О диагонализации гамильтониана

Рассмотрим набор систем по возрастанию количества внутренних переменных. Для каждой из них выпишем лагранжиан в некоторой молекулярной системе отсчета и найдем такое преобразование переменных, которое диагонализует лагранжиан. Используем найденное преобразование для диагонализации гамильтониана. Затем выпишем якобианы замены переменных в лагранжиане и в гамильтониане.

Двухатомная система

Пусть совокупное движение двух тел происходит в плоскости Oyz. Выберем молекулярную систему отсчета таким образом, чтобы рассматриваемые тела находились на оси Z. В таком случае, плоскости молекулярной системы OyZ и лабораторной системы Oyz совпадают в любой момент времени. При этом угол между осями Oy и OY (равный, конечно, углу между Oz и OZ) равен эйлеровому углу θ (в рамках стандартного определения эйлеровых углов по Голдстейну). Остальные два эйлеровых угла, ϕ и ψ , равны 0.

Понятно, что угловая скорость, соответсвующая повороту на угол θ , направлена вдоль оси вращения x=X. Следовательно, $\Omega_x=\dot{\theta}$. Аналогичный результат можно получить, взяв матрицу \mathbb{V} , связывающую компоненты угловой скорости с эйлеровыми скоростями, в общем случае и подставив в нее $\phi=\psi=0$:

$$\begin{bmatrix} \Omega_x \\ \Omega_y \\ \Omega_z \end{bmatrix} = \mathbb{V} \begin{bmatrix} \dot{\varphi} \\ \dot{\theta} \\ \dot{\psi} \end{bmatrix}$$

$$\mathbb{V} = \begin{bmatrix} \sin \theta \sin \psi & \cos \psi & 0 \\ \sin \theta \cos \psi & -\sin \psi & 0 \\ \cos \theta & 0 & 1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta & 0 & 0 \\ \cos \theta & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

T.K.
$$\dot{\varphi} = \dot{\psi} = 0$$
, to $\Omega_x = \dot{\theta}$, $\Omega_y = 0$, $\Omega_z = 0$.

Выведем кинетическую энергию в лагранжевой форме в предложенной системе координат. Обозначим массы тел за m_1 и m_2 , расстояние между телами – за R. Тогда координаты тел равны

$$x_1 = 0$$
 $x_2 = 0$
 $y_1 = 0$ $y_2 = 0$
 $z_1 = -\frac{m_2}{m_1 + m_2}R$ $z_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2}R$

Тензор инерции будет иметь лишь две ненулевые компоненты, а именно, $I_{xx}=I_{yy}=\mu R^2$, где μ – приведенная масса системы, $\mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$. Приведенные выше рассуждения показывают,

что вектор угловой скорости направлен вдоль оси x = X:

$$oldsymbol{\Omega} = egin{bmatrix} \Omega_x \ 0 \ 0 \end{bmatrix}$$

Итак, кинетическая энергия в лагранжевой форме в рассматриваемой молекулярной системе отсчета имеет следующий вид

$$T_{\mathcal{L}} = \frac{1}{2}\mu \dot{R}^2 + \frac{1}{2}\mu R^2 \Omega_x^2$$

Осуществим следующую тривиальную замену переменных

$$x_1^2 = \frac{1}{2}\mu \dot{R}^2 x_2^2 = \frac{1}{2}\mu R^2 \Omega_x^2,$$
 (1)

приводящую лагранжиан к сумме квадратов

$$T_{\mathcal{L}} = x_1^2 + x_2^2. \tag{2}$$

Осуществим стандартную процедуру перехода от лагранжевой кинетической энергии к гамильтоновой, однако будем выполнять промежуточные преобразования через переменные x_1 и x_2 . Выразим лагранжевы переменные \dot{R} , Ω_x и гамильтоновые переменные p_R , J_x через x_1 и x_2 .

$$\dot{R} = \sqrt{\frac{2}{\mu}} x_1 \qquad p_R = \frac{\partial T_{\mathcal{L}}}{\partial \dot{R}} = \mu \dot{R} = \sqrt{2\mu} x_1$$

$$\Omega_x = \sqrt{\frac{2}{\mu R^2}} x_2 \qquad J_x = \frac{\partial T_{\mathcal{L}}}{\partial \Omega_x} = \mu R^2 \Omega_x = \sqrt{2\mu R^2} x_2$$

Получим выражение для гамильтоновой формы кинетической энергии

$$T_{\mathcal{H}} = \dot{R}p_R + \Omega_x J_x - x_1^2 - x_2^2$$

$$\dot{R} \cdot p_R = \sqrt{\frac{\mu}{2}} x_1 \cdot \sqrt{2\mu} x_1 = 2x_1^2$$

$$\Omega_x \cdot J_x = \sqrt{\frac{2}{\mu R^2}} x_2 \cdot \sqrt{2\mu R^2} x_2 = 2x_2^2$$

$$T_{\mathcal{H}} = 2x_1^2 + 2x_2^2 - x_1^2 - x_2^2 = x_1^2 + x_2^2$$

Итак, кинетическая энергия в гамильтоновой форме выражается в виде суммы квадратов таким же образом, как и кинетическая энергия в лагранжевой форме. Однако в выражениях переменных x_1 и x_2 необходимо лагранжевые переменные преобразовать в гамильтоновы переменные:

$$x_{1}^{2} = \frac{1}{2}\mu\dot{R}^{2} \longrightarrow x_{1}^{2} = \frac{p_{R}^{2}}{2\mu}$$

$$x_{2}^{2} = \frac{1}{2}\mu R^{2}\Omega_{x}^{2} \longrightarrow x_{2}^{2} = \frac{J_{x}^{2}}{2\mu R^{2}}$$

$$T_{\mathcal{L}} = x_{1}^{2} + x_{2}^{2} \longrightarrow T_{\mathcal{H}} = x_{1}^{2} + x_{2}^{2}$$

Получим выражения для якобианов замены переменных в лагранжиане и гамильтониане.

$$[Jac]_{lagr} = \begin{vmatrix} \frac{\partial (\dot{R}, \Omega_x)}{\partial (x_1, x_2)} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{\partial \dot{R}}{\partial x_1} & \frac{\partial \dot{R}}{\partial x_2} \\ \frac{\partial \Omega_x}{\partial x_1} & \frac{\partial \Omega_x}{\partial x_2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sqrt{\frac{2}{\mu}} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{\mu R^2}} \end{vmatrix} = 2\sqrt{\frac{1}{\mu}}\sqrt{\frac{1}{\mu R^2}} = \frac{2}{\mu R}$$

$$[Jac]_{ham} = \begin{vmatrix} \frac{\partial (p_R, J_x)}{\partial x_1, x_2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \frac{\partial p_R}{\partial x_1} & \frac{\partial p_R}{\partial x_2} \\ \frac{\partial J_x}{\partial x_1} & \frac{\partial J_x}{\partial x_2} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sqrt{2\mu} & 0 \\ 0 & \sqrt{2\mu R^2} \end{vmatrix} = \sqrt{2\mu}\sqrt{2\mu R^2} = 2\mu R$$

Отметим, что якобианы связаны следующим соотношением

$$[Jac]_{lagr} \cdot [Jac]_{ham} = 2^2$$

Система CO₂-Ar

Используем стандартную молекулярную систему отсчета для этой системы. Направим ось OZ вдоль линии C-Ar, ось OX перпендикулярно ей в плоскости системы.

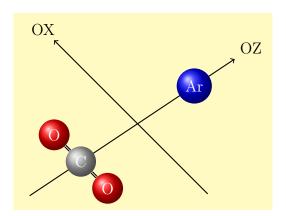


Рис. 1: Молекулярная система отсчета для системы $Ar - CO_2$.

Лагранжиан в описанной молекулярной системе отсчета имеет вид

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\mu_{2}\dot{R}^{2} + \frac{1}{2}\mu_{1}l^{2}\dot{\Theta}^{2} + \mu_{1}l^{2}\Omega_{y}^{2}\dot{\Theta} + \frac{1}{2}\left(\mu_{1}l^{2}\cos^{2}\Theta + \mu_{2}R^{2}\right)\Omega_{x}^{2} + \frac{1}{2}\left(\mu_{1}l^{2} + \mu_{2}R^{2}\right)\Omega_{y}^{2} + \frac{1}{2}\mu_{1}l^{2}\Omega_{z}^{2}\sin^{2}\Theta - \mu_{1}l^{2}\Omega_{x}\Omega_{z}\sin\Theta\cos\Theta,$$

где приведенные массы μ_1, μ_2 связаны с массами кислорода $m_1,$ аргона m_2 и углерода m_3 следующим образом

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

Будем использовать следующую замену для диагонализации лагранжиана

$$x_{1}^{2} = \frac{1}{2}\mu_{2}\dot{R}^{2}$$

$$x_{2}^{2} = \frac{1}{2}\mu_{1}l^{2}\left(\dot{\Theta} + \Omega_{y}\right)^{2}$$

$$x_{3}^{2} = \frac{1}{2}\mu_{2}R^{2}\Omega_{y}^{2}$$

$$x_{4}^{2} = \frac{1}{2}\mu_{1}l^{2}\left(\Omega_{x}\cos\Theta - \Omega_{z}\sin\Theta\right)^{2}$$

$$x_{5}^{2} = \frac{1}{2}\mu_{2}R^{2}\Omega_{x}^{2}$$
(3)

Следующим шагом процедуры является получение выражений лагранжевых и гамильтоновых переменных через x_1,\ldots,x_5 . Для нахождения первых решим систему линейных соотношений (3) относительно $\dot{R},\dot{\Theta},\Omega_x,\Omega_y$ и Ω_z .

$$\dot{R} = x_1 \sqrt{\frac{2}{\mu_2}}$$

$$\dot{\Theta} = x_2 \sqrt{\frac{2}{\mu_1 l^2}} - x_3 \sqrt{\frac{2}{\mu_2 R^2}}$$

$$\Omega_x = x_5 \sqrt{\frac{2}{\mu_2 R^2}}$$

$$\Omega_y = x_3 \sqrt{\frac{2}{\mu_2 R^2}}$$

$$\Omega_z = x_5 \sqrt{\frac{2}{\mu_2 R^2}} \cot \Theta - \frac{x_4}{\sin \Theta} \sqrt{\frac{2}{\mu_1 l^2}}$$

Действуя блочной матрицей \mathbb{B} на вектор лагранжевых переменных, получаем вектор гамильтоновых переменных. Подставляя в это выражение лагранжевы переменные через x_1, \ldots, x_5 , мы получаем связь гамильтоновых перменных и x_1, \ldots, x_5 :

$$\mathbf{J} = \frac{\partial T_{\mathcal{L}}}{\partial \mathbf{\Omega}} = \mathbb{I}\mathbf{\Omega} + \mathbf{A}\dot{\mathbf{q}}$$

$$\mathbf{p} = \frac{\partial T_{\mathcal{L}}}{\partial \dot{\mathbf{q}}} = \mathbf{A}^{\top}\mathbf{\Omega} + a\dot{\mathbf{q}}$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} \mathbf{J} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbb{I} & \mathbf{A} \\ \mathbf{A}^{\top} & \mathbf{a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{\Omega} \\ \dot{\mathbf{q}} \end{bmatrix} = \mathbb{B} \begin{bmatrix} \mathbf{\Omega} \\ \dot{\mathbf{q}} \end{bmatrix}$$

$$p_{R} = \mu_{1}\dot{R}$$

$$p_{R} = \mu_{1}\dot{R}$$

$$p_{R} = \mu_{1}\dot{R}$$

$$p_{R} = \mu_{1}\dot{R}$$

$$p_{R} = x_{1}\sqrt{2\mu_{2}}$$

$$p_{\Theta} = x_{2}\sqrt{2\mu_{1}l^{2}}$$

$$p_{\Theta} = x_{$$

Получим выражение для кинетической энергии в гамильтоновой форме

$$T_{\mathcal{H}} = \dot{R}p_R + \dot{\Theta}p_{\Theta} + \Omega_x J_x + \Omega_y J_y + \Omega_z J_z - T_{\mathcal{L}} = \left[2x_1^2\right] + \left[2x_2^2 - 2x_2 x_3 \sqrt{\frac{\mu_1 l^2}{\mu_2 R^2}}\right] + \left[2x_5^2 + 2x_4 x_5 \cos \Theta \sqrt{\frac{\mu_1 l^2}{\mu_2 R^2}}\right] + \left[2x_3^2 + 2x_2 x_3 \sqrt{\frac{\mu_1 l^2}{\mu_2 R^2}}\right] + \left[2x_4^2 - 2x_4 x_5 \cos \Theta \sqrt{\frac{\mu_1 l^2}{\mu_2 R^2}}\right] - T_{\mathcal{L}} = 2\left(x_1^2 + \dots + x_5^2\right) - \left(x_1^2 + \dots + x_5^2\right) = x_1^2 + \dots + x_5^2$$

Используя левый столбец формул в (5), выразим лагранжевы переменные через гамильтоновы, чтобы использовать их для преобразования выражений $x_1, \dots x_5$.

$$\begin{split} \dot{R} &= \frac{1}{\mu_2} p_R \\ \dot{\Theta} &= -\frac{1}{\mu_2 R^2} J_y + p_\Theta \left(\frac{1}{\mu_2 R^2} + \frac{1}{\mu_1 l^2} \right) \\ \Omega_x &= \frac{1}{\mu_2 R^2} J_x + \frac{\cot \Theta}{\mu_2 R^2} J_z \\ \Omega_y &= \frac{J_y - p_\Theta}{\mu_2 R^2} \\ \Omega_z &= \frac{\cot \Theta}{\mu_2 R^2} J_x + \frac{\cot^2 \Theta}{\mu_2 R^2} J_z + \frac{1}{\mu_1 l^2 \sin^2 \Theta} J_z \\ x_1^2 &= \frac{1}{2} \mu_2 \dot{R}^2 \\ x_2^2 &= \frac{1}{2} \mu_1 l^2 \left(\dot{\Theta} + \Omega_y \right)^2 \\ x_3^2 &= \frac{1}{2} \mu_2 R^2 \Omega_y^2 \\ x_4^2 &= \frac{1}{2} \mu_1 l^2 \left(\Omega_x \cos \Theta - \Omega_z \sin \Theta \right)^2 \\ x_5^2 &= \frac{1}{2} \mu_2 R^2 \Omega_x^2 \\ T_{\mathcal{L}} &= x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + x_5^2 \\ \end{split}$$

$$T_{\mathcal{L}} = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + x_5^2 \\ \longleftrightarrow T_{\mathcal{H}} = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + x_5^2 \\ \end{split}$$

Выпишем выражения для якобианов замены переменных в лагранжиане и гамильтониане

$$[Jac]_{lagr} = \begin{vmatrix} \partial(\dot{R},\dot{\Theta},\Omega_x,\Omega_y,\Omega_z) \\ \overline{\partial(x_1,x_2,x_3,x_4,x_5)} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sqrt{\frac{2}{\mu_2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{\mu_1l^2}} & -\sqrt{\frac{2}{\mu_2R^2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{\mu_2R^2}} \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{\mu_2R^2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sqrt{\frac{2}{\mu_1l^2\sin^2\Theta}} & \sqrt{\frac{2}{\mu_2R^2}}\cot\Theta \end{vmatrix} = \\ = 2^{5/2}\sqrt{\frac{1}{\mu_2}}\sqrt{\frac{1}{\mu_1l^2}}\sqrt{\frac{1}{\mu_1l^2\sin^2\Theta}}\frac{1}{\mu_2R^2} = 2^{5/2}\mu_1^{-1}\mu_2^{-3/2}l^{-2}R^{-2}\sin^{-1}\Theta$$

$$[Jac]_{ham} = \begin{vmatrix} \overline{\partial(p_R,p_\Theta,J_x,J_y,J_z)} \\ \overline{\partial(x_1,x_2,x_3,x_4,x_5)} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sqrt{2\mu_2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2\mu_1l^2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2\mu_2R^2} & -\sqrt{2\mu_1l^2}\cos\Theta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2\mu_1l^2}\sin\Theta \end{vmatrix} = \\ = 2^{5/2}\mu_1\mu_2^{3/2}l^2R^2\sin\Theta$$

Якобианы связаны следующим соотношением

$$[Jac]_{lagr} \cdot [Jac]_{ham} = 2^5$$

Система N_2-N_2

Используем следующую замену для диагонализации лагранжиана

$$x_{1}^{2} = \frac{1}{2}\mu_{2}l_{2}^{2}\left(-\dot{\varphi}\sin\theta_{2} + \Omega_{x}\cos\varphi\cos\theta_{2} + \Omega_{y}\sin\varphi\cos\theta_{2} - \Omega_{z}\sin\theta_{2}\right)^{2}$$

$$x_{2}^{2} = \frac{1}{2}\mu_{2}l_{2}^{2}\left(\dot{\theta}_{2} - \Omega_{x}\sin\varphi + \Omega_{y}\cos\varphi\right)^{2}$$

$$x_{3}^{2} = \frac{1}{2}\mu_{1}l_{1}^{2}\left(\Omega_{x}\cos\theta_{1} - \Omega_{z}\sin\theta_{1}\right)^{2}$$

$$x_{4}^{2} = \frac{1}{2}\mu_{3}R^{2}\Omega_{x}^{2}$$

$$x_{5}^{2} = \frac{1}{2}\mu_{3}R^{2}\Omega_{y}^{2}$$

$$x_{6}^{2} = \frac{1}{2}\mu_{1}l_{1}^{2}\left(\dot{\theta}_{1} + \Omega_{y}\right)^{2}$$

$$x_{7}^{2} = \frac{1}{2}\mu_{3}\dot{R}^{2}$$
(6)

Выражаем лагранжевы переменные через x_1, \ldots, x_7 :

$$\begin{split} \dot{\Theta}_1 &= x_6 \sqrt{\frac{2}{\mu_1 l_1^2}} - x_5 \sqrt{\frac{2}{\mu_3 R^4}} \\ \dot{\varphi} &= -\frac{x_1}{\sin \Theta_2} \sqrt{\frac{2}{\mu_2 l_2^2}} + \frac{x_4 \cos \varphi \cos \Theta_2}{\sin \Theta_2} \sqrt{\frac{2}{\mu_3 R^2}} + \frac{x_5 \sin \varphi \cos \Theta_2}{\sin \Theta_2} \sqrt{\frac{2}{\mu_3 R^2}} + \frac{x_3}{\sin \Theta_1} \sqrt{\frac{2}{\mu_1 l_1^2}} - \frac{x_4 \cos \Theta_1}{\sin \Theta_1} \sqrt{\frac{2}{\mu_3 R^2}} \\ \dot{\Theta}_2 &= x_2 \sqrt{\frac{2}{\mu_2 l_2^2}} + x_4 \sin \varphi \sqrt{\frac{2}{\mu_3 R^2}} - x_5 \cos \varphi \sqrt{\frac{2}{\mu_3 R^2}} \\ \dot{R} &= x_7 \sqrt{\frac{2}{\mu_3}} \\ \Omega_x &= x_4 \sqrt{\frac{2}{\mu_3 R^2}} \\ \Omega_y &= x_5 \sqrt{\frac{2}{\mu_3 R^2}} \\ \Omega_z &= -\frac{x_3}{\sin \Theta_1} \sqrt{\frac{2}{\mu_1 l_1^2}} + \frac{x_4 \cos \Theta_1}{\sin \Theta_1} \sqrt{\frac{2}{\mu_3 R^2}} \end{split}$$

Действуем матрицей \mathbb{B} на вектор лагранжевых переменных и подставляем их выражения через $x_1, \dots x_7$:

$$\begin{split} J_x &= x_4 \sqrt{2\mu_3 R^2} + x_3 \sqrt{2\mu_1 l_1^2} \cos \Theta_1 + x_1 \sqrt{2\mu_2 l_2^2} \cos \varphi \cos \Theta_2 - x_2 \sqrt{2\mu_2 l_2^2} \sin \varphi \\ J_y &= x_5 \sqrt{2\mu_3 R^2} + x_6 \sqrt{2\mu_1 l_1^2} + x_1 \sqrt{2\mu_2 l_2^2} \sin \varphi \cos \Theta_2 + x_2 \sqrt{2\mu_2 l_2^2} \cos \varphi \\ J_z &= -x_3 \sqrt{2\mu_1 l_1^2} \sin \Theta_1 - x_1 \sqrt{2\mu_2 l_2^2} \sin \Theta_2 \\ p_{\Theta_1} &= x_6 \sqrt{2\mu_1 l_1^2} \\ p_{\varphi} &= -x_1 \sqrt{2\mu_2 l_2^2} \sin \Theta_2 \\ p_{\Theta_2} &= x_2 \sqrt{2\mu_2 l_2^2} \\ p_R &= \sqrt{2\mu_3 x_7} \end{split}$$

Правильность полученных выражений подтверждается следующей связью

$$T_{\mathcal{H}} = \Omega_x J_x + \Omega_y J_y + \Omega_z J_z + p_{\Theta_1} \dot{\Theta}_1 + p_{\Theta_2} \dot{\Theta}_2 + p_{\varphi} \dot{\varphi} + p_R \dot{R} - T_{\mathcal{L}} =$$

$$= \left[2x_1^2 + \dots + 2x_7^2 \right] - \left[x_1^2 + \dots + x_7^2 \right] = x_1^2 + \dots + x_7^2$$

Выражения, свящывающие лагранжевы переменные с гамильтоновыми приводить здесь не буду, они слишком громоздки, однако руками мне удалось получить компактный вид для 6 из 7 выражений. Подставив эти выражения в (6), получаем новые переменные x_1, \ldots, x_7 , выражененные уже в гамильтоновых переменных. Опять же, производя упрощения руками, можно получить (относительно) компактный вид этих выражений, но особенного смысла в этом нет.

Несмотря на значительный размер выражений, якобианы замены переменных как вслучае лагранжиана так и в случае гамильтониана могут быть получены в компактном виде без дополнительных упрощений руками. Представлю конечный результат:

$$[Jac]_{lagr} = \left| \frac{\partial (\dot{R}, \dot{\Theta}_{1}, \dot{\Theta}_{2}, \dot{\varphi}, \Omega_{x}, \Omega_{y}, \Omega_{z})}{\partial (x_{1}, x_{2}, x_{3}, x_{4}, x_{5}, x_{6}, x_{7}0)} \right| = 2^{7/2} \mu_{1}^{-1} l_{1}^{-2} \mu_{2}^{-1} l_{2}^{-2} \mu_{3}^{-3/2} R^{-2} \sin^{-1} \Theta_{1} \sin^{-1} \Theta_{2}$$

$$[Jac]_{ham} = \left| \frac{\partial (p_{R}, p_{\Theta_{1}}, p_{\Theta_{2}}, p_{\varphi}, J_{x}, J_{y}, J_{z})}{\partial (x_{1}, x_{2}, x_{3}, x_{4}, x_{5}, x_{6}, x_{7})} \right| = 2^{7/2} \mu_{1} l_{1}^{2} \mu_{2} l_{2}^{2} \mu_{3}^{3/2} R^{2} \sin \Theta_{1} \sin \Theta_{2}$$

$$[Jac]_{lagr} \cdot [Jac]_{ham} = 2^{7}$$