Введем следующие обозначения:

$$\mu_1 = \frac{m_1}{2}, \quad \mu_2 = \frac{m_2\,(2m_1 + m_3)}{2m_1 + m_2 + m_3}$$

Матрицы $\mathbb{a}$, $\mathbb{A}$, $\mathbb{I}$, определяющие вид кинетической энергии в лагранжевой форме:

$$\mathbb{a} = \begin{bmatrix} \mu_2 & 0 \\ 0 & \mu_1 l^2 \end{bmatrix} \quad \mathbb{A} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mu_1 l^2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbb{I} = \begin{bmatrix} \mu_1 l^2 \cos^2\theta + \mu_2 R^2 & 0 & -\mu_1 l^2 \sin\theta\cos\theta \\ 0 & \mu_1 l^2 + \mu_2 R^2 & 0 \\ -\mu_1 l^2 \sin\theta\cos\theta & 0 & \mu_1 l^2 \sin^2\theta \end{bmatrix}$$

Используя формулы Фробениуса, получаем матрицы $\mathbb{G}_{11}$, $\mathbb{G}_{12}$, $\mathbb{G}_{22}$, определяющие кинетическую энергию в гамильтоновой форме:

$$\mathbb{G}_{11} = \begin{bmatrix} \dfrac{1}{\mu_2 R^2} & 0 & \dfrac{1}{\mu_2 R^2 \tan\theta} \\ 0 & \dfrac{1}{\mu_2 R^2} & 0 \\ \dfrac{1}{\mu_2 R^2 \tan\theta} & 0 & \dfrac{1}{\mu_2 R^2 \tan^2\theta} + \dfrac{1}{\mu_1 l^2 \sin^2\theta} \end{bmatrix} \quad \mathbb{G}_{12} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\dfrac{1}{\mu_2 R^2} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbb{G}_{22} = \begin{bmatrix} \dfrac{1}{\mu_2} & 0 \\ 0 & \dfrac{1}{\mu_2 R^2} + \dfrac{1}{\mu_1 l^2} \end{bmatrix}$$

Получаем гамильтониан системы CO_2–Ar в заданной молекулярной системе координат:

$$H = \frac{1}{2\mu_2} p_R^2 + \left(\frac{1}{2\mu_2 R^2} + \frac{1}{2\mu_1 l^2} \right) p_\theta^2 - \frac{1}{\mu_2 R^2} p_\theta J_Y + \frac{1}{2\mu_2 R^2} J_Y^2 + \frac{1}{2\mu_2 R^2} J_X^2 + \frac{1}{2\sin^2\theta} \left(\frac{\cos^2\theta}{\mu_2 R^2} + \frac{1}{\mu_1 l^2} \right) J_Z^2 + \\ + \frac{1}{\mu_2 R^2 \tan\theta} J_X J_Z + U(R,\theta)$$