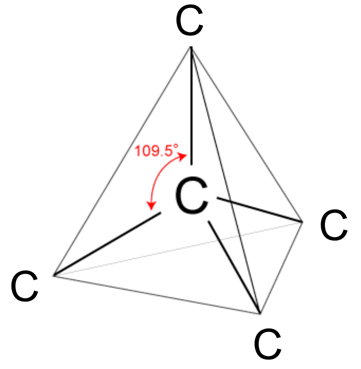
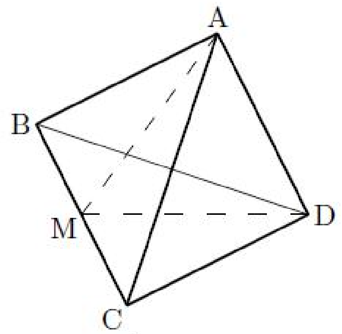
1　炭素の結合角

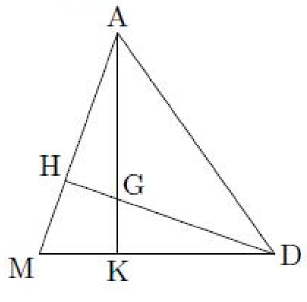
　炭素の結合角が、約 $109.5°$ であることを確認しよう。
　炭素のそれぞれの結合を図示すると、下図に示したように正四面体の重心に着目する炭素が、また、各頂点にそれぞれの原子が配置されることになる。



1.1　幾何学的なやり方

　この正四面体の各頂点を A, B, C, D とし、各辺の長さを 1 とする。また、重心を G、辺 BC の中点を M とし、さらに、頂点 A から △ BCD に下した垂線の足を K とする。





この設定の元で、結合角（例えば、∠ AGD）を求めよう。
　まず、△ CDM において、∠ DMC = ⊥, ∠ DCM =60° であるので、

$$CM : CD : \mathrm{D}M = 1 : 2 : \sqrt{3}$$
$$\therefore \quad \mathrm{D}M = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

　次に、△ KBC に着目すると、∠ BKC =120° より ∠ BKM = 60° であるので MK:KB=1:2

となる。また、K は △BCD の重心であるので KB=KD、したがって、

$$
\begin{aligned}
\mathrm{D}M &= \mathrm{M}K + \mathrm{K}D = \mathrm{M}K + \mathrm{K}B = 3 \times \mathrm{M}K \\
\therefore \quad \mathrm{M}K &= \frac{\mathrm{D}M}{3} \\
&= \frac{\sqrt{3}}{6}
\end{aligned}
$$

AM=DM であることに注意すると、△ AMK において三平方の定理より、

$$
\begin{aligned}
\mathrm{A}K &= \sqrt{\mathrm{A}M^2 - \mathrm{M}K^2} \\
&= \frac{\sqrt{6}}{3}
\end{aligned}
$$

△ AMK ∼ △ AGH であるので、AM:AG = AK:AH となり、

$$
\begin{aligned}
\mathrm{A}G &= \mathrm{A}M \times \frac{\mathrm{A}K}{\mathrm{A}H} \\
&= \mathrm{A}M \times \frac{\mathrm{A}K}{(\mathrm{A}M - \mathrm{H}M)} \\
&= \frac{\sqrt{3}}{2} \times \frac{\frac{\sqrt{6}}{3}}{\left(\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}\right)} \\
&= \frac{\sqrt{6}}{4}
\end{aligned}
$$

この時、求める結合角 ∠ AGD は、△ AGD に対して余弦定理[1)] を用いて、

$$
\begin{aligned}
\cos \angle \mathrm{A}GD &= \frac{\mathrm{A}G^2 + \mathrm{G}D^2 - \mathrm{A}D^2}{2 \times \mathrm{G}A \times \mathrm{G}D} \\
&= \frac{\left(\frac{\sqrt{6}}{4}\right)^2 + \left(\frac{\sqrt{6}}{4}\right)^2 - (1)^2}{2 \times \frac{\sqrt{6}}{4} \times \frac{\sqrt{6}}{4}} \\
&= -\frac{1}{3}
\end{aligned}
$$

となる。

関数電卓等を用いて、

$$
\angle \mathrm{A}GD = \cos^{-1}\left(-\frac{1}{3}\right) = 109.4712206 \cdots^{o}
$$

という無理数の形で得られるので、これを小数第一位で丸めて、約 109.5^{o} と表記しているわけである。

1） 三角形の辺の長さと内角の余弦の間に成り立つ関係を与える定理であり、△ ABC において、a = BC, b = CA, c = AB, α = ∠ CAB, β = ∠ ABC, γ = ∠ BCA としたとき

$$
\begin{aligned}
a^2 &= b^2 + c^2 - 2bc\cos\alpha \\
b^2 &= c^2 + a^2 - 2ca\cos\beta \\
c^2 &= a^2 + b^2 - 2ab\cos\gamma
\end{aligned}
$$

と表される。

1.2　ベクトル形式での解法

重心 G から各頂点（ A, B, C, D ）への長さが 1 の正四面体を考えよう。これをベクトルで、$\overrightarrow{GA} = \boldsymbol{a}, \overrightarrow{GB} = \boldsymbol{b}, \cdots$ と表し、結合角（例えば、$\angle AGB$ ）を θ と表記しよう。

このとき、

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c} = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{d} = \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c} = \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{d} = \boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{d} = 1\times 1\times\cos\theta = \cos\theta \\
&|\boldsymbol{a}|^2 = |\boldsymbol{b}|^2 = |\boldsymbol{c}|^2 = |\boldsymbol{d}|^2 = 1
\end{aligned}$$

となる。

また、重心の定義より、

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c}+\boldsymbol{d} &= \boldsymbol{0} \\
\therefore\quad -\boldsymbol{d} &= \boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c}
\end{aligned}$$

したがって、

$$\begin{aligned}
|\boldsymbol{d}| &= |\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c}| \\
&= \sqrt{|\boldsymbol{a}|^2+|\boldsymbol{b}|^2+|\boldsymbol{c}|^2+2\boldsymbol{ab}+2\boldsymbol{ac}+2\boldsymbol{bc}} \\
&= \sqrt{3+6\cos\theta} \\
&= 1 \\
\therefore\quad \cos\theta &= -\frac{1}{3}
\end{aligned}$$

を得る。