

## 表面の回転

SFG テンソルを表面固定座標系(xyz)系の成分として表したのから、表面が回転した後の座標系(XYZ)系の成分へ変換したものを記す。

### 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<sub>2</sub> 基あるいは HCCH 基が面をそろえて並ぶ方向に取る。

### 実験室固定 (XYZ) 系

(xyz) 系を z 軸まわりに  $\chi$  だけ回したものの。

ファイル「変換行列 (xyz).doc」において、 $\phi = 0, \theta = 0$  と置いて、以下の関係式が求まる。

$$\begin{aligned}
 (\text{ppp}) \quad \chi_{XXX} &= -(1/4)(\chi_{xxx} - \chi_{yyx} - \chi_{xyy} - \chi_{yxy})(\cos\chi - \cos 3\chi) + \chi_{xxx}\cos\chi \\
 &\quad - (1/4)(\chi_{yyy} - \chi_{xxy} - \chi_{xyx} - \chi_{yxx})(\sin\chi + \sin 3\chi) + \chi_{yyy}\sin\chi \\
 \chi_{XZZ} &= \chi_{xxz}\cos\chi + \chi_{yzz}\sin\chi \\
 \chi_{ZXZ} &= \chi_{zxx}\cos\chi + \chi_{zyz}\sin\chi \\
 \chi_{ZZX} &= \chi_{zxx}\cos\chi + \chi_{zyz}\sin\chi \\
 \chi_{ZXX} &= (1/2)[(\chi_{zxx} + \chi_{zyy}) + (\chi_{zxx} - \chi_{zyy})\cos 2\chi] + (1/2)(\chi_{zxy} + \chi_{zyx})\sin 2\chi \\
 \chi_{XZX} &= (1/2)[(\chi_{zxx} + \chi_{zyy}) + (\chi_{zxx} - \chi_{zyy})\cos 2\chi] + (1/2)(\chi_{zyx} + \chi_{zxy})\sin 2\chi \\
 \chi_{XXZ} &= (1/2)[(\chi_{xxz} + \chi_{yyz}) + (\chi_{xxz} - \chi_{yyz})\cos 2\chi] + (1/2)(\chi_{xyx} + \chi_{yxz})\sin 2\chi \\
 \chi_{ZZZ} &= \chi_{zzz}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\text{spp}) \quad \chi_{YXX} &= -(1/4)(\chi_{xxx} - \chi_{yyx} - \chi_{xyy} - \chi_{yxy})(\sin\chi + \sin 3\chi) - \chi_{xyy}\sin\chi \\
 &\quad + (1/4)(\chi_{yyy} - \chi_{xxy} - \chi_{xyx} - \chi_{yxx})(\cos\chi - \cos 3\chi) + \chi_{yxx}\cos\chi \\
 \chi_{YZZ} &= -\chi_{xxz}\sin\chi + \chi_{yzz}\cos\chi \\
 \chi_{YZX} &= -(1/2)(\chi_{zxx} - \chi_{zyy})\sin 2\chi + (1/2)[(\chi_{zyx} - \chi_{zxy}) + (\chi_{zyx} + \chi_{zxy})\cos 2\chi] \\
 \chi_{YXZ} &= -(1/2)(\chi_{xxz} - \chi_{yyz})\sin 2\chi + (1/2)[(\chi_{yxz} - \chi_{xyx}) + (\chi_{yxz} + \chi_{xyx})\cos 2\chi]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\text{ssp}) \quad \chi_{YYX} &= (1/4)(\chi_{xxx} - \chi_{yyx} - \chi_{xyy} - \chi_{yxy})(\cos\chi - \cos 3\chi) + \chi_{yyx}\cos\chi \\
 &\quad + (1/4)(\chi_{yyy} - \chi_{xxy} - \chi_{xyx} - \chi_{yxx})(\sin\chi + \sin 3\chi) + \chi_{xxy}\sin\chi \\
 \chi_{YYZ} &= (1/2)[(\chi_{xxz} + \chi_{yyz}) - (\chi_{xxz} - \chi_{yyz})\cos 2\chi] - (1/2)(\chi_{xyx} + \chi_{yxz})\sin 2\chi
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 (\text{psp}) \quad \chi_{XYX} &= -(1/4)(\chi_{xxx} - \chi_{yyx} - \chi_{xyy} - \chi_{yxy})(\sin\chi + \sin 3\chi) - \chi_{yxy}\sin\chi \\
 &\quad + (1/4)(\chi_{yyy} - \chi_{xxy} - \chi_{xyx} - \chi_{yxx})(\cos\chi - \cos 3\chi) + \chi_{xyx}\cos\chi \\
 \chi_{ZYZ} &= -\chi_{zxx}\sin\chi + \chi_{zyz}\cos\chi \\
 \chi_{XYZ} &= -(1/2)(\chi_{xxz} - \chi_{yyz})\sin 2\chi + (1/2)[(\chi_{xyx} - \chi_{yxz}) + (\chi_{xyx} + \chi_{yxz})\cos 2\chi] \\
 \chi_{ZYX} &= -(1/2)(\chi_{zxx} - \chi_{zyy})\sin 2\chi + (1/2)[(\chi_{zyx} - \chi_{zxy}) + (\chi_{zyx} + \chi_{zxy})\cos 2\chi]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\text{sps}) \quad \chi_{YXY} &= (1/4)(\chi_{xxx} - \chi_{yyx} - \chi_{xyy} - \chi_{yxy})(\cos\chi - \cos 3\chi) + \chi_{yxy} \cos\chi \\
&\quad + (1/4)(\chi_{yyy} - \chi_{xxy} - \chi_{xyx} - \chi_{yxx})(\sin\chi + \sin 3\chi) + \chi_{xyx} \sin\chi \\
\chi_{YZY} &= (1/2)[(\chi_{zxx} + \chi_{zyz}) - (\chi_{zxx} - \chi_{zyz})\cos 2\chi] - (1/2)(\chi_{yzx} + \chi_{xzy})\sin 2\chi \\
\\
(\text{pps}) \quad \chi_{XXY} &= -(1/4)(\chi_{xxx} - \chi_{yyx} - \chi_{xyy} - \chi_{yxy})(\sin\chi + \sin 3\chi) - \chi_{yxy} \sin\chi \\
&\quad + (1/4)(\chi_{yyy} - \chi_{xxy} - \chi_{xyx} - \chi_{yxx})(\cos\chi - \cos 3\chi) + \chi_{xxy} \cos\chi \\
\chi_{ZZY} &= -\chi_{zzx} \sin\chi + \chi_{zzy} \cos\chi \\
\chi_{ZXY} &= -(1/2)(\chi_{zxx} - \chi_{zyy})\sin 2\chi + (1/2)[(\chi_{zxy} - \chi_{zyx}) + (\chi_{zxy} + \chi_{zyx})\cos 2\chi] \\
\chi_{XZY} &= -(1/2)(\chi_{zxx} - \chi_{zyy})\sin 2\chi + (1/2)[(\chi_{xzy} - \chi_{yzx}) + (\chi_{xzy} + \chi_{yzx})\cos 2\chi] \\
\\
(\text{pss}) \quad \chi_{XYX} &= (1/4)(\chi_{xxx} - \chi_{yyx} - \chi_{xyy} - \chi_{yxy})(\cos\chi - \cos 3\chi) + \chi_{xxy} \cos\chi \\
&\quad + (1/4)(\chi_{yyy} - \chi_{xxy} - \chi_{xyx} - \chi_{yxx})(\sin\chi + \sin 3\chi) + \chi_{yxx} \sin\chi \\
\chi_{ZYY} &= (1/2)[(\chi_{zxx} + \chi_{zyz}) - (\chi_{zxx} - \chi_{zyz})\cos 2\chi] - (1/2)(\chi_{zxy} + \chi_{zyx})\sin 2\chi \\
\\
(\text{sss}) \quad \chi_{YYX} &= (1/4)(\chi_{xxx} - \chi_{yyx} - \chi_{xyy} - \chi_{yxy})(\sin\chi + \sin 3\chi) - \chi_{xxx} \sin\chi \\
&\quad - (1/4)(\chi_{yyy} - \chi_{xxy} - \chi_{xyx} - \chi_{yxx})(\cos\chi - \cos 3\chi) + \chi_{yyy} \cos\chi
\end{aligned}$$