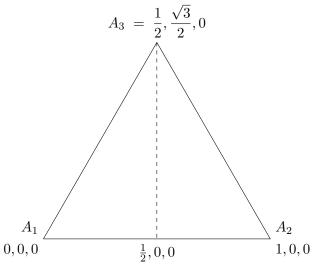
Практическая работа №4

Михеева Дарья (7872)

29 октября 2017 г.

1 Молекула метана

олекула 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 0yx и имеет длину ребра равную 1. Определим координаты вершин для грани, лежащей в плоскости 0yx:



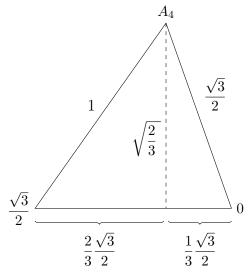
из чертежа видно, что координаты векторов вершин $\vec{A}_1 = (0,0,0),$ $\vec{A}_2=(1,0,0)$ и $\vec{A}_3=(rac{1}{2},rac{\sqrt{3}}{2},0)$ координату 4-й вершины определим на проекции тетраэдра на плос-

кость 0yz.

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

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

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:

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

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

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

Координаты вектора A_i в результате двух поворотов будут равны

$$\vec{A}_{i}$$
 после поворота = $\mathbb{B} \cdot \mathbb{A} \cdot \vec{A}_{i}$

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

$$\mathbb{P}\mathbf{r} = \left(\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

$$\left. \vec{A}_i
ight._{ ext{после поворота}} \right|_{0xz} = \mathbb{P} \mathbf{r} \cdot \mathbb{B} \cdot \mathbb{A} \cdot \vec{\mathbf{A_i}}$$

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

Поворот молекулы на угол $\alpha=\frac{\pi}{3}$ вокруг оси Z, а затем на угол $\beta=-\frac{5\pi}{6}$ вокруг оси Y.

