CH_2 基および HCCH 基のオイラー角

1. 座標軸：

分子固定 (abc) 系

(CH_2 基)　c 軸を HCH の外向き２等分線方向、a 軸を分子面内で H—H に平行に取る。

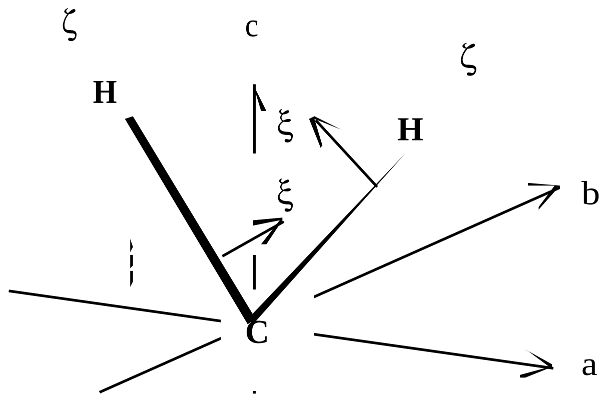
(HCCH 基)　a 軸を(水素化されている)炭素原子の方向に、c 軸を 2 回軸に取る。

★２個の HCC 面が同一平面のときには C_{2v} 対称で、ac 面がこの平面である。立体障害によって２個の CH 結合がもとの HCCH 面に関して同じ方向にずれているときには、a 軸と c 軸もずれることになる。

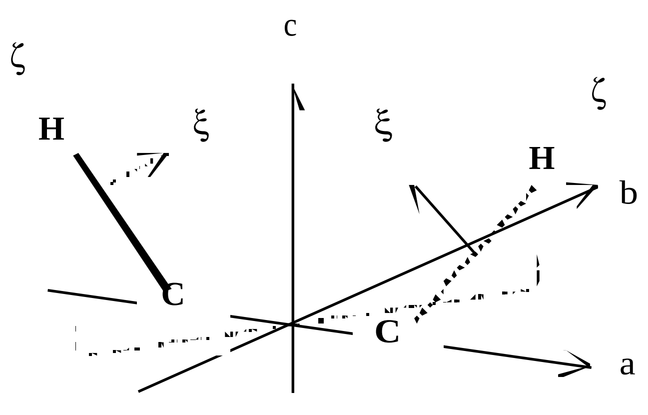
★２個の HCC 面が角度を持つときには、分子は C_2 対称を持ち ac 面は２つの平面を２等分する平面（鋭角をなす方を２等分する面、すなわち、立体障害がないとしたときの HCCH 面）の上にある。

CH 固定 (ξηζ) 系：ζ 軸を CH 方向に取る。

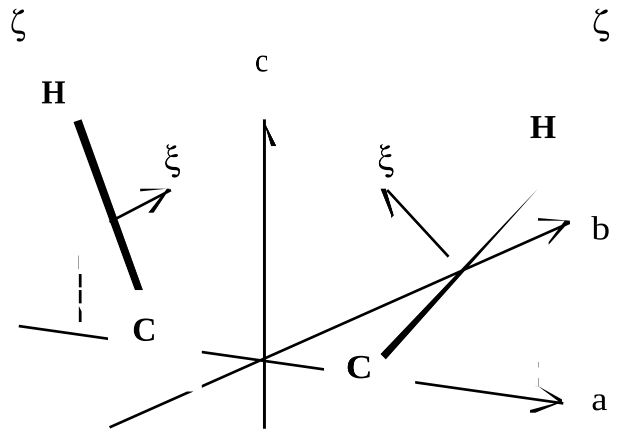
(CH_2 基) ξ 軸を、HCH 面内で C_2 軸に向かう方向に取る。



(HCCH 基) ξ 軸を、HCC 面内で C_2 軸に向かう方向に取る。



(ねじれ形：C_2 対称)



(平面形：C_{2v} 対称)

HCCCH タイプのユニットに対しても、HCCH ユニットと同じ形になる。

表面固定（xyz）系

z 軸を、表面の外向き法線方向に取る。

x 軸を、立体障害がないとしたときに CH_2 基あるいは HCCH 基が面をそろえて並ぶ方向に取る。

2. 配向した CH_2 基、HCCH 基の表面固定系に対するオイラー角

３つの軸まわりの回転 $R_z(\chi)\ R_{b'}(\theta)\ R_c(\phi)$ により(abc) 系を (xyz) 系に重ねるときの回転角 (χ, θ, ϕ) をオイラー角という。

θ は、z 軸と c 軸の間の角で、x y 面と ab 面の間の二面角でもある。

ϕ は、xy 面と ab 面の交線と b 軸の間の角で、z 軸と c 軸が作る面と分子面がなす角でもある。

χ は、xy 面と ab 面の交線と y 軸の間の角で、z 軸と c 軸が作る面と xz 面がなす角でもある。

表面が同一の官能基で覆われている場合には、隣り合って角突き合いをしている CH 結合のペアをユニットに取れば、CH_2 基であろうと HCCH 基であろうと、２個の CH 結合は互いにねじれの位置にある。また、ペアに固定した座標系と表面固定座標系を一致させることが出来る。（しかし、CH_2 基によるペアと HCCH 基によるペアでは必要とする角度に違いがあるため、これを出す段階に苦心がある。）

水素化された部分の配列が 90° 向きを変えるためには、ステップが必要である。そして、そのステップの中段には CH 基が存在する。

2a. 配向した CH_2 基のオイラー角

水素化ダイヤモンド表面の CH_2 基は、相互の間に立体障害がなければ、表面に垂直でしかも分子面を平行にして並ぶ。一方、水素原子間の立体障害により垂直軸（c 軸）まわりのねじれ角 γ と傾き角 θ の両方を持っているとすれば、CH_2 基に対する回転操作としては次のようなものが考えられる。なお、

現実問題としての平面分子の配向の記述は、z 軸からの主軸の傾き角と分子面（and/or ２つの表面の交線の方向）と表面の２面角で表現する方がわかりやすい。よって、下では必要に応じて分子面（ac 面）と表面（xy 面）の間の 2 面角 τ とオイラー角との関係も併せて記すことにする。

下記の結果を出す際の基本方式は、(1) a 軸、b 軸、c 軸方向の単位ベクトルを (xyz) 座標系で見た座標成分として表す。この作業を、２面角を使ったものとオイラー角を使ったものと両方で行う。(2) b 軸と z 軸がなす角は２面角と一致する。よって、この２つの軸に沿った単位ベクトルの内積の絶対値が cosτ であることから、オイラー角と２面角の関係が得られる。（２面角は鋭角に取るから、$\cos\tau > 0$ である。）(3) 下に示すオイラー角による表式と２面角を使った表式が一致するように、オイラー角を決めてやる。

$$\boldsymbol{e}_a = \begin{bmatrix} \cos\chi\cos\phi\cos\theta - \sin\chi\sin\phi \\ -\sin\chi\cos\phi\cos\theta - \cos\chi\sin\phi \\ \cos\phi\sin\theta \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{e}_b = \begin{bmatrix} \cos\chi\sin\phi\cos\theta + \sin\chi\cos\phi \\ -\sin\chi\sin\phi\cos\theta + \cos\chi\cos\phi \\ \sin\phi\sin\theta \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{e}_c = \begin{bmatrix} -\cos\chi\sin\theta \\ +\sin\chi\sin\theta \\ +\cos\theta \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{e}_z\cdot\boldsymbol{e}_b = \sin\phi\sin\theta$$

（$R_c(\phi)$：b 軸が z 軸に垂直になるように、すなわち、z 軸と c 軸が作る面に垂直にする。）
（$R_{b'}(\pm\theta)$：c 軸を z 軸に重ねる、すなわち、xy 面と ab 面を重ねる。）
（$R_z(\chi)$：b 軸を y 軸に重ねる、すなわち、xz 面と分子面を重ねる。）

z 軸まわりのねじれだけがある場合：隣り合う CH_2 基が同じ向きにねじれることで H — H 間隔を広げる。

$R_z(\chi = \gamma)\, R_{b'}(\theta = 0)\, R_c(\phi = 0)$ または $R_z(\chi = -\gamma)\, R_{b'}(\theta = 0)\, R_c(\phi = 0)$、$\tau = \pi/2$ (Eu-1)

$\sin\chi = \sin\gamma$、$\sin2\chi = \sin2\gamma$、$\sin3\chi = \sin3\gamma$ $\cos\chi = \cos\gamma$、$\cos2\chi = \cos2\gamma$、$\cos3\chi = \cos3\gamma$

$\sin\phi = 0$、$\sin2\phi = 0$、$\sin3\phi = 0$ $\cos\phi = 1$、$\cos2\phi = -1$、$\cos3\phi = 1$

$(\sin\gamma / -\sin\gamma)$, $(\sin2\gamma / -\sin2\gamma)$, $(\sin3\gamma / -\sin3\gamma)$ pairs

隣り合う CH_2 基がともに $+\gamma$ または $-\gamma$ のどちらかをとり、互い違いにはならない。

（傾きだけがある場合-1：隣り合う CH_2 基が x 軸まわりに回転し、表面に向けて ±y 軸方向に倒れることで H — H 間隔を広げる。）

$$\boldsymbol{e}_a = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}、\boldsymbol{e}_b = \begin{bmatrix} 0 \\ \cos\theta \\ \sin\theta \end{bmatrix}、\boldsymbol{e}_c = \begin{bmatrix} 0 \\ -\sin\theta \\ +\cos\theta \end{bmatrix}、\quad \boldsymbol{e}_z \cdot \boldsymbol{e}_b = \sin\theta$$

$R_z(\chi = -\pi/2)\ R_{b'}(-\theta)\ R_c(\phi = \pi/2)$ **または** $R_z(\chi = -\pi/2)\ R_{b'}(\theta)\ R_c(\phi = \pi/2)$、 (Eu-2a)

$\tau = \pi/2 - \theta$ (**厳密には** $\cos\tau = \sin\theta$)

$\sin\chi = -1$、$\sin2\chi = 0$、$\sin3\chi = +1$　　$\cos\chi = 0$、$\cos2\chi = -1$、$\cos3\chi = 0$

$\sin\phi = +1$、$\sin2\phi = 0$、$\sin3\phi = -1$　　$\cos\phi = 0$、$\cos2\phi = -1$、$\cos3\phi = 0$

($\sin\theta$ /$-\sin\theta$） pairs

隣り合う CH_2 **基は交互に** $+\theta$ **と** $-\theta$ **をとる。**

（傾きだけがある場合-2：隣り合う CH_2 **基が** y **軸まわりに回転し、表面に向けて** ±x **軸方向に倒れることで** H — H **間隔を広げる。）**

$$\boldsymbol{e}_a = \begin{bmatrix} \cos\theta \\ 0 \\ -\sin\theta \end{bmatrix}、\boldsymbol{e}_b = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}、\boldsymbol{e}_c = \begin{bmatrix} +\sin\theta \\ 0 \\ +\cos\theta \end{bmatrix}、\quad \boldsymbol{e}_z \cdot \boldsymbol{e}_b = 0$$

$R_z(\chi = \pi)\ R_{b'}(\theta)\ R_c(\phi = \pi)$ **または** $R_z(\chi = -\pi)\ R_{b'}(-\theta)\ R_c(\phi = \pi)$、$\tau = \pi/2$ (Eu-2b)

$\sin\chi = 0$、$\sin2\chi = 0$、$\sin3\chi = 0$　　$\cos\chi = -1$、$\cos2\chi = +1$、$\cos3\chi = -1$

$\sin\phi = 0$、$\sin2\phi = 0$、$\sin3\phi = 0$　　$\cos\phi = -1$、$\cos2\phi = +1$、$\cos3\phi = -1$

either $\sin\theta$ /or $-\sin\theta$

隣り合う CH_2 **基は、交互に** $+\theta$ **または** $-\theta$ **のどちらかをとり、逆符号のものが隣り合わせにはならない。**

（ねじれと傾きの両方がある場合）

実際の配向には、次の (a) から (c) に記すケースが考えられる。オイラー角は、それぞれのケースで違う。

(a)　y 軸方向への傾き（分子軸が yz **面の上にあり、**xy **面への射影は** y **軸と重なる）。**

ねじれと同時に y **軸方向への傾きがある場合である。**

$$\boldsymbol{e}_a = \begin{bmatrix} \cos\gamma \\ \sin\gamma\cos\theta \\ \sin\gamma\sin\theta \end{bmatrix}、\boldsymbol{e}_b = \begin{bmatrix} -\sin\gamma \\ \cos\gamma\cos\theta \\ \cos\gamma\sin\theta \end{bmatrix}、\boldsymbol{e}_c = \begin{bmatrix} 0 \\ -\sin\theta \\ +\cos\theta \end{bmatrix}、\quad \boldsymbol{e}_z \cdot \boldsymbol{e}_b = \cos\gamma\sin\theta$$

$\sin\chi = -1$、$\cos\chi = 0$（**すなわち** $\chi = 3\pi/2$、$-\pi/2$)

$\sin\phi = \cos\gamma$、$\cos\phi = \sin\gamma$（**すなわち** $\phi = \pi/2 - \gamma$)、$\cos\gamma = \cos\tau/\sin\theta$

$\sin\chi = -1$、$\sin2\chi = 0$、$\sin3\chi = -1$　　$\cos\chi = 0$、$\cos2\chi = -1$、$\cos3\chi = 0$

$\sin\phi = \cos\gamma = \cos\tau/\sin\theta$、　　$\sin2\phi = \sin2\gamma = 2\cos\tau\sqrt{\sin^2\theta - \cos^2\tau}\,/\sin^2\theta$,

$\cos\phi = \sin\gamma = \sqrt{\sin^2\theta - \cos^2\tau}/\sin\theta$、 $\cos 2\phi = -\cos 2\gamma = (\sin^2\theta - 2\cos^2\tau)/\sin^2\theta$、

$\sin 3\phi = -\cos 3\gamma = \cos\tau(3\sin^2\theta - 4\cos^2\tau)/\sin^3\theta$、 $\cos 3\phi = -\sin 3\gamma = (\sin^2\theta - 4\cos^2\tau)\sqrt{\sin^2\theta - \cos^2\tau}/\sin^3\theta$

(Eu-3a)

either ($\sin\gamma$、$\sin 2\gamma$、$\sin 3\gamma$) set or ($-\sin 2\gamma$、$-\sin 2\gamma$、$-\sin 3\gamma$) set
($\sin\theta$ /- $\sin\theta$) pair

隣り合う CH_2 基は同じく $+\gamma$ または $-\gamma$ のどちらかをとり、θ が交互に符号を交替する。

**(b) x 軸方向への傾き（分子軸が xz 面の上にあり、xy 面射影は x 軸と重なる）である。
ねじれと同時に x 軸方向への傾きがある場合である。**

$$\boldsymbol{e}_a = \begin{bmatrix} \cos\gamma\cos\theta \\ \sin\gamma \\ -\cos\gamma\sin\theta \end{bmatrix}、\ \boldsymbol{e}_b = \begin{bmatrix} -\sin\gamma\cos\theta \\ \cos\gamma \\ \sin\gamma\sin\theta \end{bmatrix}、\ \boldsymbol{e}_c = \begin{bmatrix} \sin\theta \\ 0 \\ \cos\theta \end{bmatrix}、\quad \boldsymbol{e}_z\cdot\boldsymbol{e}_b = \sin\gamma\sin\theta$$

$\sin\chi = 0$、$\cos\chi = -1$（**すなわち** $\chi = \pi$）
$\sin\phi = \sin\gamma$, $\cos\phi = -\cos\gamma$（**すなわち**$\phi = \pi - \gamma$), $\sin\gamma = \cos\tau/\sin\theta$

$\sin\chi = 0$, $\sin 2\chi = 0$, $\sin 3\chi = 0$, $\cos\chi = -1$, $\cos 2\chi = +1$, $\cos 3\chi = -1$

$\sin\phi = \sin\gamma = \cos\tau/\sin\theta$, $\sin 2\phi = -\sin 2\gamma = -2\cos\tau\sqrt{\sin^2\theta - \cos^2\tau}/\sin^2\theta$,

$\cos\phi = -\cos\gamma = -\sqrt{\sin^2\theta - \cos^2\tau}/\sin\theta$, $\cos 2\phi = \cos 2\gamma = (\sin^2\theta - 2\cos^2\tau)/\sin^2\theta$,

$\sin 3\phi = \sin 3\gamma = \mathrm{cost}(3\sin^2\theta - 4\cos^2\tau)/\sin^3\theta$,

$\cos 3\phi = -\cos 3\gamma = -(\sin^2\theta - 4\cos^2\tau)\sqrt{\sin^2\theta - \cos^2\tau}/\sin^3\theta$ (Eu-3b)

($+\gamma$, $+\theta$) set, ($+\gamma$, $-\theta$) set, ($-\gamma$, $+\theta$) set, or ($-\gamma$, $-\theta$) set

隣り合う CH_2 基は同じく $+\gamma$ または $-\gamma$ のどちらかをとり、θ も同じ符号をとる。

**(c) ねじれと傾きがあるが、xy 面への分子軸の射影が x 軸と角 γ をなしている。
上のケース (b) から χ^* だけの回転として考えることが出来る。**

$$\boldsymbol{e}_a = \begin{bmatrix} \cos\chi^*\cos\gamma\cos\theta - \sin\chi^*\sin\gamma \\ +\sin\chi^*\cos\gamma\cos\theta - \cos\chi^*\sin\gamma \\ -\cos\gamma\sin\theta \end{bmatrix}、\ \boldsymbol{e}_b = \begin{bmatrix} -\cos\chi^*\sin\gamma\cos\theta - \sin\chi^*\cos\gamma \\ -\sin\chi^*\sin\gamma\cos\theta + \cos\chi^*\cos\gamma \\ \sin\gamma\sin\theta \end{bmatrix}、$$

$$\boldsymbol{e}_c = \begin{bmatrix} \cos\chi^*\sin\theta \\ \sin\chi^*\sin\theta \\ \cos\theta \end{bmatrix}、\quad \boldsymbol{e}_z\cdot\boldsymbol{e}_b = \sin\gamma\sin\theta$$

$\sin\chi = \sin\chi^*$、$\cos\chi = -\cos\chi^*$（すなわち $\chi = \pi - \chi^*$）
$\sin\phi = \sin\gamma$、$\cos\phi = -\cos\gamma$（すなわち $\phi = \pi - \gamma$）、$\sin\gamma = \cos\tau/\sin\theta$

$\sin\chi = \sin\chi^*$、$\sin 2\chi = -\sin 2\chi^*$、$\sin 3\chi = \sin 3\chi^*$
$\cos\chi = -\cos\chi^*$、$\cos 2\chi = +\cos 2\chi^*$、$\cos 3\chi = -\cos 3\chi^*$

$\sin\phi = \sin\gamma = \cos\tau/\sin\theta$、　$\sin 2\phi = -\sin 2\gamma = -2\cos\tau\sqrt{\sin^2\theta - \cos^2\tau}/\sin^2\theta$、

$\cos\phi = -\cos\gamma = -\sqrt{\sin^2\theta - \cos^2\tau}/\sin\theta$、　$\cos 2\phi = \cos 2\gamma = (\sin^2\theta - 2\cos^2\tau)/\sin^2\theta$、

$\sin 3\phi = \sin 3\gamma = \cos\tau\,(3\sin^2\theta - 4\cos^2\tau)/\sin^3\theta$、

$$\cos 3\phi = -\cos 3\gamma = -(\sin^2\theta - 4\cos^2\tau)\sqrt{\sin^2\theta - \cos^2\tau}/\sin^3\theta \qquad \text{(Eu-3c)}$$

either ($\sin\gamma$、$\sin 2\gamma$、in3γ) set or ($-\sin 2\gamma$、$-\sin 2\gamma$、$-\sin 3\gamma$) set
for either one of the ($+\gamma$, $+\theta$) set、 ($+\gamma$, $-\theta$) set、 ($-\gamma$, $+\theta$) set、 or ($-\gamma$, $-\theta$) set

隣り合う CH_2 **基は同じく** $+\gamma$ **または** $-\gamma$ **のどちらかをとり、**θ **も同じ符号をとる。**χ^* **の符号が交代する。**

2b. 配向した HCCH 基のオイラー角

HCCH ユニットが平面形 (C_{2v}) を取っているときには、「ねじれ」を考えなくて良いので、xz **面に対して** ac **面がなす** a **軸まわりの回転角** τ **が与えられれば用が足りる。隣り合うペアについて見ると、下のようになる。**

$R_z(\chi = -\pi/2)\ R_{b'}(\theta = -\tau)\ R_c(\phi = \pi/2)$、$R_z(\chi = -\pi/2)\ R_{b'}(\theta = +\tau)\ R_c(\phi = \pi/2)$、 $\tau = \pi/2 - \theta$ (Eu-4)
$\sin\chi = -1$、$\sin 2\chi = 0$、$\sin 3\chi = +1$　$\cos\chi = 0$、$\cos 2\chi = -1$、$\cos 3\chi = 0$
$\sin\phi = +1$、$\sin 2\phi = 0$、$\sin 3\phi = -1$　$\cos\phi = 0$、$\cos 2\phi = -1$、$\cos 3\phi = 0$
$\sin\theta = -(\pm)\sin\tau$　$\cos\theta = \cos\tau$
($-\sin\tau$ /$+\sin\tau$) pair

隣り合う HCCH **基は交互に** $-\tau$ **と** $+\tau$ **をとる。**

HCCH ユニットがねじれ形 (C_2) を取っているときには、xz **面と** ac **面ひいては２つの座標系そのものが一致していると考えて良いであろう。**

CH 固定 ($\xi\eta\zeta$) 系を分子固定 (abc) 系に重ねるためのオイラー角

CH_2 基

HCH **角を** α **とするとき、２個の** CH **結合の** ($\xi\eta\zeta$) **座標に対して次の回転操作になる。**

$R_c(\chi = \pi)\ R_\eta(\theta = \alpha/2)\ R_\zeta(\phi = 0)$,　$R_c(\chi = 0)\ R_\eta(\theta = \alpha/2)\ R_\zeta(\phi = 0)$ (Eu-5)
$\sin\chi = 0$、$\sin 2\chi = 0$、$\sin 3\chi = 0$　$\cos\chi = \pm 1$、$\cos 2\chi = +1$、$\cos 3\chi = \pm 1$

$\sin\phi = 0$、$\sin 2\phi = 0$、$\sin 3\phi = 0$　　　$\cos\phi = +1$、$\cos 2\phi = +1$、$\cos 3\phi = +1$

$\sin\theta = \sin(\alpha/2)$、　　　$\cos\theta = \cos(\alpha/2)$

HCCH 基 (平面形、C_{2v} 対称)

HCH 角を α とするとき、2 個の CH 結合の $(\xi\eta\zeta)$ 座標に対して次の回転操作になる。

$$R_c(\chi = \pi)\, R_\eta(\theta = \alpha - \pi/2)\, R_\zeta(\phi = 0)、R_c(\chi = 0)\, R_\eta(\theta = \alpha - \pi/2)\, R_\zeta(\phi = 0) \quad \text{(Eu-6)}$$

$\sin\chi = 0$、$\sin 2\chi = 0$、$\sin 3\chi = 0$、　　　$\cos\chi = \pm 1$、$\cos 2\chi = +1$、$\cos 3\chi = \pm 1$

$\sin\phi = 0$、$\sin 2\phi = 0$、$\sin 3\phi = 0$、　　　$\cos\phi = +1$、$\cos 2\phi = +1$、$\cos 3\phi = +1$

$\sin\theta = -\cos\alpha$,、　　　$\cos\theta = \sin\alpha$

HCCH 基 (ねじれ形、C_2 対称)

分子固定系に対する CH 基の配向を定義するときに、構造化学で一般的に用いられる CCH 角 α と２個の CCH 面の間の２面角（面の交線の上の点から２つの面上に引いた垂線がなす角）τ を用いるとき、２個の CH 結合の $(\xi\eta\zeta)$ 座標に対する回転操作の変換関係は次のようにして求められる。

ξ 軸と ζ 軸は CCH 面の上に乗っていること、及び、CCH 面と ac 面との間の２面角は $\tau/2$ であることに注意して、$(\xi\eta\zeta)$座標系の３つの軸方向の単位ベクトルを (abc) 座標系で表すと下式を得る。（a 軸の正方向・b 軸側に傾いている CH 基に対するものと、それとは反対向きに傾いている CH 基に対するものを左右に並べて示す。）

$$e_\xi = \begin{bmatrix} -\sin\alpha \\ -\cos\alpha \sin(\tau/2) \\ -\cos\alpha \cos(\tau/2) \end{bmatrix} \qquad e_\xi = \begin{bmatrix} +\sin\alpha \\ +\cos\alpha \sin(\tau/2) \\ -\cos\alpha \cos(\tau/2) \end{bmatrix} \quad \text{(Eu-7a)}$$

$$e_\eta = \begin{bmatrix} 0 \\ -\cos(\tau/2) \\ +\sin(\tau/2) \end{bmatrix} \qquad e_\eta = \begin{bmatrix} 0 \\ +\cos(\tau/2) \\ +\sin(\tau/2) \end{bmatrix} \quad \text{(Eu-7b)}$$

$$e_\zeta = \begin{bmatrix} -\cos\alpha \\ +\sin\alpha \sin(\tau/2) \\ +\sin\alpha \cos(\tau/2) \end{bmatrix} \qquad e_\zeta = \begin{bmatrix} +\cos\alpha \\ -\sin\alpha \sin(\tau/2) \\ +\sin\alpha \cos(\tau/2) \end{bmatrix} \quad \text{(Eu-7c)}$$

$\boldsymbol{e}_\zeta$ と $\boldsymbol{e}_c$ の間の角 θ は内積 $\boldsymbol{e}_z \cdot \boldsymbol{e}_c = \cos\theta$ から求められる。

$$\cos\theta = \sin\alpha\cos(\tau/2), \quad \sin\theta = \sqrt{1 - \sin^2\alpha \cos^2(\tau/2)} \quad \text{(Eu-8)}$$

$\boldsymbol{e}_\zeta$と $\boldsymbol{e}_c$ の両方に垂直な単位ベクトル $\boldsymbol{e}_{\eta'}$ は、ベクトル積 $\boldsymbol{e}_\zeta \times \boldsymbol{e}_c$ の向きを正方向にすると

$$e_{\eta'} = \begin{bmatrix} +\sin\alpha \sin(\tau/2)/\sin\theta \\ +\cos\alpha/\sin\theta \\ +0 \end{bmatrix} \qquad e_{\eta'} = \begin{bmatrix} -\sin\alpha \sin(\tau/2)/\sin\theta \\ -\cos\alpha/\sin\theta \\ +0 \end{bmatrix} \quad \text{(Eu-9)}$$

となり、$\boldsymbol{e}_{\eta'}$ **と** $\boldsymbol{e}_{\eta}$ **の間の角** ϕ **と** $\boldsymbol{e}_{\eta'}$ **と** $\boldsymbol{e}_{b}$ **の間の角** χ **は次のように与えられる。**

$$\sin\phi = \frac{\sin(\tau/2)}{\sin\theta} \qquad \sin\phi = \frac{\sin(\tau/2)}{\sin\theta}$$

$$\cos\phi = -\frac{\cos\alpha\cos(\tau/2)}{\sin\theta} \qquad \cos\phi = -\frac{\cos\alpha\cos(\tau/2)}{\sin\theta} \tag{Eu-10}$$

$$\sin\chi = \frac{\sin\alpha\sin(\tau/2)}{\sin\theta} \qquad \sin\chi = -\frac{\sin\alpha\sin(\tau/2)}{\sin\theta}$$

$$\cos\chi = \frac{\cos\alpha}{\sin\theta} \qquad \cos\chi = -\frac{\cos\alpha}{\sin\theta} \tag{Eu-11}$$

２個の CH **結合に対して、**$\phi \leftrightarrow \phi$、$\chi \leftrightarrow \chi + \pi$ **の関係にあることがわかる。座標変換に当たっては、**χ **に関する三角関数のうちで** χ **と** 3χ **の関数は２個の** CH **結合に対して逆符号になることに注意しよう。**

平面形 HCCH **に対する** (abc) **座標系をここと同じように取るときには、**χ **に関する部分が** $\chi \leftrightarrow \pi - \chi$ **となる。**

上で求めたオイラー角の表式を使えば、ファイル「**分子固定から空間固定へ**.doc」**により、**CH **結合に対する** SFG **テンソル成分を使って** CH_2 **基と** HCCH **基の分子固定** SFG **テンソルを表す表式を得ることが出来る。また、ファイル**「CH_2 **の配向とテンソル成分**.doc」**も参考になるであろう。**