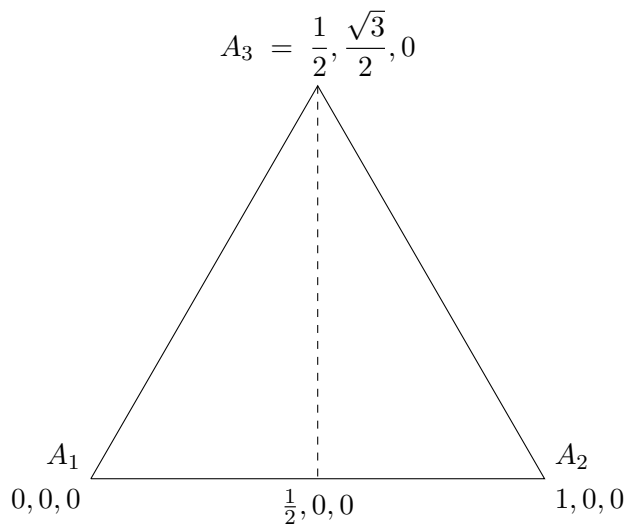


Практическая работа 4

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 :



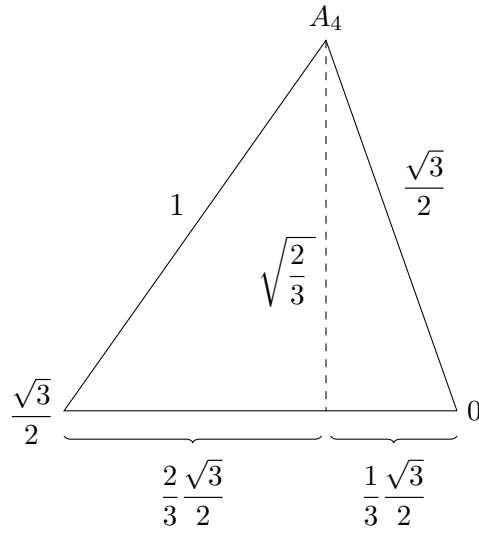
из чертежа видно, что координаты векторов вершин $\vec{A}_1 = (0, 0, 0)$, $\vec{A}_2 = (1, 0, 0)$ и $\vec{A}_3 = (\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0)$

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

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

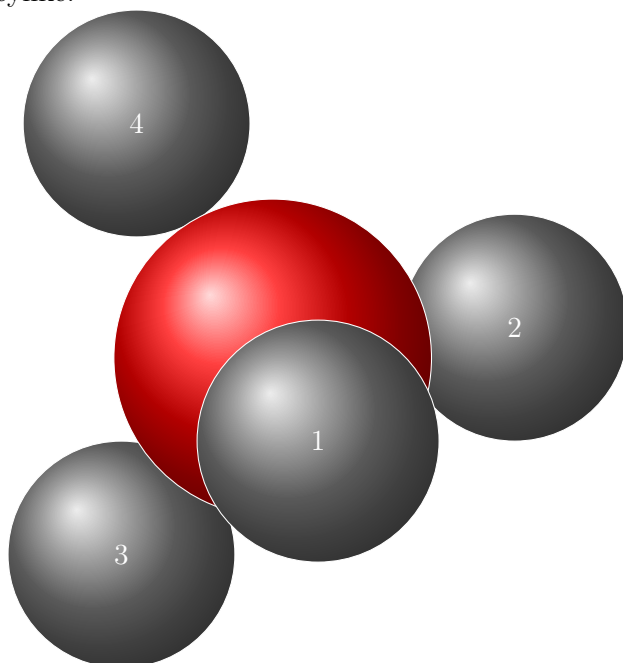
Чтобы получить проекцию на плоскость $0xz$ молекулы можно убрать y -координату или воспользоваться умножением слева на матрицу-проектор:

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

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

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 $\alpha = \frac{\pi}{6}$, а затем на угол $\beta = \frac{5\pi}{6}$ приведена на рисунке:



чтобы вычислить координаты при повороте можно воспользоваться программой scilab:

```

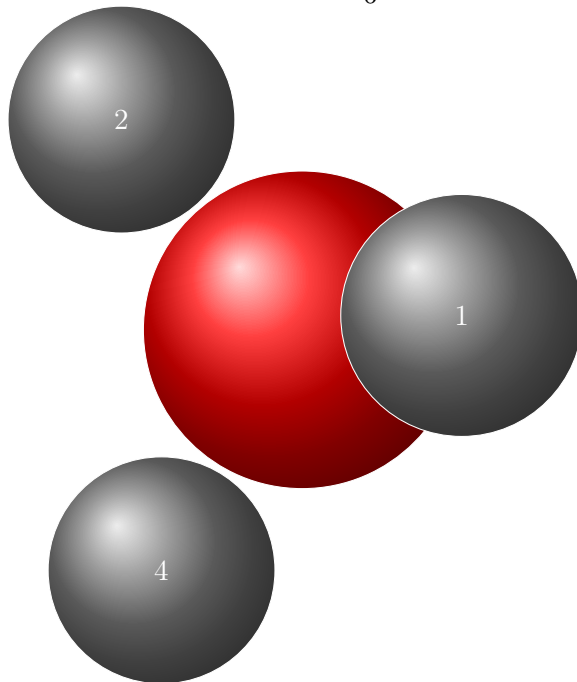
a1=[0;0;0;0];
a2=[1;0;0;0];
a3=[0.5;sqrt(3)/2;0;0];
a4=[0.5;1/2/sqrt(3);sqrt(2/3);0];

alpha=%pi/6;
A=[cos(alpha),-sin(alpha),0,0;sin(alpha),cos(alpha),0,0;0,0,1,0;0,0,0,1];
beta=5%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 $\alpha = \frac{\pi}{6}$, а затем на угол $\beta = \frac{5\pi}{6}$



Расчет координат в 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=  $\alpha = \frac{\pi}{6}$  alpha =
0.5235988

```

```

-> A=[cos(alpha),-sin(alpha),0,0;sin(alpha),cos(alpha),0,0;0,0,1,0;0,0,0,1];
-> A=[cos(alpha),-sin(alpha),0,0;sin(alpha),cos(alpha),0,0;0,0,1,0;0,0,0,1]
A =
0.8660254 -0.5 0. 0. 0.5 0.8660254 0. 0. 0. 0. 1. 0. 0. 0. 0. 1.
-> beta=β =  $\frac{5\pi}{6}$  beta =
2.6179939
-> B=[cos(beta),0,-sin(beta),0;0,1,0,0;sin(beta),0,cos(beta),0;0,0,0,1] B
=
-0.8660254 0. -0.5 0. 0. 1. 0. 0. 0.5 0. -0.8660254 0. 0. 0. 0. 1.
-> h1=6*B*A*a1 h1 =
0. 0. 0. 0.
-> h2=6*B*A*a2 h2 =
-4.5 3. 2.5980762 0.
-> h3=6*B*A*a3 h3 =
-4.441D-16 6. 2.220D-16 0.
-> h4=6*B*A*a4 h4 =
-3.9494897 3. -3.3766153 0.
-> c=1/4*6*B*A*(a1+a2+a3+a4) c =
-2.1123724 3. -0.1946348 0.

```