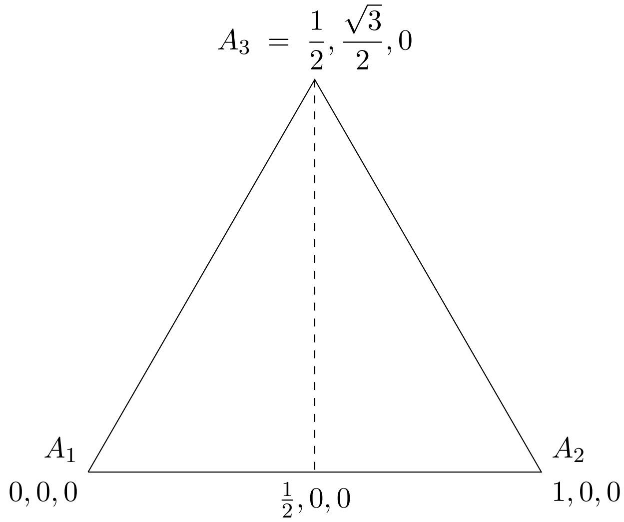
Практическая работа №4

Гильченок Василий (7872)

24 декабря 2017 г.

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



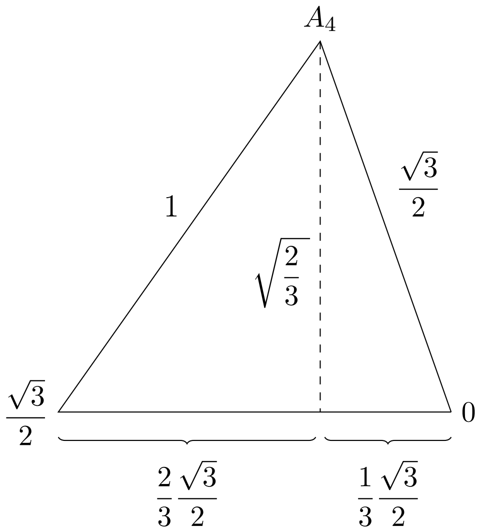
из чертежа видно, что координаты векторов вершин $\vec{A}_1 = (0,0,0)$, $\vec{A}_2 = (1,0,0)$ и $\vec{A}_3 = (\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0)$

координату 4-й вершины определим на проекции тетраэдра на плоскость $0yz$.

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:

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

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

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

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

$$\mathbb{P}\mathbf{r} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{A}_{i\text{ после поворота}}\Big|_{0xz} = \mathbb{P}\mathbf{r} \cdot \mathbb{B} \cdot \mathbb{A} \cdot \vec{\mathbf{A}}_{\mathbf{i}}$$

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

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