Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Химический факультет

Кафедра физической химии
Лаборатория строения и квантовой механики молекул

Исследование бифуркации в трехатомных гидридах методом классических траекторий.

Курсовая работа студента 411 группы
Финенко А.А.

Научный руководитель:
к.ф.-м.н., доц. Петров С.В.

Москва
2016

Содержание

1 Введение

2 Схема получения полного колебательно-вращательного гамильтониана

2.1 Переход в систему отсчета, связанную с центром масс

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 $\vec{R}_i$ $(i = 1 \dots n)$. Разделим движение системы на движение центра масс и движение вокруг центра масс:

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

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.

2.2 Переход в подвижную систему отсчета

Переход от лабораторной системы отсчета к подвижной системе может быть осуществлен при помощи трех последовательных поворотов на углы Эйлера φ, θ и ψ.

Первое вращение происходит вокруг оси z на угол φ. Оно переводит лабораторную систему x, y, z в систему x', y', z'. Угол φ называется углом прецессии.

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \mathbb{S}_\varphi \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

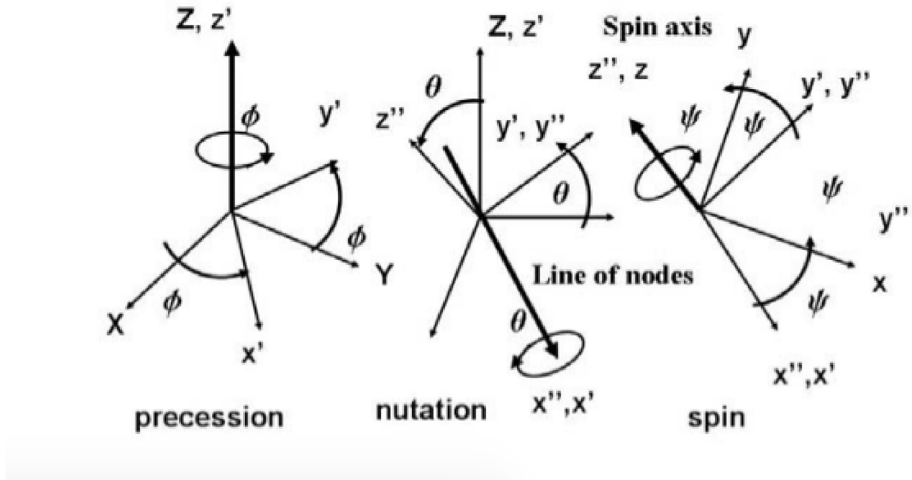

Рис. 1: Углы Эйлера

Оси x', y' лежат в плоскости x, y. Затем происходит поворот вокруг оси x' на угол θ, переводящий систему x', y', z' в систему x'', y'', z''. Ось x'' совпадает с осью x'. Ось этого поворота называется линией узлов. Угол θ называется углом нутации.

$$\begin{pmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & -sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \mathbb{S}_\theta \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}$$

И наконец, вращение вокруг оси z'' на угол ψ переводит систему x'', y'', z'' в систему x, y, z. Угол ψ называется углом собственного вращения.

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\psi & \sin\psi & 0 \\ -\sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{pmatrix} = \mathbb{S}_\psi \begin{pmatrix} x'' \\ y'' \\ z'' \end{pmatrix}$$

Суммарное вращение представляет собой последовательное применение описанных поворотов и имеет следующую матрицу:

$$\begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} = \mathbb{S} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\mathbb{S} = \mathbb{S}_\psi \mathbb{S}_\theta \mathbb{S}_\varphi = \begin{pmatrix} \cos\psi\cos\varphi - \cos\theta\sin\varphi\sin\psi & \cos\psi\sin\varphi + \cos\theta\cos\varphi\sin\psi & \sin\theta\sin\psi \\ -\sin\psi\cos\varphi - \cos\theta\sin\varphi\cos\psi & -\sin\psi\sin\varphi + \cos\theta\cos\varphi\cos\psi & \sin\theta\cos\psi \\ \sin\psi\sin\theta & -\cos\varphi\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

Проектируя вектор угловой скорости Ω на базис, образованный эйлеровыми угловыми скоростями $\dot{\varphi}$, $\dot{\theta}$, $\dot{\psi}$, получаем соотношение, известное как кинематическое уравнение Эйлера:

$$\begin{pmatrix} \Omega_X \\ \Omega_Y \\ \Omega_Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin\theta\sin\psi & \cos\psi & 0 \\ \sin\theta\cos\psi & -\sin\psi & 0 \\ \cos\theta & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\varphi} \\ \dot{\theta} \\ \dot{\psi} \end{pmatrix}$$

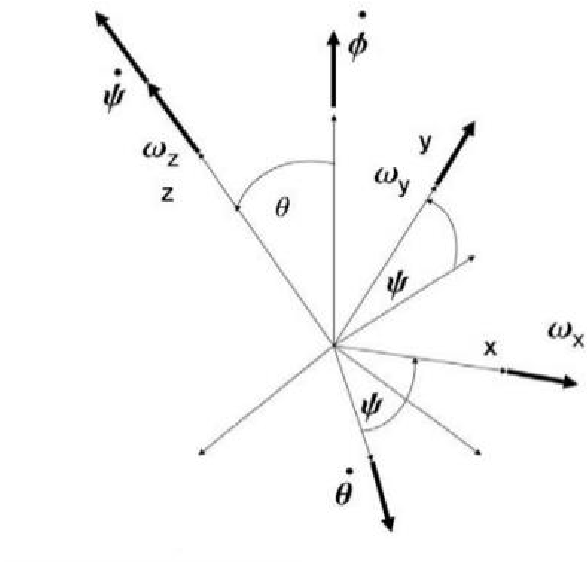

Рис. 2: Угловые скорости

ПОПРАВИТЬ НА КАРТИНКЕ МАЛЕНЬКИЕ БУКВЫ НА БОЛЬШИЕ

Я НЕ ЗНАЮ КАК СВЯЗАТЬ НАПИСАННОЕ НИЖЕ С ТЕМ, ЧТО ДОПИСАНО СЕЙЧАС

Перейдём в подвижную систему координат при помощи ортогональной матрицы $\mathbb{S}$:

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

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

Несложно заметить, что матрица $\mathbb{a}$ является симметричной: $\mathbb{a} = \mathbb{a}^{\top}$.

2.3 Применение теоремы Донкина

Перепишем выражение для кинетической энергии в матричном виде для того, чтобы перейти к гамильтоновым переменным.

$$T = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}\vec{\Omega}^{\top} & \dot{\vec{q}}^{\top}\end{bmatrix}\mathbb{B}\begin{bmatrix}\vec{\Omega}\\ \dot{\vec{q}}\end{bmatrix},$$

где $\mathbb{B}$ – блочная матрица:

$$\mathbb{B} = \begin{bmatrix}\mathbb{I} & \mathbb{A}\\ \mathbb{A}^{\top} & \mathbb{a}\end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{ccc}
\mathcal{L} = \mathcal{L}(\vec{q},\dot{\vec{q}}) & \Longrightarrow & \mathcal{H} = \mathcal{H}(\vec{q},\vec{p}) \\
\vec{p} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\vec{q}}} & & \dot{\vec{q}} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\vec{p}} \\
\mathcal{L} = \mathcal{L}(\vec{\Omega}) & \Longrightarrow & \mathcal{H} = \mathcal{H}(\vec{J}) \\
\vec{J} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\vec{\Omega}} & & \vec{\Omega} = \frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\vec{J}}
\end{array}$$

Текст, поясняющий, что угловая скорость и угловой момент являются такими же сопряженными переменными как $\vec{q}$ и $\vec{p}$.

Сейчас мы работаем исключительно с выражением для кинетической энергии, так что обозначим имеющееся у нас выражение $T_{\mathcal{L}}$ (в лагранжевом представлении), а искомое представление – $T_{\mathcal{H}}$.

$$\vec{p} = \frac{\partial T_{\mathcal{L}}}{\partial\dot{\vec{q}}} = \mathbb{A}^{\top}\vec{\Omega} + \mathbb{a}\dot{\vec{q}}$$
$$\vec{J} = \frac{\partial T_{\mathcal{L}}}{\partial\vec{\Omega}} = \mathbb{I}\,\vec{\Omega} + \mathbb{A}\dot{\vec{q}}$$

Заметим, что блочный вектор $\begin{bmatrix}\vec{J}\\ \vec{p}\end{bmatrix}$ связан с вектором $\begin{bmatrix}\vec{\Omega}\\ \dot{\vec{q}}\end{bmatrix}$ линейным преобразованием, причем матрица этого линейного преобразования есть $\mathbb{B}$:

$$\begin{bmatrix}\vec{J}\\ \vec{p}\end{bmatrix} = \mathbb{B}\begin{bmatrix}\vec{\Omega}\\ \dot{\vec{q}}\end{bmatrix} \quad\Longrightarrow\quad \begin{bmatrix}\vec{\Omega}\\ \dot{\vec{q}}\end{bmatrix} = \mathbb{B}^{-1}\begin{bmatrix}\vec{J}\\ \vec{p}\end{bmatrix}$$

Инвертирование блочной матрицы $\mathbb{B}$ легче всего осуществить с применением формул Фробениуса. (Аппендикс B). Обозначим $\mathbb{G} = \mathbb{B}^{-1} = \begin{bmatrix}G_{11} & G_{12}\\ G_{21} & G_{22}\end{bmatrix}$, ее элементы имеют следующие выражения:

$$
\begin{aligned}
\mathbb{G}_{11} &= \left(\mathbb{I} - \mathbb{A}\mathbb{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top}\right)^{-1} \\
\mathbb{G}_{12} &= -\mathbb{I}^{-1}\mathbb{A}\mathbb{G}_{22} = -\mathbb{G}_{11}\mathbb{A}\mathbb{a}^{-1} \\
\mathbb{G}_{21} &= -\mathbb{a}^{-1}\mathbb{A}^{\top}\mathbb{G}_{11} = \mathbb{G}_{22}\mathbb{A}^{\top}\mathbb{I}^{-1} \\
\mathbb{G}_{22} &= \left(\mathbb{a} - \mathbb{A}^{\top}\mathbb{I}^{-1}\mathbb{A}\right)^{-1}.
\end{aligned}
$$

Легко заметить, что $\mathbb{G}_{12} = \mathbb{G}_{21}^{\top}$. Используем этот факт в ходе стандартной процедуры перехода к гамильтоновому представлению кинетической энергии.

$$
\begin{bmatrix} \vec{\Omega} \\ \dot{\vec{q}} \end{bmatrix} = \mathbb{G} \begin{bmatrix} \vec{J} \\ \vec{p} \end{bmatrix} \quad \Longrightarrow \quad \begin{bmatrix} \vec{\Omega}^{\top} & \dot{\vec{q}}^{\top} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{J}^{\top} & \vec{p}^{\top} \end{bmatrix} \mathbb{G}
$$

$$
T_{\mathcal{H}} = \begin{bmatrix} \vec{\Omega}^{\top} & \dot{\vec{q}}^{\top} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{J} \\ \vec{p} \end{bmatrix} - T_{\mathcal{L}} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \vec{J}^{\top} & \vec{p}^{\top} \end{bmatrix} \mathbb{G} \begin{bmatrix} \vec{J} \\ \vec{p} \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\vec{J}^{\top}\mathbb{G}_{11}\vec{J} + \frac{1}{2}\vec{p}^{\top}\mathbb{G}_{22}\vec{p} + \vec{J}^{\top}\mathbb{G}_{12}\vec{p}
$$

3 Применение метода

Рассмотрим симметричные трехатомные гидриды H_2X. Они представляются хорошим объектом для изучения вращательной динамики и влияния колебательных движений на характер вращательного движения. В условиях высокого вращательного возбуждения легкие концевые атомы ставовятся подвижными, подвергаясь воздействию центробежных сил. Также, небольшое количество внутренних степеней свободы, делает эту систему доступной для изучения описанным методом.

В качестве первой системы рассмотрим простейшую модель симметричной трехатомной молекулы H_2X. В качестве первого упрощения зафиксируем расстояния между легкими атомами и центральным атомом. Таким образом, колебательная динамика молекулярной системы сводится к колебанию ножничного типа. Также, будем считать, что масса тяжелого центрального атома много больше масс легких атомов (фактически, бесконечность), что позволит нам поместить центр масс молекулярной системы на тяжелый атом. Несмотря на кажущуюся грубость описанной модели, она позволяет на качественном уровне описать колебательно-вращательное взаимодействие в трехатомных гидридах. Предложенная модель применима по причине того, что существенное влияние на колебательно-вращательное движение оказывает взаимодействие колебания деформационного типа с вращением молекулярной системы.

На рис.(3) молекула изображена в подвижной системе координат, причем ось Ox параллельна биссектрисе валентного угла q, а ось Oy перпендикулярна плоскости молекулы. Обозначим массу легких атомов – m, расстояние между легким и тяжелым атомами – r_0.

Выпишем координаты легких атомов в системе координат, связанной с центром масс.

$$
\begin{cases} x_1 = -r_0 \cos\left(\dfrac{q}{2}\right) \\ y_1 = 0 \\ z_1 = -r_0 \sin\left(\dfrac{q}{2}\right) \end{cases} \qquad \begin{cases} x_3 = -r_0 \cos\left(\dfrac{q}{2}\right) \\ y_3 = 0 \\ z_3 = r_0 \sin\left(\dfrac{q}{2}\right) \end{cases}
$$

Используя формулы, приведенные в предыдущей части, получим элементы матриц $\mathbb{a}$, $\mathbb{A}$, $\mathbb{I}$, определяющих функцию Лагранжа в подвижной системе координат, учитывающей внутренние степени свободы. Размер матрицы $\mathbb{a}$ равен $\dim \mathbb{a} = s \times s$, где s - количество

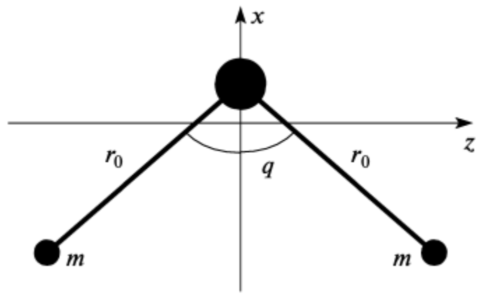

Рис. 3: Молекула H_2X в подвижной системе отсчета.

внутренних степеней свободы, т.е. в данном случае матрица $\mathbb{a}$ является числом: $\mathbb{a} = \frac{I_0}{2}$, где $I_0 = mr_0^2$. Несложные преобразования показывают, что матрица $\mathbb{A}$ является нулевой. Тензор инерции рассматриваемой системы имеет диагональный вид, причем компоненты I_{xx}, I_{zz} в сумме дают I_{yy} (т.к. система плоская): $I_{xx} = 2I_0 \sin^2\left(\frac{q}{2}\right)$, $I_{yy} = 2I_0$, $I_{zz} = 2I_0 \cos^2\left(\frac{q}{2}\right)$. Итак, функция Лагранжа принимает следующий вид:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\sum_i m_i \dot{\vec{R}}_i^2 + \vec{\Omega}^\top \sum_i m_i \left[\vec{R}_i \times \dot{\vec{R}}_i\right] + \frac{1}{2}\vec{\Omega}^\top \mathbb{I}\,\vec{\Omega} = \frac{1}{2}\frac{I_0}{2}\dot{q}^2 + \frac{1}{2}\vec{\Omega}^\top \mathbb{I}\,\vec{\Omega}.$$

A Про угловой момент..

Покажем истинность следующего результата:

$$\vec{J} = \mathbb{A}\dot{\vec{q}} + \mathbb{I}\,\vec{\Omega}$$

Рассмотрим угловой момент в лабораторной системе координат.

$$\vec{j} = \sum_{i=1}^{n} m_i \left[\vec{r}_i \times \dot{\vec{r}}_i\right]$$
$$\dot{\vec{r}}_i = \mathbb{S}^{-1}\left(\left[\vec{\Omega} \times \vec{R}_i\right] + \dot{\vec{R}}_i\right)$$
$$\vec{j} = \sum_{i=1}^{n} m_i \left[\vec{r}_i \times \mathbb{S}^{-1}\left(\left[\vec{\Omega} \times \vec{R}_i\right] + \dot{\vec{R}}_i\right)\right] = \mathbb{S}^{-1}\sum_i m_i \left[\vec{R}_i \times \dot{\vec{R}}_i\right] + \mathbb{S}^{-1}\sum_i m_i \left[\vec{R}_i \times \left[\vec{\Omega} \times \vec{R}_i\right]\right]$$

Внимательно посмотрим на слагаемое, содержащее двойное векторное произведение:

$$\sum_i m_i \left[\vec{R}_i \times \left[\vec{\Omega} \times \vec{R}_i\right]\right] = \sum_i \left(R_i^2\vec{\Omega} - \left(\vec{R}_i, \vec{\Omega}\right)\vec{R}_i\right) = \mathbb{I}\vec{\Omega}$$

Используем результат, умножаем обе части на $\mathbb{S}$, учтем, что $\vec{J} = \mathbb{S}\vec{j}$:

$$\vec{J} = \mathbb{A}\dot{\vec{q}} + \mathbb{I}\,\vec{\Omega}$$

B Формулы Фробениуса

Рассмотрим блочную матрицу $\mathbb{U} = \begin{bmatrix} \mathbb{U}_{11} & \mathbb{U}_{12} \\ \mathbb{U}_{21} & \mathbb{U}_{22} \end{bmatrix}$, т.ч. $\mathbb{U}_{11} = \left(\mathbb{U}_{11}^{jk}\right)_{\substack{j=1...m \\ k=1...m}}$, $\mathbb{U}_{22} = \left(\mathbb{U}_{22}^{jk}\right)_{\substack{j=1...n \\ k=1...n}}$ – обратимые матрицы; $\mathbb{U}_{12} = \left(\mathbb{U}_{12}^{jk}\right)_{\substack{j=1...m \\ k=1...n}}$, $\mathbb{U}_{21} = \left(\mathbb{U}_{21}^{jk}\right)_{\substack{j=1...n \\ k=1...m}}$.

Положим $\mathbb{V} = \begin{bmatrix} \mathbb{V}_{11} & \mathbb{V}_{12} \\ \mathbb{V}_{21} & \mathbb{V}_{22} \end{bmatrix}$ – это матрица, удовлетворяющая следующему соотношению:

$$\mathbb{U}\mathbb{V} = \begin{bmatrix} \mathbb{E}_{m\times m} & \mathbb{O}_{m\times n} \\ \mathbb{O}_{n\times m} & \mathbb{E}_{n\times n} \end{bmatrix} \tag{1}$$

$\mathbb{E}_{m\times m}$ – единичная матрица, $\dim \mathbb{E} = m \times m$
$\mathbb{O}_{m\times n}$ – матрица, заполненная нулями, $\dim \mathbb{O} = m \times n$.

Соотношение (1) эквивалентно следующей системе:

$$\mathbb{U}_{11}\mathbb{V}_{11} + \mathbb{U}_{12}\mathbb{V}_{21} = \mathbb{E}_{m\times m} \tag{2}$$
$$\mathbb{U}_{11}\mathbb{V}_{12} + \mathbb{U}_{12}\mathbb{V}_{22} = \mathbb{O}_{m\times n} \tag{3}$$
$$\mathbb{U}_{21}\mathbb{V}_{11} + \mathbb{U}_{22}\mathbb{V}_{21} = \mathbb{O}_{n\times m} \tag{4}$$
$$\mathbb{U}_{21}\mathbb{V}_{12} + \mathbb{U}_{22}\mathbb{V}_{22} = \mathbb{E}_{n\times n} \tag{5}$$

Выразим из уравнений (3) и (4) $\mathbb{V}_{12}$ и $\mathbb{V}_{21}$ соответственно:

$$\mathbb{V}_{12} = -\mathbb{U}_{11}^{-1}\mathbb{U}_{12}\mathbb{V}_{22}$$
$$\mathbb{V}_{21} = -\mathbb{U}_{22}^{-1}\mathbb{U}_{21}\mathbb{V}_{11}$$

Подставляя полученные выражения в уравнения (2) и (5) и выражая $\mathbb{V}_{11}$ и $\mathbb{V}_{22}$ получаем:

$$\mathbb{V}_{11} = \left(\mathbb{U}_{11} - \mathbb{U}_{12}\mathbb{U}_{22}^{-1}\mathbb{U}_{21}\right)^{-1}$$
$$\mathbb{V}_{22} = \left(\mathbb{U}_{22} - \mathbb{U}_{21}\mathbb{U}_{11}^{-1}\mathbb{U}_{12}\right)^{-1}$$

Приходим к следующему виду матрицы $\mathbb{V}$:

$$\mathbb{V} = \begin{bmatrix} \left(\mathbb{U}_{11} - \mathbb{U}_{12}\mathbb{U}_{22}^{-1}\mathbb{U}_{21}\right)^{-1} & -\mathbb{U}_{11}^{-1}\mathbb{U}_{12}\left(\mathbb{U}_{22} - \mathbb{U}_{21}\mathbb{U}_{11}^{-1}\mathbb{U}_{12}\right)^{-1} \\ -\mathbb{U}_{22}^{-1}\mathbb{U}_{21}\left(\mathbb{U}_{11} - \mathbb{U}_{12}\mathbb{U}_{22}^{-1}\mathbb{U}_{21}\right)^{-1} & \left(\mathbb{U}_{22} - \mathbb{U}_{21}\mathbb{U}_{11}^{-1}\mathbb{U}_{12}\right)^{-1} \end{bmatrix}$$

Хитрый прием. Мы нашли выражение для обратной (справа) матрицы, теперь найдем выражение для обратной (слева) матрицы $\mathbb{Q} = \begin{bmatrix} \mathbb{Q}_{11} & \mathbb{Q}_{12} \\ \mathbb{Q}_{21} & \mathbb{Q}_{22} \end{bmatrix}$:

$$\mathbb{Q}\mathbb{U} = \begin{bmatrix} \mathbb{E}_{m\times m} & \mathbb{O}_{m\times n} \\ \mathbb{O}_{n\times m} & \mathbb{E}_{n\times n} \end{bmatrix}$$

Проводя аналогичные вычисления приходим к следующему виду матрицы $\mathbb{Q}$:

$$\mathbb{Q} = \begin{bmatrix} \left(\mathbb{U}_{11} - \mathbb{U}_{12}\mathbb{U}_{22}^{-1}\mathbb{U}_{21}\right)^{-1} & -\left(\mathbb{U}_{11} - \mathbb{U}_{12}\mathbb{U}_{22}^{-1}\mathbb{U}_{21}\right)^{-1}\mathbb{U}_{12}\mathbb{U}_{22}^{-1} \\ -\left(\mathbb{U}_{22} - \mathbb{U}_{21}\mathbb{U}_{11}^{-1}\mathbb{U}_{12}\right)^{-1}\mathbb{U}_{21}\mathbb{U}_{11}^{-1} & \left(\mathbb{U}_{22} - \mathbb{U}_{21}\mathbb{U}_{11}^{-1}\mathbb{U}_{12}\right)^{-1} \end{bmatrix}$$

Так как обратная слева матрица совпадает с обратной справа матрицей, то получаем следующие два тождества:

$$\begin{cases} \mathbb{V}_{12} = \mathbb{Q}_{12} \\ \mathbb{V}_{21} = \mathbb{Q}_{21} \end{cases} \implies \begin{cases} \mathbb{U}_{11}^{-1}\mathbb{U}_{12}\left(\mathbb{U}_{22} - \mathbb{U}_{21}\mathbb{U}_{11}^{-1}\mathbb{U}_{12}\right)^{-1} = \left(\mathbb{U}_{11} - \mathbb{U}_{12}\mathbb{U}_{22}^{-1}\mathbb{U}_{21}\right)^{-1}\mathbb{U}_{12}\mathbb{U}_{22}^{-1} \\ \mathbb{U}_{22}^{-1}\mathbb{U}_{21}\left(\mathbb{U}_{11} - \mathbb{U}_{12}\mathbb{U}_{22}^{-1}\mathbb{U}_{21}\right)^{-1} = \left(\mathbb{U}_{22} - \mathbb{U}_{21}\mathbb{U}_{11}^{-1}\mathbb{U}_{12}\right)^{-1}\mathbb{U}_{21}\mathbb{U}_{11}^{-1} \end{cases}$$

C Теорема Донкина