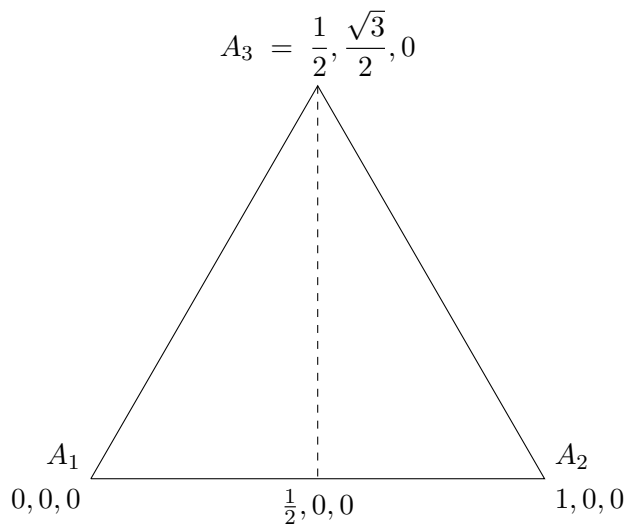


Практическая работа 4

1 Молекула метана

Молекула метана представляет собой правильный тетраэдр. Пусть одна из вершин находится в начале координат $(0, 0, 0)$, одно из ребер лежит на оси x и одна из граней лежит в плоскости Oyx и имеет длину ребра равную 1. Определим координаты вершин для грани, лежащей в плоскости Oyx :



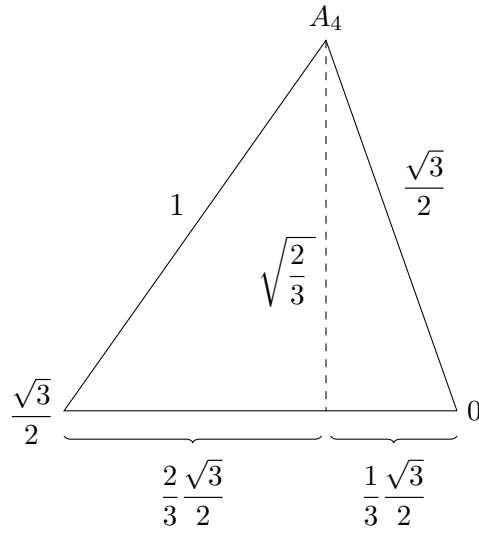
из чертежа видно, что координаты векторов вершин $\vec{A}_1 = (0, 0, 0)$, $\vec{A}_2 = (1, 0, 0)$ и $\vec{A}_3 = (\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0)$

координату 4-й вершины определим на проекции тетраэдра на плоскость Oyz .

По формуле Герона площадь треугольника, если известны длины сторон, равна

$$S = \sqrt{p(p-a)(p-b)(p-c)}, \text{ где } p = \frac{a+b+c}{2}$$

Отсюда найдем высоту треугольника и отношение, в котором высота



делит основание:

Из чертежа видно, что координаты вершины A_4 равны

$$\vec{A}_4 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2\sqrt{3}}, \sqrt{\frac{2}{3}} \right)$$

вектора вершин в координатной форме

$$\vec{A}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{A}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{A}_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{A}_4 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2\sqrt{3}} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Координата точки, где находится атом C лежит в центре тяжести:

$$\vec{A}_5 = \frac{1}{4} (\vec{A}_1 + \vec{A}_2 + \vec{A}_3 + \vec{A}_4)$$

поворот вокруг оси z на угол α представляется матрицей

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

поворот вокруг оси y на угол β представляется матрицей

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & -\sin \beta & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \sin \beta & 0 & \cos \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Координаты вектора A_i в результате двух поворотов будут равны

$$\vec{A}_i \text{ после поворота} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{A}_i$$

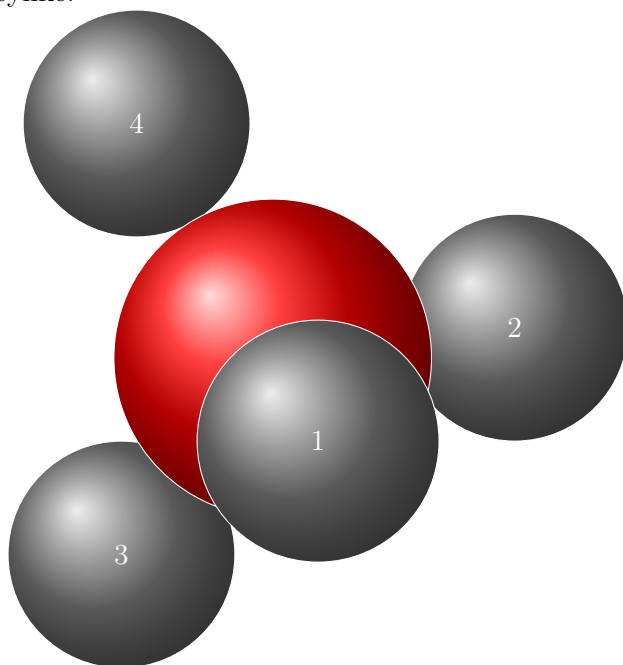
Чтобы получить проекцию на плоскость $0xz$ молекулы можно убрать y -координату или воспользоваться умножением слева на матрицу-проектор:

$$\mathbf{Pr} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{A}_i \text{ после поворота} \Big|_{0xz} = \mathbf{Pr} \cdot \mathbf{B} \cdot \mathbf{A} \cdot \vec{A}_i$$

Матрица-проектор имеет $\det(\mathbf{Pr}) = 0$, и значит отображает пространство на плоскость.

Проекция на плоскость $0xz$ молекулы метана после двух последовательных поворотов на угол $\alpha = \frac{\pi}{3}$, а затем на угол $\beta = \frac{\pi}{6}$ приведена на рисунке:



чтобы вычислить координаты при повороте можно воспользоваться программой `scilab`:

```

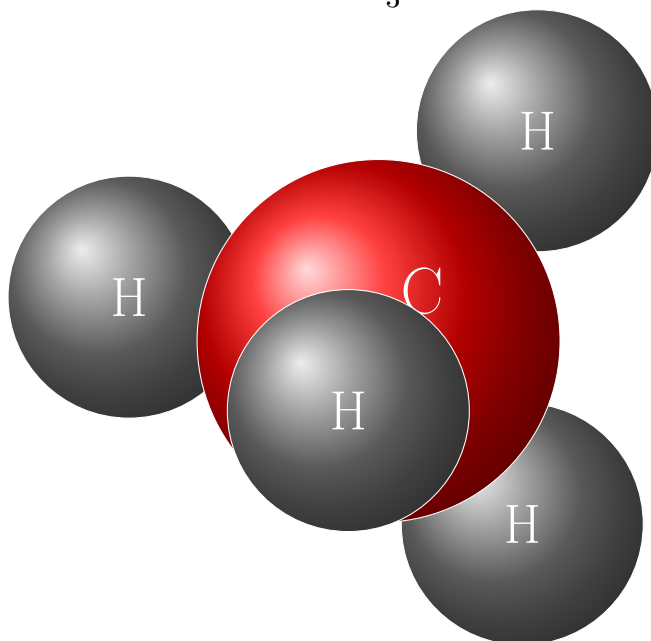
a1=[0;0;0;0];
a2=[1;0;0;0];
a3=[0.5;sqrt(3)/2;0;0];
a4=[0.5;1/2/sqrt(3);sqrt(2/3);0];

alpha=%pi/3;
A=[cos(alpha),-sin(alpha),0,0;sin(alpha),cos(alpha),0,0;0,0,1,0;0,0,0,1];
beta=%pi/6;
B=[cos(beta),0,-sin(beta),0;0,1,0,0;sin(beta),0,cos(beta),0;0,0,0,1];

h1=6*B*A*a1
h2=6*B*A*a2
h3=6*B*A*a3
h4=6*B*A*a4
c=1/4*6*B*A*(a1+a2+a3+a4)

```

при повороте на угол $\alpha = -\frac{\pi}{3}$, а затем на угол $\beta = -\frac{\pi}{6}$



Пример рисования в \TeX шара диаметром 1.6 с центром в точке (1,3) представлен ниже:

```

\begin{tikzpicture}
\begin{scope}[xscale=6,yscale=6]
\draw [rounded corners=4pt,color=white,ball color=gray,smooth] (1,2)
circle (1.6) node {1}; %1
\end{scope}
\end{tikzpicture}

```

2 задание

№ варианта	поворот относительно оси z	поворот относительно оси y	порядок поворотов
1	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{6}$	z, y
2	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{3}$	z, y
3	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{2\pi}{3}$	z, y
4	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{5\pi}{6}$	z, y
5	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{6}$	z, y
6	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	z, y
7	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}$	z, y
8	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{6}$	z, y
9	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{\pi}{6}$	z, y
10	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	z, y
11	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}$	z, y
12	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{5\pi}{6}$	z, y

Задание: Построить в T_EX молекулу метана с заданными углами поворота