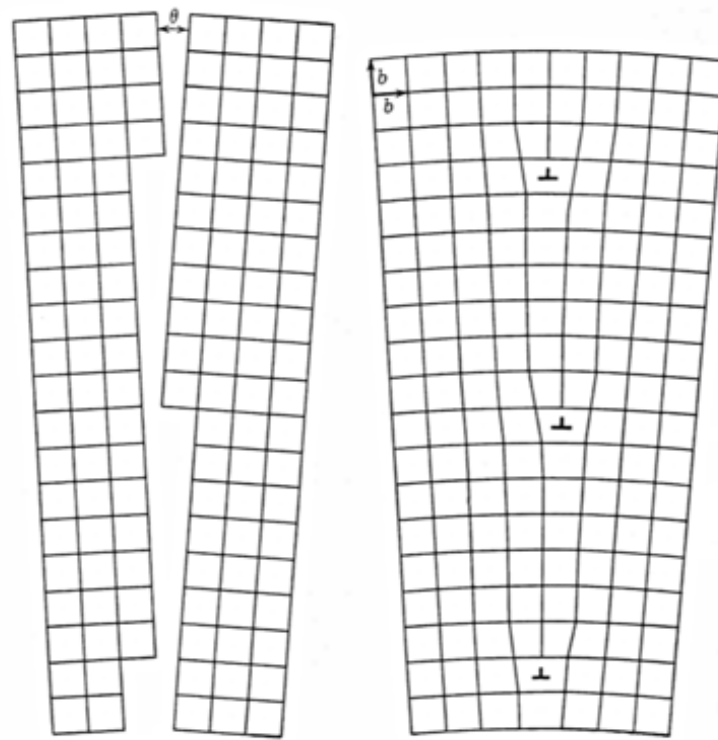


図 1.2:  $[100]$  対称傾角粒界のモデル [1].

## 1.2 転位

転位とは結晶の持つ格子欠陥の一種である．結晶は，本来，ある構造単位（単位胞）が三次元的に平行移動して空間を埋め尽くしているべきものであるが，現実には存在する結晶は必ずしも理想的な結晶構造を持っているわけではない [2]．構成元素の種類に関係なく，原子の配列が幾何学的に乱れている状態，これらを総称して格子欠陥 (lattice defect) という．物質の格子欠陥には 0 次元的な欠陥の点欠陥や，1 次元的な欠陥の線欠陥，2 次元的な面欠陥の積層欠陥等があり，中でも線欠陥は転位と呼ばれ，材料の変形を左右する重要な欠陥である．

### 1.3 刃状転位

本研究では、数種類の転位のうち、刃状転位のみを扱うため、刃状転位について解説する。図 1.3 はある結晶中における刃状転位の例である。結晶中のある面 ABCD の上の物質が下の物質に対して、決まったベクトル  $\mathbf{b}$  だけすべったとする。このすべり方向の間隔が  $\mathbf{b}$  の持つ大きさ  $b$  に等しくなるようにしておけば、境界線 AD から離れた位置では、面 ABCD の上下の結晶はちょうど 1 原子距離ずれ、隣接する原子間の間隔や方向は、元の結晶と同じものとなる。すなわち、すべりの影響は直線 AD のまわりにしわ寄せされている。この歪模様が転位である。図 1.3 ではすべりのベクトル  $\mathbf{b}$  と境界線 AD が直角である。また、同じ原子の配列は図 1.4 のように原子面を 1 枚の刃物のようにすべり面に垂直に押しこむことによっても形成される。このことから、すべりのベクトルと転位が垂直となる転位を刃状転位と呼ぶ [3]。

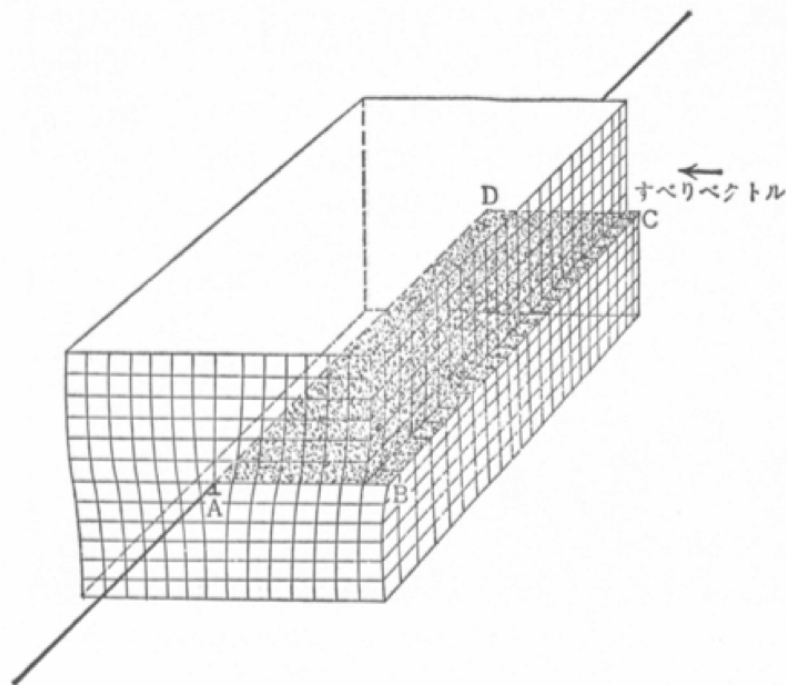


図 1.3: 刃状転位を作るすべり [3]. すべりは ABCD の内面で起き、すべった領域と滑らない領域の境界は、すべりベクトルと直角である。

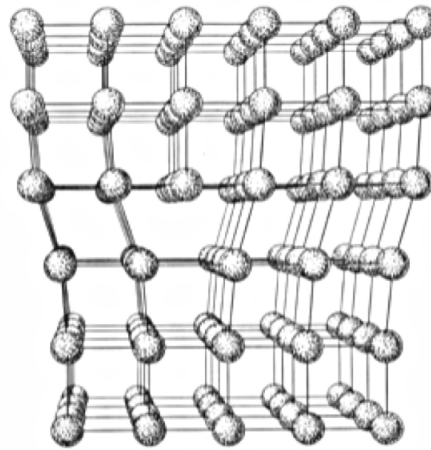


図 1.4: 刃状転位の構造 [4]. 上半分に余分の原子面を挿入したために，変形していると考えられる．この挿入で，上半分の原子は圧縮され，下半分の原子は引き伸ばされる．

## 1.4 バーガースベクトル

バーガースベクトルとは，原子の変位をあらわすベクトルであり，転位を特徴付ける重要な量である．転位というのはすべりを起こした領域の境界，または空格子点など板状に凝縮した領域の境界であることを述べた．滑りの場合にはすべり面の一方の物質を他方に対してすべり面に平行に変位させる．これに対して凝縮の場合には，凝縮面にほぼ垂直に変位させている．この両者を組み合わせることにより，結晶面に任意の面を考えて，片側の結晶を他方に対して格子ベクトル  $\mathbf{b}$  だけ変異させるように考えることによって転位を定義できる．実際，図 1.5 [a], [b], [c], [d] に示すように，結晶内の任意の方向に切れ目を入れて，一方の結晶を  $\mathbf{b}$  だけ変位させた場合を考えると，原子がちょうど重なるところとすき間とができる．すき間のところは原子を取り去ったものと同じものとなっている．したがって，原子の重なるところには空格子点を持ってきて原子を取り去り，すき間には格子間原子を流し込ませると，変位させた結晶は元と同じ結晶構造に戻り，切れ目は綺麗になくなる．変異のしわ寄せは境界のところにだけ残るのであるから，切れ目の方向がどのように変わっても，切れ目の境界が同じで，変位をあらわす格子ベクトル  $\mathbf{b}$  が同じならば，境界にしわ寄せされるひずみの模様もまた同じものとなる．この定義で変位をあらわすベクトル  $\mathbf{b}$  は転位を特徴付ける重要な量で，その重要性を最初に指摘した Burgers の名前をとってバーガースベクトルと呼ばれる [3]．



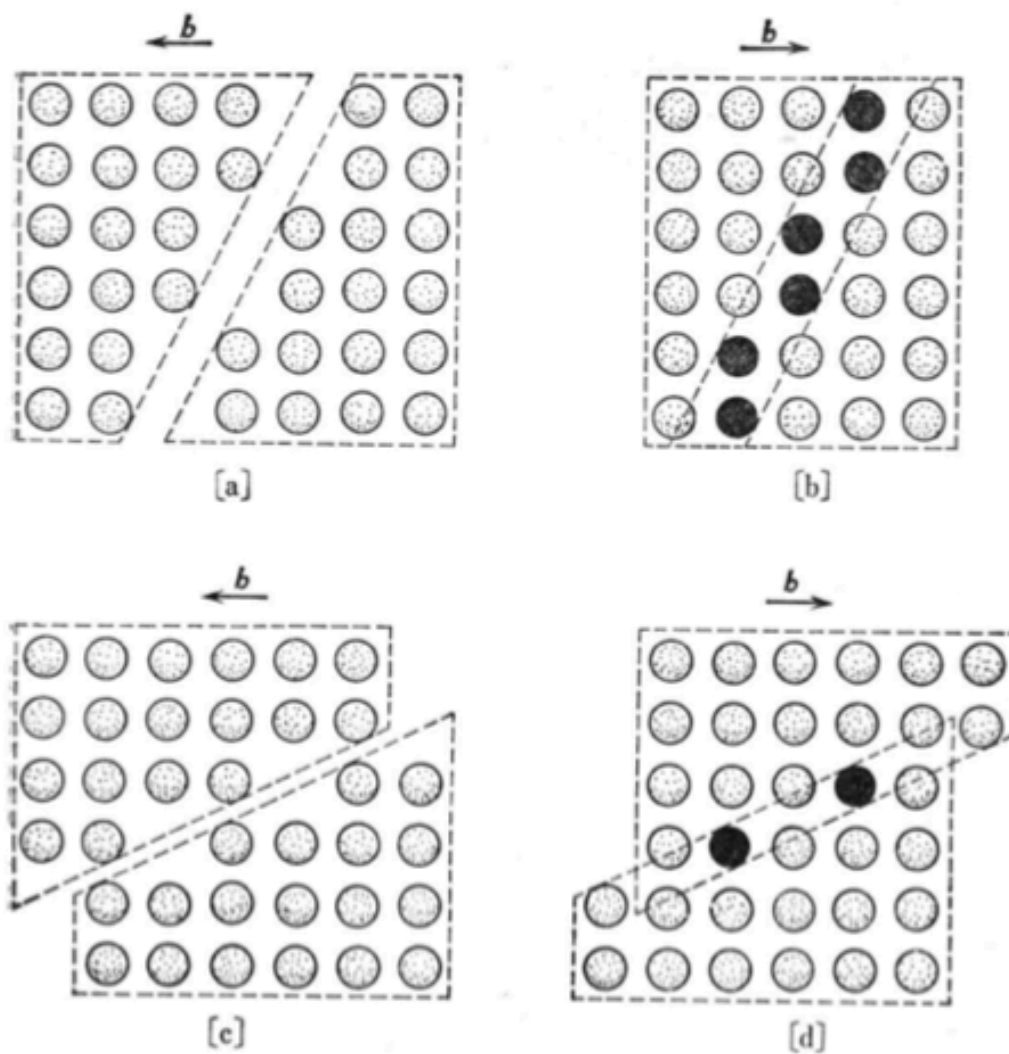


図 1.5: 結晶に任意の方向の切断面を入れ, 相対的に  $b$  だけ変位させた時の原子配列. [a], [c] のすき間には原子を詰めると完全な結晶となる. [b], [d] では黒丸の原子は, ちょうど2個重なっているので, 原子を取り去れば完全な結晶となる [3].

## 1.5 Read-Shockley の式による粒界エネルギーの算出

粒界を持つ物質は粒界を持たない物質に比べてエネルギーが高い状態にあり，そのエネルギーの差を粒界エネルギーと呼ぶ．粒界エネルギーは以下に示す，転位論に基づく Read-Shockley の式によって求まるとされている．回転角  $\theta$  の粒界における粒界エネルギー  $E$  は係数  $E_0$ ，定数  $A$  を用いた式によって

$$E = E_0\theta(A - \log \theta) \quad (1.1)$$

で求まるとされている．係数  $E_0$  は，剛性率  $\mu$ ，ポアソン比  $\nu$ ，バーガースベクトル  $\mathbf{b}$  を用いて

$$\frac{\mu \mathbf{b}}{4\pi(1 - \nu)} \quad (1.2)$$

と表すことが出来る．なお，定数  $A$  は転位の弾性場から導出される項

$$\log \left( \frac{\mathbf{b}}{2\pi r_0} \right) \quad (1.3)$$

と半径  $r_0$  の転位の芯のエネルギー

$$\frac{4\pi(1 - \nu)}{\mu \mathbf{b}^2} E_{(0, r_0)} \quad (1.4)$$

を用いて

$$A = 1 + \log \left( \frac{\mathbf{b}}{2\pi r_0} \right) + \frac{4\pi(1 - \nu)}{\mu \mathbf{b}^2} E_{(0, r_0)} \quad (1.5)$$

と表される．これらの式によって得られる小傾角粒界のエネルギーには，バーガースベクトルの大きさによって，大きな違いが現れる．1.6 節ではこの違いが生じる具体的な様子を記す．

## 1.6 粒界エネルギーの角度依存性

図 1.6 に示すように，Read-Shockley の式において，回転角  $0-30^\circ$  付近ではバーガースベクトル  $\mathbf{b} = a[001]$ ， $60-90^\circ$  付近では  $\mathbf{b} = (1/2)a[011]$  が幾何学的に転位に必要なずれである．このバーガースベクトルの大きさを上記の式 1.1 に適応すると， $0-30^\circ$  付近と  $60-90^\circ$  付近でエネルギーに  $\sqrt{2}$  倍の差が生じる [5]．そのため，エネルギーの角度依存性を比較した際に立ち上がりの傾きに違いが出ることが予測される．

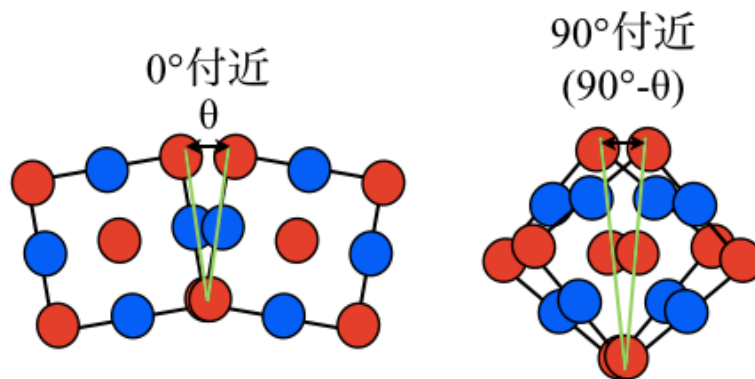


図 1.6: fcc における (100) 面での回転角  $0^\circ$  付近及び回転角  $90^\circ$  付近での小傾角粒界. 赤, 青はそれぞれの原子が同じ奥行きに位置することを示す.

また, Hasson らによる Morse ポテンシャルを用いた Al 結晶の粒界シミュレーションの結果は図 1.7 で示すように Read-Shockley の式を支持するものとなっている. [1] しかし近年, 大槻が行った粒界の持つ界面三重点における界面張力の釣り合いを用いた Al 結晶の粒界エネルギーの実験的観測の結果は図 1.8 に示すように角度  $0^\circ$  付近及び  $90^\circ$  付近に相当する立ち上がりの傾きが同じものであるという相違が生じた.

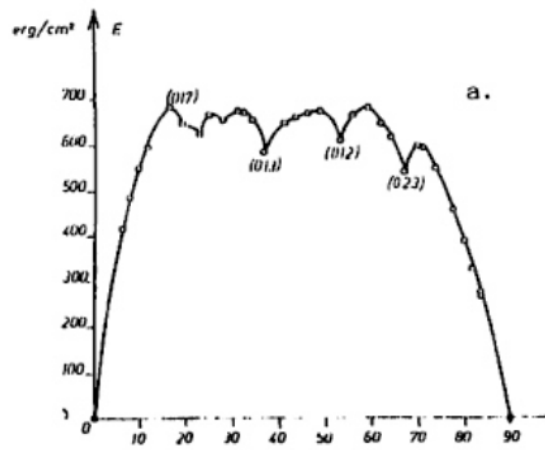


図 1.7: Hasson らのシミュレーションによる粒界エネルギーの角度依存性 [6]

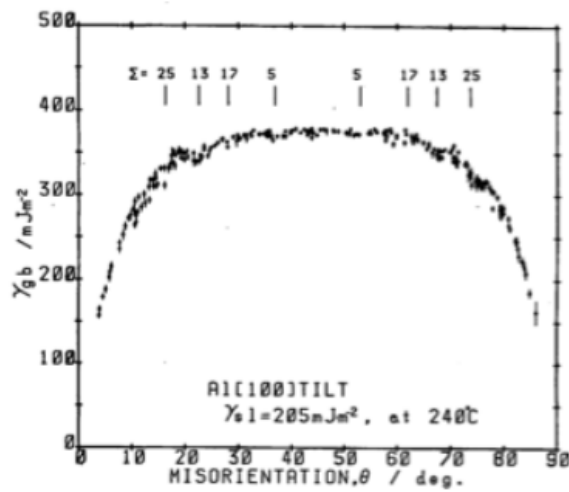


図 1.8: 大槻の実験による粒界エネルギーの角度依存性 [7].

本研究は、第一原理計算によるシミュレーションによって得られる結果が、Read-Shockleyの式と大槻らの実験結果のどちらを支持するものであるかを確認することを目的としている。

## 第2章 計算手法及び使用モデルの概要

本章では、第一原理計算の手法及び計算に使用した結晶モデルの作成方法について説明する。

### 2.1 VASP による第一原理計算

本研究では、第一原理計算によるシミュレーションで粒界エネルギーを求める必要がある。第一原理計算とは、量子力学を支配するシュレディンガー方程式を正確に解いて、原子の種類だけから電子構造を求め、様々な物性を予測する計算である。しかし、第一原理計算は非常に高い精度が要求される複雑なものである。本研究ではソフト VASP (Viana ab-initio Simulation Package) を用いて第一原理計算計算を行った。VASP は、密度汎関数法による平面波・擬ポテンシャル法を用いた第一原理計算プログラムパッケージである。擬ポテンシャル法は原子の内殻電子を除いた価電子だけを考慮する方法である。そのため、全電子を計算するフルポテンシャル法に比べ比較的高速な計算が可能となる。また、内殻電子は化学結合や物性に影響を与えることが少ないのため、擬ポテンシャル法であっても十分な精度で計算ができる。計算に用いる入力ファイルのうち、格子定数や各原子の座標など計算モデルのデータを保持するファイルを POSCAR、計算後の出力ファイルのうち構造緩和されたモデルのデータを POSCAR と同様の形式で出力したものを CONTCAR と呼ぶ。本研究では、これらの入出力ファイルを結晶構造視覚化ソフト VESTA を用いて視覚化することで、作成モデルの簡便な確認を行った。

### 2.2 Sutton Vitek の粒界モデル

本研究では、幾何学的に安定であると言われる Sutton Vitek が考案した粒界モデルを使用した [8].. 以下にその概要を示す。Sutton Vitek の粒界モデルは回転角をつけた 2 つの完全結晶と、その間に挟まれた buffer layer によって構成されたモデルを構造緩和することによって作成される。buffer layer の構造は、図 2.1 のようにモデルの上半分と下半分で  $x$  方向の原子の層が変化する形となる。

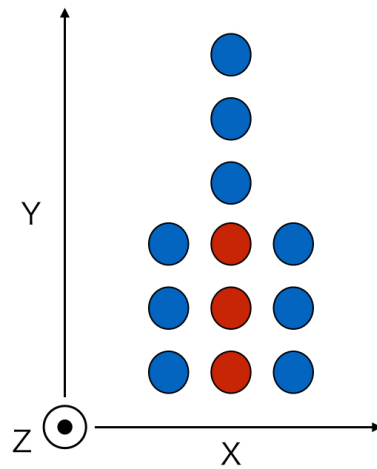


図 2.1: buffer layer の模式図. 赤と青はそれぞれの色の原子が  $z$  方向において同じ高さに位置することを示す.

図 2.2 は, Sutton Vitek が考案した, Al と同様に fcc 構造をとる Cu 結晶における回転角  $77.4^\circ$  の粒界モデルである. 図において赤い線で区切った範囲が 1 周期となっており, 黒い線に挟まれた中心部分が buffer layer である.  $+$ ,  $\triangle$  はそれぞれの原子が  $z$  方向において同じ高さに位置することを示している. 青い線で囲まれた部分のように, 原子の  $z$  方向の座標が変化する  $y$  軸方向の部分において, 原子の配位数が変化し転位が形成されている.

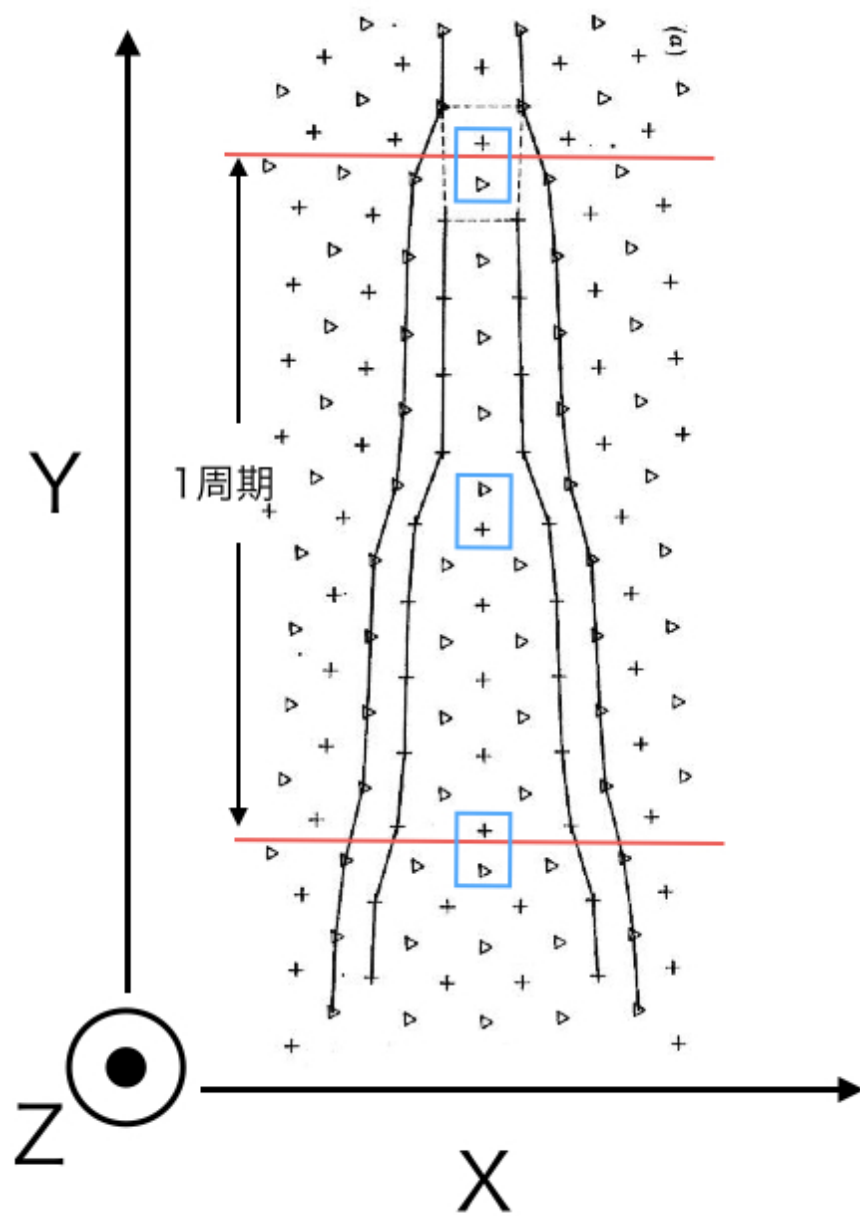


図 2.2: 回転角  $77.4^\circ$  における粒界モデル [8].

## 2.3 モデル作成の補足

本研究では、図 2.2 を参考に複数の回転角の粒界モデルを考案、POSCAR を作成した。以下にモデル作成の際に注意する必要のあった点を記述する。

### 2.3.1 周期的境界条件

VASP での計算に使用するファイルは周期的境界条件を満たしている必要がある。周期的境界条件とは結晶モデルにおいて、モデルの端が反対側とつながっていると仮定することである。

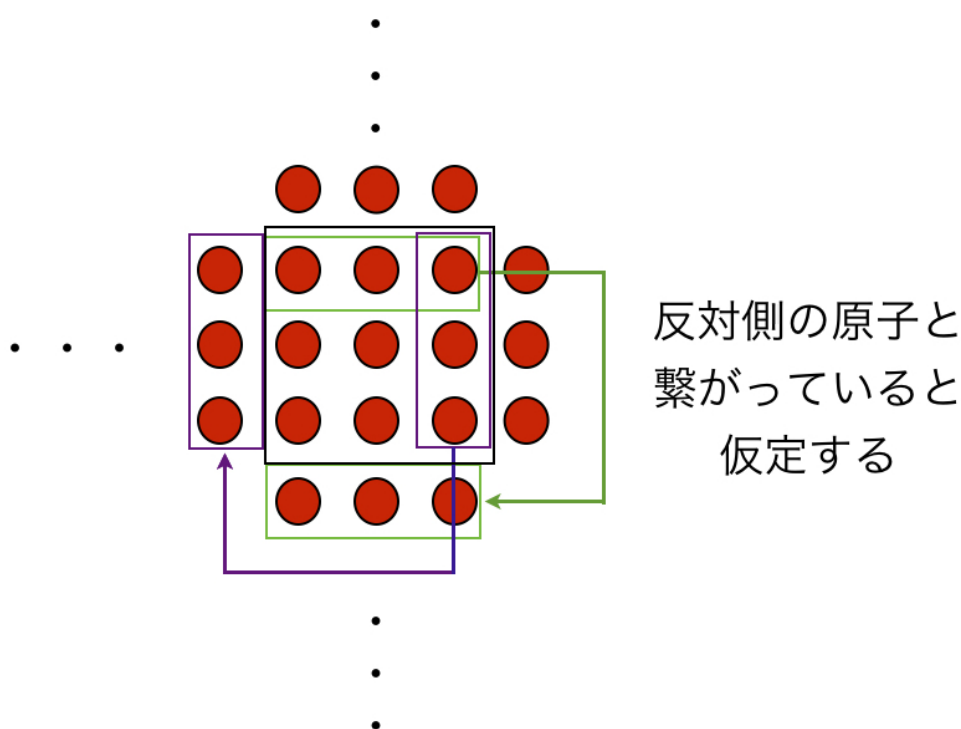


図 2.3: 周期的境界条件のイメージ図.

2つの完全結晶とその間の原子で構成された簡易な小傾角粒界モデルを例に、粒界モデルにおける周期的境界条件の例を示す。図 2.4 は簡易な粒界モデルの端に更に原子を加えたモデルを x 方向に 2 つ並べたものである。図中の青い線で示したように、モデルの端を中心として、y 方向に反転した粒界モデルが形成され、上下左右に対称なモデルとなる。このように、本研究で作成するモデルは、x 軸方向の周期的境界条件を満たすために両端にも buffer layer を配置する必要がある。



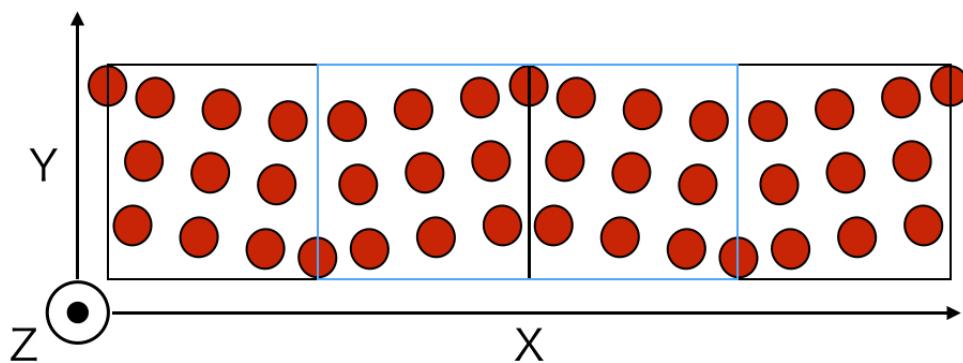


図 2.4: 簡易な粒界モデルに原子を 1 つ加え, x 軸方向に拡張した場合のイメージ図.

### 2.3.2 粒界モデルの回転角

本研究において, 粒界モデルの回転角は  $\arctan(1/n)$  を用いて決定する. 図 2.5 に示すように,  $\theta = \arctan(1/n)$  のとき,  $\tan \theta = 1/n$  となる. よって  $0^\circ$  付近の粒界モデルにおいては, 完全結晶部分の y 方向の原子数を  $n$  と取ることによって, 図 2.6 に示すように隣接モデル間の完全結晶が直線に並ぶようになる. なお,  $90^\circ$  付近においては, (011) 面に粒界が形成されるため,  $90^\circ$  から  $\theta$  を引いたものが, 粒界の回転角となる.

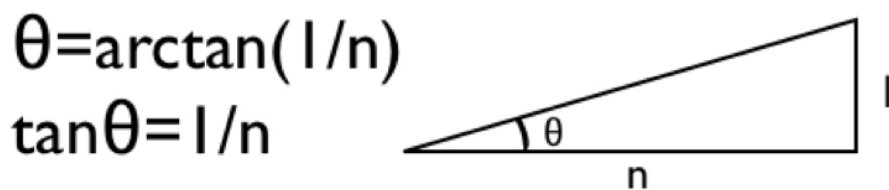


図 2.5:  $\theta = \arctan(1/n)$  のとき,  $\tan \theta = 1/n$ [9].

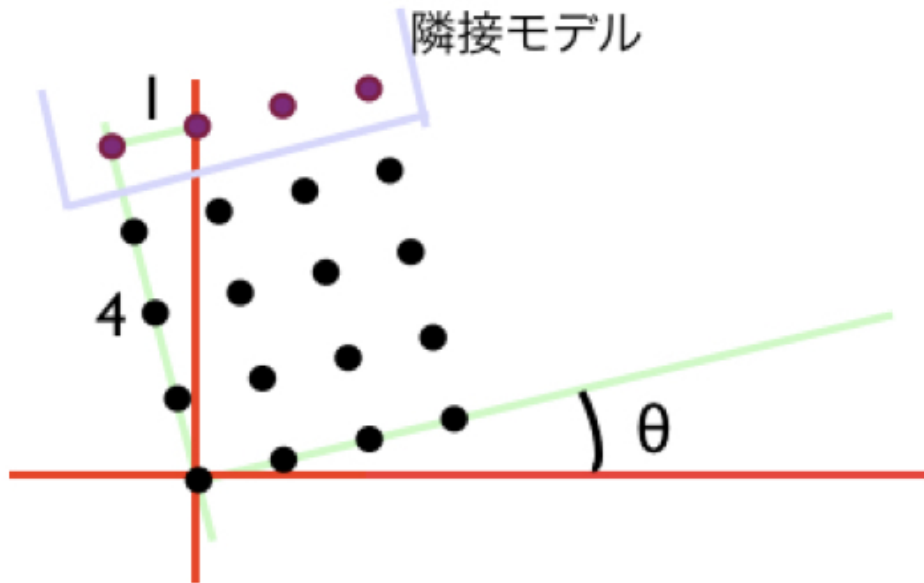


図 2.6: 回転角  $\theta = \arctan(1/4)$  で原点を軸に回転した完全結晶モデルのイメージ図 [9].

### 2.3.3 作成モデルの確認

VASP を用いた第一原理計算の所要時間は計算モデルの原子数に大きく影響され、200 原子を超えるモデルを用いる場合は2週間以上の計算時間を要する。本研究において用いた粒界モデルは、回転角が  $0^\circ$  付近及び  $90^\circ$  付近に近づくにつれ原子数が大幅に増加するため、 $\theta = \arctan(1/15)$  を超える粒界モデルの計算は困難である。

また、モデルの計算結果が意図したものとなっているかを確認する際、常に最終的な計算結果を待つことも難しいため、計算の途中経過を確認することによってその妥当性を判断する必要がある。以下にその手法を示す。

VASP による構造緩和はモデルが安定となる原子配置を求めた後、それに合わせて格子を調整するという過程を繰り返すことによって行われる。出力ファイルの一種である CONTCAR はこの過程ごとに更新されるため、計算途中のモデルであっても VESTA を用いた視覚化によって意図した構造に近づいているかを確認することが可能である。

また、緩和の過程毎のモデルが持つエネルギーは出力ファイル OUTCAR に free energy TOTEN としてすべて出力される。構造緩和が正しく行われている場合、モデルの持つエネルギーは緩和が進むごとにより最も安定な値に漸近する。よってこの free energy TOTEN の推移を確認することによってモデルの緩和が正しく行われているか確認することが可能である。

## 第3章 粒界モデルの計算結果

### 3.1 90° 付近の粒界モデル

#### 3.1.1 Sutton の論文を参考にした粒界モデル

はじめに, Sutton Vitek の粒界モデルを再現した回転角  $77.4^\circ$  の粒界モデル図 3.1[a] を作成した. また, これを元に 1 周期あたりの buffer layer の長さを変え,  $79.6^\circ$  及び  $81.2^\circ$  の回転角を付け粒界モデルを作成した. この図では赤い線で囲まれた部分が完全結晶, 緑の線で囲まれた部分が buffer layer である. VASP を用いてこれらの粒界モデルの構造緩和及びモデルの持つエネルギーの計算を行ったところ, 図 3.1[b] に示す構造に緩和された. 図中の青い線で囲った部分において図 2.2 と同様原子の配位数が完全結晶部分と比べ減少し転位が形成されていることが確認できる.

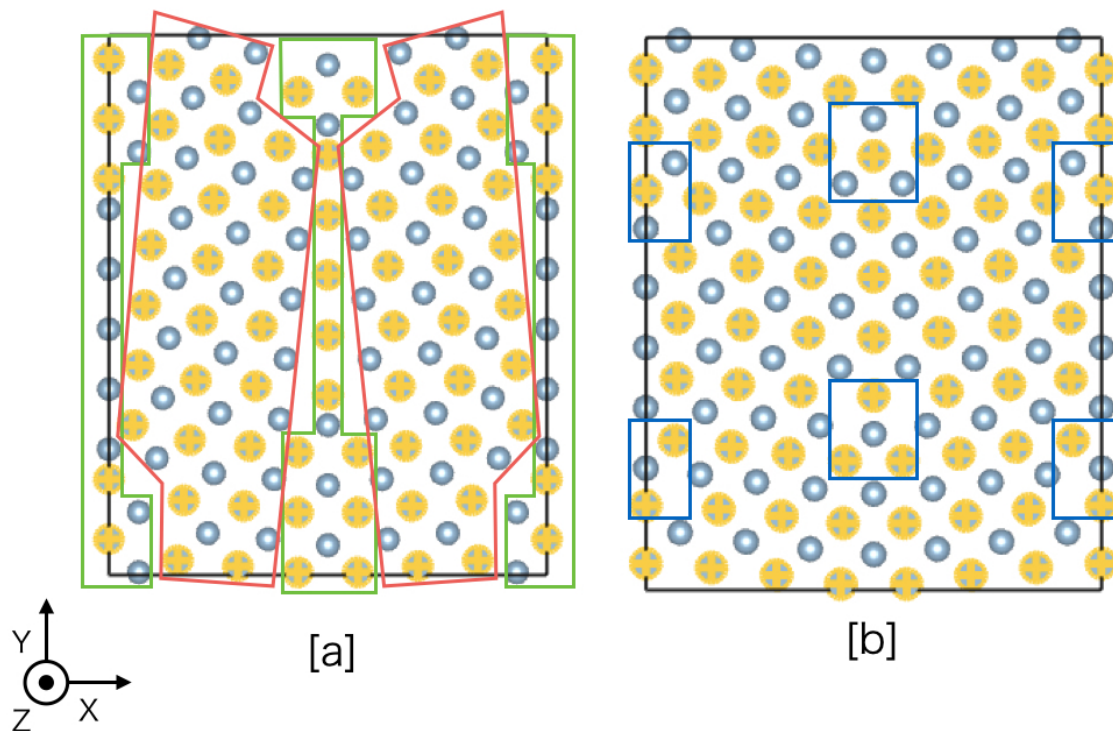


図 3.1: 作成した回転角  $77.4^\circ$  における粒界モデルの [a] 構造緩和前, [b] 構造緩和後をそれぞれ VESTA によって視覚化したもの.

本小節で提案した粒界モデルの原子1つあたりがもつエネルギーを求めたところ、-6.0eVより低い値となった。最安定構造のAl結晶において原子1つあたりの持つエネルギーは-3.7eVであり、粒界モデルのエネルギーは最安定構造モデルのエネルギーと比べ高くなる。よって、本節で作成したモデルはこの条件を満たしておらず、適切な粒界モデルを作成できていない。このような結果となった原因として、モデル内の原子の重なりが考えられる。検証のため本小節で作成したPOSCARの原子数とVESTAにより視覚化されたモデルの原子数を比較したところ、後者の原子数が減少していることが分かった。更なる検証として各粒界モデルのPOSCARの原子座標を確認したところ、ほぼ同一の座標に位置する原子が複数個確認された。そこで図3.2に示すように、同一の座標に複数の原子が配置されたモデルを作成、エネルギー計算を行ったところ、極端に低いエネルギーが出力された。図3.2右側に示したPOSCARでは各原子座標は0~1.0に規格化されるため、1を超える座標は少数点以上を0として扱われる。故に赤い線で囲まれた原子が同一の座標に存在することになる。また、緑の線で囲われた部位は周期的境界条件により表示されたものである。

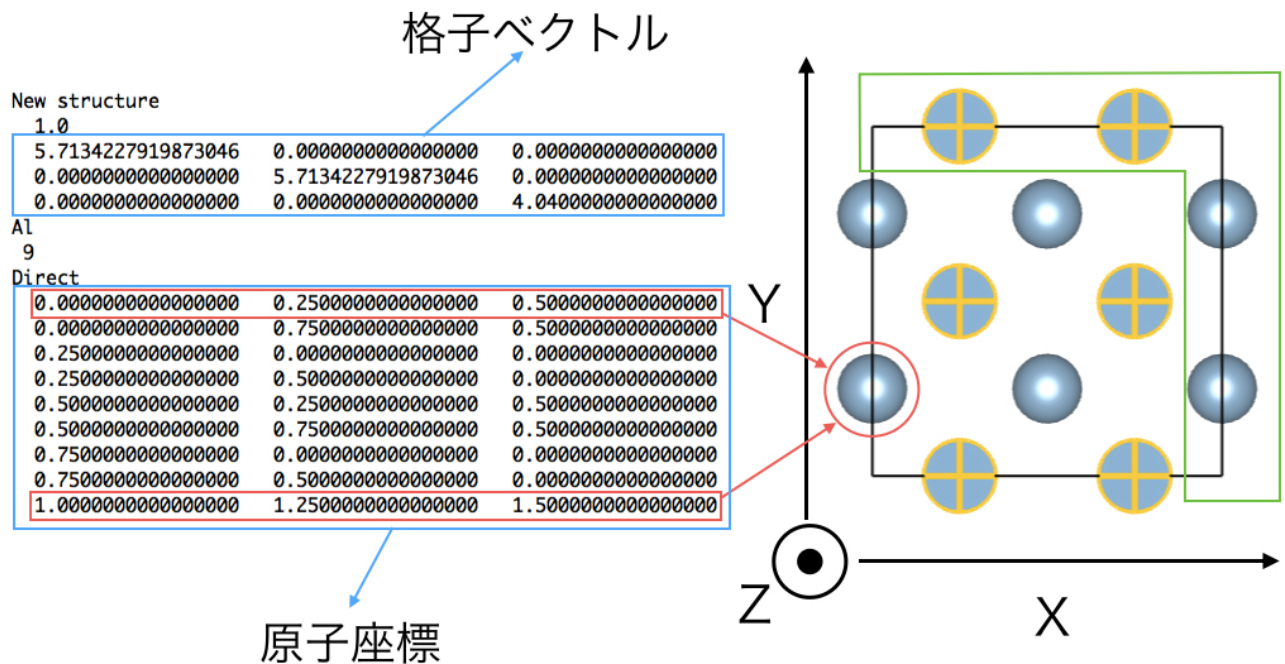


図 3.2: 原子が同じ座標に2つ存在するPOSCAR及びそれを視覚化したもの。赤い線で囲った原子が同じ座標に存在している。

こうした問題を解決するため、粒界モデルの作成プログラムに各原子毎の原子間距離を求め、それを元に原子間距離が極端に短くなった原子を削除するコードを実装した。

### 3.1.2 原子座標の重なりを解消した粒界モデル

3.1.1 小節で述べた問題点を解消した粒界モデルを複数の回転角で作成し、再び VASP による構造緩和を行ったところ、図 3.1[b] と同じ構造となった。また、これらのモデルが持つエネルギーは最安定構造モデルが持つエネルギーより高いものとなった。VASP による計算結果を元に単位面積当たりの粒界エネルギーを求め、縦軸に粒界エネルギー、横軸に回転角を取った角度依存性を図 3.3 に示した。この結果を図 1.7 及び 1.8 と比較すると、結晶の回転角が  $90^\circ$  に近づくにつれて粒界エネルギーが小さくなるという傾向を満たしていないことが確認できる。

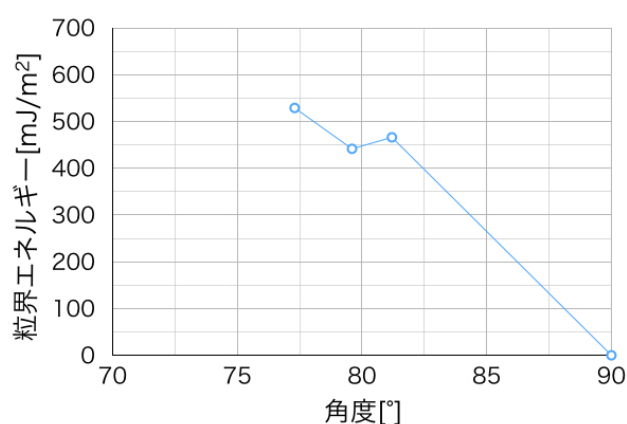


図 3.3: Sutton の論文を元に作成した粒界モデルの  $90^\circ$  付近の角度依存性のグラフ。

この相違から、今回提案したモデルは Hasson らによる先行研究との比較には不適切であると考えられる。

### 3.1.3 $90^\circ$ モデルの構造の見直し

3.1.2 小節で作成したモデルが先行研究と異なる傾向を示した理由として、端の buffer layer を正確に配置できておらず、Sutton Vitek の粒界モデルを幾何学的に再現出来ていないことが示唆される。この問題を解決するため、図 3.4 のように、完全結晶部分を長方形に簡略化し、また、buffer layer の始点を調整することによって 1 周期をわかりやすくしたモデルを、 $77.4^\circ$ 、 $79.6^\circ$ 、 $81.2^\circ$  の回転角で作成した。図 3.4 において赤い線で囲まれた部分が完全結晶部分、緑の線で囲まれた部分が buffer layer である。

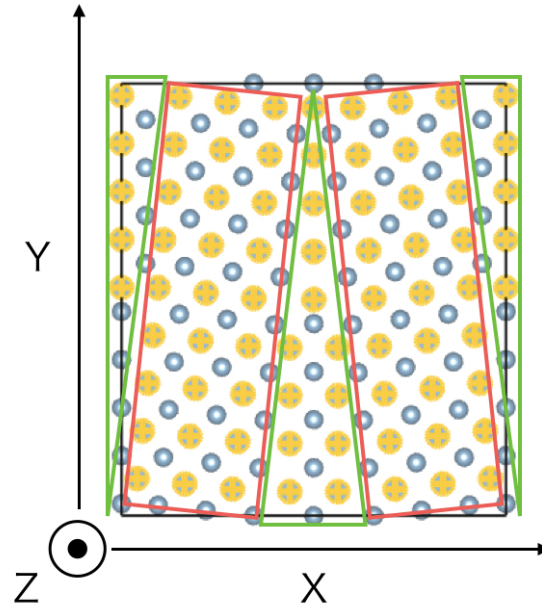


図 3.4: 完全結晶部分を簡略化し，buffer layer の始点を変更した回転角  $77.4^\circ$  の粒界モデル。

VASP によりこれらのモデルを構造緩和し，ユニットセルを x 方向と y 方向に 2 倍拡張したところ，図 3.5 のような形となった．図 3.1[b] とほぼ同一の転位が形成されていることがわかる．

また，緩和後のモデルの粒界エネルギーの角度依存性は，図 3.6 のようになった．図 1.7 及び図 1.8 と同様に，回転角が  $90^\circ$  に近づくにつれ粒界エネルギーが小さくなる傾向をとっていることが確認できる．よって，今回提案した粒界モデルは，先行研究との比較に適していると考えられる．



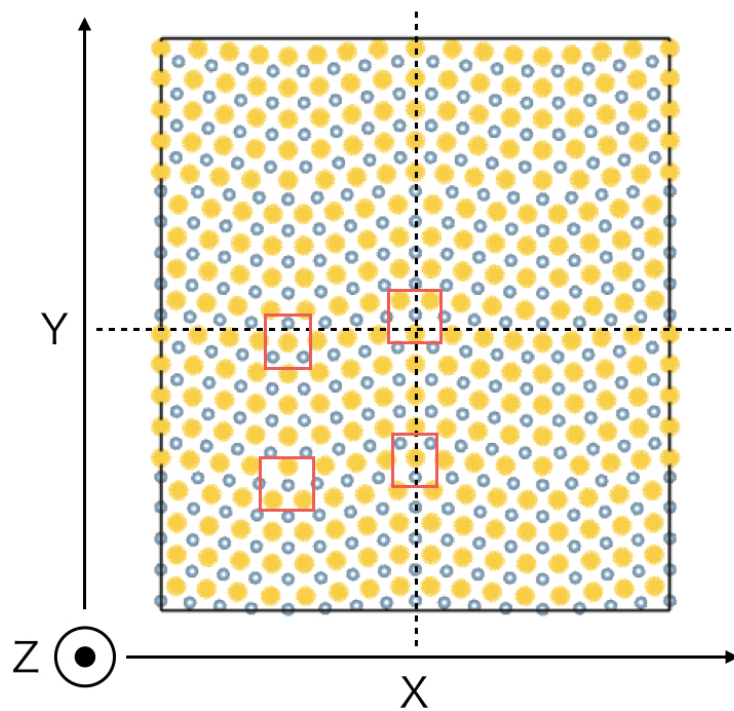


図 3.5: 図 3.4 を構造緩和し,  $2 \times 2 \times 1$  に拡張したモデル. ユニットセル間の境目においても転位が形成されていることが確認できる.

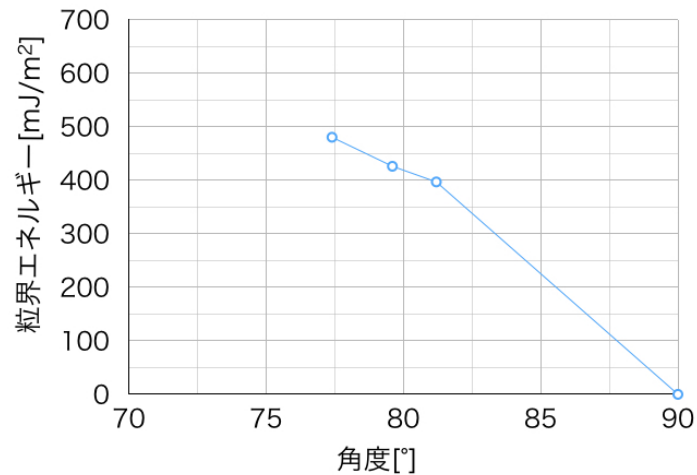


図 3.6: 本小節で提案した粒界モデルの  $90^\circ$  付近の角度依存性のグラフ.

## 3.2 $0^\circ$ 付近の粒界モデル

Sutton Vitek の論文には  $0^\circ$  付近の回転角における小傾角粒界のモデルは記載されていない. そのため, 新たにモデルを考案した.

### 3.2.1 Sutton Vitek の粒界モデルを参考にした粒界モデル

$90^\circ$  付近において, 粒界は (011) 面に形成される. 一方で  $0^\circ$  付近において, 粒界は (001) 面に形成されるため,  $0^\circ$  付近の粒界モデルは  $90^\circ$  付近の粒界モデルと異なる構造をとる. 本小節では, 3.1.3 小節で考案した粒界モデルの構造を, (001) 面に置き換えることで,  $0^\circ$  付近の粒界モデルを回転角  $8.8^\circ$ ,  $10.4^\circ$  および  $12.6^\circ$  で作成した.

図 3.7[a] は 3.1.3 小節の粒界モデルを元に新たに考案した  $0^\circ$  付近の粒界モデル, 図 3.7[b] は VASP を用いてこれを構造緩和した粒界モデルである. 図中の赤線で囲った範囲は, 完全結晶部分と比較して原子の配位数が変化し, 転位が形成されていることが確認できる.



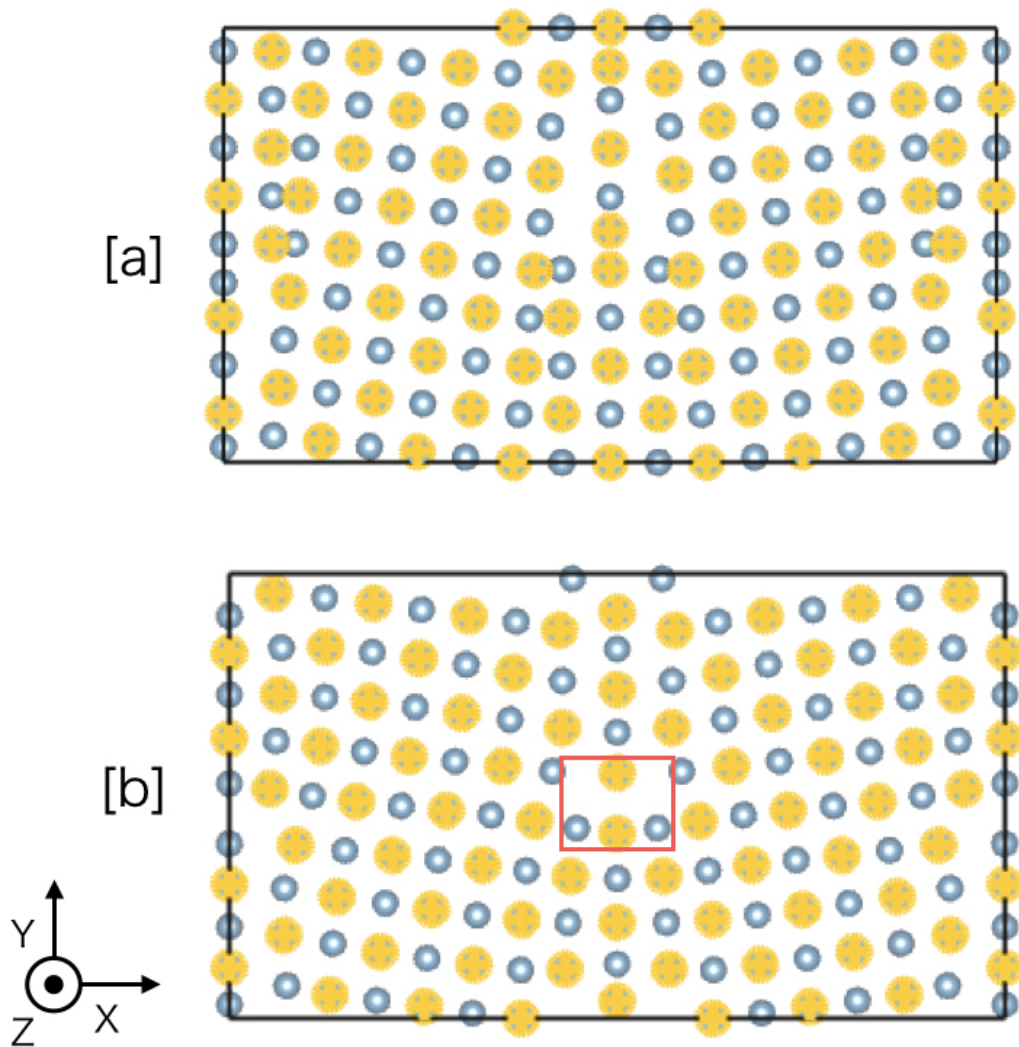


図 3.7: 回転角  $12.6^\circ$  における粒界モデルの [a] 構造緩和前, [b] 構造緩和後をそれぞれ VESTA によって視覚化したもの.

また, 3.1.2 小節及び 3.1.3 小節と同様に構造緩和後のモデルにおける粒界エネルギーの角度依存性を求めた結果が図 3.8 である. 回転角が  $0^\circ$  に近づくにつれ粒界エネルギーが減少していることが確認できる. しかしながら, 本節で考案した粒界モデルの単位面積あたりの粒界エネルギーは  $1000 \sim 1200 [\text{mJ}/\text{m}^2]$  先行研究の結果である図 3.6, 図 1.7 及び図 1.8 に示された単位面積あたりの粒界エネルギーと比較して非常に高い粒界エネルギーを持つことがわかる. この結果は,  $0^\circ$  付近において, 図 3.7 で示したものよりも安定な結晶構造を持つ粒界モデルが存在することを示唆している.

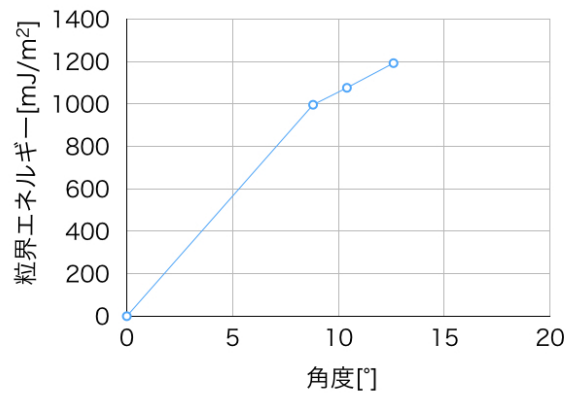


図 3.8: 本小節で考案した粒界モデルの角度依存性のグラフ.

### 3.2.2 簡易な構造の粒界モデルの安定構造を元にした粒界モデル

3.2.1 小節に示した手法では, Sutton Vitek が考案した  $90^\circ$  付近の粒界モデルを  $0^\circ$  付近で再現することができなかった. そのため, より低い粒界エネルギーを持つ粒界モデルを考察する必要がある.

#### 簡易な構造を持つ粒界モデル

図 3.9 は, 西谷研究室岩倉が考案した簡易な構造をもつ小傾角粒界のモデルを元に, 周期的境界条件を満たすよう新たに作成した回転角  $12.6^\circ$  の粒界モデルである [9]. 簡易な構造を持つ粒界モデルは回転角を付けた 2 つの完全結晶とそれらに挟まれた原子によって構成されている.

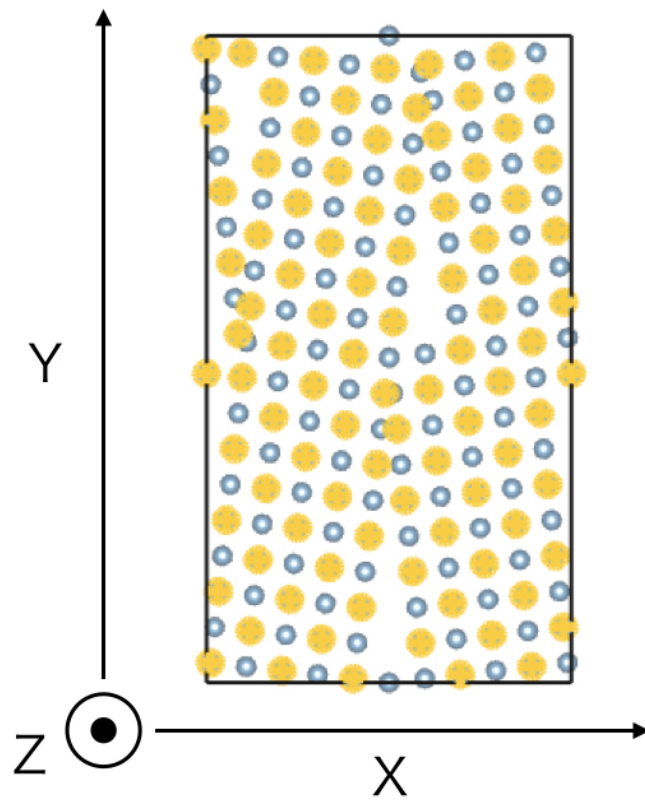


図 3.9: 12.6°を元にした回転角 12.6° の粒界モデル.

このモデルを VASP を用いて構造緩和したところ、図 3.10 のような構造となった。完全結晶間の隙間を埋めるように原子が移動し、モデルの中心が buffer layer に近い構造をとっていることが確認できる。また、このモデルの単位面積あたりの粒界エネルギーを求めたところ、 $538.4[\text{mJ}/\text{m}^2]$  となり、3.2.1 小節で作成した同回転角のモデルのものと比べ大幅に低くなっており、より安定な構造であることが確認できる。

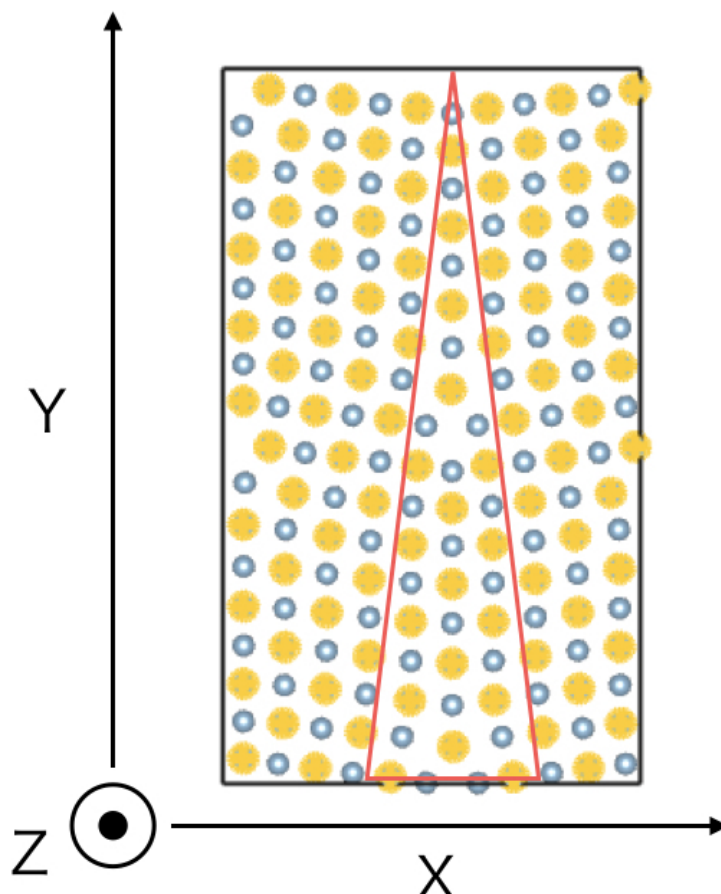


図 3.10: 3.9 を構造緩和したモデル。赤線で囲った部分が buffer layer に近い構造になっている。

### buffer layer を変更したモデル

3.2.2 小節の計算結果を参考に、より安定な構造をもつ  $0^\circ$  付近の粒界モデルを再考する。図 3.10 のモデルの中心部分を buffer layer と仮定し、同様の buffer layer を実現するために、新たに図 3.11[a] に示す構造の粒界モデルを  $8.8^\circ$ 、 $10.4^\circ$ 、 $12.6^\circ$  の回転角で作成し、VASP による緩和計算を行った。これらのモデルは図 3.7[a] に示した構造のモデルの粒界部分から一部原子を取り除いたものである。

図 3.11[b] は図 3.11[a] を VASP により構造緩和したモデルである。中央の buffer layer の構造が図 3.10 の中央に近い構造となっていること、本図赤線で囲った部分において原子の配位数が変化し粒界が形成されていることが確認できる。また、図 3.12 はこれらのモデルの角度依存性である。単位面積あたりの粒界エネルギーが  $530 \sim 640 [\text{mJ}/\text{m}^2]$  となり、本節で考案したモデルが 3.2.2 小節で作成したモデルと比べより安定した構造であり、より先行研究との比較に適した結果であると考えられる。

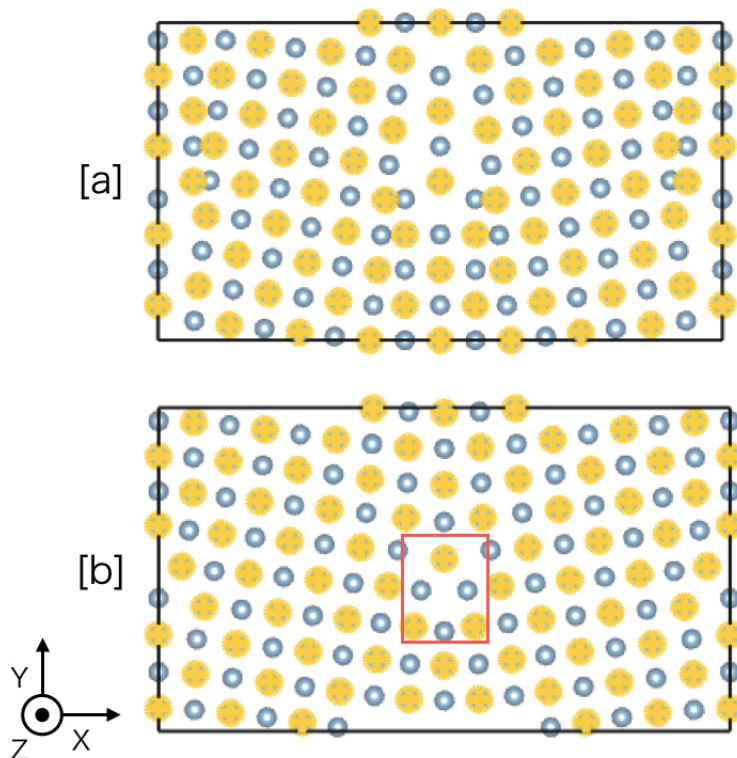


図 3.11: [a] 新たな buffer layer を採用した粒界モデル。図 3.7[a] に示したモデルの粒界部分の原子を一部削除している。[b][a] を構造緩和したモデル。

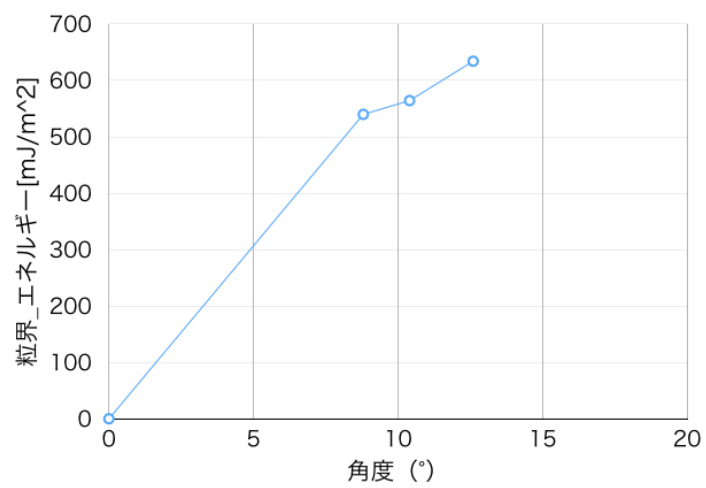


図 3.12: 本節で考案した粒界モデルの角度依存性のグラフ.



## 第4章 検証結果と今後

### 4.0.3 作成モデルの幾何学的相違

3.1.2小節で作成したモデル及び3.1.3小節において考案した粒界モデルは、ともに類似した転位を形成しているが粒界エネルギーの角度依存性は異なる結果をとった。本節ではこのモデルの幾何学的な相違から、この原因を解明する。図4.1[a]は図3.1[b]をx方向とy方向に2倍拡張したモデル、4.1は[b]図3.5[b]と同一のモデルである。完全結晶部分を赤い線で、buffer layer部分を緑の線で囲み、各モデルの構造の差異を明確にしている。図4.1[a]はモデル中心と両端のbuffer layerが同じ高さに位置しておらず、青い線で囲まれた範囲に余分な原子が挿入されている。よって、3.1.2小節で考案したモデルはSutton Vitekの粒界モデルを幾何学的に再現出来ておらず、粒界エネルギーの角度依存性にも影響を与えたと示唆される。

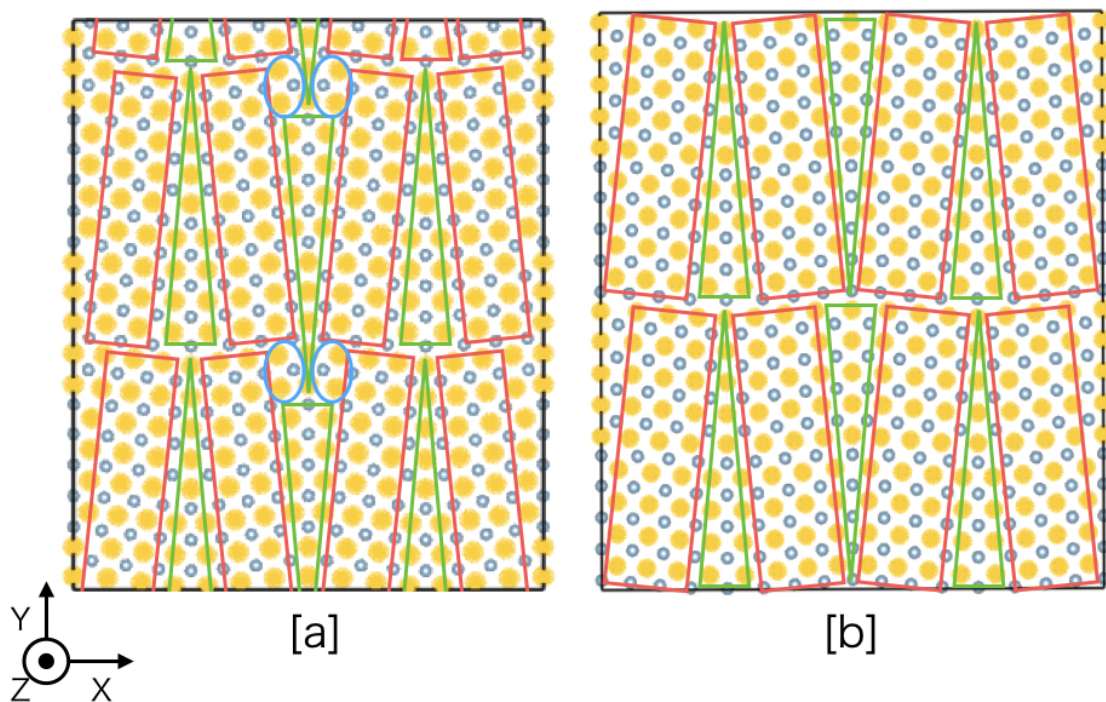


図 4.1: [a] 図 3.1[b] を  $2 \times 2 \times 1$  に拡張したモデル。 [b] 図 3.5[b] と同一のモデル。

## 4.1 角度依存性の検証

### 4.1.1 小傾角粒界の角度依存性

3.1.3 小節及び 3.2.2 小節より， $90^\circ$  付近， $0^\circ$  付近双方において，Hasson らによる先行研究に近いエネルギーを持つ粒界モデルを作成することができた．図 4.2 は本研究における最終的な粒界エネルギーの角度依存性である．

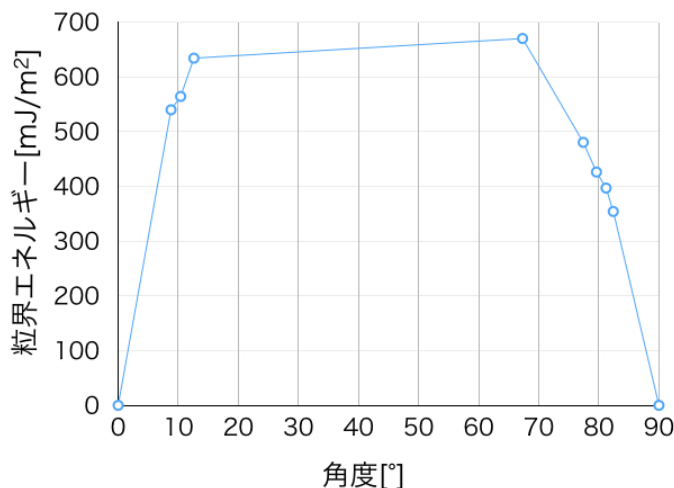


図 4.2: VASP による粒界エネルギーの角度依存性.

このグラフを図 1.7 及び図 1.8 と比較したところ，図 1.7 同様に， $0^\circ$  付近と  $90^\circ$  付近の立ち上がりの傾きが異なっていることが確認できる．4.1.2 節では，本研究で得られた第一原理計算による検証結果と Hasson らによるシミュレーション結果を更に詳しく比較する．

### 4.1.2 $\log$ を用いた検証

1.5 節において，粒界エネルギーは式 (1.1) で求まることを示した．この式は，両辺を回転角  $\theta$  で割ることで

$$\frac{E}{\theta} = E_0 A - E_0 \log \theta \quad (4.1)$$

となる．1.5 節で示したように定数  $E_0$  及び  $A$  は回転角  $\theta$  を用いておらず，式 (4.1) は  $\frac{E}{\theta}$  に関する  $\log \theta$  の 1 次関数とみなすことができる．

図 4.3 は，Hasson らによる粒界エネルギーのシミュレーション結果及び VASP による計算結果を上記の式 (4.1) に当てはめ，グラフ化したものである．この図より，VASP を用いた第一原理計算によるシミュレーション結果が Hasson らによるシミュレーション結果に類似したものとなっていることが確認できる．

本研究の結果より第一原理計算によるシミュレーションの結果は  $0^\circ$  付近及び  $90^\circ$  付近の立ち上がりの傾きが異なることが示された．この結果より，第一原理計算による粒界エ



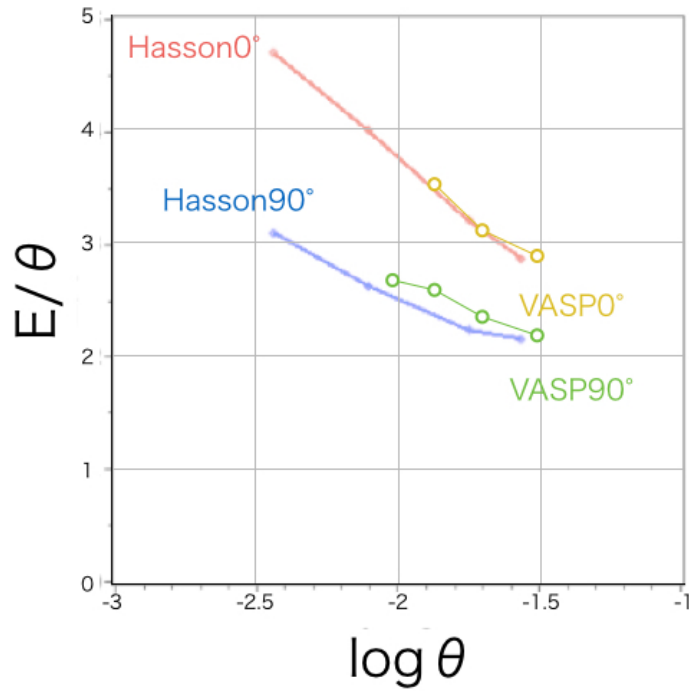


図 4.3: Hasson らによるシミュレーション結果及び VASP による計算結果を  $\log$  を用いてグラフ化したもの。

エネルギーの計算にもバーガースベクトルの差が影響していることが推察される。しかし一方で、本研究の結果においても、大槻が行った実験的観測の結果との相違が生じている。この相違の原因の一つとして、大槻の実験で用いられた粒界モデルと本研究で使用了粒界モデルの構造が異なるものであることが推察される。本研究により求めた単位面積あたりの粒界エネルギーは  $90^\circ$  付近に対して  $0^\circ$  付近のエネルギーが高くなっている。対して大槻の実験結果では、 $0^\circ$  付近及び  $90^\circ$  付近の単位面積あたりの粒界エネルギーは共により安定な値をとっており、本研究で用いた粒界モデルよりも安定な構造を持つ粒界モデルの存在が示唆される。

## 4.2 今後の課題

今後の課題として、より安定な構造を持つ粒界モデルの考案及びそれらを用いた粒界エネルギーの角度依存性の検証がある。Sutton は自身の論文において、粒界モデルのうち、最も高いエネルギーを持つ原子を取り除き、再度構造緩和を行うことによってより安定した構造を持つ粒界モデルを作成する手法を提案している [10]。本研究で作成した粒界モデルにこの手法を適応することで、より安定な構造を持つ粒界モデルを作成可能であると考えられる。

## 第5章 総括

小傾角粒界エネルギーの粒界エネルギー  $E$  は回転角  $\theta$ ，係数  $E_0$ ，定数  $A$  を用いた Read-Shockley の式

$$E = E_0\theta(A - \log \theta) \quad (5.1)$$

により求まるとされている．この式より小傾角粒界の角度依存性における  $0^\circ$  付近及び  $90^\circ$  付近の立ち上がりの傾きは異なることが予想される．しかし大槻が行った実験的観測の結果は， $0^\circ$  付近の回転角及び  $90^\circ$  付近の回転角に相当する立ち上がりの傾きが同じであるという相違が生じている．本研究では，粒界エネルギーの角度依存性について Read-Shockley の式を支持する Hasson らのシミュレーション結果と大槻による実験結果との相違の解明の一環として，第一原理計算によるシミュレーションにより粒界モデルの持つ粒界エネルギーを求め，その角度依存性を検証した．第一原理計算には VASP を用い，また，粒界モデルは Sutton Vitek が考案したモデルを使用した．

粒界モデルを作成する過程で，VASP の入力ファイルに複数の原子が同じ座標に存在する場合，算出されるエネルギーが実際の粒界モデルのものと比べ極端に低いものとなることが判明した．粒界モデルのエネルギーは最安定構造モデルのエネルギーがより高くなるという条件を満たす必要がある．

作成した粒界モデルを用いて，第一原理計算による粒界エネルギーの角度依存性を求めた．また，Read-Shockley の式は両辺を角度  $\theta$  で割ることにより  $\frac{E}{\theta}$  に関する 1 次関数の式

$$\frac{E}{\theta} = E_0A - E_0 \log \theta \quad (5.2)$$

に変形できる．この式を元に本研究で得られた粒界エネルギーの立ち上がりの傾きを 1 次関数化し，検証をおこなった．結果として VASP を用いた第一原理計算によるシミュレーション結果は Hasson らによるシミュレーションに類似した傾向を示すことが確認された．一方で大槻の実験結果との相違も確認された．この原因として，本研究で使用したモデルより安定した構造を持つ粒界モデルが存在することが考えられる．より安定な構造を持つ粒界モデルの考案が今後の課題のひとつである．

# 謝辞

本研究を遂行するにあたって、終始多大なる有益なご指導、ご鞭撻、及び助言を賜りました関西学院大学理工学部 情報科学科 西谷滋人教授に深謝致します。また、本研究の進行に伴い、様々な助力、知識の供給を頂きました、西谷研究室の同輩、先輩方に、この場を借りて心から感謝の意を示します。本当にありがとうございました。

## 第6章 付録

本研究で作成した粒界モデルの POSCAR を掲載する.

### 6.1 3.1.1 小節で作成した粒界モデル

#### 6.1.1 回転角 $77.4^\circ$ ( $\arctan(1/9)$ )

New structure

1.0

20.8539931907536662	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	25.7104025639428713	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	4.0400000000000000

136

Direct

0.5000000000000000	0.0555555555555556	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.1666666666666667	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.2777777777777778	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.0055555555555556	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.1166666666666667	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.2277777777777778	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.3333333333333333	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.4444444444444444	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.5555555555555556	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.6666666666666667	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.7777777777777778	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.8333333333333333	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.9444444444444444	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.8944444444444444	0.0000000000000000
0.5684931506849316	1.0055555555555556	0.0000000000000000
0.6369863013698630	0.0666666666666667	0.5000000000000000
0.6232876712328766	0.1777777777777778	0.5000000000000000
0.6095890410958904	0.2888888888888889	0.5000000000000000
0.5958904109589040	0.4000000000000000	0.5000000000000000
0.5821917808219178	0.5111111111111111	0.5000000000000000

0.5684931506849316	0.622222222222221	0.5000000000000000
0.5547945205479452	0.7333333333333333	0.5000000000000000
0.7054794520547945	0.0166666666666667	0.0000000000000000
0.6917808219178082	0.1277777777777778	0.0000000000000000
0.6780821917808220	0.2388888888888889	0.0000000000000000
0.6643835616438356	0.3500000000000000	0.0000000000000000
0.6506849315068494	0.4611111111111111	0.0000000000000000
0.6369863013698630	0.5722222222222222	0.0000000000000000
0.6232876712328766	0.6833333333333333	0.0000000000000000
0.6095890410958904	0.7944444444444443	0.0000000000000000
0.7739726027397260	0.0777777777777778	0.5000000000000000
0.7602739726027397	0.1888888888888889	0.5000000000000000
0.7465753424657534	0.3000000000000000	0.5000000000000000
0.7328767123287671	0.4111111111111111	0.5000000000000000
0.7191780821917808	0.5222222222222221	0.5000000000000000
0.7054794520547945	0.6333333333333333	0.5000000000000000
0.6917808219178082	0.7444444444444445	0.5000000000000000
0.6780821917808219	0.8555555555555554	0.5000000000000000
0.6643835616438356	0.9666666666666666	0.5000000000000000
0.8424657534246573	0.0277777777777778	0.0000000000000000
0.8287671232876711	0.1388888888888889	0.0000000000000000
0.8150684931506849	0.2500000000000000	0.0000000000000000
0.8013698630136986	0.3611111111111111	0.0000000000000000
0.7876712328767123	0.4722222222222222	0.0000000000000000
0.7739726027397260	0.5833333333333333	0.0000000000000000
0.7602739726027397	0.6944444444444444	0.0000000000000000
0.7465753424657534	0.8055555555555554	0.0000000000000000
0.7328767123287671	0.9166666666666665	0.0000000000000000
0.9315068493150684	1.0055555555555555	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.8944444444444445	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.7833333333333333	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.1166666666666667	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.0055555555555555	0.5000000000000000
0.8630136986301370	0.9444444444444444	0.0000000000000000
0.8767123287671232	0.8333333333333333	0.0000000000000000
0.8904109589041097	0.7222222222222222	0.0000000000000000
0.9041095890410960	0.6111111111111110	0.0000000000000000
0.9178082191780822	0.5000000000000000	0.0000000000000000
0.9315068493150684	0.3888888888888889	0.0000000000000000
0.9452054794520548	0.2777777777777777	0.0000000000000000
0.7945205479452054	0.9944444444444444	0.5000000000000000

0.8082191780821917	0.8833333333333333	0.5000000000000000
0.8219178082191779	0.7722222222222223	0.5000000000000000
0.8356164383561643	0.6611111111111111	0.5000000000000000
0.8493150684931505	0.5499999999999999	0.5000000000000000
0.8630136986301370	0.4388888888888889	0.5000000000000000
0.8767123287671232	0.3277777777777778	0.5000000000000000
0.8904109589041095	0.2166666666666668	0.5000000000000000
0.4315068493150685	0.0055555555555556	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.1166666666666667	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.2277777777777777	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.8944444444444444	0.0000000000000000
0.4315068493150685	1.0055555555555555	0.0000000000000000
0.3630136986301370	0.0666666666666667	0.5000000000000000
0.3767123287671233	0.1777777777777778	0.5000000000000000
0.3904109589041096	0.2888888888888889	0.5000000000000000
0.4041095890410960	0.4000000000000000	0.5000000000000000
0.4178082191780822	0.5111111111111111	0.5000000000000000
0.4315068493150685	0.6222222222222221	0.5000000000000000
0.4452054794520549	0.7333333333333333	0.5000000000000000
0.2945205479452055	0.0166666666666667	0.0000000000000000
0.3082191780821918	0.1277777777777778	0.0000000000000000
0.3219178082191781	0.2388888888888889	0.0000000000000000
0.3356164383561644	0.3500000000000000	0.0000000000000000
0.3493150684931507	0.4611111111111111	0.0000000000000000
0.3630136986301370	0.5722222222222222	0.0000000000000000
0.3767123287671233	0.6833333333333333	0.0000000000000000
0.3904109589041096	0.7944444444444443	0.0000000000000000
0.2260273972602740	0.0777777777777778	0.5000000000000000
0.2397260273972603	0.1888888888888889	0.5000000000000000
0.2534246575342466	0.3000000000000000	0.5000000000000000
0.2671232876712329	0.4111111111111111	0.5000000000000000
0.2808219178082192	0.5222222222222221	0.5000000000000000
0.2945205479452055	0.6333333333333333	0.5000000000000000
0.3082191780821918	0.7444444444444445	0.5000000000000000
0.3219178082191781	0.8555555555555554	0.5000000000000000
0.3356164383561644	0.9666666666666666	0.5000000000000000
0.1575342465753425	0.0277777777777778	0.0000000000000000
0.1712328767123289	0.1388888888888889	0.0000000000000000
0.1849315068493151	0.2500000000000000	0.0000000000000000
0.1986301369863014	0.3611111111111111	0.0000000000000000
0.2123287671232877	0.4722222222222222	0.0000000000000000

0.2260273972602740	0.5833333333333333	0.0000000000000000
0.2397260273972603	0.6944444444444444	0.0000000000000000
0.2534246575342466	0.8055555555555554	0.0000000000000000
0.2671232876712329	0.9166666666666665	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.9555555555555555	0.0000000000000000
0.0000000000000001	0.8444444444444443	0.0000000000000000
0.0000000000000001	0.7333333333333333	0.0000000000000000
0.0684931506849314	1.0055555555555555	0.5000000000000000
0.0684931506849315	0.8944444444444445	0.5000000000000000
0.0684931506849315	0.7833333333333333	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.6777777777777777	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.5666666666666667	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.4555555555555556	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.3444444444444444	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.2333333333333332	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.1777777777777778	0.0000000000000000
0.0000000000000002	0.0666666666666667	0.0000000000000000
0.0684931506849316	0.1166666666666667	0.5000000000000000
0.0684931506849316	0.0055555555555555	0.5000000000000000
0.1369863013698630	0.9444444444444444	0.0000000000000000
0.1232876712328767	0.8333333333333333	0.0000000000000000
0.1095890410958904	0.7222222222222222	0.0000000000000000
0.0958904109589042	0.6111111111111110	0.0000000000000000
0.0821917808219179	0.5000000000000000	0.0000000000000000
0.0684931506849316	0.3888888888888889	0.0000000000000000
0.0547945205479453	0.2777777777777777	0.0000000000000000
0.2054794520547945	0.9944444444444444	0.5000000000000000
0.1917808219178082	0.8833333333333333	0.5000000000000000
0.1780821917808220	0.7722222222222223	0.5000000000000000
0.1643835616438357	0.6611111111111111	0.5000000000000000
0.1506849315068494	0.5499999999999999	0.5000000000000000
0.1369863013698631	0.4388888888888889	0.5000000000000000
0.1232876712328768	0.3277777777777778	0.5000000000000000
0.1095890410958905	0.2166666666666668	0.5000000000000000

### 6.1.2 回轉角 79.6° (arctan(1/11))

New structure

1.0

20.8539931907536662	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	31.4238253559301732	0.0000000000000000

0.0000000000000000	0.0000000000000000	4.0400000000000000
160		
Direct		
0.5000000000000000	0.0454545454545455	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.1363636363636364	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.2272727272727273	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.0037878787878788	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.0946969696969697	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.1856060606060606	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.2727272727272728	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.3636363636363636	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.4545454545454545	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.5454545454545455	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.6363636363636365	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.7272727272727273	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.7727272727272727	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.8636363636363636	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.9545454545454545	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.8219696969696969	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.9128787878787880	0.0000000000000000
0.5684931506849316	1.0037878787878787	0.0000000000000000
0.6369863013698630	0.0530303030303030	0.5000000000000000
0.6255707762557078	0.1439393939393940	0.5000000000000000
0.6141552511415524	0.2348484848484849	0.5000000000000000
0.6027397260273973	0.3257575757575757	0.5000000000000000
0.5913242009132420	0.4166666666666666	0.5000000000000000
0.5799086757990867	0.5075757575757576	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.5984848484848485	0.5000000000000000
0.5570776255707762	0.6893939393939393	0.5000000000000000
0.7054794520547945	0.0113636363636364	0.0000000000000000
0.6940639269406392	0.1022727272727273	0.0000000000000000
0.6826484018264840	0.1931818181818182	0.0000000000000000
0.6712328767123287	0.2840909090909091	0.0000000000000000
0.6598173515981736	0.3749999999999999	0.0000000000000000
0.6484018264840182	0.4659090909090909	0.0000000000000000
0.6369863013698630	0.5568181818181818	0.0000000000000000
0.6255707762557078	0.6477272727272727	0.0000000000000000
0.6141552511415524	0.7386363636363636	0.0000000000000000
0.7739726027397260	0.0606060606060606	0.5000000000000000
0.7625570776255707	0.1515151515151515	0.5000000000000000
0.7511415525114155	0.2424242424242424	0.5000000000000000



0.7397260273972601	0.3333333333333334	0.5000000000000000
0.7283105022831050	0.4242424242424243	0.5000000000000000
0.7168949771689498	0.5151515151515150	0.5000000000000000
0.7054794520547945	0.6060606060606061	0.5000000000000000
0.6940639269406392	0.6969696969696969	0.5000000000000000
0.6826484018264839	0.7878787878787878	0.5000000000000000
0.6712328767123287	0.8787878787878788	0.5000000000000000
0.6598173515981736	0.9696969696969696	0.5000000000000000
0.8424657534246573	0.0189393939393939	0.0000000000000000
0.8310502283105022	0.1098484848484848	0.0000000000000000
0.8196347031963470	0.2007575757575757	0.0000000000000000
0.8082191780821917	0.2916666666666667	0.0000000000000000
0.7968036529680365	0.3825757575757576	0.0000000000000000
0.7853881278538811	0.4734848484848485	0.0000000000000000
0.7739726027397260	0.5643939393939394	0.0000000000000000
0.7625570776255707	0.6553030303030303	0.0000000000000000
0.7511415525114155	0.7462121212121212	0.0000000000000000
0.7397260273972601	0.8371212121212122	0.0000000000000000
0.7283105022831050	0.9280303030303030	0.0000000000000000
0.9315068493150684	1.0037878787878787	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.9128787878787878	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.8219696969696968	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.1856060606060605	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.0946969696969696	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.0037878787878787	0.5000000000000000
0.8630136986301371	0.9545454545454544	0.0000000000000000
0.8744292237442922	0.8636363636363635	0.0000000000000000
0.8858447488584476	0.7727272727272726	0.0000000000000000
0.8972602739726028	0.6818181818181818	0.0000000000000000
0.9086757990867579	0.5909090909090908	0.0000000000000000
0.9200913242009132	0.4999999999999999	0.0000000000000000
0.9315068493150684	0.4090909090909089	0.0000000000000000
0.9429223744292236	0.3181818181818181	0.0000000000000000
0.7945205479452054	0.9962121212121211	0.5000000000000000
0.8059360730593607	0.9053030303030302	0.5000000000000000
0.8173515981735160	0.8143939393939393	0.5000000000000000
0.8287671232876711	0.7234848484848484	0.5000000000000000
0.8401826484018265	0.6325757575757575	0.5000000000000000
0.8515981735159817	0.5416666666666666	0.5000000000000000
0.8630136986301370	0.4507575757575757	0.5000000000000000
0.8744292237442922	0.3598484848484848	0.5000000000000000

0.8858447488584473	0.2689393939393939	0.5000000000000000
0.4315068493150685	0.0037878787878788	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.0946969696969697	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.1856060606060606	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.8219696969696969	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.9128787878787880	0.0000000000000000
0.4315068493150685	1.0037878787878787	0.0000000000000000
0.3630136986301370	0.0530303030303030	0.5000000000000000
0.3744292237442922	0.1439393939393940	0.5000000000000000
0.3858447488584475	0.2348484848484849	0.5000000000000000
0.3972602739726027	0.3257575757575757	0.5000000000000000
0.4086757990867580	0.4166666666666666	0.5000000000000000
0.4200913242009133	0.5075757575757576	0.5000000000000000
0.4315068493150685	0.5984848484848485	0.5000000000000000
0.4429223744292238	0.6893939393939393	0.5000000000000000
0.2945205479452055	0.0113636363636364	0.0000000000000000
0.3059360730593608	0.1022727272727273	0.0000000000000000
0.3173515981735160	0.1931818181818182	0.0000000000000000
0.3287671232876713	0.2840909090909091	0.0000000000000000
0.3401826484018265	0.3749999999999999	0.0000000000000000
0.3515981735159818	0.4659090909090909	0.0000000000000000
0.3630136986301370	0.5568181818181818	0.0000000000000000
0.3744292237442922	0.6477272727272727	0.0000000000000000
0.3858447488584475	0.7386363636363636	0.0000000000000000
0.2260273972602740	0.0606060606060606	0.5000000000000000
0.2374429223744293	0.1515151515151515	0.5000000000000000
0.2488584474885845	0.2424242424242424	0.5000000000000000
0.2602739726027398	0.3333333333333334	0.5000000000000000
0.2716894977168950	0.4242424242424243	0.5000000000000000
0.2831050228310503	0.5151515151515150	0.5000000000000000
0.2945205479452055	0.6060606060606061	0.5000000000000000
0.3059360730593608	0.6969696969696969	0.5000000000000000
0.3173515981735160	0.7878787878787878	0.5000000000000000
0.3287671232876713	0.8787878787878788	0.5000000000000000
0.3401826484018265	0.9696969696969696	0.5000000000000000
0.1575342465753425	0.0189393939393939	0.0000000000000000
0.1689497716894978	0.1098484848484848	0.0000000000000000
0.1803652968036530	0.2007575757575757	0.0000000000000000
0.1917808219178083	0.2916666666666667	0.0000000000000000
0.2031963470319635	0.3825757575757576	0.0000000000000000
0.2146118721461188	0.4734848484848485	0.0000000000000000

0.2260273972602740	0.5643939393939394	0.0000000000000000
0.2374429223744293	0.6553030303030303	0.0000000000000000
0.2488584474885845	0.7462121212121212	0.0000000000000000
0.2602739726027398	0.8371212121212122	0.0000000000000000
0.2716894977168950	0.9280303030303030	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.9621212121212120	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.8712121212121212	0.0000000000000000
0.0000000000000001	0.7803030303030303	0.0000000000000000
0.0684931506849314	1.0037878787878787	0.5000000000000000
0.0684931506849314	0.9128787878787878	0.5000000000000000
0.0684931506849315	0.8219696969696968	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.7348484848484848	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.6439393939393938	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.5530303030303030	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.4621212121212120	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.3712121212121210	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.2803030303030302	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.2348484848484848	0.0000000000000000
0.0000000000000002	0.1439393939393938	0.0000000000000000
0.0000000000000002	0.0530303030303030	0.0000000000000000
0.0684931506849316	0.1856060606060605	0.5000000000000000
0.0684931506849316	0.0946969696969696	0.5000000000000000
0.0684931506849316	0.0037878787878787	0.5000000000000000
0.1369863013698630	0.9545454545454544	0.0000000000000000
0.1255707762557078	0.8636363636363635	0.0000000000000000
0.1141552511415525	0.7727272727272726	0.0000000000000000
0.1027397260273973	0.6818181818181818	0.0000000000000000
0.0913242009132420	0.5909090909090908	0.0000000000000000
0.0799086757990868	0.4999999999999999	0.0000000000000000
0.0684931506849316	0.4090909090909089	0.0000000000000000
0.0570776255707763	0.3181818181818181	0.0000000000000000
0.2054794520547945	0.9962121212121211	0.5000000000000000
0.1940639269406393	0.9053030303030302	0.5000000000000000
0.1826484018264840	0.8143939393939393	0.5000000000000000
0.1712328767123288	0.7234848484848484	0.5000000000000000
0.1598173515981735	0.6325757575757575	0.5000000000000000
0.1484018264840183	0.5416666666666666	0.5000000000000000
0.1369863013698631	0.4507575757575757	0.5000000000000000
0.1255707762557079	0.3598484848484848	0.5000000000000000
0.1141552511415526	0.2689393939393939	0.5000000000000000

### 6.1.3 回転角 $81.2^\circ$ ( $\arctan(1/13)$ )

New structure

1.0

20.8539931907536662	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	37.1372481479174823	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	4.0400000000000000

192

Direct

0.5000000000000000	0.0384615384615385	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.1153846153846154	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.1923076923076923	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.2692307692307692	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.0027472527472527	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.0796703296703297	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.1565934065934066	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.2335164835164835	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.3076923076923077	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.3846153846153846	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.4615384615384615	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.5384615384615384	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.6153846153846153	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.6923076923076922	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.7692307692307692	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.8076923076923076	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.8846153846153845	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.9615384615384615	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.8489010989010988	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.9258241758241758	0.0000000000000000
0.5684931506849316	1.0027472527472527	0.0000000000000000
0.6369863013698630	0.0439560439560440	0.5000000000000000
0.6272015655577299	0.1208791208791209	0.5000000000000000
0.6174168297455969	0.1978021978021978	0.5000000000000000
0.6076320939334637	0.2747252747252747	0.5000000000000000
0.5978473581213307	0.3516483516483516	0.5000000000000000
0.5880626223091976	0.4285714285714285	0.5000000000000000
0.5782778864970646	0.5054945054945055	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.5824175824175822	0.5000000000000000
0.5587084148727984	0.6593406593406592	0.5000000000000000
0.5489236790606654	0.7362637362637362	0.5000000000000000
0.7054794520547945	0.0082417582417582	0.0000000000000000

0.6956947162426613	0.0851648351648352	0.0000000000000000
0.6859099804305283	0.1620879120879121	0.0000000000000000
0.6761252446183953	0.2390109890109890	0.0000000000000000
0.6663405088062622	0.3159340659340659	0.0000000000000000
0.6565557729941291	0.3928571428571428	0.0000000000000000
0.6467710371819961	0.4697802197802198	0.0000000000000000
0.6369863013698630	0.5467032967032966	0.0000000000000000
0.6272015655577299	0.6236263736263735	0.0000000000000000
0.6174168297455969	0.7005494505494505	0.0000000000000000
0.6076320939334637	0.7774725274725274	0.0000000000000000
0.7739726027397260	0.0494505494505494	0.5000000000000000
0.7641878669275929	0.1263736263736264	0.5000000000000000
0.7544031311154599	0.2032967032967033	0.5000000000000000
0.7446183953033269	0.2802197802197802	0.5000000000000000
0.7348336594911937	0.3571428571428571	0.5000000000000000
0.7250489236790606	0.4340659340659340	0.5000000000000000
0.7152641878669276	0.5109890109890109	0.5000000000000000
0.7054794520547945	0.5879120879120878	0.5000000000000000
0.6956947162426613	0.6648351648351648	0.5000000000000000
0.6859099804305283	0.7417582417582417	0.5000000000000000
0.6761252446183953	0.8186813186813185	0.5000000000000000
0.6663405088062622	0.8956043956043955	0.5000000000000000
0.6565557729941291	0.9725274725274725	0.5000000000000000
0.8424657534246573	0.0137362637362637	0.0000000000000000
0.8326810176125244	0.0906593406593407	0.0000000000000000
0.8228962818003913	0.1675824175824176	0.0000000000000000
0.8131115459882582	0.2445054945054945	0.0000000000000000
0.8033268101761252	0.3214285714285714	0.0000000000000000
0.7935420743639920	0.3983516483516483	0.0000000000000000
0.7837573385518589	0.4752747252747253	0.0000000000000000
0.7739726027397260	0.5521978021978021	0.0000000000000000
0.7641878669275929	0.6291208791208791	0.0000000000000000
0.7544031311154598	0.7060439560439561	0.0000000000000000
0.7446183953033267	0.7829670329670328	0.0000000000000000
0.7348336594911937	0.8598901098901098	0.0000000000000000
0.7250489236790606	0.9368131868131868	0.0000000000000000
0.9315068493150684	1.0027472527472527	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.9258241758241758	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.8489010989010988	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.7719780219780219	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.1565934065934066	0.5000000000000000

0.9315068493150684	0.0796703296703297	0.5000000000000000
0.9315068493150683	0.0027472527472527	0.5000000000000000
0.8630136986301371	0.9615384615384615	0.0000000000000000
0.8727984344422701	0.8846153846153847	0.0000000000000000
0.8825831702544030	0.8076923076923076	0.0000000000000000
0.8923679060665364	0.7307692307692307	0.0000000000000000
0.9021526418786693	0.6538461538461539	0.0000000000000000
0.9119373776908022	0.5769230769230769	0.0000000000000000
0.9217221135029353	0.4999999999999999	0.0000000000000000
0.9315068493150684	0.4230769230769231	0.0000000000000000
0.9412915851272015	0.3461538461538462	0.0000000000000000
0.9510763209393344	0.2692307692307692	0.0000000000000000
0.7945205479452054	0.9972527472527470	0.5000000000000000
0.8043052837573386	0.9203296703296703	0.5000000000000000
0.8140900195694717	0.8434065934065934	0.5000000000000000
0.8238747553816046	0.7664835164835164	0.5000000000000000
0.8336594911937377	0.6895604395604394	0.5000000000000000
0.8434442270058709	0.6126373626373626	0.5000000000000000
0.8532289628180039	0.5357142857142857	0.5000000000000000
0.8630136986301370	0.4587912087912088	0.5000000000000000
0.8727984344422701	0.3818681318681318	0.5000000000000000
0.8825831702544030	0.3049450549450549	0.5000000000000000
0.8923679060665359	0.2280219780219780	0.5000000000000000
0.4315068493150685	0.0027472527472527	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.0796703296703297	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.1565934065934066	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.2335164835164835	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.8489010989010988	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.9258241758241758	0.0000000000000000
0.4315068493150685	1.0027472527472527	0.0000000000000000
0.3630136986301370	0.0439560439560440	0.5000000000000000
0.3727984344422701	0.1208791208791209	0.5000000000000000
0.3825831702544031	0.1978021978021978	0.5000000000000000
0.3923679060665362	0.2747252747252747	0.5000000000000000
0.4021526418786693	0.3516483516483516	0.5000000000000000
0.4119373776908024	0.4285714285714285	0.5000000000000000
0.4217221135029354	0.5054945054945055	0.5000000000000000
0.4315068493150685	0.5824175824175822	0.5000000000000000
0.4412915851272016	0.6593406593406592	0.5000000000000000
0.4510763209393346	0.7362637362637362	0.5000000000000000
0.2945205479452055	0.0082417582417582	0.0000000000000000

0.3043052837573386	0.0851648351648352	0.0000000000000000
0.3140900195694717	0.1620879120879121	0.0000000000000000
0.3238747553816047	0.2390109890109890	0.0000000000000000
0.3336594911937378	0.3159340659340659	0.0000000000000000
0.3434442270058709	0.3928571428571428	0.0000000000000000
0.3532289628180039	0.4697802197802198	0.0000000000000000
0.3630136986301370	0.5467032967032966	0.0000000000000000
0.3727984344422701	0.6236263736263735	0.0000000000000000
0.3825831702544031	0.7005494505494505	0.0000000000000000
0.3923679060665362	0.7774725274725274	0.0000000000000000
0.2260273972602740	0.0494505494505494	0.5000000000000000
0.2358121330724071	0.1263736263736264	0.5000000000000000
0.2455968688845402	0.2032967032967033	0.5000000000000000
0.2553816046966732	0.2802197802197802	0.5000000000000000
0.2651663405088063	0.3571428571428571	0.5000000000000000
0.2749510763209394	0.4340659340659340	0.5000000000000000
0.2847358121330725	0.5109890109890109	0.5000000000000000
0.2945205479452055	0.5879120879120878	0.5000000000000000
0.3043052837573386	0.6648351648351648	0.5000000000000000
0.3140900195694717	0.7417582417582417	0.5000000000000000
0.3238747553816047	0.8186813186813185	0.5000000000000000
0.3336594911937378	0.8956043956043955	0.5000000000000000
0.3434442270058709	0.9725274725274725	0.5000000000000000
0.1575342465753425	0.0137362637362637	0.0000000000000000
0.1673189823874756	0.0906593406593407	0.0000000000000000
0.1771037181996087	0.1675824175824176	0.0000000000000000
0.1868884540117418	0.2445054945054945	0.0000000000000000
0.1966731898238748	0.3214285714285714	0.0000000000000000
0.2064579256360079	0.3983516483516483	0.0000000000000000
0.2162426614481409	0.4752747252747253	0.0000000000000000
0.2260273972602740	0.5521978021978021	0.0000000000000000
0.2358121330724071	0.6291208791208791	0.0000000000000000
0.2455968688845402	0.7060439560439561	0.0000000000000000
0.2553816046966733	0.7829670329670328	0.0000000000000000
0.2651663405088063	0.8598901098901098	0.0000000000000000
0.2749510763209394	0.9368131868131868	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.9670329670329668	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.8901098901098901	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.8131868131868132	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.7362637362637362	0.0000000000000000
0.0684931506849314	1.0027472527472527	0.5000000000000000

0.0684931506849314	0.9258241758241758	0.5000000000000000
0.0684931506849314	0.8489010989010988	0.5000000000000000
0.0684931506849315	0.7719780219780219	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.6978021978021978	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.6208791208791209	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.5439560439560439	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.4670329670329669	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.3901098901098901	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.3131868131868132	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.2362637362637363	0.5000000000000000
0.0000000000000002	0.1978021978021978	0.0000000000000000
0.0000000000000002	0.1208791208791209	0.0000000000000000
0.0000000000000002	0.0439560439560440	0.0000000000000000
0.0684931506849316	0.1565934065934066	0.5000000000000000
0.0684931506849316	0.0796703296703297	0.5000000000000000
0.0684931506849317	0.0027472527472527	0.5000000000000000
0.1369863013698630	0.9615384615384615	0.0000000000000000
0.1272015655577299	0.8846153846153847	0.0000000000000000
0.1174168297455969	0.8076923076923076	0.0000000000000000
0.1076320939334638	0.7307692307692307	0.0000000000000000
0.0978473581213307	0.6538461538461539	0.0000000000000000
0.0880626223091977	0.5769230769230769	0.0000000000000000
0.0782778864970646	0.4999999999999999	0.0000000000000000
0.0684931506849316	0.4230769230769231	0.0000000000000000
0.0587084148727986	0.3461538461538462	0.0000000000000000
0.0489236790606655	0.2692307692307692	0.0000000000000000
0.2054794520547945	0.9972527472527470	0.5000000000000000
0.1956947162426614	0.9203296703296703	0.5000000000000000
0.1859099804305284	0.8434065934065934	0.5000000000000000
0.1761252446183953	0.7664835164835164	0.5000000000000000
0.1663405088062622	0.6895604395604394	0.5000000000000000
0.1565557729941292	0.6126373626373626	0.5000000000000000
0.1467710371819962	0.5357142857142857	0.5000000000000000
0.1369863013698631	0.4587912087912088	0.5000000000000000
0.1272015655577300	0.3818681318681318	0.5000000000000000
0.1174168297455970	0.3049450549450549	0.5000000000000000
0.1076320939334639	0.2280219780219780	0.5000000000000000



## 6.2 3.1.2 小節で作成した粒界モデル

### 6.2.1 回転角 $77.4^\circ$ ( $\arctan(1/9)$ )

New structure

1.0

20.8539931907536662	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	25.7104025639428713	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	4.0400000000000000

132

Direct

0.5000000000000000	0.0555555555555556	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.1666666666666667	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.2777777777777778	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.0055555555555556	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.1166666666666667	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.2277777777777778	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.3333333333333333	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.4444444444444444	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.5555555555555556	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.6666666666666667	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.7777777777777778	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.8333333333333333	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.9444444444444444	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.8944444444444444	0.0000000000000000
0.6369863013698630	0.0666666666666667	0.5000000000000000
0.6232876712328766	0.1777777777777778	0.5000000000000000
0.6095890410958904	0.2888888888888889	0.5000000000000000
0.5958904109589040	0.4000000000000000	0.5000000000000000
0.5821917808219178	0.5111111111111111	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.6222222222222222	0.5000000000000000
0.5547945205479452	0.7333333333333333	0.5000000000000000
0.7054794520547945	0.0166666666666667	0.0000000000000000
0.6917808219178082	0.1277777777777778	0.0000000000000000
0.6780821917808220	0.2388888888888889	0.0000000000000000
0.6643835616438356	0.3500000000000000	0.0000000000000000
0.6506849315068494	0.4611111111111111	0.0000000000000000
0.6369863013698630	0.5722222222222222	0.0000000000000000
0.6232876712328766	0.6833333333333333	0.0000000000000000
0.6095890410958904	0.7944444444444443	0.0000000000000000
0.7739726027397260	0.0777777777777778	0.5000000000000000

0.7602739726027397	0.1888888888888889	0.5000000000000000
0.7465753424657534	0.3000000000000000	0.5000000000000000
0.7328767123287671	0.4111111111111111	0.5000000000000000
0.7191780821917808	0.5222222222222221	0.5000000000000000
0.7054794520547945	0.6333333333333333	0.5000000000000000
0.6917808219178082	0.7444444444444445	0.5000000000000000
0.6780821917808219	0.8555555555555554	0.5000000000000000
0.6643835616438356	0.9666666666666666	0.5000000000000000
0.8424657534246573	0.0277777777777778	0.0000000000000000
0.8287671232876711	0.1388888888888889	0.0000000000000000
0.8150684931506849	0.2500000000000000	0.0000000000000000
0.8013698630136986	0.3611111111111111	0.0000000000000000
0.7876712328767123	0.4722222222222222	0.0000000000000000
0.7739726027397260	0.5833333333333333	0.0000000000000000
0.7602739726027397	0.6944444444444444	0.0000000000000000
0.7465753424657534	0.8055555555555554	0.0000000000000000
0.7328767123287671	0.9166666666666665	0.0000000000000000
0.9315068493150684	0.0055555555555555	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.8944444444444445	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.7833333333333333	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.1166666666666667	0.5000000000000000
0.8630136986301370	0.9444444444444444	0.0000000000000000
0.8767123287671232	0.8333333333333333	0.0000000000000000
0.8904109589041097	0.7222222222222222	0.0000000000000000
0.9041095890410960	0.6111111111111110	0.0000000000000000
0.9178082191780822	0.5000000000000000	0.0000000000000000
0.9315068493150684	0.3888888888888889	0.0000000000000000
0.9452054794520548	0.2777777777777777	0.0000000000000000
0.7945205479452054	0.9944444444444444	0.5000000000000000
0.8082191780821917	0.8833333333333333	0.5000000000000000
0.8219178082191779	0.7722222222222223	0.5000000000000000
0.8356164383561643	0.6611111111111111	0.5000000000000000
0.8493150684931505	0.5499999999999999	0.5000000000000000
0.8630136986301370	0.4388888888888889	0.5000000000000000
0.8767123287671232	0.3277777777777778	0.5000000000000000
0.8904109589041095	0.2166666666666668	0.5000000000000000
0.4315068493150685	0.0055555555555556	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.1166666666666667	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.2277777777777777	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.8944444444444444	0.0000000000000000
0.3630136986301370	0.0666666666666667	0.5000000000000000

0.3767123287671233	0.1777777777777778	0.5000000000000000
0.3904109589041096	0.2888888888888889	0.5000000000000000
0.4041095890410960	0.4000000000000000	0.5000000000000000
0.4178082191780822	0.5111111111111111	0.5000000000000000
0.4315068493150685	0.6222222222222221	0.5000000000000000
0.4452054794520549	0.7333333333333333	0.5000000000000000
0.2945205479452055	0.0166666666666667	0.0000000000000000
0.3082191780821918	0.1277777777777778	0.0000000000000000
0.3219178082191781	0.2388888888888889	0.0000000000000000
0.3356164383561644	0.3500000000000000	0.0000000000000000
0.3493150684931507	0.4611111111111111	0.0000000000000000
0.3630136986301370	0.5722222222222222	0.0000000000000000
0.3767123287671233	0.6833333333333333	0.0000000000000000
0.3904109589041096	0.7944444444444443	0.0000000000000000
0.2260273972602740	0.0777777777777778	0.5000000000000000
0.2397260273972603	0.1888888888888889	0.5000000000000000
0.2534246575342466	0.3000000000000000	0.5000000000000000
0.2671232876712329	0.4111111111111111	0.5000000000000000
0.2808219178082192	0.5222222222222221	0.5000000000000000
0.2945205479452055	0.6333333333333333	0.5000000000000000
0.3082191780821918	0.7444444444444445	0.5000000000000000
0.3219178082191781	0.8555555555555554	0.5000000000000000
0.3356164383561644	0.9666666666666666	0.5000000000000000
0.1575342465753425	0.0277777777777778	0.0000000000000000
0.1712328767123289	0.1388888888888889	0.0000000000000000
0.1849315068493151	0.2500000000000000	0.0000000000000000
0.1986301369863014	0.3611111111111111	0.0000000000000000
0.2123287671232877	0.4722222222222222	0.0000000000000000
0.2260273972602740	0.5833333333333333	0.0000000000000000
0.2397260273972603	0.6944444444444444	0.0000000000000000
0.2534246575342466	0.8055555555555554	0.0000000000000000
0.2671232876712329	0.9166666666666665	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.9555555555555555	0.0000000000000000
0.0000000000000001	0.8444444444444443	0.0000000000000000
0.0000000000000001	0.7333333333333333	0.0000000000000000
0.0684931506849314	0.0055555555555555	0.5000000000000000
0.0684931506849315	0.8944444444444445	0.5000000000000000
0.0684931506849315	0.7833333333333333	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.6777777777777777	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.5666666666666667	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.4555555555555556	0.5000000000000000

0.0000000000000001	0.3444444444444444	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.2333333333333332	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.1777777777777778	0.0000000000000000
0.0000000000000002	0.0666666666666667	0.0000000000000000
0.0684931506849316	0.1166666666666667	0.5000000000000000
0.1369863013698630	0.9444444444444444	0.0000000000000000
0.1232876712328767	0.8333333333333333	0.0000000000000000
0.1095890410958904	0.7222222222222222	0.0000000000000000
0.0958904109589042	0.6111111111111110	0.0000000000000000
0.0821917808219179	0.5000000000000000	0.0000000000000000
0.0684931506849316	0.3888888888888889	0.0000000000000000
0.0547945205479453	0.2777777777777777	0.0000000000000000
0.2054794520547945	0.9944444444444444	0.5000000000000000
0.1917808219178082	0.8833333333333333	0.5000000000000000
0.1780821917808220	0.7722222222222223	0.5000000000000000
0.1643835616438357	0.6611111111111111	0.5000000000000000
0.1506849315068494	0.5499999999999999	0.5000000000000000
0.1369863013698631	0.4388888888888889	0.5000000000000000
0.1232876712328768	0.3277777777777778	0.5000000000000000
0.1095890410958905	0.2166666666666668	0.5000000000000000

## 6.2.2 回転角 79.6° (arctan(1/11))

New structure

1.0

20.8539931907536662	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	31.4238253559301732	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	4.0400000000000000

156

Direct

0.5000000000000000	0.0454545454545455	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.1363636363636364	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.2272727272727273	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.0037878787878788	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.0946969696969697	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.1856060606060606	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.2727272727272728	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.3636363636363636	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.4545454545454545	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.5454545454545455	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.6363636363636365	0.0000000000000000

0.5000000000000000	0.7272727272727273	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.7727272727272727	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.8636363636363636	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.9545454545454545	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.8219696969696969	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.9128787878787880	0.0000000000000000
0.6369863013698630	0.0530303030303030	0.5000000000000000
0.6255707762557078	0.1439393939393940	0.5000000000000000
0.6141552511415524	0.2348484848484849	0.5000000000000000
0.6027397260273973	0.3257575757575757	0.5000000000000000
0.5913242009132420	0.4166666666666666	0.5000000000000000
0.5799086757990867	0.5075757575757576	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.5984848484848485	0.5000000000000000
0.5570776255707762	0.6893939393939393	0.5000000000000000
0.7054794520547945	0.0113636363636364	0.0000000000000000
0.6940639269406392	0.1022727272727273	0.0000000000000000
0.6826484018264840	0.1931818181818182	0.0000000000000000
0.6712328767123287	0.2840909090909091	0.0000000000000000
0.6598173515981736	0.3749999999999999	0.0000000000000000
0.6484018264840182	0.4659090909090909	0.0000000000000000
0.6369863013698630	0.5568181818181818	0.0000000000000000
0.6255707762557078	0.6477272727272727	0.0000000000000000
0.6141552511415524	0.7386363636363636	0.0000000000000000
0.7739726027397260	0.0606060606060606	0.5000000000000000
0.7625570776255707	0.1515151515151515	0.5000000000000000
0.7511415525114155	0.2424242424242424	0.5000000000000000
0.7397260273972601	0.3333333333333334	0.5000000000000000
0.7283105022831050	0.4242424242424243	0.5000000000000000
0.7168949771689498	0.5151515151515150	0.5000000000000000
0.7054794520547945	0.6060606060606061	0.5000000000000000
0.6940639269406392	0.6969696969696969	0.5000000000000000
0.6826484018264839	0.7878787878787878	0.5000000000000000
0.6712328767123287	0.8787878787878788	0.5000000000000000
0.6598173515981736	0.9696969696969696	0.5000000000000000
0.8424657534246573	0.0189393939393939	0.0000000000000000
0.8310502283105022	0.1098484848484848	0.0000000000000000
0.8196347031963470	0.2007575757575757	0.0000000000000000
0.8082191780821917	0.2916666666666667	0.0000000000000000
0.7968036529680365	0.3825757575757576	0.0000000000000000
0.7853881278538811	0.4734848484848485	0.0000000000000000
0.7739726027397260	0.5643939393939394	0.0000000000000000

0.7625570776255707	0.6553030303030303	0.0000000000000000
0.7511415525114155	0.7462121212121212	0.0000000000000000
0.7397260273972601	0.8371212121212122	0.0000000000000000
0.7283105022831050	0.9280303030303030	0.0000000000000000
0.9315068493150684	0.0037878787878787	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.9128787878787878	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.8219696969696968	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.1856060606060605	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.0946969696969696	0.5000000000000000
0.8630136986301371	0.9545454545454544	0.0000000000000000
0.8744292237442922	0.8636363636363635	0.0000000000000000
0.8858447488584476	0.7727272727272726	0.0000000000000000
0.8972602739726028	0.6818181818181818	0.0000000000000000
0.9086757990867579	0.5909090909090908	0.0000000000000000
0.9200913242009132	0.4999999999999999	0.0000000000000000
0.9315068493150684	0.4090909090909089	0.0000000000000000
0.9429223744292236	0.3181818181818181	0.0000000000000000
0.7945205479452054	0.9962121212121211	0.5000000000000000
0.8059360730593607	0.9053030303030302	0.5000000000000000
0.8173515981735160	0.8143939393939393	0.5000000000000000
0.8287671232876711	0.7234848484848484	0.5000000000000000
0.8401826484018265	0.6325757575757575	0.5000000000000000
0.8515981735159817	0.5416666666666666	0.5000000000000000
0.8630136986301370	0.4507575757575757	0.5000000000000000
0.8744292237442922	0.3598484848484848	0.5000000000000000
0.8858447488584473	0.2689393939393939	0.5000000000000000
0.4315068493150685	0.0037878787878788	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.0946969696969697	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.1856060606060606	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.8219696969696969	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.9128787878787880	0.0000000000000000
0.3630136986301370	0.0530303030303030	0.5000000000000000
0.3744292237442922	0.1439393939393940	0.5000000000000000
0.3858447488584475	0.2348484848484849	0.5000000000000000
0.3972602739726027	0.3257575757575757	0.5000000000000000
0.4086757990867580	0.4166666666666666	0.5000000000000000
0.4200913242009133	0.5075757575757576	0.5000000000000000
0.4315068493150685	0.5984848484848485	0.5000000000000000
0.4429223744292238	0.6893939393939393	0.5000000000000000
0.2945205479452055	0.0113636363636364	0.0000000000000000
0.3059360730593608	0.1022727272727273	0.0000000000000000

0.3173515981735160	0.1931818181818182	0.0000000000000000
0.3287671232876713	0.2840909090909091	0.0000000000000000
0.3401826484018265	0.3749999999999999	0.0000000000000000
0.3515981735159818	0.4659090909090909	0.0000000000000000
0.3630136986301370	0.5568181818181818	0.0000000000000000
0.3744292237442922	0.6477272727272727	0.0000000000000000
0.3858447488584475	0.7386363636363636	0.0000000000000000
0.2260273972602740	0.0606060606060606	0.5000000000000000
0.2374429223744293	0.1515151515151515	0.5000000000000000
0.2488584474885845	0.2424242424242424	0.5000000000000000
0.2602739726027398	0.3333333333333334	0.5000000000000000
0.2716894977168950	0.4242424242424243	0.5000000000000000
0.2831050228310503	0.5151515151515150	0.5000000000000000
0.2945205479452055	0.6060606060606061	0.5000000000000000
0.3059360730593608	0.6969696969696969	0.5000000000000000
0.3173515981735160	0.7878787878787878	0.5000000000000000
0.3287671232876713	0.8787878787878788	0.5000000000000000
0.3401826484018265	0.9696969696969696	0.5000000000000000
0.1575342465753425	0.0189393939393939	0.0000000000000000
0.1689497716894978	0.1098484848484848	0.0000000000000000
0.1803652968036530	0.2007575757575757	0.0000000000000000
0.1917808219178083	0.2916666666666667	0.0000000000000000
0.2031963470319635	0.3825757575757576	0.0000000000000000
0.2146118721461188	0.4734848484848485	0.0000000000000000
0.2260273972602740	0.5643939393939394	0.0000000000000000
0.2374429223744293	0.6553030303030303	0.0000000000000000
0.2488584474885845	0.7462121212121212	0.0000000000000000
0.2602739726027398	0.8371212121212122	0.0000000000000000
0.2716894977168950	0.9280303030303030	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.9621212121212120	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.8712121212121212	0.0000000000000000
0.0000000000000001	0.7803030303030303	0.0000000000000000
0.0684931506849314	0.0037878787878787	0.5000000000000000
0.0684931506849314	0.9128787878787878	0.5000000000000000
0.0684931506849315	0.8219696969696968	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.7348484848484848	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.6439393939393938	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.5530303030303030	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.4621212121212120	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.3712121212121210	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.2803030303030302	0.5000000000000000

0.0000000000000001	0.2348484848484848	0.0000000000000000
0.0000000000000002	0.1439393939393938	0.0000000000000000
0.0000000000000002	0.0530303030303030	0.0000000000000000
0.0684931506849316	0.1856060606060605	0.5000000000000000
0.0684931506849316	0.0946969696969696	0.5000000000000000
0.1369863013698630	0.9545454545454544	0.0000000000000000
0.1255707762557078	0.8636363636363635	0.0000000000000000
0.1141552511415525	0.7727272727272726	0.0000000000000000
0.1027397260273973	0.6818181818181818	0.0000000000000000
0.0913242009132420	0.5909090909090908	0.0000000000000000
0.0799086757990868	0.4999999999999999	0.0000000000000000
0.0684931506849316	0.4090909090909089	0.0000000000000000
0.0570776255707763	0.3181818181818181	0.0000000000000000
0.2054794520547945	0.9962121212121211	0.5000000000000000
0.1940639269406393	0.9053030303030302	0.5000000000000000
0.1826484018264840	0.8143939393939393	0.5000000000000000
0.1712328767123288	0.7234848484848484	0.5000000000000000
0.1598173515981735	0.6325757575757575	0.5000000000000000
0.1484018264840183	0.5416666666666666	0.5000000000000000
0.1369863013698631	0.4507575757575757	0.5000000000000000
0.1255707762557079	0.3598484848484848	0.5000000000000000
0.1141552511415526	0.2689393939393939	0.5000000000000000

### 6.2.3 回轉角 $81.2^\circ$ ( $\arctan(1/13)$ )

New structure

1.0

20.8539931907536662	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	37.1372481479174823	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	4.0400000000000000

188

Direct

0.5000000000000000	0.0384615384615385	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.1153846153846154	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.1923076923076923	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.2692307692307692	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.0027472527472527	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.0796703296703297	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.1565934065934066	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.2335164835164835	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.3076923076923077	0.0000000000000000



0.5000000000000000	0.3846153846153846	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.4615384615384615	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.5384615384615384	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.6153846153846153	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.6923076923076922	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.7692307692307692	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.8076923076923076	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.8846153846153845	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.9615384615384615	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.8489010989010988	0.0000000000000000
0.5684931506849316	0.9258241758241758	0.0000000000000000
0.6369863013698630	0.0439560439560440	0.5000000000000000
0.6272015655577299	0.1208791208791209	0.5000000000000000
0.6174168297455969	0.1978021978021978	0.5000000000000000
0.6076320939334637	0.2747252747252747	0.5000000000000000
0.5978473581213307	0.3516483516483516	0.5000000000000000
0.5880626223091976	0.4285714285714285	0.5000000000000000
0.5782778864970646	0.5054945054945055	0.5000000000000000
0.5684931506849316	0.5824175824175822	0.5000000000000000
0.5587084148727984	0.6593406593406592	0.5000000000000000
0.5489236790606654	0.7362637362637362	0.5000000000000000
0.7054794520547945	0.0082417582417582	0.0000000000000000
0.6956947162426613	0.0851648351648352	0.0000000000000000
0.6859099804305283	0.1620879120879121	0.0000000000000000
0.6761252446183953	0.2390109890109890	0.0000000000000000
0.6663405088062622	0.3159340659340659	0.0000000000000000
0.6565557729941291	0.3928571428571428	0.0000000000000000
0.6467710371819961	0.4697802197802198	0.0000000000000000
0.6369863013698630	0.5467032967032966	0.0000000000000000
0.6272015655577299	0.6236263736263735	0.0000000000000000
0.6174168297455969	0.7005494505494505	0.0000000000000000
0.6076320939334637	0.7774725274725274	0.0000000000000000
0.7739726027397260	0.0494505494505494	0.5000000000000000
0.7641878669275929	0.1263736263736264	0.5000000000000000
0.7544031311154599	0.2032967032967033	0.5000000000000000
0.7446183953033269	0.2802197802197802	0.5000000000000000
0.7348336594911937	0.3571428571428571	0.5000000000000000
0.7250489236790606	0.4340659340659340	0.5000000000000000
0.7152641878669276	0.5109890109890109	0.5000000000000000
0.7054794520547945	0.5879120879120878	0.5000000000000000
0.6956947162426613	0.6648351648351648	0.5000000000000000

0.6859099804305283	0.7417582417582417	0.5000000000000000
0.6761252446183953	0.8186813186813185	0.5000000000000000
0.6663405088062622	0.8956043956043955	0.5000000000000000
0.6565557729941291	0.9725274725274725	0.5000000000000000
0.8424657534246573	0.0137362637362637	0.0000000000000000
0.8326810176125244	0.0906593406593407	0.0000000000000000
0.8228962818003913	0.1675824175824176	0.0000000000000000
0.8131115459882582	0.2445054945054945	0.0000000000000000
0.8033268101761252	0.3214285714285714	0.0000000000000000
0.7935420743639920	0.3983516483516483	0.0000000000000000
0.7837573385518589	0.4752747252747253	0.0000000000000000
0.7739726027397260	0.5521978021978021	0.0000000000000000
0.7641878669275929	0.6291208791208791	0.0000000000000000
0.7544031311154598	0.7060439560439561	0.0000000000000000
0.7446183953033267	0.7829670329670328	0.0000000000000000
0.7348336594911937	0.8598901098901098	0.0000000000000000
0.7250489236790606	0.9368131868131868	0.0000000000000000
0.9315068493150684	0.0027472527472527	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.9258241758241758	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.8489010989010988	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.7719780219780219	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.1565934065934066	0.5000000000000000
0.9315068493150684	0.0796703296703297	0.5000000000000000
0.8630136986301371	0.9615384615384615	0.0000000000000000
0.8727984344422701	0.8846153846153847	0.0000000000000000
0.8825831702544030	0.8076923076923076	0.0000000000000000
0.8923679060665364	0.7307692307692307	0.0000000000000000
0.9021526418786693	0.6538461538461539	0.0000000000000000
0.9119373776908022	0.5769230769230769	0.0000000000000000
0.9217221135029353	0.4999999999999999	0.0000000000000000
0.9315068493150684	0.4230769230769231	0.0000000000000000
0.9412915851272015	0.3461538461538462	0.0000000000000000
0.9510763209393344	0.2692307692307692	0.0000000000000000
0.7945205479452054	0.9972527472527470	0.5000000000000000
0.8043052837573386	0.9203296703296703	0.5000000000000000
0.8140900195694717	0.8434065934065934	0.5000000000000000
0.8238747553816046	0.7664835164835164	0.5000000000000000
0.8336594911937377	0.6895604395604394	0.5000000000000000
0.8434442270058709	0.6126373626373626	0.5000000000000000
0.8532289628180039	0.5357142857142857	0.5000000000000000
0.8630136986301370	0.4587912087912088	0.5000000000000000

0.8727984344422701	0.3818681318681318	0.5000000000000000
0.8825831702544030	0.3049450549450549	0.5000000000000000
0.8923679060665359	0.2280219780219780	0.5000000000000000
0.4315068493150685	0.0027472527472527	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.0796703296703297	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.1565934065934066	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.2335164835164835	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.8489010989010988	0.0000000000000000
0.4315068493150685	0.9258241758241758	0.0000000000000000
0.3630136986301370	0.0439560439560440	0.5000000000000000
0.3727984344422701	0.1208791208791209	0.5000000000000000
0.3825831702544031	0.1978021978021978	0.5000000000000000
0.3923679060665362	0.2747252747252747	0.5000000000000000
0.4021526418786693	0.3516483516483516	0.5000000000000000
0.4119373776908024	0.4285714285714285	0.5000000000000000
0.4217221135029354	0.5054945054945055	0.5000000000000000
0.4315068493150685	0.5824175824175822	0.5000000000000000
0.4412915851272016	0.6593406593406592	0.5000000000000000
0.4510763209393346	0.7362637362637362	0.5000000000000000
0.2945205479452055	0.0082417582417582	0.0000000000000000
0.3043052837573386	0.0851648351648352	0.0000000000000000
0.3140900195694717	0.1620879120879121	0.0000000000000000
0.3238747553816047	0.2390109890109890	0.0000000000000000
0.3336594911937378	0.3159340659340659	0.0000000000000000
0.3434442270058709	0.3928571428571428	0.0000000000000000
0.3532289628180039	0.4697802197802198	0.0000000000000000
0.3630136986301370	0.5467032967032966	0.0000000000000000
0.3727984344422701	0.6236263736263735	0.0000000000000000
0.3825831702544031	0.7005494505494505	0.0000000000000000
0.3923679060665362	0.7774725274725274	0.0000000000000000
0.2260273972602740	0.0494505494505494	0.5000000000000000
0.2358121330724071	0.1263736263736264	0.5000000000000000
0.2455968688845402	0.2032967032967033	0.5000000000000000
0.2553816046966732	0.2802197802197802	0.5000000000000000
0.2651663405088063	0.3571428571428571	0.5000000000000000
0.2749510763209394	0.4340659340659340	0.5000000000000000
0.2847358121330725	0.5109890109890109	0.5000000000000000
0.2945205479452055	0.5879120879120878	0.5000000000000000
0.3043052837573386	0.6648351648351648	0.5000000000000000
0.3140900195694717	0.7417582417582417	0.5000000000000000
0.3238747553816047	0.8186813186813185	0.5000000000000000

0.3336594911937378	0.8956043956043955	0.5000000000000000
0.3434442270058709	0.9725274725274725	0.5000000000000000
0.1575342465753425	0.0137362637362637	0.0000000000000000
0.1673189823874756	0.0906593406593407	0.0000000000000000
0.1771037181996087	0.1675824175824176	0.0000000000000000
0.1868884540117418	0.2445054945054945	0.0000000000000000
0.1966731898238748	0.3214285714285714	0.0000000000000000
0.2064579256360079	0.3983516483516483	0.0000000000000000
0.2162426614481409	0.4752747252747253	0.0000000000000000
0.2260273972602740	0.5521978021978021	0.0000000000000000
0.2358121330724071	0.6291208791208791	0.0000000000000000
0.2455968688845402	0.7060439560439561	0.0000000000000000
0.2553816046966733	0.7829670329670328	0.0000000000000000
0.2651663405088063	0.8598901098901098	0.0000000000000000
0.2749510763209394	0.9368131868131868	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.9670329670329668	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.8901098901098901	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.8131868131868132	0.0000000000000000
0.0000000000000001	0.7362637362637362	0.0000000000000000
0.0684931506849314	0.0027472527472527	0.5000000000000000
0.0684931506849314	0.9258241758241758	0.5000000000000000
0.0684931506849314	0.8489010989010988	0.5000000000000000
0.0684931506849315	0.7719780219780219	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.6978021978021978	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.6208791208791209	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.5439560439560439	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.4670329670329669	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.3901098901098901	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.3131868131868132	0.5000000000000000
0.0000000000000001	0.2362637362637363	0.5000000000000000
0.0000000000000002	0.1978021978021978	0.0000000000000000
0.0000000000000002	0.1208791208791209	0.0000000000000000
0.0000000000000002	0.0439560439560440	0.0000000000000000
0.0684931506849316	0.1565934065934066	0.5000000000000000
0.0684931506849316	0.0796703296703297	0.5000000000000000
0.1369863013698630	0.9615384615384615	0.0000000000000000
0.1272015655577299	0.8846153846153847	0.0000000000000000
0.1174168297455969	0.8076923076923076	0.0000000000000000
0.1076320939334638	0.7307692307692307	0.0000000000000000
0.0978473581213307	0.6538461538461539	0.0000000000000000
0.0880626223091977	0.5769230769230769	0.0000000000000000

0.0782778864970646	0.4999999999999999	0.0000000000000000
0.0684931506849316	0.4230769230769231	0.0000000000000000
0.0587084148727986	0.3461538461538462	0.0000000000000000
0.0489236790606655	0.2692307692307692	0.0000000000000000
0.2054794520547945	0.9972527472527470	0.5000000000000000
0.1956947162426614	0.9203296703296703	0.5000000000000000
0.1859099804305284	0.8434065934065934	0.5000000000000000
0.1761252446183953	0.7664835164835164	0.5000000000000000
0.1663405088062622	0.6895604395604394	0.5000000000000000
0.1565557729941292	0.6126373626373626	0.5000000000000000
0.1467710371819962	0.5357142857142857	0.5000000000000000
0.1369863013698631	0.4587912087912088	0.5000000000000000
0.1272015655577300	0.3818681318681318	0.5000000000000000
0.1174168297455970	0.3049450549450549	0.5000000000000000
0.1076320939334639	0.2280219780219780	0.5000000000000000

## 6.3 3.1.3 小節で作成した粒界モデル

### 6.3.1 回転角 $77.4^\circ$ ( $\arctan(1/9)$ )

New structure

1.0

22.8536911679492185	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	25.7104025639428713	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	4.0400000000000000

144

Direct

0.6562500000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.6424460592406441	0.1104315260748465	0.5000000000000000
0.6286421184812884	0.2208630521496931	0.5000000000000000
0.6148381777219325	0.3312945782245397	0.5000000000000000
0.6010342369625767	0.4417261042993861	0.5000000000000000
0.5872302962032209	0.5521576303742326	0.5000000000000000
0.5734263554438651	0.6625891564490793	0.5000000000000000
0.5596224146845092	0.7730206825239258	0.5000000000000000
0.5458184739251535	0.8834522085987723	0.5000000000000000
0.7114657630374233	0.0613508478193592	0.0000000000000000
0.6976618222780674	0.1717823738942058	0.0000000000000000
0.6838578815187116	0.2822138999690523	0.0000000000000000
0.6700539407593559	0.3926454260438988	0.0000000000000000
0.6562500000000000	0.5030769521187454	0.0000000000000000

0.6424460592406442	0.6135084781935919	0.0000000000000000
0.6286421184812884	0.7239400042684384	0.0000000000000000
0.6148381777219325	0.8343715303432850	0.0000000000000000
0.6010342369625767	0.9448030564181316	0.0000000000000000
0.7804854668342023	0.0122701695638718	0.5000000000000000
0.7666815260748466	0.1227016956387184	0.5000000000000000
0.7528775853154908	0.2331332217135649	0.5000000000000000
0.7390736445561350	0.3435647477884115	0.5000000000000000
0.7252697037967791	0.4539962738632580	0.5000000000000000
0.7114657630374233	0.5644277999381045	0.5000000000000000
0.6976618222780674	0.6748593260129512	0.5000000000000000
0.6838578815187116	0.7852908520877976	0.5000000000000000
0.6700539407593559	0.8957223781626441	0.5000000000000000
0.8357012298716257	0.0736210173832310	0.0000000000000000
0.8218972891122699	0.1840525434580776	0.0000000000000000
0.8080933483529140	0.2944840695329241	0.0000000000000000
0.7942894075935581	0.4049155956077707	0.0000000000000000
0.7804854668342025	0.5153471216826172	0.0000000000000000
0.7666815260748466	0.6257786477574637	0.0000000000000000
0.7528775853154908	0.7362101738323102	0.0000000000000000
0.7390736445561350	0.8466416999071569	0.0000000000000000
0.7252697037967791	0.9570732259820034	0.0000000000000000
0.9047209336684047	0.0245403391277437	0.5000000000000000
0.8909169929090489	0.1349718652025902	0.5000000000000000
0.8771130521496930	0.2454033912774368	0.5000000000000000
0.8633091113903372	0.3558349173522833	0.5000000000000000
0.8495051706309814	0.4662664434271298	0.5000000000000000
0.8357012298716257	0.5766979695019763	0.5000000000000000
0.8218972891122699	0.6871294955768230	0.5000000000000000
0.8080933483529140	0.7975610216516694	0.5000000000000000
0.7942894075935581	0.9079925477265161	0.5000000000000000
0.9599366967058280	0.0858911869471029	0.0000000000000000
0.9461327559464723	0.1963227130219494	0.0000000000000000
0.9323288151871164	0.3067542390967959	0.0000000000000000
0.9185248744277605	0.4171857651716425	0.0000000000000000
0.9047209336684047	0.5276172912464890	0.0000000000000000
0.8909169929090489	0.6380488173213356	0.0000000000000000
0.8771130521496930	0.7484803433961822	0.0000000000000000
0.8633091113903372	0.8589118694710287	0.0000000000000000
0.8495051706309814	0.9693433955458753	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000

0.5000000000000000	0.1111111111111111	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.2222222222222222	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.3333333333333333	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.4444444444444444	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.0555555555555555	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.1666666666666667	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.2777777777777777	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.3888888888888889	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.5000000000000000	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.6111111111111110	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.7222222222222222	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.8333333333333333	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.9444444444444444	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.9166666666666665	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.8055555555555555	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.6944444444444444	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.5833333333333333	0.5000000000000000
0.3437500000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.3575539407593559	0.1104315260748465	0.5000000000000000
0.3713578815187116	0.2208630521496931	0.5000000000000000
0.3851618222780674	0.3312945782245397	0.5000000000000000
0.3989657630374233	0.4417261042993861	0.5000000000000000
0.4127697037967791	0.5521576303742326	0.5000000000000000
0.4265736445561349	0.6625891564490793	0.5000000000000000
0.4403775853154907	0.7730206825239258	0.5000000000000000
0.4541815260748466	0.8834522085987723	0.5000000000000000
0.2885342369625767	0.0613508478193592	0.0000000000000000
0.3023381777219326	0.1717823738942058	0.0000000000000000
0.3161421184812884	0.2822138999690523	0.0000000000000000
0.3299460592406442	0.3926454260438988	0.0000000000000000
0.3437500000000000	0.5030769521187454	0.0000000000000000
0.3575539407593558	0.6135084781935919	0.0000000000000000
0.3713578815187116	0.7239400042684384	0.0000000000000000
0.3851618222780674	0.8343715303432850	0.0000000000000000
0.3989657630374233	0.9448030564181316	0.0000000000000000
0.2195145331657976	0.0122701695638718	0.5000000000000000
0.2333184739251535	0.1227016956387184	0.5000000000000000
0.2471224146845093	0.2331332217135649	0.5000000000000000
0.2609263554438651	0.3435647477884115	0.5000000000000000
0.2747302962032209	0.4539962738632580	0.5000000000000000
0.2885342369625767	0.5644277999381045	0.5000000000000000

0.3023381777219326	0.6748593260129512	0.5000000000000000
0.3161421184812883	0.7852908520877976	0.5000000000000000
0.3299460592406442	0.8957223781626441	0.5000000000000000
0.1642987701283743	0.0736210173832310	0.0000000000000000
0.1781027108877302	0.1840525434580776	0.0000000000000000
0.1919066516470860	0.2944840695329241	0.0000000000000000
0.2057105924064418	0.4049155956077707	0.0000000000000000
0.2195145331657976	0.5153471216826172	0.0000000000000000
0.2333184739251535	0.6257786477574637	0.0000000000000000
0.2471224146845093	0.7362101738323102	0.0000000000000000
0.2609263554438651	0.8466416999071569	0.0000000000000000
0.2747302962032209	0.9570732259820034	0.0000000000000000
0.0952790663315953	0.0245403391277437	0.5000000000000000
0.1090830070909510	0.1349718652025902	0.5000000000000000
0.1228869478503069	0.2454033912774368	0.5000000000000000
0.1366908886096627	0.3558349173522833	0.5000000000000000
0.1504948293690186	0.4662664434271298	0.5000000000000000
0.1642987701283743	0.5766979695019763	0.5000000000000000
0.1781027108877302	0.6871294955768230	0.5000000000000000
0.1919066516470860	0.7975610216516694	0.5000000000000000
0.2057105924064419	0.9079925477265161	0.5000000000000000
0.0400633032941720	0.0858911869471029	0.0000000000000000
0.0538672440535278	0.1963227130219494	0.0000000000000000
0.0676711848128837	0.3067542390967959	0.0000000000000000
0.0814751255722395	0.4171857651716425	0.0000000000000000
0.0952790663315953	0.5276172912464890	0.0000000000000000
0.1090830070909511	0.6380488173213356	0.0000000000000000
0.1228869478503070	0.7484803433961822	0.0000000000000000
0.1366908886096627	0.8589118694710287	0.0000000000000000
0.1504948293690186	0.9693433955458753	0.0000000000000000
0.4374999999999999	0.0555555555555556	0.0000000000000000
0.4374999999999999	0.1666666666666667	0.0000000000000000
0.4374999999999999	0.2777777777777777	0.0000000000000000
0.4374999999999999	0.3888888888888889	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.9722222222222221	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.8611111111111109	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.7500000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.6388888888888888	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.5277777777777778	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.9166666666666665	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.8055555555555556	0.5000000000000000



0.0625000000000000	0.6944444444444444	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.5833333333333333	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.4722222222222222	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.3611111111111111	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.2500000000000000	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.1388888888888889	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.0277777777777778	0.5000000000000000

### 6.3.2 回轉角 79.6° (arctan(1/11))

New structure

1.0

22.8536911679492185	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	31.4238253559301732	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	4.0400000000000000

176

Direct

0.6562500000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.6449330317446852	0.0905357460425185	0.5000000000000000
0.6336160634893704	0.1810714920850371	0.5000000000000000
0.6222990952340556	0.2716072381275556	0.5000000000000000
0.6109821269787408	0.3621429841700741	0.5000000000000000
0.5996651587234260	0.4526787302125926	0.5000000000000000
0.5883481904681110	0.5432144762551112	0.5000000000000000
0.5770312222127962	0.6337502222976297	0.5000000000000000
0.5657142539574814	0.7242859683401482	0.5000000000000000
0.5543972857021666	0.8148217143826668	0.5000000000000000
0.5430803174468518	0.9053574604251853	0.5000000000000000
0.7128348412765740	0.0493831342050101	0.0000000000000000
0.7015178730212592	0.1399188802475286	0.0000000000000000
0.6902009047659444	0.2304546262900472	0.0000000000000000
0.6788839365106296	0.3209903723325658	0.0000000000000000
0.6675669682553148	0.4115261183750843	0.0000000000000000
0.6562500000000000	0.5020618644176027	0.0000000000000000
0.6449330317446852	0.5925976104601214	0.0000000000000000
0.6336160634893704	0.6831333565026397	0.0000000000000000
0.6222990952340556	0.7736691025451584	0.0000000000000000
0.6109821269787408	0.8642048485876769	0.0000000000000000
0.5996651587234260	0.9547405946301954	0.0000000000000000
0.7807366508084631	0.0082305223675017	0.5000000000000000
0.7694196825531482	0.0987662684100202	0.5000000000000000

0.7581027142978334	0.1893020144525387	0.5000000000000000
0.7467857460425186	0.2798377604950573	0.5000000000000000
0.7354687777872038	0.3703735065375758	0.5000000000000000
0.7241518095318888	0.4609092525800944	0.5000000000000000
0.7128348412765740	0.5514449986226129	0.5000000000000000
0.7015178730212592	0.6419807446651314	0.5000000000000000
0.6902009047659444	0.7325164907076499	0.5000000000000000
0.6788839365106296	0.8230522367501686	0.5000000000000000
0.6675669682553148	0.9135879827926869	0.5000000000000000
0.8373214920850370	0.0576136565725118	0.0000000000000000
0.8260045238297222	0.1481494026150303	0.0000000000000000
0.8146875555744074	0.2386851486575489	0.0000000000000000
0.8033705873190926	0.3292208947000674	0.0000000000000000
0.7920536190637779	0.4197566407425860	0.0000000000000000
0.7807366508084631	0.5102923867851045	0.0000000000000000
0.7694196825531482	0.6008281328276230	0.0000000000000000
0.7581027142978334	0.6913638788701414	0.0000000000000000
0.7467857460425186	0.7818996249126601	0.0000000000000000
0.7354687777872038	0.8724353709551786	0.0000000000000000
0.7241518095318888	0.9629711169976971	0.0000000000000000
0.9052233016169259	0.0164610447350034	0.5000000000000000
0.8939063333616111	0.1069967907775219	0.5000000000000000
0.8825893651062963	0.1975325368200404	0.5000000000000000
0.8712723968509813	0.2880682828625590	0.5000000000000000
0.8599554285956668	0.3786040289050775	0.5000000000000000
0.8486384603403518	0.4691397749475960	0.5000000000000000
0.8373214920850370	0.5596755209901145	0.5000000000000000
0.8260045238297222	0.6502112670326331	0.5000000000000000
0.8146875555744074	0.7407470130751516	0.5000000000000000
0.8033705873190926	0.8312827591176702	0.5000000000000000
0.7920536190637779	0.9218185051601887	0.5000000000000000
0.9618081428935000	0.0658441789400135	0.0000000000000000
0.9504911746381852	0.1563799249825320	0.0000000000000000
0.9391742063828704	0.2469156710250505	0.0000000000000000
0.9278572381275555	0.3374514170675691	0.0000000000000000
0.9165402698722407	0.4279871631100877	0.0000000000000000
0.9052233016169259	0.5185229091526061	0.0000000000000000
0.8939063333616111	0.6090586551951247	0.0000000000000000
0.8825893651062963	0.6995944012376432	0.0000000000000000
0.8712723968509813	0.7901301472801617	0.0000000000000000
0.8599554285956665	0.8806658933226803	0.0000000000000000

0.8486384603403518	0.9712016393651989	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.0909090909090909	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.1818181818181818	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.2727272727272728	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.3636363636363636	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.4545454545454545	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.0454545454545455	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.1363636363636364	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.2272727272727273	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.3181818181818182	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.4090909090909091	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.5000000000000000	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.5909090909090909	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.6818181818181818	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.7727272727272727	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.8636363636363636	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.9545454545454545	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.9318181818181818	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.8409090909090908	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.7499999999999999	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.6590909090909089	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.5681818181818181	0.5000000000000000
0.3437500000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.3550669682553148	0.0905357460425185	0.5000000000000000
0.3663839365106296	0.1810714920850371	0.5000000000000000
0.3777009047659444	0.2716072381275556	0.5000000000000000
0.3890178730212592	0.3621429841700741	0.5000000000000000
0.4003348412765741	0.4526787302125926	0.5000000000000000
0.4116518095318889	0.5432144762551112	0.5000000000000000
0.4229687777872038	0.6337502222976297	0.5000000000000000
0.4342857460425186	0.7242859683401482	0.5000000000000000
0.4456027142978334	0.8148217143826668	0.5000000000000000
0.4569196825531481	0.9053574604251853	0.5000000000000000
0.2871651587234259	0.0493831342050101	0.0000000000000000
0.2984821269787408	0.1399188802475286	0.0000000000000000
0.3097990952340556	0.2304546262900472	0.0000000000000000
0.3211160634893704	0.3209903723325658	0.0000000000000000
0.3324330317446852	0.4115261183750843	0.0000000000000000
0.3437500000000000	0.5020618644176027	0.0000000000000000
0.3550669682553148	0.5925976104601214	0.0000000000000000

0.3663839365106296	0.6831333565026397	0.0000000000000000
0.3777009047659444	0.7736691025451584	0.0000000000000000
0.3890178730212592	0.8642048485876769	0.0000000000000000
0.4003348412765741	0.9547405946301954	0.0000000000000000
0.2192633491915370	0.0082305223675017	0.5000000000000000
0.2305803174468519	0.0987662684100202	0.5000000000000000
0.2418972857021666	0.1893020144525387	0.5000000000000000
0.2532142539574815	0.2798377604950573	0.5000000000000000
0.2645312222127963	0.3703735065375758	0.5000000000000000
0.2758481904681111	0.4609092525800944	0.5000000000000000
0.2871651587234259	0.5514449986226129	0.5000000000000000
0.2984821269787407	0.6419807446651314	0.5000000000000000
0.3097990952340556	0.7325164907076499	0.5000000000000000
0.3211160634893704	0.8230522367501686	0.5000000000000000
0.3324330317446852	0.9135879827926869	0.5000000000000000
0.1626785079149630	0.0576136565725118	0.0000000000000000
0.1739954761702778	0.1481494026150303	0.0000000000000000
0.1853124444255926	0.2386851486575489	0.0000000000000000
0.1966294126809074	0.3292208947000674	0.0000000000000000
0.2079463809362222	0.4197566407425860	0.0000000000000000
0.2192633491915370	0.5102923867851045	0.0000000000000000
0.2305803174468519	0.6008281328276230	0.0000000000000000
0.2418972857021666	0.6913638788701414	0.0000000000000000
0.2532142539574815	0.7818996249126601	0.0000000000000000
0.2645312222127963	0.8724353709551786	0.0000000000000000
0.2758481904681111	0.9629711169976971	0.0000000000000000
0.0947766983830741	0.0164610447350034	0.5000000000000000
0.1060936666383889	0.1069967907775219	0.5000000000000000
0.1174106348937037	0.1975325368200404	0.5000000000000000
0.1287276031490185	0.2880682828625590	0.5000000000000000
0.1400445714043333	0.3786040289050775	0.5000000000000000
0.1513615396596481	0.4691397749475960	0.5000000000000000
0.1626785079149630	0.5596755209901145	0.5000000000000000
0.1739954761702777	0.6502112670326331	0.5000000000000000
0.1853124444255926	0.7407470130751516	0.5000000000000000
0.1966294126809074	0.8312827591176702	0.5000000000000000
0.2079463809362222	0.9218185051601887	0.5000000000000000
0.0381918571065000	0.0658441789400135	0.0000000000000000
0.0495088253618148	0.1563799249825320	0.0000000000000000
0.0608257936171296	0.2469156710250505	0.0000000000000000
0.0721427618724444	0.3374514170675691	0.0000000000000000

0.0834597301277592	0.4279871631100877	0.0000000000000000
0.0947766983830741	0.5185229091526061	0.0000000000000000
0.1060936666383889	0.6090586551951247	0.0000000000000000
0.1174106348937037	0.6995944012376432	0.0000000000000000
0.1287276031490185	0.7901301472801617	0.0000000000000000
0.1400445714043334	0.8806658933226803	0.0000000000000000
0.1513615396596481	0.9712016393651989	0.0000000000000000
0.4374999999999999	0.0454545454545455	0.0000000000000000
0.4374999999999999	0.1363636363636364	0.0000000000000000
0.4374999999999999	0.2272727272727273	0.0000000000000000
0.4374999999999999	0.3181818181818182	0.0000000000000000
0.4374999999999999	0.4090909090909091	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.9772727272727272	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.8863636363636362	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.7954545454545454	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.7045454545454545	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.6136363636363635	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.5227272727272727	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.9318181818181818	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.8409090909090908	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.7499999999999999	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.6590909090909089	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.5681818181818181	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.4772727272727272	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.3863636363636363	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.2954545454545455	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.2045454545454545	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.1136363636363636	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.0227272727272727	0.5000000000000000

### 6.3.3 回轉角 $81.2^\circ$ ( $\arctan(1/13)$ )

New structure

1.0

22.8536911679492185	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	37.1372481479174752	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	4.0400000000000000

208

Direct

0.6562500000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.6466629376394079	0.0766964988847370	0.5000000000000000

0.6370758752788157	0.1533929977694741	0.5000000000000000
0.6274888129182237	0.2300894966542112	0.5000000000000000
0.6179017505576315	0.3067859955389482	0.5000000000000000
0.6083146881970394	0.3834824944236853	0.5000000000000000
0.5987276258364471	0.4601789933084224	0.5000000000000000
0.5891405634758551	0.5368754921931593	0.5000000000000000
0.5795535011152629	0.6135719910778964	0.5000000000000000
0.5699664387546708	0.6902684899626335	0.5000000000000000
0.5603793763940786	0.7669649888473705	0.5000000000000000
0.5507923140334865	0.8436614877321076	0.5000000000000000
0.5412052516728943	0.9203579866168448	0.5000000000000000
0.7137723741635529	0.0412981147840892	0.0000000000000000
0.7041853118029606	0.1179946136688262	0.0000000000000000
0.6945982494423685	0.1946911125535633	0.0000000000000000
0.6850111870817763	0.2713876114383004	0.0000000000000000
0.6754241247211843	0.3480841103230374	0.0000000000000000
0.6658370623605921	0.4247806092077744	0.0000000000000000
0.6562500000000000	0.5014771080925116	0.0000000000000000
0.6466629376394079	0.5781736069772485	0.0000000000000000
0.6370758752788157	0.6548701058619857	0.0000000000000000
0.6274888129182237	0.7315666047467227	0.0000000000000000
0.6179017505576314	0.8082631036314597	0.0000000000000000
0.6083146881970394	0.8849596025161969	0.0000000000000000
0.5987276258364471	0.9616561014009338	0.0000000000000000
0.7808818106876977	0.0058997306834413	0.5000000000000000
0.7712947483271055	0.0825962295681784	0.5000000000000000
0.7617076859665133	0.1592927284529154	0.5000000000000000
0.7521206236059212	0.2359892273376525	0.5000000000000000
0.7425335612453291	0.3126857262223895	0.5000000000000000
0.7329464988847371	0.3893822251071266	0.5000000000000000
0.7233594365241449	0.4660787239918637	0.5000000000000000
0.7137723741635529	0.5427752228766006	0.5000000000000000
0.7041853118029606	0.6194717217613377	0.5000000000000000
0.6945982494423685	0.6961682206460748	0.5000000000000000
0.6850111870817763	0.7728647195308118	0.5000000000000000
0.6754241247211843	0.8495612184155489	0.5000000000000000
0.6658370623605921	0.9262577173002861	0.5000000000000000
0.8384041848512505	0.0471978454675305	0.0000000000000000
0.8288171224906583	0.1238943443522676	0.0000000000000000
0.8192300601300663	0.2005908432370046	0.0000000000000000
0.8096429977694741	0.2772873421217417	0.0000000000000000

0.8000559354088821	0.3539838410064787	0.0000000000000000
0.7904688730482899	0.4306803398912158	0.0000000000000000
0.7808818106876977	0.5073768387759529	0.0000000000000000
0.7712947483271055	0.5840733376606898	0.0000000000000000
0.7617076859665135	0.6607698365454270	0.0000000000000000
0.7521206236059212	0.7374663354301640	0.0000000000000000
0.7425335612453291	0.8141628343149010	0.0000000000000000
0.7329464988847371	0.8908593331996382	0.0000000000000000
0.7233594365241449	0.9675558320843751	0.0000000000000000
0.9055136213753955	0.0117994613668826	0.5000000000000000
0.8959265590148033	0.0884959602516197	0.5000000000000000
0.8863394966542111	0.1651924591363567	0.5000000000000000
0.8767524342936190	0.2418889580210938	0.5000000000000000
0.8671653719330268	0.3185854569058308	0.5000000000000000
0.8575783095724346	0.3952819557905679	0.5000000000000000
0.8479912472118425	0.4719784546753050	0.5000000000000000
0.8384041848512505	0.5486749535600419	0.5000000000000000
0.8288171224906583	0.6253714524447790	0.5000000000000000
0.8192300601300663	0.7020679513295160	0.5000000000000000
0.8096429977694741	0.7787644502142531	0.5000000000000000
0.8000559354088819	0.8554609490989902	0.5000000000000000
0.7904688730482898	0.9321574479837273	0.5000000000000000
0.9630359955389480	0.0530975761509718	0.0000000000000000
0.9534489331783560	0.1297940750357089	0.0000000000000000
0.9438618708177638	0.2064905739204459	0.0000000000000000
0.9342748084571718	0.2831870728051830	0.0000000000000000
0.9246877460965797	0.3598835716899200	0.0000000000000000
0.9151006837359875	0.4365800705746570	0.0000000000000000
0.9055136213753955	0.5132765694593943	0.0000000000000000
0.8959265590148033	0.5899730683441312	0.0000000000000000
0.8863394966542111	0.6666695672288683	0.0000000000000000
0.8767524342936190	0.7433660661136055	0.0000000000000000
0.8671653719330268	0.8200625649983424	0.0000000000000000
0.8575783095724346	0.8967590638830795	0.0000000000000000
0.8479912472118425	0.9734555627678164	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.0769230769230769	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.1538461538461539	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.2307692307692308	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.3076923076923077	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.3846153846153846	0.5000000000000000

0.5000000000000000	0.4615384615384616	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.0384615384615385	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.1153846153846154	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.1923076923076923	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.2692307692307693	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.3461538461538462	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.4230769230769231	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.5000000000000001	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.5769230769230771	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.6538461538461540	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.7307692307692309	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.8076923076923078	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.8846153846153848	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.9615384615384616	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.9423076923076924	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.8653846153846154	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.7884615384615384	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.7115384615384616	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.6346153846153846	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.5576923076923077	0.5000000000000000
0.3437500000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.3533370623605921	0.0766964988847370	0.5000000000000000
0.3629241247211843	0.1533929977694741	0.5000000000000000
0.3725111870817764	0.2300894966542112	0.5000000000000000
0.3820982494423685	0.3067859955389482	0.5000000000000000
0.3916853118029607	0.3834824944236853	0.5000000000000000
0.4012723741635528	0.4601789933084224	0.5000000000000000
0.4108594365241449	0.5368754921931593	0.5000000000000000
0.4204464988847371	0.6135719910778964	0.5000000000000000
0.4300335612453292	0.6902684899626335	0.5000000000000000
0.4396206236059213	0.7669649888473705	0.5000000000000000
0.4492076859665135	0.8436614877321076	0.5000000000000000
0.4587947483271056	0.9203579866168448	0.5000000000000000
0.2862276258364472	0.0412981147840892	0.0000000000000000
0.2958146881970393	0.1179946136688262	0.0000000000000000
0.3054017505576315	0.1946911125535633	0.0000000000000000
0.3149888129182236	0.2713876114383004	0.0000000000000000
0.3245758752788157	0.3480841103230374	0.0000000000000000
0.3341629376394079	0.4247806092077744	0.0000000000000000
0.3437500000000000	0.5014771080925116	0.0000000000000000
0.3533370623605921	0.5781736069772485	0.0000000000000000



0.3629241247211843	0.6548701058619857	0.0000000000000000
0.3725111870817764	0.7315666047467227	0.0000000000000000
0.3820982494423686	0.8082631036314597	0.0000000000000000
0.3916853118029607	0.8849596025161969	0.0000000000000000
0.4012723741635528	0.9616561014009338	0.0000000000000000
0.2191181893123023	0.0058997306834413	0.5000000000000000
0.2287052516728945	0.0825962295681784	0.5000000000000000
0.2382923140334866	0.1592927284529154	0.5000000000000000
0.2478793763940787	0.2359892273376525	0.5000000000000000
0.2574664387546708	0.3126857262223895	0.5000000000000000
0.2670535011152630	0.3893822251071266	0.5000000000000000
0.2766405634758551	0.4660787239918637	0.5000000000000000
0.2862276258364472	0.5427752228766006	0.5000000000000000
0.2958146881970393	0.6194717217613377	0.5000000000000000
0.3054017505576315	0.6961682206460748	0.5000000000000000
0.3149888129182236	0.7728647195308118	0.5000000000000000
0.3245758752788158	0.8495612184155489	0.5000000000000000
0.3341629376394079	0.9262577173002861	0.5000000000000000
0.1615958151487495	0.0471978454675305	0.0000000000000000
0.1711828775093416	0.1238943443522676	0.0000000000000000
0.1807699398699338	0.2005908432370046	0.0000000000000000
0.1903570022305259	0.2772873421217417	0.0000000000000000
0.1999440645911180	0.3539838410064787	0.0000000000000000
0.2095311269517101	0.4306803398912158	0.0000000000000000
0.2191181893123023	0.5073768387759529	0.0000000000000000
0.2287052516728944	0.5840733376606898	0.0000000000000000
0.2382923140334866	0.6607698365454270	0.0000000000000000
0.2478793763940787	0.7374663354301640	0.0000000000000000
0.2574664387546708	0.8141628343149010	0.0000000000000000
0.2670535011152629	0.8908593331996382	0.0000000000000000
0.2766405634758551	0.9675558320843751	0.0000000000000000
0.0944863786246046	0.0117994613668826	0.5000000000000000
0.1040734409851967	0.0884959602516197	0.5000000000000000
0.1136605033457889	0.1651924591363567	0.5000000000000000
0.1232475657063810	0.2418889580210938	0.5000000000000000
0.1328346280669732	0.3185854569058308	0.5000000000000000
0.1424216904275653	0.3952819557905679	0.5000000000000000
0.1520087527881574	0.4719784546753050	0.5000000000000000
0.1615958151487495	0.5486749535600419	0.5000000000000000
0.1711828775093417	0.6253714524447790	0.5000000000000000
0.1807699398699338	0.7020679513295160	0.5000000000000000

0.1903570022305259	0.7787644502142531	0.5000000000000000
0.1999440645911181	0.8554609490989902	0.5000000000000000
0.2095311269517102	0.9321574479837273	0.5000000000000000
0.0369640044610519	0.0530975761509718	0.0000000000000000
0.0465510668216440	0.1297940750357089	0.0000000000000000
0.0561381291822361	0.2064905739204459	0.0000000000000000
0.0657251915428282	0.2831870728051830	0.0000000000000000
0.0753122539034204	0.3598835716899200	0.0000000000000000
0.0848993162640125	0.4365800705746570	0.0000000000000000
0.0944863786246046	0.5132765694593943	0.0000000000000000
0.1040734409851967	0.5899730683441312	0.0000000000000000
0.1136605033457889	0.6666695672288683	0.0000000000000000
0.1232475657063810	0.7433660661136055	0.0000000000000000
0.1328346280669732	0.8200625649983424	0.0000000000000000
0.1424216904275653	0.8967590638830795	0.0000000000000000
0.1520087527881574	0.9734555627678164	0.0000000000000000
0.4374999999999999	0.0384615384615385	0.0000000000000000
0.4374999999999999	0.1153846153846154	0.0000000000000000
0.4374999999999999	0.1923076923076923	0.0000000000000000
0.4374999999999999	0.2692307692307693	0.0000000000000000
0.4374999999999999	0.3461538461538462	0.0000000000000000
0.4374999999999999	0.4230769230769231	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.9807692307692308	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.9038461538461539	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.8269230769230770	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.7500000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.6730769230769231	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.5961538461538461	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.5192307692307692	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.9423076923076924	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.8653846153846154	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.7884615384615384	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.7115384615384616	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.6346153846153846	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.5576923076923077	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.4807692307692307	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.4038461538461538	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.3269230769230769	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.2499999999999999	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.1730769230769230	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.0961538461538460	0.5000000000000000

0.0000000000000000 0.0192307692307692 0.5000000000000000

## 6.4 3.2.1 小節で作成した粒界モデル

### 6.4.1 回転角 $12.6^\circ$ ( $\arctan(1/9)$ )

New structure

1.0

32.32000000000000003	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	18.179999999999997	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	4.0400000000000000

148

Direct

0.6250000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.6180980296203221	0.1104315260748465	0.5000000000000000
0.6871177334171013	0.0122701695638718	0.5000000000000000
0.6802157630374233	0.1227016956387184	0.0000000000000000
0.6111960592406442	0.2208630521496931	0.0000000000000000
0.6042940888609662	0.3312945782245396	0.5000000000000000
0.6733137926577454	0.2331332217135649	0.5000000000000000
0.6664118222780675	0.3435647477884115	0.0000000000000000
0.5973921184812884	0.4417261042993862	0.0000000000000000
0.5904901481016105	0.5521576303742327	0.5000000000000000
0.6595098518983895	0.4539962738632581	0.5000000000000000
0.6526078815187116	0.5644277999381047	0.0000000000000000
0.5835881777219325	0.6625891564490792	0.0000000000000000
0.5766862073422546	0.7730206825239258	0.5000000000000000
0.6457059111390338	0.6748593260129511	0.5000000000000000
0.6388039407593558	0.7852908520877977	0.0000000000000000
0.5697842369625767	0.8834522085987724	0.0000000000000000
0.6319019703796779	0.8957223781626441	0.5000000000000000
0.7492354668342024	0.0245403391277437	0.0000000000000000
0.7423334964545245	0.1349718652025902	0.5000000000000000
0.8113532002513035	0.0368105086916155	0.5000000000000000
0.8044512298716257	0.1472420347664621	0.0000000000000000
0.7354315260748465	0.2454033912774368	0.0000000000000000
0.7285295556951686	0.3558349173522833	0.5000000000000000
0.7975492594919478	0.2576735608413086	0.5000000000000000
0.7906472891122698	0.3681050869161551	0.0000000000000000
0.7216275853154908	0.4662664434271299	0.0000000000000000
0.7147256149358128	0.5766979695019764	0.5000000000000000

0.7837453187325919	0.4785366129910018	0.5000000000000000
0.7768433483529140	0.5889681390658483	0.0000000000000000
0.7078236445561349	0.6871294955768229	0.0000000000000000
0.7009216741764570	0.7975610216516694	0.5000000000000000
0.7699413779732360	0.6993996651406947	0.5000000000000000
0.7630394075935581	0.8098311912155414	0.0000000000000000
0.6940197037967791	0.9079925477265162	0.0000000000000000
0.7561374372138803	0.9202627172903879	0.5000000000000000
0.8734709336684048	0.0490806782554873	0.0000000000000000
0.8665689632887268	0.1595122043303339	0.5000000000000000
0.9355886670855059	0.0613508478193592	0.5000000000000000
0.9286866967058280	0.1717823738942058	0.0000000000000000
0.8596669929090489	0.2699437304051804	0.0000000000000000
0.8527650225293710	0.3803752564800270	0.5000000000000000
0.9217847263261501	0.2822138999690523	0.5000000000000000
0.9148827559464722	0.3926454260438988	0.0000000000000000
0.8458630521496930	0.4908067825548735	0.0000000000000000
0.8389610817700152	0.6012383086297201	0.5000000000000000
0.9079807855667943	0.5030769521187454	0.5000000000000000
0.9010788151871163	0.6135084781935920	0.0000000000000000
0.8320591113903373	0.7116698347045666	0.0000000000000000
0.8251571410106594	0.8221013607794131	0.5000000000000000
0.8941768448074385	0.7239400042684384	0.5000000000000000
0.8872748744277605	0.8343715303432850	0.0000000000000000
0.8182551706309815	0.9325328868542597	0.0000000000000000
0.8803729040480827	0.9448030564181314	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.1111111111111111	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.1111111111111111	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.2222222222222222	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.3333333333333333	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.2222222222222222	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.3333333333333333	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.4444444444444444	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.4444444444444444	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.5333333333333333	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.6111111111111112	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.7222222222222222	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.8333333333333334	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.9111111111111110	0.0000000000000000

0.9375000000000000	0.9466666666666667	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.8355555555555555	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.7244444444444444	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.6133333333333333	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.5022222222222221	0.0000000000000000
0.3750000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.3819019703796779	0.1104315260748465	0.5000000000000000
0.3128822665828988	0.0122701695638718	0.5000000000000000
0.3197842369625767	0.1227016956387184	0.0000000000000000
0.3888039407593558	0.2208630521496931	0.0000000000000000
0.3957059111390338	0.3312945782245396	0.5000000000000000
0.3266862073422546	0.2331332217135649	0.5000000000000000
0.3335881777219326	0.3435647477884115	0.0000000000000000
0.4026078815187116	0.4417261042993862	0.0000000000000000
0.4095098518983895	0.5521576303742327	0.5000000000000000
0.3404901481016104	0.4539962738632581	0.5000000000000000
0.3473921184812884	0.5644277999381047	0.0000000000000000
0.4164118222780674	0.6625891564490792	0.0000000000000000
0.4233137926577454	0.7730206825239258	0.5000000000000000
0.3542940888609662	0.6748593260129511	0.5000000000000000
0.3611960592406442	0.7852908520877977	0.0000000000000000
0.4302157630374233	0.8834522085987724	0.0000000000000000
0.3680980296203221	0.8957223781626441	0.5000000000000000
0.2507645331657976	0.0245403391277437	0.0000000000000000
0.2576665035454755	0.1349718652025902	0.5000000000000000
0.1886467997486965	0.0368105086916155	0.5000000000000000
0.1955487701283743	0.1472420347664621	0.0000000000000000
0.2645684739251535	0.2454033912774368	0.0000000000000000
0.2714704443048314	0.3558349173522833	0.5000000000000000
0.2024507405080523	0.2576735608413086	0.5000000000000000
0.2093527108877302	0.3681050869161551	0.0000000000000000
0.2783724146845092	0.4662664434271299	0.0000000000000000
0.2852743850641872	0.5766979695019764	0.5000000000000000
0.2162546812674081	0.4785366129910018	0.5000000000000000
0.2231566516470860	0.5889681390658483	0.0000000000000000
0.2921763554438651	0.6871294955768229	0.0000000000000000
0.2990783258235430	0.7975610216516694	0.5000000000000000
0.2300586220267639	0.6993996651406947	0.5000000000000000
0.2369605924064419	0.8098311912155414	0.0000000000000000
0.3059802962032209	0.9079925477265162	0.0000000000000000
0.2438625627861197	0.9202627172903879	0.5000000000000000

0.1265290663315953	0.0490806782554873	0.0000000000000000
0.1334310367112732	0.1595122043303339	0.5000000000000000
0.0644113329144941	0.0613508478193592	0.5000000000000000
0.0713133032941720	0.1717823738942058	0.0000000000000000
0.1403330070909511	0.2699437304051804	0.0000000000000000
0.1472349774706290	0.3803752564800270	0.5000000000000000
0.0782152736738499	0.2822138999690523	0.5000000000000000
0.0851172440535278	0.3926454260438988	0.0000000000000000
0.1541369478503069	0.4908067825548735	0.0000000000000000
0.1610389182299848	0.6012383086297201	0.5000000000000000
0.0920192144332057	0.5030769521187454	0.5000000000000000
0.0989211848128836	0.6135084781935920	0.0000000000000000
0.1679408886096627	0.7116698347045666	0.0000000000000000
0.1748428589893406	0.8221013607794131	0.5000000000000000
0.1058231551925615	0.7239400042684384	0.5000000000000000
0.1127251255722395	0.8343715303432850	0.0000000000000000
0.1817448293690185	0.9325328868542597	0.0000000000000000
0.1196270959519173	0.9448030564181314	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.1111111111111111	0.0000000000000000
0.4375000000000000	0.2222222222222222	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.3333333333333333	0.0000000000000000
0.4375000000000000	0.4444444444444444	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.9466666666666667	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.8355555555555555	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.9466666666666667	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.8355555555555555	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.7244444444444444	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.6133333333333333	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.7244444444444444	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.6133333333333333	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.5022222222222221	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.5022222222222221	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.4133333333333333	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.3355555555555554	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.2244444444444443	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.1133333333333333	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0355555555555556	0.5000000000000000

## 6.4.2 回転角 $10.4^\circ$ ( $\arctan(1/11)$ )

New structure

1.0

32.32000000000000003	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	22.2199999999999989	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	4.0400000000000000

180

Direct

0.6250000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.6193415158723425	0.0905357460425185	0.5000000000000000
0.6872433254042315	0.0082305223675017	0.5000000000000000
0.6815848412765741	0.0987662684100202	0.0000000000000000
0.6136830317446852	0.1810714920850371	0.0000000000000000
0.6080245476170277	0.2716072381275556	0.5000000000000000
0.6759263571489167	0.1893020144525388	0.5000000000000000
0.6702678730212592	0.2798377604950573	0.0000000000000000
0.6023660634893704	0.3621429841700741	0.0000000000000000
0.5967075793617129	0.4526787302125926	0.5000000000000000
0.6646093888936019	0.3703735065375758	0.5000000000000000
0.6589509047659444	0.4609092525800943	0.0000000000000000
0.5910490952340556	0.5432144762551112	0.0000000000000000
0.5853906111063981	0.6337502222976297	0.5000000000000000
0.6532924206382871	0.5514449986226129	0.5000000000000000
0.6476339365106296	0.6419807446651314	0.0000000000000000
0.5797321269787408	0.7242859683401482	0.0000000000000000
0.5740736428510833	0.8148217143826667	0.5000000000000000
0.6419754523829722	0.7325164907076499	0.5000000000000000
0.6363169682553148	0.8230522367501685	0.0000000000000000
0.5684151587234260	0.9053574604251853	0.0000000000000000
0.6306584841276575	0.9135879827926870	0.5000000000000000
0.7494866508084630	0.0164610447350034	0.0000000000000000
0.7438281666808055	0.1069967907775219	0.5000000000000000
0.8117299762126945	0.0246915671025051	0.5000000000000000
0.8060714920850370	0.1152273131450236	0.0000000000000000
0.7381696825531482	0.1975325368200404	0.0000000000000000
0.7325111984254907	0.2880682828625589	0.5000000000000000
0.8004130079573797	0.2057630591875421	0.5000000000000000
0.7947545238297222	0.2962988052300606	0.0000000000000000
0.7268527142978334	0.3786040289050775	0.0000000000000000
0.7211942301701759	0.4691397749475960	0.5000000000000000

0.7890960397020648	0.3868345512725792	0.5000000000000000
0.7834375555744074	0.4773702973150977	0.0000000000000000
0.7155357460425185	0.5596755209901145	0.0000000000000000
0.7098772619148611	0.6502112670326331	0.5000000000000000
0.7777790714467501	0.5679060433576162	0.5000000000000000
0.7721205873190926	0.6584417894001348	0.0000000000000000
0.7042187777872038	0.7407470130751517	0.0000000000000000
0.6985602936595463	0.8312827591176700	0.5000000000000000
0.7664621031914352	0.7489775354426533	0.5000000000000000
0.7608036190637778	0.8395132814851718	0.0000000000000000
0.6929018095318888	0.9218185051601886	0.0000000000000000
0.7551451349361205	0.9300490275276904	0.5000000000000000
0.8739733016169260	0.0329220894700067	0.0000000000000000
0.8683148174892685	0.1234578355125253	0.5000000000000000
0.9362166270211574	0.0411526118375084	0.5000000000000000
0.9305581428935000	0.1316883578800269	0.0000000000000000
0.8626563333616112	0.2139935815550438	0.0000000000000000
0.8569978492339537	0.3045293275975623	0.5000000000000000
0.9248996587658427	0.2222241039225455	0.5000000000000000
0.9192411746381852	0.3127598499650640	0.0000000000000000
0.8513393651062964	0.3950650736400809	0.0000000000000000
0.8456808809786389	0.4856008196825993	0.5000000000000000
0.9135826905105278	0.4032955960075826	0.5000000000000000
0.9079242063828704	0.4938313420501010	0.0000000000000000
0.8400223968509815	0.5761365657251178	0.0000000000000000
0.8343639127233241	0.6666723117676364	0.5000000000000000
0.9022657222552130	0.5843670880926196	0.5000000000000000
0.8966072381275556	0.6749028341351381	0.0000000000000000
0.8287054285956668	0.7572080578101551	0.0000000000000000
0.8230469444680093	0.8477438038526734	0.5000000000000000
0.8909487539998981	0.7654385801776566	0.5000000000000000
0.8852902698722407	0.8559743262201752	0.0000000000000000
0.8173884603403518	0.9382795498951920	0.0000000000000000
0.8796317857445833	0.9465100722626937	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.0909090909090909	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.0909090909090909	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.1818181818181818	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.2727272727272727	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.1818181818181818	0.5000000000000000



0.5625000000000000	0.2727272727272727	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.3636363636363636	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.4545454545454545	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.3636363636363636	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.4545454545454545	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.5272727272727272	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.5909090909090909	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.6818181818181818	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.7727272727272727	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.8636363636363636	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.9272727272727272	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.9563636363636363	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.8654545454545454	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.7745454545454545	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.6836363636363636	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.5927272727272727	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.5018181818181818	0.5000000000000000
0.3750000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.3806584841276574	0.0905357460425185	0.5000000000000000
0.3127566745957685	0.0082305223675017	0.5000000000000000
0.3184151587234259	0.0987662684100202	0.0000000000000000
0.3863169682553148	0.1810714920850371	0.0000000000000000
0.3919754523829722	0.2716072381275556	0.5000000000000000
0.3240736428510833	0.1893020144525388	0.5000000000000000
0.3297321269787408	0.2798377604950573	0.0000000000000000
0.3976339365106296	0.3621429841700741	0.0000000000000000
0.4032924206382871	0.4526787302125926	0.5000000000000000
0.3353906111063981	0.3703735065375758	0.5000000000000000
0.3410490952340556	0.4609092525800943	0.0000000000000000
0.4089509047659444	0.5432144762551112	0.0000000000000000
0.4146093888936019	0.6337502222976297	0.5000000000000000
0.3467075793617129	0.5514449986226129	0.5000000000000000
0.3523660634893704	0.6419807446651314	0.0000000000000000
0.4202678730212592	0.7242859683401482	0.0000000000000000
0.4259263571489167	0.8148217143826667	0.5000000000000000
0.3580245476170278	0.7325164907076499	0.5000000000000000
0.3636830317446852	0.8230522367501685	0.0000000000000000
0.4315848412765741	0.9053574604251853	0.0000000000000000
0.3693415158723426	0.9135879827926870	0.5000000000000000
0.2505133491915370	0.0164610447350034	0.0000000000000000
0.2561718333191944	0.1069967907775219	0.5000000000000000

0.1882700237873055	0.0246915671025051	0.5000000000000000
0.1939285079149630	0.1152273131450236	0.0000000000000000
0.2618303174468518	0.1975325368200404	0.0000000000000000
0.2674888015745093	0.2880682828625589	0.5000000000000000
0.1995869920426203	0.2057630591875421	0.5000000000000000
0.2052454761702778	0.2962988052300606	0.0000000000000000
0.2731472857021666	0.3786040289050775	0.0000000000000000
0.2788057698298241	0.4691397749475960	0.5000000000000000
0.2109039602979352	0.3868345512725792	0.5000000000000000
0.2165624444255926	0.4773702973150977	0.0000000000000000
0.2844642539574815	0.5596755209901145	0.0000000000000000
0.2901227380851389	0.6502112670326331	0.5000000000000000
0.2222209285532500	0.5679060433576162	0.5000000000000000
0.2278794126809074	0.6584417894001348	0.0000000000000000
0.2957812222127963	0.7407470130751517	0.0000000000000000
0.3014397063404537	0.8312827591176700	0.5000000000000000
0.2335378968085648	0.7489775354426533	0.5000000000000000
0.2391963809362222	0.8395132814851718	0.0000000000000000
0.3070981904681111	0.9218185051601886	0.0000000000000000
0.2448548650638796	0.9300490275276904	0.5000000000000000
0.1260266983830740	0.0329220894700067	0.0000000000000000
0.1316851825107315	0.1234578355125253	0.5000000000000000
0.0637833729788426	0.0411526118375084	0.5000000000000000
0.0694418571065000	0.1316883578800269	0.0000000000000000
0.1373436666383888	0.2139935815550438	0.0000000000000000
0.1430021507660463	0.3045293275975623	0.5000000000000000
0.0751003412341574	0.2222241039225455	0.5000000000000000
0.0807588253618148	0.3127598499650640	0.0000000000000000
0.1486606348937037	0.3950650736400809	0.0000000000000000
0.1543191190213611	0.4856008196825993	0.5000000000000000
0.0864173094894722	0.4032955960075826	0.5000000000000000
0.0920757936171296	0.4938313420501010	0.0000000000000000
0.1599776031490185	0.5761365657251178	0.0000000000000000
0.1656360872766759	0.6666723117676364	0.5000000000000000
0.0977342777447870	0.5843670880926196	0.5000000000000000
0.1033927618724444	0.6749028341351381	0.0000000000000000
0.1712945714043333	0.7572080578101551	0.0000000000000000
0.1769530555319907	0.8477438038526734	0.5000000000000000
0.1090512460001019	0.7654385801776566	0.5000000000000000
0.1147097301277593	0.8559743262201752	0.0000000000000000
0.1826115396596481	0.9382795498951920	0.0000000000000000

0.1203682142554167	0.9465100722626937	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.0909090909090909	0.0000000000000000
0.4375000000000000	0.1818181818181818	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.2727272727272727	0.0000000000000000
0.4375000000000000	0.3636363636363636	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.4545454545454545	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.9563636363636363	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.8654545454545454	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.9563636363636363	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.8654545454545454	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.7745454545454545	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.6836363636363636	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.7745454545454545	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.6836363636363636	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.5927272727272727	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.5018181818181818	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.5927272727272727	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.5018181818181818	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.4290909090909091	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.3654545454545454	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.2745454545454545	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.1836363636363636	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.0927272727272727	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0290909090909091	0.5000000000000000

### 6.4.3 回転角 $8.8^\circ$ ( $\arctan(1/13)$ )

New structure

1.0

32.3200000000000003	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	26.2600000000000016	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	4.0400000000000000

212

Direct

0.6250000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.6202064688197040	0.0766964988847370	0.5000000000000000
0.6873159053438489	0.0058997306834413	0.5000000000000000
0.6825223741635528	0.0825962295681784	0.0000000000000000
0.6154129376394079	0.1533929977694741	0.0000000000000000
0.6106194064591118	0.2300894966542111	0.5000000000000000

0.6777288429832568	0.1592927284529154	0.5000000000000000
0.6729353118029606	0.2359892273376525	0.0000000000000000
0.6058258752788157	0.3067859955389482	0.0000000000000000
0.6010323440985197	0.3834824944236853	0.5000000000000000
0.6681417806226646	0.3126857262223895	0.5000000000000000
0.6633482494423686	0.3893822251071266	0.0000000000000000
0.5962388129182237	0.4601789933084223	0.0000000000000000
0.5914452817379275	0.5368754921931593	0.5000000000000000
0.6585547182620725	0.4660787239918636	0.5000000000000000
0.6537611870817763	0.5427752228766006	0.0000000000000000
0.5866517505576314	0.6135719910778964	0.0000000000000000
0.5818582193773354	0.6902684899626335	0.5000000000000000
0.6489676559014803	0.6194717217613377	0.5000000000000000
0.6441741247211843	0.6961682206460746	0.0000000000000000
0.5770646881970394	0.7669649888473705	0.0000000000000000
0.5722711570167432	0.8436614877321075	0.5000000000000000
0.6393805935408882	0.7728647195308118	0.5000000000000000
0.6345870623605921	0.8495612184155488	0.0000000000000000
0.5674776258364472	0.9203579866168445	0.0000000000000000
0.6297935311802960	0.9262577173002858	0.5000000000000000
0.7496318106876977	0.0117994613668826	0.0000000000000000
0.7448382795074017	0.0884959602516197	0.5000000000000000
0.8119477160315466	0.0176991920503239	0.5000000000000000
0.8071541848512505	0.0943956909350610	0.0000000000000000
0.7400447483271055	0.1651924591363567	0.0000000000000000
0.7352512171468095	0.2418889580210938	0.5000000000000000
0.8023606536709544	0.1710921898197980	0.5000000000000000
0.7975671224906584	0.2477886887045351	0.0000000000000000
0.7304576859665135	0.3185854569058308	0.0000000000000000
0.7256641547862174	0.3952819557905679	0.5000000000000000
0.7927735913103623	0.3244851875892721	0.5000000000000000
0.7879800601300662	0.4011816864740092	0.0000000000000000
0.7208706236059212	0.4719784546753049	0.0000000000000000
0.7160770924256252	0.5486749535600419	0.5000000000000000
0.7831865289497701	0.4778781853587463	0.5000000000000000
0.7783929977694741	0.5545746842434833	0.0000000000000000
0.7112835612453292	0.6253714524447790	0.0000000000000000
0.7064900300650331	0.7020679513295160	0.5000000000000000
0.7735994665891780	0.6312711831282203	0.5000000000000000
0.7688059354088820	0.7079676820129573	0.0000000000000000
0.7016964988847371	0.7787644502142531	0.0000000000000000

0.6969029677044409	0.8554609490989902	0.5000000000000000
0.7640124042285859	0.7846641808976944	0.5000000000000000
0.7592188730482898	0.8613606797824314	0.0000000000000000
0.6921094365241449	0.9321574479837272	0.0000000000000000
0.7544253418679938	0.9380571786671685	0.5000000000000000
0.8742636213753954	0.0235989227337652	0.0000000000000000
0.8694700901950994	0.1002954216185023	0.5000000000000000
0.9365795267192443	0.0294986534172066	0.5000000000000000
0.9317859955389483	0.1061951523019436	0.0000000000000000
0.8646765590148033	0.1769919205032393	0.0000000000000000
0.8598830278345072	0.2536884193879764	0.5000000000000000
0.9269924643586521	0.1828916511866807	0.5000000000000000
0.9221989331783560	0.2595881500714177	0.0000000000000000
0.8550894966542111	0.3303849182727134	0.0000000000000000
0.8502959654739151	0.4070814171574505	0.5000000000000000
0.9174054019980600	0.3362846489561547	0.5000000000000000
0.9126118708177640	0.4129811478408918	0.0000000000000000
0.8455024342936190	0.4837779160421875	0.0000000000000000
0.8407089031133229	0.5604744149269245	0.5000000000000000
0.9078183396374679	0.4896776467256289	0.5000000000000000
0.9030248084571718	0.5663741456103659	0.0000000000000000
0.8359153719330269	0.6371709138116616	0.0000000000000000
0.8311218407527308	0.7138674126963986	0.5000000000000000
0.8982312772768757	0.6430706444951030	0.5000000000000000
0.8934377460965797	0.7197671433798399	0.0000000000000000
0.8263283095724347	0.7905639115811358	0.0000000000000000
0.8215347783921387	0.8672604104658728	0.5000000000000000
0.8886442149162836	0.7964636422645770	0.5000000000000000
0.8838506837359875	0.8731601411493141	0.0000000000000000
0.8167412472118426	0.9439569093506098	0.0000000000000000
0.8790571525556915	0.9498566400340511	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.0769230769230769	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.0769230769230769	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.1538461538461539	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.2307692307692308	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.1538461538461539	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.2307692307692308	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.3076923076923077	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.3846153846153846	0.5000000000000000

0.5625000000000000	0.3076923076923077	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.3846153846153846	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.4615384615384616	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.4615384615384616	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.5230769230769231	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.5769230769230769	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.6538461538461539	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.7307692307692307	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.8076923076923077	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.8846153846153846	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.9384615384615385	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.9630769230769231	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.8861538461538461	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.8092307692307692	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.7323076923076923	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.6553846153846153	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.5784615384615385	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.5015384615384615	0.0000000000000000
0.3750000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.3797935311802961	0.0766964988847370	0.5000000000000000
0.3126840946561512	0.0058997306834413	0.5000000000000000
0.3174776258364472	0.0825962295681784	0.0000000000000000
0.3845870623605921	0.1533929977694741	0.0000000000000000
0.3893805935408882	0.2300894966542111	0.5000000000000000
0.3222711570167432	0.1592927284529154	0.5000000000000000
0.3270646881970394	0.2359892273376525	0.0000000000000000
0.3941741247211843	0.3067859955389482	0.0000000000000000
0.3989676559014803	0.3834824944236853	0.5000000000000000
0.3318582193773354	0.3126857262223895	0.5000000000000000
0.3366517505576315	0.3893822251071266	0.0000000000000000
0.4037611870817764	0.4601789933084223	0.0000000000000000
0.4085547182620725	0.5368754921931593	0.5000000000000000
0.3414452817379275	0.4660787239918636	0.5000000000000000
0.3462388129182236	0.5427752228766006	0.0000000000000000
0.4133482494423685	0.6135719910778964	0.0000000000000000
0.4181417806226646	0.6902684899626335	0.5000000000000000
0.3510323440985197	0.6194717217613377	0.5000000000000000
0.3558258752788157	0.6961682206460746	0.0000000000000000
0.4229353118029606	0.7669649888473705	0.0000000000000000
0.4277288429832568	0.8436614877321075	0.5000000000000000
0.3606194064591118	0.7728647195308118	0.5000000000000000

0.3654129376394079	0.8495612184155488	0.0000000000000000
0.4325223741635528	0.9203579866168445	0.0000000000000000
0.3702064688197039	0.9262577173002858	0.5000000000000000
0.2503681893123023	0.0117994613668826	0.0000000000000000
0.2551617204925983	0.0884959602516197	0.5000000000000000
0.1880522839684534	0.0176991920503239	0.5000000000000000
0.1928458151487495	0.0943956909350610	0.0000000000000000
0.2599552516728945	0.1651924591363567	0.0000000000000000
0.2647487828531905	0.2418889580210938	0.5000000000000000
0.1976393463290456	0.1710921898197980	0.5000000000000000
0.2024328775093416	0.2477886887045351	0.0000000000000000
0.2695423140334866	0.3185854569058308	0.0000000000000000
0.2743358452137826	0.3952819557905679	0.5000000000000000
0.2072264086896377	0.3244851875892721	0.5000000000000000
0.2120199398699338	0.4011816864740092	0.0000000000000000
0.2791293763940787	0.4719784546753049	0.0000000000000000
0.2839229075743748	0.5486749535600419	0.5000000000000000
0.2168134710502299	0.4778781853587463	0.5000000000000000
0.2216070022305259	0.5545746842434833	0.0000000000000000
0.2887164387546708	0.6253714524447790	0.0000000000000000
0.2935099699349669	0.7020679513295160	0.5000000000000000
0.2264005334108220	0.6312711831282203	0.5000000000000000
0.2311940645911180	0.7079676820129573	0.0000000000000000
0.2983035011152629	0.7787644502142531	0.0000000000000000
0.3030970322955590	0.8554609490989902	0.5000000000000000
0.2359875957714141	0.7846641808976944	0.5000000000000000
0.2407811269517102	0.8613606797824314	0.0000000000000000
0.3078905634758551	0.9321574479837272	0.0000000000000000
0.2455746581320062	0.9380571786671685	0.5000000000000000
0.1257363786246046	0.0235989227337652	0.0000000000000000
0.1305299098049006	0.1002954216185023	0.5000000000000000
0.0634204732807557	0.0294986534172066	0.5000000000000000
0.0682140044610518	0.1061951523019436	0.0000000000000000
0.1353234409851967	0.1769919205032393	0.0000000000000000
0.1401169721654928	0.2536884193879764	0.5000000000000000
0.0730075356413479	0.1828916511866807	0.5000000000000000
0.0778010668216439	0.2595881500714177	0.0000000000000000
0.1449105033457889	0.3303849182727134	0.0000000000000000
0.1497040345260849	0.4070814171574505	0.5000000000000000
0.0825945980019400	0.3362846489561547	0.5000000000000000
0.0873881291822360	0.4129811478408918	0.0000000000000000

0.1544975657063810	0.4837779160421875	0.0000000000000000
0.1592910968866771	0.5604744149269245	0.5000000000000000
0.0921816603625321	0.4896776467256289	0.5000000000000000
0.0969751915428282	0.5663741456103659	0.0000000000000000
0.1640846280669731	0.6371709138116616	0.0000000000000000
0.1688781592472692	0.7138674126963986	0.5000000000000000
0.1017687227231243	0.6430706444951030	0.5000000000000000
0.1065622539034203	0.7197671433798399	0.0000000000000000
0.1736716904275653	0.7905639115811358	0.0000000000000000
0.1784652216078613	0.8672604104658728	0.5000000000000000
0.1113557850837164	0.7964636422645770	0.5000000000000000
0.1161493162640125	0.8731601411493141	0.0000000000000000
0.1832587527881574	0.9439569093506098	0.0000000000000000
0.1209428474443085	0.9498566400340511	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.0769230769230769	0.0000000000000000
0.4375000000000000	0.1538461538461539	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.2307692307692308	0.0000000000000000
0.4375000000000000	0.3076923076923077	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.3846153846153846	0.0000000000000000
0.4375000000000000	0.4615384615384616	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.9630769230769231	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.8861538461538461	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.9630769230769231	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.8861538461538461	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.8092307692307692	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.7323076923076923	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.8092307692307692	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.7323076923076923	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.6553846153846153	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.5784615384615385	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.6553846153846153	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.5784615384615385	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.5015384615384615	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.5015384615384615	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.4400000000000000	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.3861538461538461	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.3092307692307692	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.2323076923076922	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.1553846153846153	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.0784615384615384	0.0000000000000000



0.0000000000000000 0.0246153846153846 0.5000000000000000

## 6.5 3.2.2 小節で作成した粒界モデル

### 6.5.1 回転角 $12.6^\circ$ ( $\arctan(1/9)$ )

New structure

1.0

32.32000000000000003	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	18.179999999999997	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	4.0400000000000000

144

Direct

0.6250000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.6180980296203221	0.1104315260748465	0.5000000000000000
0.6871177334171013	0.0122701695638718	0.5000000000000000
0.6802157630374233	0.1227016956387184	0.0000000000000000
0.6111960592406442	0.2208630521496931	0.0000000000000000
0.6042940888609662	0.3312945782245396	0.5000000000000000
0.6733137926577454	0.2331332217135649	0.5000000000000000
0.6664118222780675	0.3435647477884115	0.0000000000000000
0.5973921184812884	0.4417261042993862	0.0000000000000000
0.5904901481016105	0.5521576303742327	0.5000000000000000
0.6595098518983895	0.4539962738632581	0.5000000000000000
0.6526078815187116	0.5644277999381047	0.0000000000000000
0.5835881777219325	0.6625891564490792	0.0000000000000000
0.5766862073422546	0.7730206825239258	0.5000000000000000
0.6457059111390338	0.6748593260129511	0.5000000000000000
0.6388039407593558	0.7852908520877977	0.0000000000000000
0.5697842369625767	0.8834522085987724	0.0000000000000000
0.6319019703796779	0.8957223781626441	0.5000000000000000
0.7492354668342024	0.0245403391277437	0.0000000000000000
0.7423334964545245	0.1349718652025902	0.5000000000000000
0.8113532002513035	0.0368105086916155	0.5000000000000000
0.8044512298716257	0.1472420347664621	0.0000000000000000
0.7354315260748465	0.2454033912774368	0.0000000000000000
0.7285295556951686	0.3558349173522833	0.5000000000000000
0.7975492594919478	0.2576735608413086	0.5000000000000000
0.7906472891122698	0.3681050869161551	0.0000000000000000
0.7216275853154908	0.4662664434271299	0.0000000000000000
0.7147256149358128	0.5766979695019764	0.5000000000000000

0.7837453187325919	0.4785366129910018	0.5000000000000000
0.7768433483529140	0.5889681390658483	0.0000000000000000
0.7078236445561349	0.6871294955768229	0.0000000000000000
0.7009216741764570	0.7975610216516694	0.5000000000000000
0.7699413779732360	0.6993996651406947	0.5000000000000000
0.7630394075935581	0.8098311912155414	0.0000000000000000
0.6940197037967791	0.9079925477265162	0.0000000000000000
0.7561374372138803	0.9202627172903879	0.5000000000000000
0.8734709336684048	0.0490806782554873	0.0000000000000000
0.8665689632887268	0.1595122043303339	0.5000000000000000
0.9355886670855059	0.0613508478193592	0.5000000000000000
0.9286866967058280	0.1717823738942058	0.0000000000000000
0.8596669929090489	0.2699437304051804	0.0000000000000000
0.8527650225293710	0.3803752564800270	0.5000000000000000
0.9217847263261501	0.2822138999690523	0.5000000000000000
0.9148827559464722	0.3926454260438988	0.0000000000000000
0.8458630521496930	0.4908067825548735	0.0000000000000000
0.8389610817700152	0.6012383086297201	0.5000000000000000
0.9079807855667943	0.5030769521187454	0.5000000000000000
0.9010788151871163	0.6135084781935920	0.0000000000000000
0.8320591113903373	0.7116698347045666	0.0000000000000000
0.8251571410106594	0.8221013607794131	0.5000000000000000
0.8941768448074385	0.7239400042684384	0.5000000000000000
0.8872748744277605	0.8343715303432850	0.0000000000000000
0.8182551706309815	0.9325328868542597	0.0000000000000000
0.8803729040480827	0.9448030564181314	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.1111111111111111	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.1111111111111111	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.2222222222222222	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.3333333333333333	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.2222222222222222	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.3333333333333333	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.4444444444444444	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.5000000000000000	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.6111111111111112	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.7222222222222222	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.8333333333333334	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.9444444444444444	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.8333333333333334	0.5000000000000000

0.9375000000000000	0.7222222222222222	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.6111111111111112	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.5000000000000000	0.0000000000000000
0.3750000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.3819019703796779	0.1104315260748465	0.5000000000000000
0.3128822665828988	0.0122701695638718	0.5000000000000000
0.3197842369625767	0.1227016956387184	0.0000000000000000
0.3888039407593558	0.2208630521496931	0.0000000000000000
0.3957059111390338	0.3312945782245396	0.5000000000000000
0.3266862073422546	0.2331332217135649	0.5000000000000000
0.3335881777219326	0.3435647477884115	0.0000000000000000
0.4026078815187116	0.4417261042993862	0.0000000000000000
0.4095098518983895	0.5521576303742327	0.5000000000000000
0.3404901481016104	0.4539962738632581	0.5000000000000000
0.3473921184812884	0.5644277999381047	0.0000000000000000
0.4164118222780674	0.6625891564490792	0.0000000000000000
0.4233137926577454	0.7730206825239258	0.5000000000000000
0.3542940888609662	0.6748593260129511	0.5000000000000000
0.3611960592406442	0.7852908520877977	0.0000000000000000
0.4302157630374233	0.8834522085987724	0.0000000000000000
0.3680980296203221	0.8957223781626441	0.5000000000000000
0.2507645331657976	0.0245403391277437	0.0000000000000000
0.2576665035454755	0.1349718652025902	0.5000000000000000
0.1886467997486965	0.0368105086916155	0.5000000000000000
0.1955487701283743	0.1472420347664621	0.0000000000000000
0.2645684739251535	0.2454033912774368	0.0000000000000000
0.2714704443048314	0.3558349173522833	0.5000000000000000
0.2024507405080523	0.2576735608413086	0.5000000000000000
0.2093527108877302	0.3681050869161551	0.0000000000000000
0.2783724146845092	0.4662664434271299	0.0000000000000000
0.2852743850641872	0.5766979695019764	0.5000000000000000
0.2162546812674081	0.4785366129910018	0.5000000000000000
0.2231566516470860	0.5889681390658483	0.0000000000000000
0.2921763554438651	0.6871294955768229	0.0000000000000000
0.2990783258235430	0.7975610216516694	0.5000000000000000
0.2300586220267639	0.6993996651406947	0.5000000000000000
0.2369605924064419	0.8098311912155414	0.0000000000000000
0.3059802962032209	0.9079925477265162	0.0000000000000000
0.2438625627861197	0.9202627172903879	0.5000000000000000
0.1265290663315953	0.0490806782554873	0.0000000000000000
0.1334310367112732	0.1595122043303339	0.5000000000000000

0.0644113329144941	0.0613508478193592	0.5000000000000000
0.0713133032941720	0.1717823738942058	0.0000000000000000
0.1403330070909511	0.2699437304051804	0.0000000000000000
0.1472349774706290	0.3803752564800270	0.5000000000000000
0.0782152736738499	0.2822138999690523	0.5000000000000000
0.0851172440535278	0.3926454260438988	0.0000000000000000
0.1541369478503069	0.4908067825548735	0.0000000000000000
0.1610389182299848	0.6012383086297201	0.5000000000000000
0.0920192144332057	0.5030769521187454	0.5000000000000000
0.0989211848128836	0.6135084781935920	0.0000000000000000
0.1679408886096627	0.7116698347045666	0.0000000000000000
0.1748428589893406	0.8221013607794131	0.5000000000000000
0.1058231551925615	0.7239400042684384	0.5000000000000000
0.1127251255722395	0.8343715303432850	0.0000000000000000
0.1817448293690185	0.9325328868542597	0.0000000000000000
0.1196270959519173	0.9448030564181314	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.1111111111111111	0.0000000000000000
0.4375000000000000	0.2222222222222222	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.3333333333333333	0.0000000000000000
0.4375000000000000	0.4444444444444444	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.9444444444444444	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.8333333333333334	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.9444444444444444	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.8333333333333334	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.7222222222222222	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.6111111111111112	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.7222222222222222	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.6111111111111112	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.5000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.4444444444444444	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.3333333333333333	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.2222222222222222	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.1111111111111111	0.0000000000000000

## 6.5.2 回転角 $10.4^{\circ}$ ( $\arctan(1/11)$ )

New structure

1.0

32.3200000000000003	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	22.2199999999999989	0.0000000000000000

0.0000000000000000	0.0000000000000000	4.0400000000000000
176		
Direct		
0.6250000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.6193415158723425	0.0905357460425185	0.5000000000000000
0.6872433254042315	0.0082305223675017	0.5000000000000000
0.6815848412765741	0.0987662684100202	0.0000000000000000
0.6136830317446852	0.1810714920850371	0.0000000000000000
0.6080245476170277	0.2716072381275556	0.5000000000000000
0.6759263571489167	0.1893020144525388	0.5000000000000000
0.6702678730212592	0.2798377604950573	0.0000000000000000
0.6023660634893704	0.3621429841700741	0.0000000000000000
0.5967075793617129	0.4526787302125926	0.5000000000000000
0.6646093888936019	0.3703735065375758	0.5000000000000000
0.6589509047659444	0.4609092525800943	0.0000000000000000
0.5910490952340556	0.5432144762551112	0.0000000000000000
0.5853906111063981	0.6337502222976297	0.5000000000000000
0.6532924206382871	0.5514449986226129	0.5000000000000000
0.6476339365106296	0.6419807446651314	0.0000000000000000
0.5797321269787408	0.7242859683401482	0.0000000000000000
0.5740736428510833	0.8148217143826667	0.5000000000000000
0.6419754523829722	0.7325164907076499	0.5000000000000000
0.6363169682553148	0.8230522367501685	0.0000000000000000
0.5684151587234260	0.9053574604251853	0.0000000000000000
0.6306584841276575	0.9135879827926870	0.5000000000000000
0.7494866508084630	0.0164610447350034	0.0000000000000000
0.7438281666808055	0.1069967907775219	0.5000000000000000
0.8117299762126945	0.0246915671025051	0.5000000000000000
0.8060714920850370	0.1152273131450236	0.0000000000000000
0.7381696825531482	0.1975325368200404	0.0000000000000000
0.7325111984254907	0.2880682828625589	0.5000000000000000
0.8004130079573797	0.2057630591875421	0.5000000000000000
0.7947545238297222	0.2962988052300606	0.0000000000000000
0.7268527142978334	0.3786040289050775	0.0000000000000000
0.7211942301701759	0.4691397749475960	0.5000000000000000
0.7890960397020648	0.3868345512725792	0.5000000000000000
0.7834375555744074	0.4773702973150977	0.0000000000000000
0.7155357460425185	0.5596755209901145	0.0000000000000000
0.7098772619148611	0.6502112670326331	0.5000000000000000
0.7777790714467501	0.5679060433576162	0.5000000000000000
0.7721205873190926	0.6584417894001348	0.0000000000000000

0.7042187777872038	0.7407470130751517	0.0000000000000000
0.6985602936595463	0.8312827591176700	0.5000000000000000
0.7664621031914352	0.7489775354426533	0.5000000000000000
0.7608036190637778	0.8395132814851718	0.0000000000000000
0.6929018095318888	0.9218185051601886	0.0000000000000000
0.7551451349361205	0.9300490275276904	0.5000000000000000
0.8739733016169260	0.0329220894700067	0.0000000000000000
0.8683148174892685	0.1234578355125253	0.5000000000000000
0.9362166270211574	0.0411526118375084	0.5000000000000000
0.9305581428935000	0.1316883578800269	0.0000000000000000
0.8626563333616112	0.2139935815550438	0.0000000000000000
0.8569978492339537	0.3045293275975623	0.5000000000000000
0.9248996587658427	0.2222241039225455	0.5000000000000000
0.9192411746381852	0.3127598499650640	0.0000000000000000
0.8513393651062964	0.3950650736400809	0.0000000000000000
0.8456808809786389	0.4856008196825993	0.5000000000000000
0.9135826905105278	0.4032955960075826	0.5000000000000000
0.9079242063828704	0.4938313420501010	0.0000000000000000
0.8400223968509815	0.5761365657251178	0.0000000000000000
0.8343639127233241	0.6666723117676364	0.5000000000000000
0.9022657222552130	0.5843670880926196	0.5000000000000000
0.8966072381275556	0.6749028341351381	0.0000000000000000
0.8287054285956668	0.7572080578101551	0.0000000000000000
0.8230469444680093	0.8477438038526734	0.5000000000000000
0.8909487539998981	0.7654385801776566	0.5000000000000000
0.8852902698722407	0.8559743262201752	0.0000000000000000
0.8173884603403518	0.9382795498951920	0.0000000000000000
0.8796317857445833	0.9465100722626937	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.0909090909090909	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.0909090909090909	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.1818181818181818	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.2727272727272727	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.1818181818181818	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.2727272727272727	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.3636363636363636	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.3636363636363636	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.4545454545454545	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.5000000000000000	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.5909090909090909	0.0000000000000000

0.5000000000000000	0.6818181818181818	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.7727272727272727	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.8636363636363636	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.9545454545454546	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.8636363636363636	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.7727272727272727	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.6818181818181818	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.5909090909090909	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.5000000000000000	0.5000000000000000
0.3750000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.3806584841276574	0.0905357460425185	0.5000000000000000
0.3127566745957685	0.0082305223675017	0.5000000000000000
0.3184151587234259	0.0987662684100202	0.0000000000000000
0.3863169682553148	0.1810714920850371	0.0000000000000000
0.3919754523829722	0.2716072381275556	0.5000000000000000
0.3240736428510833	0.1893020144525388	0.5000000000000000
0.3297321269787408	0.2798377604950573	0.0000000000000000
0.3976339365106296	0.3621429841700741	0.0000000000000000
0.4032924206382871	0.4526787302125926	0.5000000000000000
0.3353906111063981	0.3703735065375758	0.5000000000000000
0.3410490952340556	0.4609092525800943	0.0000000000000000
0.4089509047659444	0.5432144762551112	0.0000000000000000
0.4146093888936019	0.6337502222976297	0.5000000000000000
0.3467075793617129	0.5514449986226129	0.5000000000000000
0.3523660634893704	0.6419807446651314	0.0000000000000000
0.4202678730212592	0.7242859683401482	0.0000000000000000
0.4259263571489167	0.8148217143826667	0.5000000000000000
0.3580245476170278	0.7325164907076499	0.5000000000000000
0.3636830317446852	0.8230522367501685	0.0000000000000000
0.4315848412765741	0.9053574604251853	0.0000000000000000
0.3693415158723426	0.9135879827926870	0.5000000000000000
0.2505133491915370	0.0164610447350034	0.0000000000000000
0.2561718333191944	0.1069967907775219	0.5000000000000000
0.1882700237873055	0.0246915671025051	0.5000000000000000
0.1939285079149630	0.1152273131450236	0.0000000000000000
0.2618303174468518	0.1975325368200404	0.0000000000000000
0.2674888015745093	0.2880682828625589	0.5000000000000000
0.1995869920426203	0.2057630591875421	0.5000000000000000
0.2052454761702778	0.2962988052300606	0.0000000000000000
0.2731472857021666	0.3786040289050775	0.0000000000000000
0.2788057698298241	0.4691397749475960	0.5000000000000000

0.2109039602979352	0.3868345512725792	0.5000000000000000
0.2165624444255926	0.4773702973150977	0.0000000000000000
0.2844642539574815	0.5596755209901145	0.0000000000000000
0.2901227380851389	0.6502112670326331	0.5000000000000000
0.2222209285532500	0.5679060433576162	0.5000000000000000
0.2278794126809074	0.6584417894001348	0.0000000000000000
0.2957812222127963	0.7407470130751517	0.0000000000000000
0.3014397063404537	0.8312827591176700	0.5000000000000000
0.2335378968085648	0.7489775354426533	0.5000000000000000
0.2391963809362222	0.8395132814851718	0.0000000000000000
0.3070981904681111	0.9218185051601886	0.0000000000000000
0.2448548650638796	0.9300490275276904	0.5000000000000000
0.1260266983830740	0.0329220894700067	0.0000000000000000
0.1316851825107315	0.1234578355125253	0.5000000000000000
0.0637833729788426	0.0411526118375084	0.5000000000000000
0.0694418571065000	0.1316883578800269	0.0000000000000000
0.1373436666383888	0.2139935815550438	0.0000000000000000
0.1430021507660463	0.3045293275975623	0.5000000000000000
0.0751003412341574	0.2222241039225455	0.5000000000000000
0.0807588253618148	0.3127598499650640	0.0000000000000000
0.1486606348937037	0.3950650736400809	0.0000000000000000
0.1543191190213611	0.4856008196825993	0.5000000000000000
0.0864173094894722	0.4032955960075826	0.5000000000000000
0.0920757936171296	0.4938313420501010	0.0000000000000000
0.1599776031490185	0.5761365657251178	0.0000000000000000
0.1656360872766759	0.6666723117676364	0.5000000000000000
0.0977342777447870	0.5843670880926196	0.5000000000000000
0.1033927618724444	0.6749028341351381	0.0000000000000000
0.1712945714043333	0.7572080578101551	0.0000000000000000
0.1769530555319907	0.8477438038526734	0.5000000000000000
0.1090512460001019	0.7654385801776566	0.5000000000000000
0.1147097301277593	0.8559743262201752	0.0000000000000000
0.1826115396596481	0.9382795498951920	0.0000000000000000
0.1203682142554167	0.9465100722626937	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.0909090909090909	0.0000000000000000
0.4375000000000000	0.1818181818181818	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.2727272727272727	0.0000000000000000
0.4375000000000000	0.3636363636363636	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.4545454545454545	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.9545454545454546	0.5000000000000000



0.0000000000000000	0.8636363636363636	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.9545454545454546	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.8636363636363636	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.7727272727272727	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.6818181818181818	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.7727272727272727	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.6818181818181818	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.5909090909090909	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.5909090909090909	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.5000000000000000	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.4545454545454545	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.3636363636363636	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.2727272727272727	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.1818181818181818	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.0909090909090909	0.0000000000000000

### 6.5.3 回轉角 $8.8^\circ$ ( $\arctan(1/13)$ )

New structure

1.0

32.3200000000000003	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	26.2600000000000016	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.0000000000000000	4.0400000000000000

208

Direct

0.6250000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.6202064688197040	0.0766964988847370	0.5000000000000000
0.6873159053438489	0.0058997306834413	0.5000000000000000
0.6825223741635528	0.0825962295681784	0.0000000000000000
0.6154129376394079	0.1533929977694741	0.0000000000000000
0.6106194064591118	0.2300894966542111	0.5000000000000000
0.6777288429832568	0.1592927284529154	0.5000000000000000
0.6729353118029606	0.2359892273376525	0.0000000000000000
0.6058258752788157	0.3067859955389482	0.0000000000000000
0.6010323440985197	0.3834824944236853	0.5000000000000000
0.6681417806226646	0.3126857262223895	0.5000000000000000
0.6633482494423686	0.3893822251071266	0.0000000000000000
0.5962388129182237	0.4601789933084223	0.0000000000000000
0.5914452817379275	0.5368754921931593	0.5000000000000000
0.6585547182620725	0.4660787239918636	0.5000000000000000
0.6537611870817763	0.5427752228766006	0.0000000000000000

0.5866517505576314	0.6135719910778964	0.0000000000000000
0.5818582193773354	0.6902684899626335	0.5000000000000000
0.6489676559014803	0.6194717217613377	0.5000000000000000
0.6441741247211843	0.6961682206460746	0.0000000000000000
0.5770646881970394	0.7669649888473705	0.0000000000000000
0.5722711570167432	0.8436614877321075	0.5000000000000000
0.6393805935408882	0.7728647195308118	0.5000000000000000
0.6345870623605921	0.8495612184155488	0.0000000000000000
0.5674776258364472	0.9203579866168445	0.0000000000000000
0.6297935311802960	0.9262577173002858	0.5000000000000000
0.7496318106876977	0.0117994613668826	0.0000000000000000
0.7448382795074017	0.0884959602516197	0.5000000000000000
0.8119477160315466	0.0176991920503239	0.5000000000000000
0.8071541848512505	0.0943956909350610	0.0000000000000000
0.7400447483271055	0.1651924591363567	0.0000000000000000
0.7352512171468095	0.2418889580210938	0.5000000000000000
0.8023606536709544	0.1710921898197980	0.5000000000000000
0.7975671224906584	0.2477886887045351	0.0000000000000000
0.7304576859665135	0.3185854569058308	0.0000000000000000
0.7256641547862174	0.3952819557905679	0.5000000000000000
0.7927735913103623	0.3244851875892721	0.5000000000000000
0.7879800601300662	0.4011816864740092	0.0000000000000000
0.7208706236059212	0.4719784546753049	0.0000000000000000
0.7160770924256252	0.5486749535600419	0.5000000000000000
0.7831865289497701	0.4778781853587463	0.5000000000000000
0.7783929977694741	0.5545746842434833	0.0000000000000000
0.7112835612453292	0.6253714524447790	0.0000000000000000
0.7064900300650331	0.7020679513295160	0.5000000000000000
0.7735994665891780	0.6312711831282203	0.5000000000000000
0.7688059354088820	0.7079676820129573	0.0000000000000000
0.7016964988847371	0.7787644502142531	0.0000000000000000
0.6969029677044409	0.8554609490989902	0.5000000000000000
0.7640124042285859	0.7846641808976944	0.5000000000000000
0.7592188730482898	0.8613606797824314	0.0000000000000000
0.6921094365241449	0.9321574479837272	0.0000000000000000
0.7544253418679938	0.9380571786671685	0.5000000000000000
0.8742636213753954	0.0235989227337652	0.0000000000000000
0.8694700901950994	0.1002954216185023	0.5000000000000000
0.9365795267192443	0.0294986534172066	0.5000000000000000
0.9317859955389483	0.1061951523019436	0.0000000000000000
0.8646765590148033	0.1769919205032393	0.0000000000000000

0.8598830278345072	0.2536884193879764	0.5000000000000000
0.9269924643586521	0.1828916511866807	0.5000000000000000
0.9221989331783560	0.2595881500714177	0.0000000000000000
0.8550894966542111	0.3303849182727134	0.0000000000000000
0.8502959654739151	0.4070814171574505	0.5000000000000000
0.9174054019980600	0.3362846489561547	0.5000000000000000
0.9126118708177640	0.4129811478408918	0.0000000000000000
0.8455024342936190	0.4837779160421875	0.0000000000000000
0.8407089031133229	0.5604744149269245	0.5000000000000000
0.9078183396374679	0.4896776467256289	0.5000000000000000
0.9030248084571718	0.5663741456103659	0.0000000000000000
0.8359153719330269	0.6371709138116616	0.0000000000000000
0.8311218407527308	0.7138674126963986	0.5000000000000000
0.8982312772768757	0.6430706444951030	0.5000000000000000
0.8934377460965797	0.7197671433798399	0.0000000000000000
0.8263283095724347	0.7905639115811358	0.0000000000000000
0.8215347783921387	0.8672604104658728	0.5000000000000000
0.8886442149162836	0.7964636422645770	0.5000000000000000
0.8838506837359875	0.8731601411493141	0.0000000000000000
0.8167412472118426	0.9439569093506098	0.0000000000000000
0.8790571525556915	0.9498566400340511	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.0769230769230769	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.0769230769230769	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.1538461538461539	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.2307692307692308	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.1538461538461539	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.2307692307692308	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.3076923076923077	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.3846153846153846	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.3076923076923077	0.5000000000000000
0.5625000000000000	0.3846153846153846	0.0000000000000000
0.5625000000000000	0.4615384615384616	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.5000000000000000	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.5769230769230769	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.6538461538461539	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.7307692307692307	0.5000000000000000
0.5000000000000000	0.8076923076923077	0.0000000000000000
0.5000000000000000	0.8846153846153846	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.9615384615384616	0.0000000000000000

0.9375000000000000	0.8846153846153846	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.8076923076923077	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.7307692307692307	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.6538461538461539	0.0000000000000000
0.9375000000000000	0.5769230769230769	0.5000000000000000
0.9375000000000000	0.5000000000000000	0.0000000000000000
0.3750000000000000	0.0000000000000000	0.0000000000000000
0.3797935311802961	0.0766964988847370	0.5000000000000000
0.3126840946561512	0.0058997306834413	0.5000000000000000
0.3174776258364472	0.0825962295681784	0.0000000000000000
0.3845870623605921	0.1533929977694741	0.0000000000000000
0.3893805935408882	0.2300894966542111	0.5000000000000000
0.3222711570167432	0.1592927284529154	0.5000000000000000
0.3270646881970394	0.2359892273376525	0.0000000000000000
0.3941741247211843	0.3067859955389482	0.0000000000000000
0.3989676559014803	0.3834824944236853	0.5000000000000000
0.3318582193773354	0.3126857262223895	0.5000000000000000
0.3366517505576315	0.3893822251071266	0.0000000000000000
0.4037611870817764	0.4601789933084223	0.0000000000000000
0.4085547182620725	0.5368754921931593	0.5000000000000000
0.3414452817379275	0.4660787239918636	0.5000000000000000
0.3462388129182236	0.5427752228766006	0.0000000000000000
0.4133482494423685	0.6135719910778964	0.0000000000000000
0.4181417806226646	0.6902684899626335	0.5000000000000000
0.3510323440985197	0.6194717217613377	0.5000000000000000
0.3558258752788157	0.6961682206460746	0.0000000000000000
0.4229353118029606	0.7669649888473705	0.0000000000000000
0.4277288429832568	0.8436614877321075	0.5000000000000000
0.3606194064591118	0.7728647195308118	0.5000000000000000
0.3654129376394079	0.8495612184155488	0.0000000000000000
0.4325223741635528	0.9203579866168445	0.0000000000000000
0.3702064688197039	0.9262577173002858	0.5000000000000000
0.2503681893123023	0.0117994613668826	0.0000000000000000
0.2551617204925983	0.0884959602516197	0.5000000000000000
0.1880522839684534	0.0176991920503239	0.5000000000000000
0.1928458151487495	0.0943956909350610	0.0000000000000000
0.2599552516728945	0.1651924591363567	0.0000000000000000
0.2647487828531905	0.2418889580210938	0.5000000000000000
0.1976393463290456	0.1710921898197980	0.5000000000000000
0.2024328775093416	0.2477886887045351	0.0000000000000000
0.2695423140334866	0.3185854569058308	0.0000000000000000

0.2743358452137826	0.3952819557905679	0.5000000000000000
0.2072264086896377	0.3244851875892721	0.5000000000000000
0.2120199398699338	0.4011816864740092	0.0000000000000000
0.2791293763940787	0.4719784546753049	0.0000000000000000
0.2839229075743748	0.5486749535600419	0.5000000000000000
0.2168134710502299	0.4778781853587463	0.5000000000000000
0.2216070022305259	0.5545746842434833	0.0000000000000000
0.2887164387546708	0.6253714524447790	0.0000000000000000
0.2935099699349669	0.7020679513295160	0.5000000000000000
0.2264005334108220	0.6312711831282203	0.5000000000000000
0.2311940645911180	0.7079676820129573	0.0000000000000000
0.2983035011152629	0.7787644502142531	0.0000000000000000
0.3030970322955590	0.8554609490989902	0.5000000000000000
0.2359875957714141	0.7846641808976944	0.5000000000000000
0.2407811269517102	0.8613606797824314	0.0000000000000000
0.3078905634758551	0.9321574479837272	0.0000000000000000
0.2455746581320062	0.9380571786671685	0.5000000000000000
0.1257363786246046	0.0235989227337652	0.0000000000000000
0.1305299098049006	0.1002954216185023	0.5000000000000000
0.0634204732807557	0.0294986534172066	0.5000000000000000
0.0682140044610518	0.1061951523019436	0.0000000000000000
0.1353234409851967	0.1769919205032393	0.0000000000000000
0.1401169721654928	0.2536884193879764	0.5000000000000000
0.0730075356413479	0.1828916511866807	0.5000000000000000
0.0778010668216439	0.2595881500714177	0.0000000000000000
0.1449105033457889	0.3303849182727134	0.0000000000000000
0.1497040345260849	0.4070814171574505	0.5000000000000000
0.0825945980019400	0.3362846489561547	0.5000000000000000
0.0873881291822360	0.4129811478408918	0.0000000000000000
0.1544975657063810	0.4837779160421875	0.0000000000000000
0.1592910968866771	0.5604744149269245	0.5000000000000000
0.0921816603625321	0.4896776467256289	0.5000000000000000
0.0969751915428282	0.5663741456103659	0.0000000000000000
0.1640846280669731	0.6371709138116616	0.0000000000000000
0.1688781592472692	0.7138674126963986	0.5000000000000000
0.1017687227231243	0.6430706444951030	0.5000000000000000
0.1065622539034203	0.7197671433798399	0.0000000000000000
0.1736716904275653	0.7905639115811358	0.0000000000000000
0.1784652216078613	0.8672604104658728	0.5000000000000000
0.1113557850837164	0.7964636422645770	0.5000000000000000
0.1161493162640125	0.8731601411493141	0.0000000000000000

0.1832587527881574	0.9439569093506098	0.0000000000000000
0.1209428474443085	0.9498566400340511	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.0000000000000000	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.0769230769230769	0.0000000000000000
0.4375000000000000	0.1538461538461539	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.2307692307692308	0.0000000000000000
0.4375000000000000	0.3076923076923077	0.5000000000000000
0.4375000000000000	0.3846153846153846	0.0000000000000000
0.4375000000000000	0.4615384615384616	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.9615384615384616	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.8846153846153846	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.9615384615384616	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.8846153846153846	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.8076923076923077	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.7307692307692307	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.8076923076923077	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.7307692307692307	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.6538461538461539	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.5769230769230769	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.6538461538461539	0.0000000000000000
0.0625000000000000	0.5769230769230769	0.5000000000000000
0.0625000000000000	0.5000000000000000	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.4615384615384616	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.3846153846153846	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.3076923076923077	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.2307692307692308	0.0000000000000000
0.0000000000000000	0.1538461538461539	0.5000000000000000
0.0000000000000000	0.0769230769230769	0.0000000000000000

# 参考文献

- [1] 八幡裕也,「小傾角粒界のシミュレーション」, (関西学院大学情報科学科卒業論文 2012).
- [2] 竹内伸,井野博満, 古林栄一,「金属材料の物理」, (日刊工業 1992).
- [3] 鈴木秀次,「転位論入門」, (アグネ 1967).
- [4] C. Kittel,「キッテル固体物理学入門」, (丸善株式会社 2005).
- [5] 原田智史,「粒界エネルギーの転位模型」, (関西学院大学情報科学科卒業論文 2011).
- [6] G. C. Hasson, J. B. Guillot and B. Barou, Phys. Stat. Sol. (a), **2**, (1970), 551.
- [7] 大槻徹,「アルミニウムの粒界エネルギーに関する研究」, (京都大学工学研究科博士論文 1990).
- [8] A. P. Sutton and V. Vitek , Phil. Trans. R. Soc. Lond. A **309**, 1-36 (1983).
- [9] 岩倉新太郎,「Lennard-Jones ポテンシャルによる粒界エネルギーの計算」, (関西学院大学情報科学科卒業論文 2011).
- [10] A. P. Sutton, CERMIC TRANSACTION **118**, 3-23 (2000).