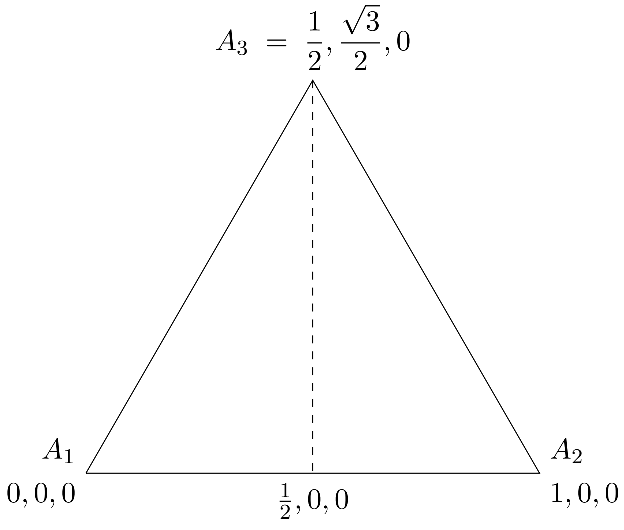
Практическая работа 4

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



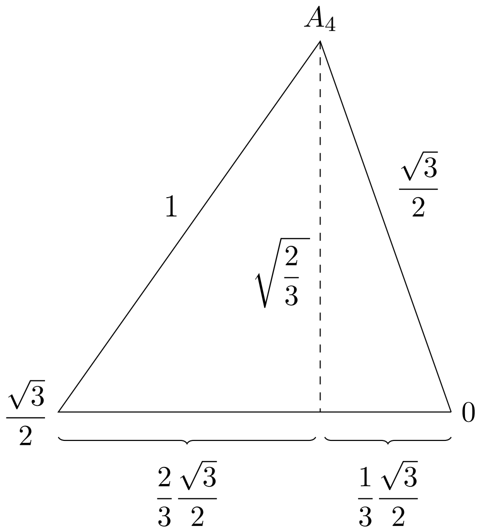
из чертежа видно, что координаты векторов вершин $\vec{A}_1 = (0, 0, 0)$, $\vec{A}_2 = (1, 0, 0)$ и $\vec{A}_3 = (\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0)$

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

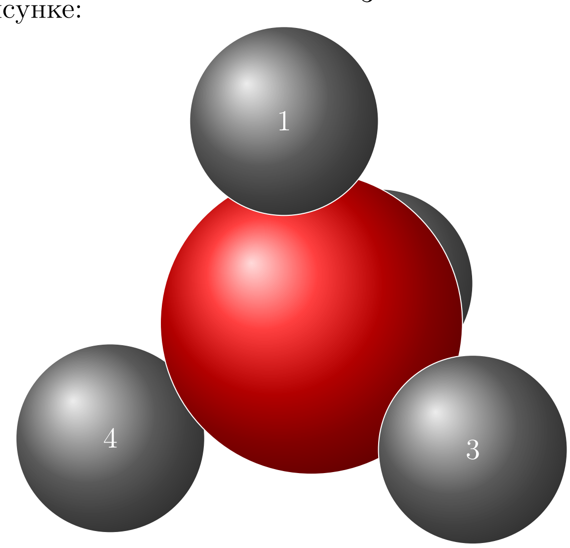
$$\mathbb{B} = \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & -\sin\beta & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \sin\beta & 0 & \cos\beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Координаты вектора A_i в результате двух поворотов будут равны

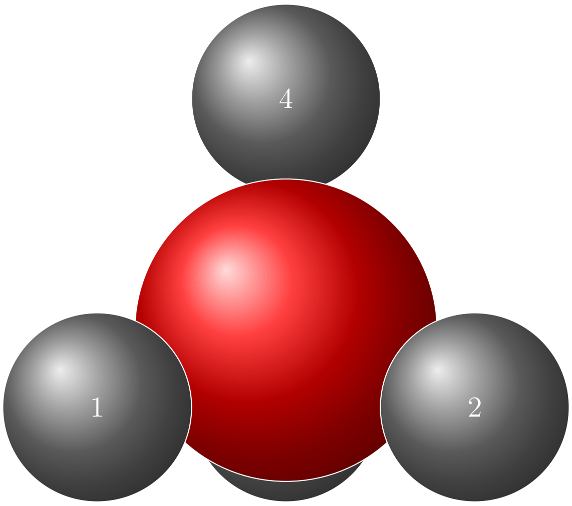
$$\vec{A}_{i\text{ после поворота}} = \mathbb{B} \cdot \mathbb{A} \cdot \vec{A}_i$$

2 Повернуть молекулу метана по оси z на $\frac{2\cdot\pi}{3}$, затем по оси y на $\frac{2\cdot\pi}{3}$

Проекция на плоскость $0xz$ молекулы метана после двух последовательных поворотов на угол $\alpha = \dfrac{2\cdot\pi}{3}$, а затем на угол $\beta = \dfrac{2\cdot\pi}{3}$ приведена на рисунке:



Начальное состояние молекулы метана выглядит следующим обаразом:



3 Расчитаем координаты вершин и центра после первого поворота:

$$\vec{A}_1 = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\cdot\pi}{3} & -\sin\frac{2\cdot\pi}{3} & 0 & 0 \\ \sin\frac{2\cdot\pi}{3} & \cos\frac{2\cdot\pi}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\cdot\cos\frac{2\cdot\pi}{3} - 0\cdot\sin\frac{2\cdot\pi}{3} + 0\cdot 0 + 1\cdot 0 \\ 0\cdot\sin\frac{2\cdot\pi}{3} + 0\cdot\cos\frac{2\cdot\pi}{3} + 0\cdot 0 + 1\cdot 0 \\ 0\cdot 0 + 0\cdot 0 + 0\cdot 1 + 1\cdot 0 \\ 0\cdot 0 + 0\cdot 0 + 0\cdot 0 + 1\cdot 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{A}_2 = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\cdot\pi}{3} & -\sin\frac{2\cdot\pi}{3} & 0 & 0 \\ \sin\frac{2\cdot\pi}{3} & \cos 2\cdot\frac{\pi}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1\cdot\cos\frac{2\cdot\pi}{3} - 0\cdot\sin\frac{2\cdot\pi}{3} + 0\cdot 0 + 1\cdot 0 \\ 1\cdot\sin\frac{2\cdot\pi}{3} + 0\cdot\cos\frac{2\cdot\pi}{3} + 0\cdot 0 + 1\cdot 0 \\ 1\cdot 0 + 0\cdot 0 + 0\cdot 1 + 1\cdot 0 \\ 1\cdot 0 + 0\cdot 0 + 0\cdot 0 + 1\cdot 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{A}_3 = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\cdot\pi}{3} & -\sin\frac{2\cdot\pi}{3} & 0 & 0 \\ \sin\frac{2\cdot\pi}{3} & \cos\frac{2\cdot\pi}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\cdot\cos\frac{2\cdot\pi}{3} - \frac{\sqrt{3}}{2}\cdot\sin\frac{2\cdot\pi}{3} + 0\cdot 0 + 1\cdot 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2}\cdot\sin\frac{2\cdot\pi}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2}\cdot\cos\frac{2\cdot\pi}{3} + 0\cdot 0 + 1\cdot 0 \\ \frac{1}{2}\cdot 0 + \frac{\sqrt{3}}{2}\cdot 0 + 0\cdot 1 + 1\cdot 0 \\ \frac{1}{2}\cdot 0 + \frac{\sqrt{3}}{2}\cdot 0 + 0\cdot 0 + 1\cdot 1 \end{pmatrix} =$$

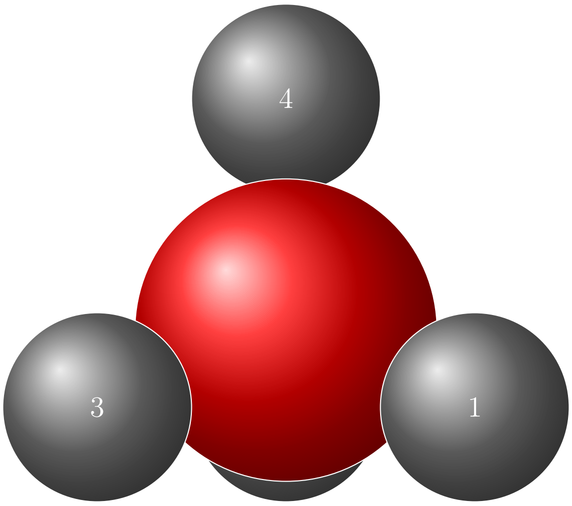
$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\cdot(-\frac{1}{2}) - \frac{\sqrt{3}}{2}\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2}\cdot\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}\cdot(-\frac{1}{2}) \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{A}_4 = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\cdot\pi}{3} & -\sin\frac{2\cdot\pi}{3} & 0 & 0 \\ \sin\frac{2\cdot\pi}{3} & \cos\frac{2\cdot\pi}{3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2\sqrt{3}} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\cdot\cos\frac{2\cdot\pi}{3} - \frac{1}{2\sqrt{3}}\cdot\sin\frac{2\cdot\pi}{3} + \sqrt{\frac{2}{3}}\cdot 0 + 1\cdot 0 \\ \frac{1}{2}\cdot\sin\frac{2\cdot\pi}{3} + \frac{1}{2\sqrt{3}}\cdot\cos\frac{2\cdot\pi}{3} + \sqrt{\frac{2}{3}}\cdot 0 + 1\cdot 0 \\ \frac{1}{2}\cdot 0 + \frac{1}{2\sqrt{3}}\cdot 0 + \sqrt{\frac{2}{3}}\cdot 1 + 1\cdot 0 \\ \frac{1}{2}\cdot 0 + \frac{1}{2\sqrt{3}}\cdot 0 + \sqrt{\frac{2}{3}}\cdot 0 + 1\cdot 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\cdot(-\frac{1}{2}) - \frac{1}{2\sqrt{3}}\cdot\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2}\cdot\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{1}{2\sqrt{3}}\cdot(-\frac{1}{2}) \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (-\frac{1}{2}) \\ \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{\sqrt{6}}{3} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{A}_5 = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}\cdot(0 + (-\frac{1}{2}) + (-1) + (-\frac{1}{2})) \\ \frac{1}{4}\cdot(0 + \frac{\sqrt{3}}{2} + 0 + \frac{\sqrt{3}}{6}) \\ \frac{1}{4}\cdot(0 + 0 + 0 + \frac{\sqrt{6}}{3}) \\ \frac{1}{4}\cdot(1 + 1 + 1 + 1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (-\frac{1}{2}) \\ \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{\sqrt{6}}{12} \\ 1 \end{pmatrix}$$

Изображение молекулы метана после 1-го поворота:



4 Расчитаем координаты вершин и центра после второго поворота

$$\vec{A}_0 = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\cdot\pi}{3} & 0 & -\sin\frac{2\cdot\pi}{3} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \sin\frac{2\cdot\pi}{3} & 0 & \cos\frac{2\cdot\pi}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (-0.5) & 0 & (-\frac{\sqrt{3}}{2}) & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & (-0.5) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{A}_1 = \begin{pmatrix} (-0.5) & 0 & (-\frac{\sqrt{3}}{2}) & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & (-0.5) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{A}_2 = \begin{pmatrix} (-0.5) & 0 & (-\frac{\sqrt{3}}{2}) & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & (-0.5) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} (-\frac{1}{2}) \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{4} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{A}_3 = \begin{pmatrix} (-0.5) & 0 & (-\frac{\sqrt{3}}{2}) & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & (-0.5) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} (-1) \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{A}_4 = \begin{pmatrix} (-0.5) & 0 & (-\frac{\sqrt{3}}{2}) & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & (-0.5) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} (-1/2) \\ \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{\sqrt{6}}{3} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.46 \\ 0.29 \\ -0.84 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{A}_5 = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \cdot (0 + \frac{1}{4} + (-\frac{1}{2}) + (-0.46) \\ \frac{1}{4} \cdot (0 + \frac{\sqrt{3}}{2} + 0 + 0.29) \\ \frac{1}{4} \cdot (0 + (-\frac{\sqrt{3}}{4}) + (-\frac{\sqrt{3}}{2} + (-0.84)) \\ \frac{1}{4} \cdot (1 + 1 + 1 + 1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.0725 \\ 0.29 \\ -0.535 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Изображение молекулы метана после 2-го поворота: