Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Л. С. Чхартишвили, Объем области пересечения трех сфер,
Матем. заметки, 2001, том 69, выпуск 3, 466–476

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm518>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.92.164.108

26 апреля 2023 г., 18:23:24

УДК 514

ОБЪЕМ ОБЛАСТИ ПЕРЕСЕЧЕНИЯ ТРЕХ СФЕР

Л. С. Чхартшвили

Получено выражение объема области пересечения трех сфер в виде непрерывной кусочно-аналитической комбинации алгебраических и обратных тригонометрических функций их радиусов и межцентровых расстояний.

Библиография: 7 названий.

К геометрической задаче об объеме области пересечения трех сфер нас привело рассмотрение физической проблемы расчета электронной структуры вещества квазиклассическим методом.

Начиная с основополагающего труда Бора [1], полуклассический анализ электронно-энергетического спектра легких атомов пользуется широкой популярностью (см., например, [2]). Тяжелые же атомы могут быть рассчитаны в рамках приближения локальной электронной плотности, используя квазиклассические разложения для функционала полной энергии [3]. Но из-за сингулярности в точке расположения ядра, а также эффекта электронных оболочек атомный потенциал в общем не удовлетворяет стандартное квазиклассическое условие пространственной плавности. Чем объясняется успех подобных подходов?

Полученное Масловым [4] квазиклассическое выражение энергий связанных состояний показывает [5], что точные и квазиклассические спектры физической системы близки друг к другу независимо от свойств плавности потенциала, если $\hbar^2/2me\Phi R^2 \ll 1$, где Φ и R – характерные величины потенциала и радиуса его действия соответственно. Пусть Z – зарядовое число ядра; тогда для атомного потенциала имеем $\Phi \sim eZ/4\pi\epsilon_0 R$ и критерий принимает вид $R_Z/2R \ll 1$. Здесь $R_Z = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2 Z$ – радиус Бора водородоподобного иона. Даже для легких атомов радиус электронного облака в несколько раз превосходит R_Z , и, следовательно, атом должен быть приблизительно квазиклассической электронной системой в указанном смысле.

Классически доступная область для связанного в атоме электрона ограничена двумя сферическими поверхностями с центрами в точке расположения ядра. В низшем квазиклассическом приближении усредненные по направлениям парциальные электронные плотности атомных орбиталей равны нулю вне этих областей и ненулевым постоянным – внутри них. В результате полная электронная плотность в атоме выражается радиальной ступенчатой функцией, которая дает аналогичную форму и для атомного потенциала. Молекулярные и кристаллические потенциалы могут быть аппроксимированы суперпозицией потенциалов атомов и являются определенными на трехмерном

пространстве ступенчатыми функциями. Поэтому если линейные комбинации кусочно-постоянных квазиклассических атомных орбиталей будут выбраны в качестве базиса при разложении волновой функции, то электронная структура молекулы или кристалла определится секулярным уравнением, в котором матричные элементы будут линейными комбинациями конечного числа объемов областей перекрываний троек классически доступных областей для электронных состояний, локализованных на определенных атомных узлах. Нетрудно убедиться в том, что такие объемы со своей стороны являются алгебраическими суммами объемов перекрываний троек сфер, ограничивающих эти области.

Таким образом, физическую задачу расчета электронной структуры вещества в низшем квазиклассическом приближении можно считать решенной, если будет решена чисто геометрическая задача – определена функция $V = V(R_1, R_2, R_3, D_{12}, D_{13}, D_{23})$, которая выражает зависимость объема области пересечения трех сфер V от их радиусов R_1, R_2, R_3 и межцентровых расстояний D_{12}, D_{13}, D_{23} . V -функция, в аналитическом виде дающая матричные элементы секулярного уравнения для низшего квазиклассического приближения, может быть использована и в алгоритмах численных расчетов трехцентровых квантовохимических интегралов, содержащих орбитали и потенциалы произвольных форм. Механика оболочек, определение инерционных характеристик деталей механизмов, расчет пористости перспективных оптоэлектронных материалов [6] и т.д. представляются примерами будущих технологических приложений V -функций.

Насколько нам известно, задача об объеме области пересечения трех сфер до сих пор не рассматривалась. В настоящей работе дается ее явное решение.

Рис. 1

Центры трех сфер обозначим через i, j и k (рис. 1),

$$(ijk) = (123), (321), (213). \quad (1)$$

Углы t_i между отрезками D_{ij} и D_{ik} определяются следующим образом:

$$\cos t_i = \frac{D_{ij}^2 + D_{ik}^2 - D_{jk}^2}{2D_{ij}D_{ik}}. \quad (2)$$

Когда $D_{ij} \leq R_i + R_j$, поверхности i - и j -сфер пересекаются вдоль окружности с радиусом $r_{ij} = r_{ji}$,

$$r_{ij}^2 = \frac{2(R_i^2 R_j^2 + R_i^2 D_{ij}^2 + R_j^2 D_{ij}^2) - (R_i^4 + R_j^4 + D_{ij}^4)}{4D_{ij}^2} \quad (3)$$

и, если кроме того $D_{ij} \geq \max(R_i, R_j)$, плоскость r_{ij} -круга находится на расстоянии d_{ij} от центра i -сферы (рис. 2),

$$d_{ij} = \frac{R_i^2 - R_j^2 + D_{ij}^2}{2D_{ij}}. \quad (4)$$

Рис. 2

Но когда $D_{ij} \leq \max(R_i, R_j)$, указанное расстояние равняется $-d_{ij}$. Всегда

$$r_{ij}^2 + d_{ij}^2 = R_i^2. \quad (5)$$

Три плоскости r_{ij} -, r_{ik} - и r_{jk} -кругов пересекаются вдоль одной и той же линии. Данное предложение можно доказать, применив теорему Пифагора к треугольникам на рис. 3: три нормали к отрезкам D_{ij} , D_{ik} , D_{jk} , которые делят их соответственно на пары отрезков d_{ij} и d_{ji} , d_{ik} и d_{ki} , d_{jk} и d_{kj} , пересекаются в одной точке. В общем случае V представляет собой сумму трех объемов V_i , V_j и V_k , где V_i ограничен частью поверхности i -сферы и сегментами r_{ij} - и r_{ik} -кругов, или r_{ij} - и r_{ik} -кругами, или лишь одним из них.

Для определенности рассмотрим случай, когда r_{ij} -, r_{ik} - и r_{jk} -круги пересекаются вдоль общей хорды с полудлиной H (рис. 4).

Из средней точки этой хорды отрезки D_{ij} , D_{ik} и D_{jk} видны соответственно под углами y_k , y_j и y_i (рис. 5),

$$\cos y_i = \frac{R_j^2 + R_k^2 - D_{jk}^2 - 2H^2}{2\sqrt{(R_j^2 - H^2)(R_k^2 - H^2)}}. \quad (6)$$

Поскольку они друг друга дополняют до полного угла,

$$\cos^2 y_i + \cos^2 y_j + \cos^2 y_k - 2 \cos y_i \cos y_j \cos y_k = 1. \quad (7)$$

Рис. 3

Рис. 4

Подстановка (6) преобразует (7) в уравнение относительно H . Его решение дает

$$H^2 = \frac{(R_i^2 R_j^2 + R_k^2 D_{ij}^2)(D_{ik}^2 + D_{jk}^2 - D_{ij}^2) + (R_i^2 R_k^2 + R_j^2 D_{ik}^2)(D_{ij}^2 + D_{jk}^2 - D_{ik}^2)}{2(D_{ij}^2 D_{ik}^2 + D_{ij}^2 D_{jk}^2 + D_{ik}^2 D_{jk}^2) - (D_{ij}^4 + D_{ik}^4 + D_{jk}^4)} + \frac{(R_j^2 R_k^2 + R_i^2 D_{jk}^2)(D_{ij}^2 + D_{ik}^2 - D_{jk}^2) - (R_i^2 D_{jk}^4 + R_j^2 D_{ik}^4 + R_k^2 D_{ij}^4) - D_{ij}^2 D_{ik}^2 D_{jk}^2}{2(D_{ij}^2 D_{ik}^2 + D_{ij}^2 D_{jk}^2 + D_{ik}^2 D_{jk}^2) - (D_{ij}^4 + D_{ik}^4 + D_{jk}^4)}. \quad (8)$$

В данном случае, когда объем V_i ограничен сегментами двух кругов, обозначим его через W_i и предположим, что $d_{ij} \geq d_{ik} \geq R_i \cos t_i \geq 0$. Сечение этой фигуры, параллельное плоскости r_{ij} -круга и удаленное от нее на расстояние x , является сегментом

Рис. 5

круга с радиусом r , полудлиной хорды h , центральным углом g (рис. 6–8),

$$r^2 = R_i^2 - (d_{ij} + x)^2 = -(p_1 + x)(p_2 + x), \quad (9)$$

$$h^2 = r_{ik}^2 - \left(\sqrt{r_{ik}^2 - H^2} + \frac{x}{\sin t_i} \right)^2 = \frac{ax^2 + bx + c}{\sin^2 t_i} = \frac{X(x)}{\sin^2 t_i}, \quad (10)$$

$$g = 2 \arcsin \frac{h}{r}. \quad (11)$$

Рис. 6

Здесь введены обозначения

$$p_1 = d_{ij} + R_i \geq 0, \quad (12)$$

$$p_2 = d_{ij} - R_i \leq 0, \quad (13)$$

$$a = -1 < 0, \quad (14)$$

$$b = -2\sqrt{r_{ik}^2 - H^2} \sin t_i \leq 0, \quad (15)$$

$$c = H^2 \sin^2 t_i \geq 0. \quad (16)$$

Рис. 7

Рис. 8

Дискриминант трехчлена $X(x)$ неотрицателен:

$$b^2 - 4ac = 4r_{ik}^2 \sin^2 t_i \geq 0. \quad (17)$$

Кроме того, $\sqrt{b^2 - 4ac} = 2r_{ik} \sin t_i$, $\sqrt{c} = H \sin t_i$, $\sqrt{-a} = 1$ и $X(\xi) = 0$, где

$$\xi = (r_{ik} - \sqrt{r_{ik}^2 - H^2}) \sin t_i = -\frac{b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}. \quad (18)$$

Рис. 9

Рис. 9 показывает, что имеет место соотношение

$$d_{ij} - d_{ik} \cos t_i = \sqrt{r_{ik}^2 - H^2} \sin t_i. \quad (19)$$

Совместно с (5) оно дает

$$d_{ij}^2 - 2d_{ij}d_{ik} \cos t_i + d_{ik}^2 = (R_i^2 - H^2) \sin^2 t_i. \quad (20)$$

Используя (20) и приняв во внимание, что $\sqrt{r_{ij}^2 - H^2} \geq x \operatorname{ctg} t_i$ (рис. 10), возможно найти расстояние s от центра r -круга до его хорды:

$$s = \sqrt{r^2 - h^2} = (p_3 - x) \operatorname{ctg} t_i, \quad (21)$$

где обозначено

$$p_3 = \sqrt{r_{ij}^2 - H^2} \operatorname{tg} t_i. \quad (22)$$

Рис. 10

Поскольку в точке $x = \xi$ площадь сечения фигуры обращается в нуль, объем W_i рассчитывается интегрированием этой площади между пределами $x = 0$ и $x = \xi$:

$$W_i = \int_0^\xi dx \frac{r^2(g - \sin g)}{2}.$$

Интегрированием по частям и последующим преобразованием с помощью (9)–(22) мы получаем

$$W_i = \frac{\operatorname{ctg} t_i}{\sin t_i} \int_0^\xi dx \frac{\sqrt{X(x)}}{p_3 - x} \left(\frac{(p_1 + p_3)^2}{(p_1 - p_2)(p_1 + x)^2} + \frac{(p_2 + p_3)^2}{(p_2 - p_1)(p_2 + x)^2} \right).$$

Разложение подынтегрального выражения на элементарные дроби превращает W_i в линейную комбинацию интегралов

$$W_i = \frac{\operatorname{ctg} t_i}{6 \sin t_i} \left(-2(p_1 + p_2 + 2p_3) \int_0^\xi dx \sqrt{X(x)} + \frac{p_1^2(p_1 - 3p_2)}{p_1 - p_2} \left(\int_0^\xi dx \frac{\sqrt{X(x)}}{p_1 + x} + (p_1 + p_3) \int_0^\xi dx \frac{\sqrt{X(x)}}{(p_1 + x)^2} \right) + \frac{p_2^2(p_2 - 3p_1)}{p_2 - p_1} \left(\int_0^\xi dx \frac{\sqrt{X(x)}}{p_2 + x} + (p_2 + p_3) \int_0^\xi dx \frac{\sqrt{X(x)}}{(p_2 + x)^2} \right) \right),$$

разрешимых в элементарных функциях.

Из (12)–(16), (19), (20) получаем

$$bp_1 - ap_1^2 - c = (d_{ik} + R_i \cos t_i)^2 \geq 0, \quad (23)$$

$$bp_2 - ap_2^2 - c = (d_{ik} - R_i \cos t_i)^2 \geq 0, \quad (24)$$

и так как $d_{ik} \geq R_i \cos t_i \geq 0$, то $\sqrt{bp_1 - ap_1^2 - c} = d_{ik} + R_i \cos t_i$ и $\sqrt{bp_2 - ap_2^2 - c} = d_{ik} - R_i \cos t_i$. Учитывая условия (14), (16), (17), (23), (24), по таблицам интегралов (см., например, формулы 1.2.51.7, 1.2.52.10, 1.2.52.12, 1.2.53.9 и 1.2.53.15 из справочника [7])¹ имеем

$$W_i = \frac{\operatorname{ctg} t_i}{12 \sin t_i} \left(\frac{\sqrt{c}(p_1 + p_2)(b + 2ap_3) + 2bp_3}{a} + \frac{(p_1 + p_2 + 2p_3)(b^2 - 4ac) + 2a(p_1 - p_2)^2(b + 2ap_3)}{2a\sqrt{-a}} \arccos q + \frac{p_1^2(p_1 - 3p_2)(b(p_3 - p_1) - 2ap_2p_3 + 2c)}{(p_1 - p_2)\sqrt{bp_1 - ap_1^2 - c}} \arccos q_1 - \frac{p_2^2(p_2 - 3p_1)(b(p_3 - p_2) - 2ap_2p_3 + 2c)}{(p_2 - p_1)\sqrt{bp_2 - ap_2^2 - c}} \arccos q_2 \right),$$

где введены обозначения

$$q = \frac{-b}{\sqrt{b^2 - 4ac}}, \quad q_1 = \frac{-b + 2c/p_1}{\sqrt{b^2 - 4ac}}, \quad q_2 = \frac{-b + 2c/p_2}{\sqrt{b^2 - 4ac}}.$$

Преобразуем коэффициенты перед обратными тригонометрическими функциями с учетом (12)–(17), (19), (20), (22)–(24) и затем перегруппируем такие члены:

$$W_i = \frac{H}{3 \sin t_i} (2d_{ij}d_{ik} - (d_{ij}^2 + d_{ik}^2) \cos t_i) - \frac{d_{ij}}{2} \left(R_i^2 - \frac{d_{ij}^2}{3} \right) (\arccos q_2 - \arccos q_1) - d_{ik} \left(R_i^2 - \frac{d_{ik}^2}{3} \right) \arccos q + \frac{R_i^3}{3} (\arccos q_2 + \arccos q_1).$$

¹По всей видимости в формуле 1.2.53.15 справочника [7] предполагается, что переменная интегрирования x и параметр p удовлетворяют условию $x + p > 0$ (в нашей задаче $x + p_1 > 0$), но если $x + p < 0$ (в нашей задаче $x + p_2 < 0$), знак следует изменить.

Использование соотношений для суммы и разности обратных тригонометрических функций (см., например, формулы 1.3.5 из приложения к справочнику [7]) и последующее преобразование аргументов получаемых функций с учетом (12)–(16), (19), (20), (23), (24) дает

$$W_i = \frac{H(2d_{ij}d_{ik} - (d_{ij}^2 + d_{ik}^2) \cos t_i)}{3 \sin t_i} - d_{ij} \left(R_i^2 - \frac{d_{ij}^2}{3} \right) \arccos \frac{d_{ik} - d_{ij} \cos t_i}{r_{ij} \sin t_i} - d_{ik} \left(R_i^2 - \frac{d_{ik}^2}{3} \right) \arccos \frac{d_{ij} - d_{ik} \cos t_i}{r_{ik} \sin t_i} + \frac{2R_i^3}{3} \arccos \frac{d_{ij}d_{ik} - R_i^2 \cos t_i}{r_{ij}r_{ik}}; \quad (25)$$

r_{ij} - и r_{ik} -круги пересекаются, если $t_i'' \leq t_i \leq t_i'$ (или $\cos t_i' \leq \cos t_i \leq \cos t_i''$) (рис. 11, 12). При этом для предельных углов t_i' и t_i'' имеем

$$\begin{aligned} d_{ij} - d_{ik} \cos t_i' &= r_{ik} \sin t_i', & d_{ik} - d_{ij} \cos t_i' &= r_{ij} \sin t_i', \\ d_{ij} - d_{ik} \cos t_i'' &= r_{ik} \sin t_i'', & d_{ik} - d_{ij} \cos t_i'' &= -r_{ij} \sin t_i''. \end{aligned}$$

Эти соотношения совместно с (5) дают

$$\cos t_i' = \frac{d_{ij}d_{ik} - r_{ij}r_{ik}}{R_i^2}, \quad (26)$$

$$\cos t_i'' = \frac{d_{ij}d_{ik} + r_{ij}r_{ik}}{R_i^2}. \quad (27)$$

Рис. 11

Выражения (25)–(27) были получены при соблюдении определенных условий. В других случаях ход расчета должен быть видоизменен. Так, например, если $d_{ij} \geq R_i \cos t_i \geq d_{ik} \geq 0$, интервал интегрирования включает область $p_3 \leq x \leq \xi$, где в отличие от (11) и (21) соответственно $g = 2\pi - 2 \arcsin(h/r)$ и $s = (x - p_3) \operatorname{ctg} t_i$. Кроме того интегрирование распространяется и на область $\xi \leq x \leq R_i - d_{ij}$, где сечением фигуры является круг с площадью πr^2 . И наконец, меняется знак перед одним из корней,

Рис. 12

$\sqrt{bp_2 - ap_2^2 - c} = R_i \cos t_i - d_{ik}$. Однако можно проверить, что все подобные поправки точно компенсируются друг другом и указанные выражения остаются в силе при любых значениях аргументов V -функции, для которых $W_i \neq 0$.

Обозначим через W_{ij} объем наибольшего сегмента i -сферы, который полностью находится внутри области пересечения i - и j -сфер. Когда $|R_i - R_j| \leq D_{ij} \leq R_i + R_j$, его высота равняется $R_i - d_{ij}$. Если же $R_i \leq R_j$ и $D_{ij} \leq R_j - R_i$, сегмент совпадает с i -сферой. Но если $D_{ij} \geq R_i + R_j$, указанные сферы не пересекаются и сегмент отсутствует. Сегмента также нет, когда $R_i \geq R_j$ и $D_{ij} \leq R_i - R_j$. Следовательно,

$$W_{ij} = \begin{cases} 0, & D_{ij} \leq R_i - R_j, \\ \frac{4\pi}{3} R_i^3, & D_{ij} \leq R_j - R_i, \\ \frac{\pi}{3} (2R_i + d_{ij})(R_i - d_{ij})^2, & |R_i - R_j| \leq D_{ij} \leq R_i + R_j, \\ 0, & D_{ij} \geq R_i + R_j. \end{cases} \quad (28)$$

Объединив полученные результаты, имеем

$$V_i = \begin{cases} 0, & \cos t_i \leq \cos t'_i, \\ W_i, & \cos t'_i \leq \cos t_i \leq \cos t''_i, \\ W_{ij}, & \cos t''_i \leq \cos t_i, d_{ij} \geq d_{ik}, \\ W_{ik}, & \cos t''_i \leq \cos t_i, d_{ij} \leq d_{ik}. \end{cases} \quad (29)$$

Объемы V_j и V_k получаются циклической перестановкой индексов в выражении (29) для V_i . Их суммирование дает искомый объем

$$V = V_i + V_j + V_k. \quad (30)$$

Соотношения (1)–(4), (8), (25)–(30) определяют объем области пересечения трех сфер как непрерывную кусочно-аналитическую комбинацию алгебраических и обратных тригонометрических функций их радиусов и межцентровых расстояний.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Bohr N. On the constitution of atoms and molecules // Phil. Mag. 1913. V. 26. P. 1–25, 476–502, 857–875.
- [2] Bagchi B., Holody P. An interesting application of Bohr theory // Amer. J. Phys. 1988. V. 56. P. 746–747.
- [3] Коломиец В. М. Приближение локальной плотности в атомной и ядерной физике. Киев: Наукова думка, 1990.
- [4] Маслов В. П. Теория возмущений и асимптотические методы. М.: Изд-во МГУ, 1965.
- [5] Елютин П. В., Кривченко В. Д. Квантовая механика с задачами. М.: Наука, 1976.
- [6] Holland B. T., Blanford Ch. F., Stein A. Synthesis of macroporous minerals with highly ordered three-dimensional arrays of spheroidal voids // Science. 1998. V. 281. P. 538–540.
- [7] Прудников А. П., Брычков Ю. А., Маричев О. И. Интегралы и ряды. Элементарные функции. М.: Наука, 1981.

Грузинский технический университет, г. Тбилиси

Поступило
15.11.1999