## Метод Якоби

На примере системы  $N_2$ -Ar сделаем преобразование координат, аналогичное введению приведенной массы в задаче двух тел, приводящее к возникновению виртуальных масс. Обозначим массы азотов за  $m_1$ ,  $m_2$ , аргона – за  $m_3$ . Радиус-векторам относительно лабораторной системы координат припишем соответстующие номера.

$$T = \frac{1}{2}m_1\dot{\mathbf{r}}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{\mathbf{r}}_2^2 + \frac{1}{2}m_3\dot{\mathbf{r}}_3^2 \tag{1}$$

Осуществим замену переменных  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \longrightarrow \mathbf{r}_{12}, \boldsymbol{\rho}_{12}$ :

$$\begin{cases}
 \rho_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \\
 \mathbf{r}_{12} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}
\end{cases}
\iff
\begin{cases}
 \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_{12} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \boldsymbol{\rho}_{12} \\
 \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_{12} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \boldsymbol{\rho}_{12}
\end{cases}$$
(2)

Подставляя замену (2) в выражение кинетической энергии (1), получаем

$$T = \frac{1}{2}m_{12}\dot{\mathbf{r}}_{12}^2 + \frac{1}{2}\mu_{12}\dot{\boldsymbol{\rho}}_{12}^2 + \frac{1}{2}m_3\dot{\mathbf{r}}_3^2,\tag{3}$$

где были введены обозначения

$$m_{12} = m_1 + m_2, \qquad \frac{1}{\mu_{12}} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}.$$

Заметим, что вектор  $\rho_{12}$  направлен вдоль линейной молекулы  $N_2$ , а вектор  $\mathbf{r}_{12}$  – к ее центру масс.

Проделаем аналогичную операцию с парой векторов  $\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{3}$ , введя переменные  $\boldsymbol{\rho}_{\Sigma}, \mathbf{r}_{\Sigma}$ :

$$\begin{cases}
\boldsymbol{\rho}_{\Sigma} = \mathbf{r}_{12} - \mathbf{r}_{3} \\
\mathbf{r}_{\Sigma} = \frac{m_{12}\mathbf{r}_{12} + m_{3}\mathbf{r}_{3}}{m_{12} + m_{3}}
\end{cases}
\iff
\begin{cases}
\mathbf{r}_{3} = \mathbf{r}_{\Sigma} - \frac{m_{12}}{m_{12} + m_{3}}\boldsymbol{\rho}_{\Sigma} \\
\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_{\Sigma} + \frac{m_{3}}{m_{12} + m_{3}}\boldsymbol{\rho}_{\Sigma}
\end{cases}$$

$$T = \frac{1}{2}m_{\Sigma}\dot{\mathbf{r}}_{\Sigma}^{2} + \frac{1}{2}\mu_{\Sigma}\dot{\boldsymbol{\rho}}_{\Sigma}^{2} + \frac{1}{2}\mu_{12}\dot{\boldsymbol{\rho}}_{12}^{2},$$
(4)

где были введены обозначения

$$m_{\Sigma} = m_1 + m_2 + m_3$$
, (сумма масс мономеров)  $\frac{1}{\mu_{\Sigma}} = \frac{1}{m_1 + m_2} + \frac{1}{m_3}$ . (приведенная масса мономеров)

Переместив начало системы отсчета в центр масс системы, исключаем первое слагаемое в (5).

$$T = \frac{1}{2}\mu_{\Sigma}\dot{\boldsymbol{\rho}}_{\Sigma}^{2} + \frac{1}{2}\mu_{12}\dot{\boldsymbol{\rho}}_{12}^{2}.$$
 (6)

Это выражение может быть получено альтернативным путем. Вместо того, чтобы последовательно вводить вектора Якоби  $\rho_{12}$ ,  $\rho_{\Sigma}$ , сразу выпишем выражения для них через исходные вектора  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}_2$ ,  $\mathbf{r}_3$ , дополненные выражением для вектора центра масс  $\mathbf{r}_{\Sigma}$ :

$$\begin{cases}
\boldsymbol{\rho}_{12} = \mathbf{r}_{1} - \mathbf{r}_{2} \\
\boldsymbol{\rho}_{\Sigma} = \mathbf{r}_{12} - \mathbf{r}_{3} = \frac{m_{1}\mathbf{r}_{1} + m_{2}\mathbf{r}_{2}}{m_{1} + m_{2}} - \mathbf{r}_{3} \\
\mathbf{r}_{\Sigma} = \frac{m_{1}\mathbf{r}_{1} + m_{2}\mathbf{r}_{2} + m_{3}\mathbf{r}_{3}}{m_{1} + m_{2} + m_{3}}
\end{cases}$$

$$\begin{bmatrix}
\boldsymbol{\rho}_{12} \\ \boldsymbol{\rho}_{\Sigma} \\ \mathbf{r}_{\Sigma}
\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
1 & -1 & 0 \\
\frac{m_{1}}{m_{1} + m_{2}} & \frac{m_{2}}{m_{1} + m_{2}} & -1 \\
\frac{m_{1}}{m_{1} + m_{2} + m_{3}} & \frac{m_{2}}{m_{1} + m_{2} + m_{3}} & \frac{m_{3}}{m_{1} + m_{2} + m_{3}}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
\mathbf{r}_{1} \\ \mathbf{r}_{2} \\ \mathbf{r}_{3}
\end{bmatrix}$$

$$(7)$$

Обращая выписанную матрицу, выражаем исходные вектора  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}_2$ ,  $\mathbf{r}_3$  через вектора Якоби  $\boldsymbol{\rho}_{12}$ ,  $\mathbf{r}_{\Sigma}$ ,  $\mathbf{r}_{\Sigma}$ . Затем отделяем центр масс системы, то есть исключаем вектор  $\mathbf{r}_{\Sigma}$  из выражений для  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}_2$ ,  $\mathbf{r}_3$ .

$$\begin{bmatrix}
\mathbf{r}_{1} \\
\mathbf{r}_{2} \\
\mathbf{r}_{3}
\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
\frac{m_{2}}{m_{1} + m_{2}} & \frac{m_{3}}{m_{1} + m_{2} + m_{3}} & 1 \\
-\frac{m_{1}}{m_{1} + m_{2}} & \frac{m_{3}}{m_{1} + m_{2} + m_{3}} & 1 \\
0 & -\frac{m_{1} + m_{2}}{m_{1} + m_{2} + m_{3}} & 1
\end{bmatrix} \begin{bmatrix}
\boldsymbol{\rho}_{12} \\
\boldsymbol{\rho}_{\Sigma} \\
\mathbf{r}_{\Sigma}
\end{bmatrix}$$

$$\left\{\mathbf{r}_{1} = \frac{m_{2}}{m_{1} + m_{2}} \boldsymbol{\rho}_{12} + \frac{m_{3}}{m_{1} + m_{2} + m_{3}} \boldsymbol{\rho}_{\Sigma}\right\}$$
(8)

$$\begin{cases}
\mathbf{r}_{1} = \frac{m_{2}}{m_{1} + m_{2}} \boldsymbol{\rho}_{12} + \frac{m_{3}}{m_{1} + m_{2} + m_{3}} \boldsymbol{\rho}_{\Sigma} \\
\mathbf{r}_{2} = -\frac{m_{1}}{m_{1} + m_{2}} \boldsymbol{\rho}_{12} + \frac{m_{3}}{m_{1} + m_{2} + m_{3}} \boldsymbol{\rho}_{\Sigma} \\
\mathbf{r}_{3} = -\frac{m_{1} + m_{2}}{m_{1} + m_{2} + m_{3}} \boldsymbol{\rho}_{\Sigma}
\end{cases}$$
(9)

Продифференцировав полученные выражения и подставив в (1), приходим к (6)

$$T = \frac{1}{2}\mu_{\Sigma}\dot{\boldsymbol{\rho}}_{\Sigma}^{2} + \frac{1}{2}\mu_{12}\dot{\boldsymbol{\rho}}_{12}^{2}$$
 (10)

Введем подвижную систему координат таким образом, чтобы линейная молекула и атом всегда находились в плоскости XZ, а атом лежал на оси OZ. Введем внутренние координаты  $\mathbf{q} = \{R, \Theta\}$ ; R – длина вектора  $\boldsymbol{\rho}_{\Sigma}$ , равная расстоянию между центром масс  $N_2$  и Ar,  $\Theta$  – угол поворота  $N_2$  относительно линии связи в подвижной плоскости.

$$\begin{array}{ll} \boldsymbol{\rho}_{\Sigma} \rightarrow \mathbf{R}_{1} = \{0,0,R\} \\ \boldsymbol{\rho}_{12} \rightarrow \mathbf{R}_{2} = \{l\cos\Theta,0,l\sin\Theta\} \end{array} \iff \begin{array}{ll} X_{1} = 0 & X_{2} = l\sin\Theta \\ Y_{1} = 0 & Y_{2} = 0 \\ Z_{1} = R & Z_{2} = l\cos\Theta \end{array}$$

## Гамильтониан молекулярной пары, в котором ориентация мономеров описывается относительно транслированной лабораторной системы координат

Рассмотрим два произвольных мономера. Обозначим радиус-векторы их центров масс через  $\mathbf{r}_{\text{mon}_1}$  и  $\mathbf{r}_{\text{mon}_2}$ . Поместим начало системы отсчета в центр масс системы как целого; параметризуем ось, соединяющую центры масс мономеров, сферическими углами  $\Theta, \Phi$ ; обозначим вектор, направленный из центра масс первого мономера в центр масс второго за  $\mathbf{R}$ .

$$\mathbf{r}_{\text{mon}_{1}} = -\frac{m_{\text{mon}_{2}}}{M} \mathbf{R} = -\frac{m_{\text{mon}_{2}}}{M} \begin{bmatrix} R \sin \Theta \cos \Phi \\ R \sin \Theta \sin \Phi \\ R \cos \Theta \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{r}_{\text{mon}_{2}} = \frac{m_{\text{mon}_{1}}}{M} \mathbf{R} = \frac{m_{\text{mon}_{1}}}{M} \begin{bmatrix} R \sin \Theta \cos \Phi \\ R \sin \Theta \sin \Phi \\ R \cos \Theta \end{bmatrix},$$

$$(11)$$

где M — сумма масс мономеров. Пусть второй мономер состоит из n точек, радиус-вектора которых во введенной системе отсчета обозначим  $\left\{\mathbf{r}_{2}^{k}\right\}_{k=1...n}$ , а относительно центра масс второго мономера —  $\left\{\mathbf{r}_{\mathrm{mon}_{2}}^{k}\right\}_{k=1...n}$ . Тогда для k-й точки вектора связаны соотношением

$$\mathbf{r}_2^k = \mathbf{r}_{\text{mon}_2} + \mathbf{r}_{\text{mon}_2}^k \tag{12}$$

Преобразуем выражение кинетической энергии второго мономера.

$$T_{2} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} m_{k} \left( \dot{\mathbf{r}}_{2}^{k} \right)^{2} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} m_{k} \left( \dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_{2}} + \dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_{2}}^{k} \right)^{2} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} m_{k} \left[ \dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_{2}}^{2} + 2 \dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_{2}} \dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_{2}}^{k} + \left( \dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_{2}}^{k} \right)^{2} \right] = \frac{1}{2} m_{\text{mon}_{2}} \dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_{2}}^{2} + \dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_{2}} \frac{d}{dt} \left[ \sum_{k=1}^{n} m_{k} \mathbf{r}_{\text{mon}_{2}}^{k} \right] + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} m_{k} \left( \dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_{2}}^{k} \right)^{2}$$

$$(13)$$

Второе слагаемое в (13) равно нулю, т.к. в квадратных скобках представлен вектор, направленный в центр масс второго мономера, в системе, связанной с центром масс второго мономера, то есть нуль-вектор. Квадрат производной вектора  $\mathbf{R}$ , соединяющего центры масс мономеров, в сферической системе координат имеет следующий вид

$$\dot{\mathbf{R}}^2 = \dot{R}^2 + R^2 \dot{\Theta}^2 + R^2 \dot{\Phi}^2 \sin^2 \Theta \tag{14}$$

Подставим выражение для производной (14) в кинетическую энергию второго мономера (13) (вектор  $\mathbf{r}_{\text{mon}_2}$  связан с вектором  $\mathbf{R}$  соотношением (11)):

$$T_{2} = \frac{1}{2} m_{\text{mon}_{2}} \frac{m_{\text{mon}_{1}}^{2}}{M^{2}} \left[ \dot{R}^{2} + R^{2} \dot{\Theta}^{2} + R^{2} \dot{\Phi}^{2} \sin^{2} \Theta \right] + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} m_{k} \left( \dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_{2}}^{k} \right)^{2}$$
(15)

Будем описывать ориентацию второго мономера при помощи матрицы  $\mathbb{S}_2$ . Обозначим систему векторов  $\{\mathbf{r}_{\text{mon}_2}^k\}_{k=1...n}$  в начальный момент времени за  $\{\mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k\}_{k=1...n}$ . Тогда в момент времени t системы векторов связаны при помощи матрицы  $\mathbb{S}_2$ :

$$\mathbf{r}_{\text{mon}_2}^k(t) = \mathbb{S}_2(t) \,\mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k, \qquad k = 1 \dots n \tag{16}$$

Получим выражение для производной k-го вектора  $\mathbf{r}_{\mathrm{mon}_2}^k$ :

$$\dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2}^k = \dot{\mathbb{S}}_2 \,\mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k = \dot{\mathbb{S}}_2 \,\mathbb{S}_2^{-1} \mathbf{r}_{\text{mon}_2}^k = \left[\boldsymbol{\omega}_2 \times \mathbf{r}_{\text{mon}_2}^k\right] = \mathbb{S}_2 \left[\boldsymbol{\Omega}_2 \times \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k\right] \tag{17}$$

Просуммируем масс-взвешенные производные векторов:

$$\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} m_k \left( \dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2}^k \right)^2 = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} m_k \left[ \mathbf{\Omega}_2 \times \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k \right]^{\top} \mathbb{S}_2^{\top} \mathbb{S}_2 \left[ \mathbf{\Omega}_2 \times \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k \right] = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} m_k \left[ \mathbf{\Omega}_2 \times \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k \right]^2 = \\
= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} m_k \mathbf{\Omega}_2^{\top} \left[ \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k \times \left[ \mathbf{\Omega}_2 \times \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k \right] \right] = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n} \mathbf{\Omega}_2^{\top} \left( \left( \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k, \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k \right) - \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k \left( \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k, \mathbf{\Omega}_2 \right) \right) = \\
= \frac{1}{2} \mathbf{\Omega}_2^{\top} \mathbb{I}_2 \mathbf{\Omega}_2,$$

где  $\mathbb{I}_2$  — тензор инерции второго мономера. Положим, что в начальный момент система координат, находящаяся в центре масс пары, совпадала с системой главных осей второго мономера. Тогда тензор инерции  $\mathbb{I}_2$  принимает диагональный вид (верхний индекс — номер мономера)

$$\mathbb{I}_2 = \begin{bmatrix} I_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & I_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & I_3^2 \end{bmatrix}$$

Вектор угловой скорости  $\Omega_2$  связан с вектором эйлеровых скоростей  $\dot{\mathbf{e}}_2$  матрицей  $\mathbb{V}_2$ :

$$\mathbf{\Omega}_2 = \begin{bmatrix} \sin \theta_2 \sin \psi_2 & \cos \psi_2 & 0 \\ \sin \theta_2 \cos \psi_2 & -\sin \psi_2 & 0 \\ \cos \theta_2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\varphi}_2 \\ \dot{\theta}_2 \\ \dot{\psi}_2 \end{bmatrix} = \mathbb{V}_2 \, \dot{\mathbf{e}}_2$$

Итак, выражение кинетической энергии второго мономера  $T_2$  приходит к виду

$$T_{2} = \frac{1}{2} m_{\text{mon}_{2}} \frac{m_{\text{mon}_{1}}^{2}}{M^{2}} \left[ \dot{R}^{2} + R^{2} \dot{\Theta}^{2} + R^{2} \dot{\Phi}^{2} \sin^{2} \Theta \right] + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{e}}_{2}^{\mathsf{T}} \mathbb{V}_{2}^{\mathsf{T}} \mathbb{I}_{2} \, \mathbb{V}_{2} \dot{\mathbf{e}}_{2}$$
(18)

Проводя аналогичные рассуждения приходим к выражению для кинетической энергии

первого мономера  $T_1$ . Получаем выражение для полной кинетической энергии пары:

$$T = T_1 + T_2 = \frac{1}{2} \left[ m_{\text{mon}_1} \frac{m_{\text{mon}_2}^2}{M^2} + m_{\text{mon}_2} \frac{m_{\text{mon}_1}^2}{M^2} \right] \times \left[ \dot{R}^2 + R^2 \dot{\Theta}^2 + R^2 \dot{\Phi}^2 \sin^2 \Theta \right] + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{e}}_1^{\top} \mathbb{V}_1^{\top} \mathbb{I}_1 \, \mathbb{V}_1 \dot{\mathbf{e}}_1 + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{e}}_2^{\top} \mathbb{V}_2^{\top} \mathbb{I}_2 \, \mathbb{V}_2 \dot{\mathbf{e}}_2,$$
(19)

$$T = \frac{1}{2}\mu \left[ \dot{R}^2 + R^2 \dot{\Theta}^2 + R^2 \dot{\Phi}^2 \sin^2 \Theta \right] + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{e}}_1^{\mathsf{T}} \mathbb{V}_1^{\mathsf{T}} \mathbb{I}_1 \, \mathbb{V}_1 \dot{\mathbf{e}}_1 + \frac{1}{2} \dot{\mathbf{e}}_2^{\mathsf{T}} \mathbb{V}_2^{\mathsf{T}} \mathbb{I}_2 \, \mathbb{V}_2 \dot{\mathbf{e}}_2, \tag{20}$$

где  $\mu = \frac{m_{\text{mon}_1} m_{\text{mon}_2}}{m_{\text{mon}_1} + m_{\text{mon}_2}}.$ 

Для перехода к гамильтоновой форме кинетической энергии выпишем выражения для эйлеровых импульсов второго волчка (нижний индекс обозначает номер волчка):

$$\mathbf{p}_{2}^{e} = \frac{\partial I'}{\partial \dot{\mathbf{e}}_{2}} = \mathbb{V}_{2}^{\top} \mathbb{I}_{2} \mathbb{V}_{2} \dot{\mathbf{e}}_{2}$$

$$p_{2}^{\varphi} = I_{1}^{2} \left( \dot{\varphi}_{2} \sin \theta_{2} \sin \psi_{2} + \dot{\theta}_{2} \cos \psi_{2} \right) \sin \theta_{2} \sin \psi_{2} +$$

$$+ I_{2}^{2} \left( \dot{\varphi}_{2} \sin \theta_{2} \cos \psi_{2} - \dot{\theta}_{2} \sin \psi_{2} \right) \sin \theta_{2} \cos \psi_{2} +$$

$$+ I_{3}^{2} \left( \dot{\varphi}_{2} \cos \theta_{2} + \dot{\psi}_{2} \right) \cos \theta_{2}$$

$$p_{2}^{\theta} = I_{1}^{2} \left( \dot{\varphi}_{2} \sin \theta_{2} \sin \psi_{2} + \dot{\theta}_{2} \cos \psi_{2} \right) \cos \psi -$$

$$- I_{3}^{2} \left( \dot{\varphi}_{2} \sin \theta_{2} \cos \psi_{2} - \dot{\theta}_{2} \sin \psi_{2} \right) \sin \psi_{2}$$

$$p_{2}^{\psi} = I_{3}^{2} \left( \dot{\varphi}_{2} \cos \theta_{2} + \dot{\psi}_{2} \right)$$

$$(21)$$

Перепишем систему в матричном виде и разрешим ее относительно вектора эйлеровых скоростей  $\dot{\mathbf{e}}_2$ :

$$\begin{bmatrix} \left(I_{1}^{2}\sin^{2}\psi_{2}+I_{2}^{2}\cos^{2}\psi_{2}\right)\sin^{2}\theta_{2}+I_{3}^{2}\cos^{2}\theta_{2} & \left(I_{1}^{2}-I_{2}^{2}\right)\sin\theta_{2}\sin\psi_{2}\cos\psi_{2} & I_{3}^{2}\cos\theta_{2} \\ \left(I_{1}^{2}-I_{2}^{2}\right)\sin\theta_{2}\sin\psi_{2}\cos\psi_{2} & I_{1}^{2}\cos^{2}\psi_{2}+I_{2}^{2}\sin^{2}\psi_{2} & 0 \\ I_{3}^{2}\cos\theta_{2} & 0 & I_{3}^{2} \end{bmatrix} \dot{\mathbf{e}}_{2}=\mathbf{p}_{2}^{e} \\ \dot{\mathbf{e}}_{2}=\frac{1}{I_{1}^{2}I_{2}^{2}\sin^{2}\theta} \times \begin{bmatrix} \alpha & \beta & -\alpha\cos\theta_{2} \\ \beta & \left(I_{1}^{2}\sin^{2}\psi_{2}+I_{2}^{2}\cos^{2}\psi_{2}\right)\sin^{2}\theta_{2} & -\beta\sin\theta_{2}\cos\theta_{2} \\ -\alpha\cos\theta_{2} & -\beta\sin\theta_{2}\cos\theta_{2} & \frac{I_{1}^{2}I_{2}^{2}}{I_{3}^{2}}\sin^{2}\theta_{2}+\alpha\cos^{2}\theta_{2} \end{bmatrix} \mathbf{p}_{2}^{e}, \\ \alpha = I_{1}^{2}\cos^{2}\psi_{2}+I_{2}^{2}\sin^{2}\psi_{2}, \quad \beta = \left(I_{2}^{2}-I_{1}^{2}\right)\sin\psi_{2}\cos\psi_{2} \end{aligned}$$

Подставив полученные выражения эйлеровых скоростей через эйлеровы импульсы в матричное произведение  $\dot{\mathbf{e}}_2^{\top} \mathbb{V}_2^{\top} \mathbb{I}_2 \mathbb{V}_2 \dot{\mathbf{e}}_2$ , вроде как (?), получаем угловую часть кинетической энергии второго мономера в гамильтоновой форме

$$\widetilde{T}_{2}^{\mathcal{H}}(\varphi_{2}, \theta_{2}, \psi_{2}, p_{2}^{\varphi}, p_{2}^{\theta}, p_{2}^{\psi}) = \frac{1}{2I_{1}^{2}\sin^{2}\theta_{2}} \left[ \left( p_{2}^{\varphi} - p_{2}^{\psi}\cos\theta_{2} \right) \cos\psi_{2} - p_{2}^{\theta}\sin\theta_{2}\sin\psi_{2} \right]^{2} + \frac{1}{2I_{2}^{2}\sin^{2}\theta_{2}} \left[ \left( p_{2}^{\varphi} - p_{2}^{\psi}\cos\theta_{2} \right) \sin\psi_{2} + p_{2}^{\theta}\sin\theta_{2}\cos\psi_{2} \right]^{2} + \frac{1}{2I_{3}^{2}} \left( p_{2}^{\psi} \right)^{2}.$$
(22)

Выражения для импульсов, сопряженных координатам  $R, \Theta, \Phi,$  существенно проще:

$$p_{R} = \frac{\partial T}{\partial \dot{R}} = \mu \dot{R}$$

$$p_{\Theta} = \frac{\partial T}{\partial \dot{\Theta}} = \mu R^{2} \dot{\Theta}$$

$$p_{\Phi} = \frac{\partial T}{\partial \dot{\Phi}} = \mu R^{2} \dot{\Phi} \sin^{2} \Theta$$

Итого, приходим к следующему выражению для гамильтониана:

$$T_{\mathcal{H}} = \frac{p_R^2}{2\mu} + \frac{p_{\Theta}^2}{2\mu R^2} + \frac{p_{\Phi}^2}{2\mu R^2 \sin^2{\Theta}} + \frac{1}{2I_1^2 \sin^2{\theta_2}} \left[ \left( p_2^{\varphi} - p_2^{\psi} \cos{\theta_2} \right) \cos{\psi_2} - p_2^{\theta} \sin{\theta_2} \sin{\psi_2} \right]^2 + \frac{1}{2I_2^2 \sin^2{\theta_2}} \left[ \left( p_2^{\varphi} - p_2^{\psi} \cos{\theta_2} \right) \sin{\psi_2} + p_2^{\theta} \sin{\theta_2} \cos{\psi_2} \right]^2 + \frac{1}{2I_3^2} \left( p_2^{\psi} \right)^2 + \frac{1}{2I_1^1 \sin^2{\theta_1}} \left[ \left( p_1^{\varphi} - p_1^{\psi} \cos{\theta_1} \right) \cos{\psi_1} - p_1^{\theta} \sin{\theta_1} \sin{\psi_1} \right]^2 + \frac{1}{2I_2^1 \sin^2{\theta_1}} \left[ \left( p_1^{\varphi} - p_1^{\psi} \cos{\theta_1} \right) \sin{\psi_1} + p_1^{\theta} \sin{\theta_1} \cos{\psi_1} \right]^2 + \frac{1}{2I_3^1} \left( p_1^{\psi} \right)^2$$