1 Введение

2 Схема получения полного колебательно-вращательного гамильтониана

Рассмотрим систему n материальных точек. Обозначим их массы через m_i, их радиус-векторы в лабораторной системе координат через $\vec{r}_i$, в подвижной системе координат – через $\vec{R}_i$ $(i = 1 \ldots n)$. Разделим движение системы на движение центра масс и движение вокруг центра масс:

$$\begin{cases} \vec{r}_1 = \vec{r} + \vec{r}_1{}', \\ \quad \ldots \\ \vec{r}_n = \vec{r} + \vec{r}_n{}', \end{cases}$$

где $\vec{r}$ – радиус-вектор центра масс в лабораторной системе координат и $\vec{r}_i{}'$ – радиус-векторы рассматриваемых точек в системе отсчёта, связанной с центром масс.

Кинетическая энергия T системы принимает вид:

$$T = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} m_i \dot{\vec{r}}_i{}^2 = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} m_i(\dot{\vec{r}} + \dot{\vec{r}}_i{}')^2 = \frac{1}{2}M\dot{r}^2 + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} m_i(\dot{r}_i')^2 + \dot{\vec{r}}\sum_{i=1}^{n} m_i \dot{\vec{r}}_i{}',$$

где $M = \sum_{i=1}^{n} m_i$.

Заметим, что последняя сумма является производной следующей суммы, которая равна нулю:

$$\sum_{i=1}^{n} m_i \dot{\vec{r}}_i{}' = \frac{d}{dt}\sum_{i=1}^{n} m_i \vec{r}_i{}' = 0.$$

Итак, мы перешли в систему координат, связанную с центром масс, и отделили энергию движения центра масс:

$$T = \frac{1}{2}M\dot{r}^2 + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} m_i(\dot{r}_i')^2.$$

Забудем про слагаемое, отвечающее центру масс; откинем штрихи, чтобы упростить запись. Перейдём в подвижную систему координат при помощи ортогональной матрицы $\mathbb{S}$:

$$\vec{r}_i = \mathbb{S}\vec{R}_i, \quad i = 1 \ldots n.$$

Введем матрицу $\mathbb{A}$ следующим образом: $\mathbb{A} = \dot{\mathbb{S}}\mathbb{S}^{-1}$. Покажем, что она является кососимметрической матрицей; для этого продифференцируем единичную матрицу:

$$\frac{d}{dt}\mathbb{E} = \frac{d}{dt}\left(\mathbb{S}\mathbb{S}^{-1}\right) = \dot{\mathbb{S}}\mathbb{S}^{-1} + \mathbb{S}\dot{\mathbb{S}}^{-1} = 0.$$

Заметим, что первое слагаемое и есть матрица $\mathbb{A}$, а второе – транспонированная матрица $\mathbb{A}$ (т.к. $\mathbb{S}^\top = \mathbb{S}^{-1}$ в силу ортогональности). Следовательно,

$$\mathbb{A} + \mathbb{A}^\top = 0,$$

т.е. по определению матрица $\mathbb{A}$ является кососимметрической.

Так как размерность пространства кососимметрических матриц равна 3, то существует естественный изоморфизм, позволяющий сопоставить каждой кососимметрической матрице единственный псевдовектор:

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_3 & \omega_2 \\ \omega_3 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix} \quad \longleftrightarrow \quad \vec{\omega} = \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \end{pmatrix},$$

причем для любого вектора $\vec{x} \in \mathbf{R}^3$ имеем $\mathbb{A}\vec{x} = [\vec{\omega} \times \vec{x}]$, где $\vec{\omega}$ – вектор угловой скорости в лабораторной системе координат.

Получим выражение для квадратов скоростей рассматриваемых точек в лабораторной системе координат через координаты и скорости в подвижной системе координат:

$$\dot{\vec{r}}_i = \mathbb{S}\dot{\vec{R}}_i + \dot{\mathbb{S}}\vec{R}_i = \dot{\mathbb{S}}\mathbb{S}^{-1}\vec{r}_i + \mathbb{S}\dot{\vec{R}}_i = \mathbb{A}\vec{r}_i + \mathbb{S}\dot{\vec{R}}_i = [\vec{\omega} \times \vec{r}_i] + \mathbb{S}\dot{\vec{R}}_i = [\mathbb{S}\vec{\Omega} \times \mathbb{S}\vec{R}_i] + \mathbb{S}\dot{\vec{R}}_i =$$
$$= \mathbb{S}\left([\vec{\Omega} \times \vec{R}_i] + \dot{\vec{R}}_i\right),$$
$$\dot{r}_i^2 = \dot{\vec{r}}_i^{\top}\dot{\vec{r}}_i = \left(\dot{\vec{R}}_i + [\vec{\Omega} \times \vec{R}_i]\right)^{\top} \mathbb{S}^{\top}\mathbb{S}\left(\dot{\vec{R}}_i + [\vec{\Omega} \times \vec{R}_i]\right) = \dot{R}_i^2 + 2\dot{\vec{R}}_i\,[\vec{\Omega} \times \vec{R}_i] + [\vec{\Omega} \times \vec{R}_i]^2,$$

где $\vec{\Omega}$ – вектор угловой скорости в подвижной системе координат.

Рассмотрим последнее слагаемое как смешанное произведение и применим правило Лагранжа:

$$([\vec{\Omega} \times \vec{R}_i], [\vec{\Omega} \times \vec{R}_i]) = \vec{\Omega}^{\top}[\vec{R}_i \times [\vec{\Omega} \times \vec{R}_i]] = \vec{\Omega}^{\top}\left(\vec{\Omega}(\vec{R}_i, \vec{R}_i) - \vec{R}_i(\vec{R}_i, \vec{\Omega})\right).$$

Итак, с учётом выполненных преобразований имеем:

$$T = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} m_i \dot{r}_i^2 = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} m_i \dot{R}_i^2 + \vec{\Omega}^{\top}\sum_{i=1}^{n} m_i[\vec{R}_i \times \dot{\vec{R}}_i] + \frac{1}{2}\vec{\Omega}^{\top}\sum_{i=1}^{n} m_i\left(\vec{\Omega}(\vec{R}_i, \vec{R}_i) - \vec{R}_i(\vec{R}_i, \vec{\Omega})\right) =$$
$$= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} m_i \dot{R}_i^2 + \vec{\Omega}^{\top}\sum_{i=1}^{n} m_i[\vec{R}_i \times \dot{\vec{R}}_i] + \vec{\Omega}^{\top}\mathbb{I}\,\vec{\Omega}.$$

где $\mathbb{I}$ – матрица тензора инерции в подвижной системе координат.

Пусть исследуемая система содержит s внутренних степеней свободы. Осуществим переход от векторов в подвижной системе к внутренним координатам $q_j, j = 1 \ldots s$:

$$\begin{cases} \vec{R}_1 = \vec{R}_1(q_1, \ldots, q_s), \\ \quad \ldots \\ \vec{R}_n = \vec{R}_n(q_1, \ldots, q_s); \end{cases}$$
$$\frac{d}{dt}\vec{R}_i = \sum_{j=1}^{s} \frac{\partial \vec{R}_i}{\partial q_j}\,\dot{q}_j.$$

Подставляя $\dot{\vec{R}}_i$ в выражение для кинетической энергии, получим:

$$T = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} m_i \sum_{j=1}^{s}\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial q_j}\dot{q}_j \sum_{k=1}^{s}\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial q_k}\dot{q}_k + \vec{\Omega}^{\top}\sum_{i=1}^{n} m_i\left[\vec{R}_i \times \sum_{j=1}^{s}\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial q_j}\,\dot{q}_j\right] + \vec{\Omega}^{\top}\mathbb{I}\,\vec{\Omega} =$$
$$= \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{s}\sum_{k=1}^{s}\left(\sum_{i=1}^{n} m_i \frac{\partial \vec{R}_i}{\partial q_j}\frac{\partial \vec{R}_i}{\partial q_k}\right)\dot{q}_j\dot{q}_k + \vec{\Omega}^{\top}\sum_{j=1}^{s}\left(\sum_{i=1}^{n} m_i\left[\vec{R}_i \times \frac{\partial \vec{R}_i}{\partial q_j}\right]\right)\dot{q}_j + \frac{1}{2}\vec{\Omega}^{\top}\mathbb{I}\,\vec{\Omega}.$$

Обозначая $a_{jk} = \sum_{i=1}^{n} m_i \frac{\partial \vec{R}_i}{\partial q_j} \frac{\partial \vec{R}_i}{\partial q_k}$, $A_{jk} = \sum_{i=1}^{n} m_i \left[\vec{R}_i \times \frac{\partial \vec{R}_i}{\partial q_k} \right]_\alpha$ (здесь $\alpha = x, y, z$ соответствуют $j = 1, 2, 3$), представим кинетиическую энергию в виде:

$$T = \frac{1}{2} \dot{\vec{q}}^{\top} \mathbb{a} \, \dot{\vec{q}} + \vec{\Omega}^{\top} \mathbb{A} \, \dot{\vec{q}} + \frac{1}{2} \vec{\Omega}^{\top} \mathbb{I} \, \vec{\Omega},$$

где $\mathbb{a} = (a_{jk})_{j=1\ldots s,\ k=1\ldots s}$, $\mathbb{A} = (A_{jk})_{j=1\ldots 3,\ k=1\ldots s}$.

Воспользуемся следующей теоремой:

Теорема 1. *Преобразование $\vec{y} = \frac{\partial X(\vec{x}, \vec{\alpha})}{\partial \vec{x}}$, определяемое производящей функцией $X = X(\vec{x}, \vec{\alpha})$, гессиан которой отличен от 0 ($\det\left(\frac{\partial^2 X}{\partial x_i \partial x_j}\right) \neq 0$), имеет обратное преобразование $\vec{x} = \frac{\partial Y(\vec{y}, \vec{\alpha})}{\partial \vec{y}}$, определяемое производящей функцией $Y(\vec{y}, \vec{\alpha})$, гессиан которой также отличен от 0 ($\det\left(\frac{\partial^2 Y}{\partial y_i \partial y_j}\right) \neq 0$). Производящая функция $Y(\vec{y}, \vec{\alpha})$ определяется следующим образом: $Y(\vec{y}, \vec{\alpha}) = \vec{x} \cdot \vec{y} - X(\vec{x}(\vec{y}, \vec{\alpha}), \vec{\alpha})$, причем $\frac{\partial X}{\partial \vec{\alpha}} + \frac{\partial Y}{\partial \vec{\alpha}} = 0$.*