

Расчет константы равновесия слабосвязанного комплекса $Ar - CO_2$

Выполнил: Финенко А. А.

Научные руководители:

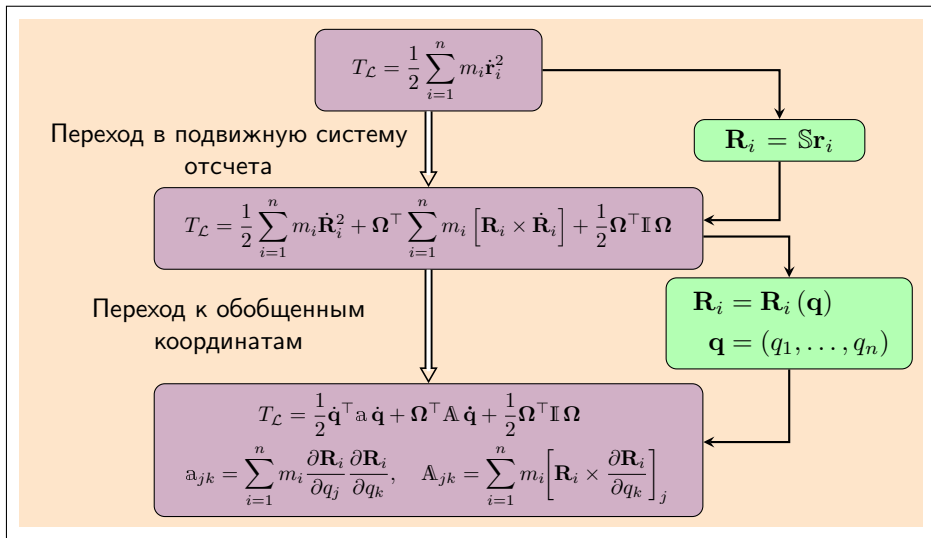
к.ф.-м.н., с.н.с. Петров С. В.

м.н.с. Локштанов С. Е.

д.ф.-м.н., в.н.с. Вигасин А. А.

МГУ им. М.В.Ломоносова, Химический факультет, 2017

Классический колебательно-вращательный гамильтониан I



Классический колебательно-вращательный гамильтониан II

$$T_{\mathcal{L}} = \frac{1}{2} [\Omega^{\top} \dot{\mathbf{q}}^{\top}] \mathbf{B} \begin{bmatrix} \Omega \\ \dot{\mathbf{q}} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{A} \\ \mathbf{A}^{\top} & \mathbf{a} \end{bmatrix}$$

Применение
теоремы Донкина

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \frac{\partial T_{\mathcal{L}}}{\partial \Omega} = \mathbf{I} \Omega + \mathbf{A} \dot{\mathbf{q}} \\ \mathbf{p} &= \frac{\partial T_{\mathcal{L}}}{\partial \dot{\mathbf{q}}} = \mathbf{A}^{\top} \Omega + \mathbf{a} \dot{\mathbf{q}} \end{aligned} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{J} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \mathbf{B} \begin{bmatrix} \Omega \\ \dot{\mathbf{q}} \end{bmatrix}$$

$$T_{\mathcal{H}} = [\Omega^{\top} \dot{\mathbf{q}}^{\top}] \begin{bmatrix} \mathbf{J} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} - T_{\mathcal{L}} = \frac{1}{2} [\mathbf{J}^{\top} \mathbf{p}^{\top}] \mathbf{G} \begin{bmatrix} \mathbf{J} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \mathbf{B}^{-1}$$

$$T_{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} \mathbf{J}^{\top} \mathbf{G}_{11} \mathbf{J} + \mathbf{J}^{\top} \mathbf{G}_{12} \mathbf{p} + \frac{1}{2} \mathbf{p}^{\top} \mathbf{G}_{22} \mathbf{p}$$

$$\mathbf{G}_{11} = (\mathbf{I} - \mathbf{A} \mathbf{a}^{-1} \mathbf{A}^{\top})^{-1}$$

$$\mathbf{G}_{12} = -\mathbf{I}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{G}_{22} = -\mathbf{G}_{11} \mathbf{A} \mathbf{a}^{-1}$$

$$\mathbf{G}_{21} = -\mathbf{a}^{-1} \mathbf{A}^{\top} \mathbf{G}_{11} = \mathbf{G}_{22} \mathbf{A}^{\top} \mathbf{I}^{-1}$$

$$\mathbf{G}_{22} = (\mathbf{a} - \mathbf{A}^{\top} \mathbf{I}^{-1} \mathbf{A})^{-1}$$

Hamiltonian