

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

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Схема получения полного колебательно-вращательного гамильтониана</b>	<b>2</b>
2.1	Переход в систему отсчета, связанную с центром масс . . . . .	2
2.2	Переход в подвижную систему отсчета . . . . .	2
2.3	Применение теоремы Донкина . . . . .	6
<b>A</b>	<b>Про угловой момент..</b>	<b>8</b>
<b>B</b>	<b>Формулы Фробениуса</b>	<b>8</b>
<b>C</b>	<b>Получение гамильтониана исследуемой системы</b>	<b>9</b>

# 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:

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

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:

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

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:

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

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  $\varphi$ ,  $\theta$  и  $\psi$ .

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

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

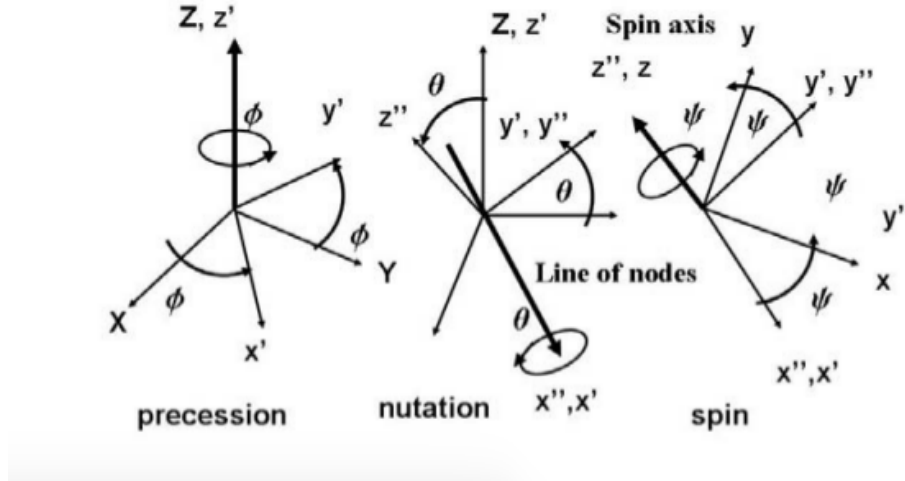


Рис. 1: Углы Эйлера

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

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

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

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

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

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

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

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

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

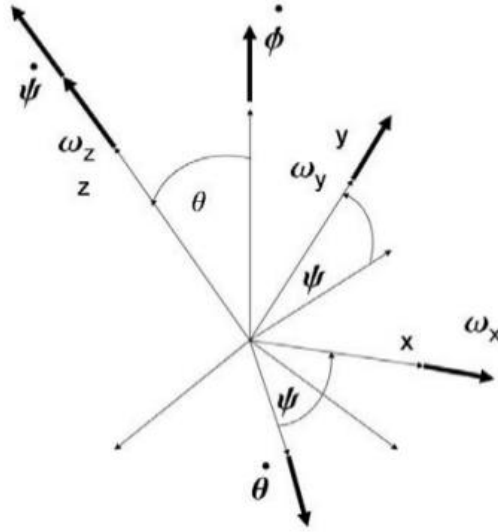


Рис. 2: Угловые скорости

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:

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

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:

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

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:

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

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:

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

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  $q_j, j = 1 \dots s$ :

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

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

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

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

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

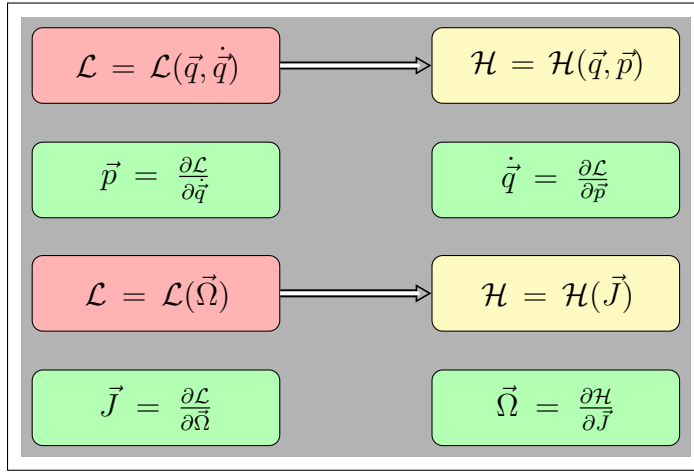
## 2.3 Применение теоремы Донкина

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

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

где  $\mathbb{B}$  – блочная матрица:

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



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 –  $T_{\mathcal{H}}$ .

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

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  $\mathbb{B}$ :

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

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

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

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

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

### 3 Получение гамильтониана исследуемой системы

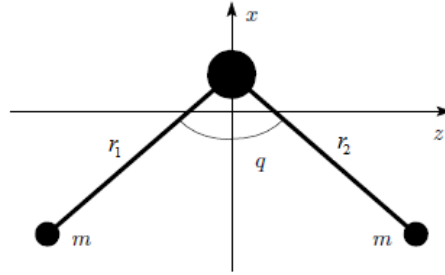


Рис. 1. Подвижная система координат для молекулы  $\text{H}_2\text{X}$



## 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.

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

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.  $\mathbb{U}_{11} = \left( \mathbb{U}_{11}^{jk} \right)_{\substack{j=1\dots m \\ k=1\dots m}}$ ,  $\mathbb{U}_{22} = \left( \mathbb{U}_{22}^{jk} \right)_{\substack{j=1\dots n \\ k=1\dots n}}$  – обратимые матрицы;  $\mathbb{U}_{12} = \left( \mathbb{U}_{12}^{jk} \right)_{\substack{j=1\dots m \\ k=1\dots n}}$ ,  $\mathbb{U}_{21} = \left( \mathbb{U}_{21}^{jk} \right)_{\substack{j=1\dots n \\ k=1\dots m}}$ .

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

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

$\mathbb{E}_{m \times m}$  – 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:

$$\mathbb{U}_{11}\mathbb{V}_{11} + \mathbb{U}_{12}\mathbb{V}_{21} = \mathbb{E}_{m \times m} \quad (2)$$

$$\mathbb{U}_{11}\mathbb{V}_{12} + \mathbb{U}_{12}\mathbb{V}_{22} = \mathbb{O}_{m \times n} \quad (3)$$

$$\mathbb{U}_{21}\mathbb{V}_{11} + \mathbb{U}_{22}\mathbb{V}_{21} = \mathbb{O}_{n \times m} \quad (4)$$

$$\mathbb{U}_{21}\mathbb{V}_{12} + \mathbb{U}_{22}\mathbb{V}_{22} = \mathbb{E}_{n \times n} \quad (5)$$

Выразим из уравнений (3) и (4)  $V_{12}$  и  $V_{21}$  соответственно:

$$\begin{aligned} V_{12} &= -U_{11}^{-1}U_{12}V_{22} \\ V_{21} &= -U_{22}^{-1}U_{21}V_{11} \end{aligned}$$

Подставляя полученные выражения в уравнения (2) и (5) и выражая  $V_{11}$  и  $V_{22}$  получаем:

$$\begin{aligned} V_{11} &= (U_{11} - U_{12}U_{22}^{-1}U_{21})^{-1} \\ V_{22} &= (U_{22} - U_{21}U_{11}^{-1}U_{12})^{-1} \end{aligned}$$

Приходим к следующему виду матрицы  $V$ :

$$V = \begin{bmatrix} (U_{11} - U_{12}U_{22}^{-1}U_{21})^{-1} & -U_{11}^{-1}U_{12}(U_{22} - U_{21}U_{11}^{-1}U_{12})^{-1} \\ -U_{22}^{-1}U_{21}(U_{11} - U_{12}U_{22}^{-1}U_{21})^{-1} & (U_{22} - U_{21}U_{11}^{-1}U_{12})^{-1} \end{bmatrix}$$

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

$$QU = \begin{bmatrix} E_{m \times m} & O_{m \times n} \\ O_{n \times m} & E_{n \times n} \end{bmatrix}$$

Проводя аналогичные вычисления приходим к следующему виду матрицы  $Q$ :

$$Q = \begin{bmatrix} (U_{11} - U_{12}U_{22}^{-1}U_{21})^{-1} & -(U_{11} - U_{12}U_{22}^{-1}U_{21})^{-1}U_{12}U_{22}^{-1} \\ -(U_{22} - U_{21}U_{11}^{-1}U_{12})^{-1}U_{21}U_{11}^{-1} & (U_{22} - U_{21}U_{11}^{-1}U_{12})^{-1} \end{bmatrix}$$

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

$$\begin{cases} V_{12} = Q_{12} \\ V_{21} = Q_{21} \end{cases} \implies \begin{cases} U_{11}^{-1}U_{12}(U_{22} - U_{21}U_{11}^{-1}U_{12})^{-1} = (U_{11} - U_{12}U_{22}^{-1}U_{21})^{-1}U_{12}U_{22}^{-1} \\ U_{22}^{-1}U_{21}(U_{11} - U_{12}U_{22}^{-1}U_{21})^{-1} = (U_{22} - U_{21}U_{11}^{-1}U_{12})^{-1}U_{21}U_{11}^{-1} \end{cases}$$