

## 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 соответствующие номера.

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

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

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

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

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

где были введены обозначения

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

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

Прделаем аналогичную операцию с парой векторов  $\mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_3$ , введя переменные  $\boldsymbol{\rho}_\Sigma, \mathbf{r}_\Sigma$ :

$$\begin{cases} \boldsymbol{\rho}_\Sigma = \mathbf{r}_{12} - \mathbf{r}_3 \\ \mathbf{r}_\Sigma = \frac{m_{12}\mathbf{r}_{12} + m_3\mathbf{r}_3}{m_{12} + m_3} \end{cases} \iff \begin{cases} \mathbf{r}_3 = \mathbf{r}_\Sigma - \frac{m_{12}}{m_{12} + m_3}\boldsymbol{\rho}_\Sigma \\ \mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_\Sigma + \frac{m_3}{m_{12} + m_3}\boldsymbol{\rho}_\Sigma \end{cases} \quad (4)$$

$$T = \frac{1}{2}m_\Sigma\dot{\mathbf{r}}_\Sigma^2 + \frac{1}{2}\mu_\Sigma\dot{\boldsymbol{\rho}}_\Sigma^2 + \frac{1}{2}\mu_{12}\dot{\boldsymbol{\rho}}_{12}^2, \quad (5)$$

где были введены обозначения

$$m_\Sigma = m_1 + m_2 + m_3, \quad (\text{сумма масс мономеров})$$

$$\frac{1}{\mu_\Sigma} = \frac{1}{m_1 + m_2} + \frac{1}{m_3}. \quad (\text{приведенная масса мономеров})$$

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

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

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

$$\begin{cases} \boldsymbol{\rho}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \\ \boldsymbol{\rho}_{\Sigma} = \mathbf{r}_{12} - \mathbf{r}_3 = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} - \mathbf{r}_3 \\ \mathbf{r}_{\Sigma} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2 + m_3\mathbf{r}_3}{m_1 + m_2 + m_3} \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\rho}_{12} \\ \boldsymbol{\rho}_{\Sigma} \\ \mathbf{r}_{\Sigma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ \frac{m_1}{m_1 + m_2} & \frac{m_2}{m_1 + m_2} & -1 \\ \frac{m_1}{m_1 + m_2 + m_3} & \frac{m_2}{m_1 + m_2 + m_3} & \frac{m_3}{m_1 + m_2 + m_3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{r}_3 \end{bmatrix} \quad (7)$$

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  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$ .

$$\begin{bmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{r}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{m_2}{m_1 + m_2} & \frac{m_3}{m_1 + m_2 + m_3} & 1 \\ -\frac{m_1}{m_1 + m_2} & \frac{m_3}{m_1 + m_2 + m_3} & 1 \\ 0 & -\frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2 + m_3} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\rho}_{12} \\ \boldsymbol{\rho}_{\Sigma} \\ \mathbf{r}_{\Sigma} \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$\begin{cases} \mathbf{r}_1 = \frac{m_2}{m_1 + m_2}\boldsymbol{\rho}_{12} + \frac{m_3}{m_1 + m_2 + m_3}\boldsymbol{\rho}_{\Sigma} \\ \mathbf{r}_2 = -\frac{m_1}{m_1 + m_2}\boldsymbol{\rho}_{12} + \frac{m_3}{m_1 + m_2 + m_3}\boldsymbol{\rho}_{\Sigma} \\ \mathbf{r}_3 = -\frac{m_1 + m_2}{m_1 + m_2 + m_3}\boldsymbol{\rho}_{\Sigma} \end{cases} \quad (9)$$

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

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

---

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  $\text{N}_2$  и  $\text{Ar}$ ,  $\Theta$  – угол поворота  $\text{N}_2$  относительно линии связи в подвижной плоскости.

$$\begin{array}{ll}
 \boldsymbol{\rho}_\Sigma \rightarrow \mathbf{R}_1 = \{0, 0, R\} & \\
 \boldsymbol{\rho}_{12} \rightarrow \mathbf{R}_2 = \{l \cos \Theta, 0, l \sin \Theta\} & \Longleftrightarrow \begin{array}{ll} X_1 = 0 & X_2 = l \sin \Theta \\ Y_1 = 0 & Y_2 = 0 \\ Z_1 = R & Z_2 = l \cos \Theta \end{array}
 \end{array}$$

## «Японский гамильтониан»

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

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_{\text{mon}_1} &= -\frac{m_{\text{mon}_2}}{M}\mathbf{R} = -\frac{m_{\text{mon}_2}}{M} \begin{bmatrix} R \sin \Theta \cos \Phi \\ R \sin \Theta \sin \Phi \\ R \cos \Theta \end{bmatrix}, \\ \mathbf{r}_{\text{mon}_2} &= \frac{m_{\text{mon}_1}}{M}\mathbf{R} = \frac{m_{\text{mon}_1}}{M} \begin{bmatrix} R \sin \Theta \cos \Phi \\ R \sin \Theta \sin \Phi \\ R \cos \Theta \end{bmatrix},\end{aligned}\tag{11}$$

где  $M$  – сумма масс мономеров. Пусть второй мономер состоит из  $n$  точек, радиус-вектора которых во введенной системе отсчета обозначим  $\{\mathbf{r}_2^k\}_{k=1\dots n}$ , а относительно центра масс второго мономера –  $\{\mathbf{r}_{\text{mon}_2}^k\}_{k=1\dots n}$ . 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.

$$\begin{aligned}T_2 &= \sum_{k=1}^n m_k (\dot{\mathbf{r}}_2^k)^2 = \sum_{k=1}^n m_k (\dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2} + \dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2}^k)^2 = \sum_{k=1}^n m_k \left[ \dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2}^2 + 2\dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2} \dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2}^k + (\dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2}^k)^2 \right] = \\ &= m_{\text{mon}_2} \dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2}^2 + 2\dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2} \frac{d}{dt} \left[ \sum_{k=1}^n m_k \mathbf{r}_{\text{mon}_2}^k \right] + \sum_{k=1}^n m_k (\dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2}^k)^2\end{aligned}\tag{13}$$

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. Производная  $\dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2}$  в сферической системе координат имеет следующий вид

$$\dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2} = \dot{R}^2 + R^2 \dot{\Theta}^2 + R^2 \dot{\Phi}^2 \sin^2 \Theta\tag{14}$$

Подставим выражение для производной (14) в кинетическую энергию второго мономера (13):

$$T_2 = m_{\text{mon}_2} \frac{m_{\text{mon}_1}^2}{M^2} \left[ \dot{R}^2 + R^2 \dot{\Theta}^2 + R^2 \dot{\Phi}^2 \sin^2 \Theta \right] + \sum_{k=1}^n m_k (\dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2}^k)^2\tag{15}$$

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

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

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

$$\dot{\mathbf{r}}_{\text{mon}_2}^k = \dot{\mathbb{S}}_2 \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k = \dot{\mathbb{S}}_2 \mathbb{S}_2^{-1} \mathbf{r}_{\text{mon}_2}^k = [\boldsymbol{\omega}_2 \times \mathbf{r}_{\text{mon}_2}^k] = \mathbb{S}_2 [\boldsymbol{\Omega}_2 \times \mathbf{R}_{\text{mon}_2}^k] \quad (17)$$

Просуммируем масс-взвешенные производные векторов:

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

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  $\boldsymbol{\Omega}_2$  связан с вектором эйлеровых скоростей  $\dot{\mathbf{e}}_2$  матрицей  $\mathbb{V}_2$ :

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

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

$$T_2 = m_{\text{mon}_2} \frac{m_{\text{mon}_1}^2}{M^2} \left[ \dot{R}^2 + R^2 \dot{\Theta}^2 + R^2 \dot{\Phi}^2 \sin^2 \Theta \right] + \dot{\mathbf{e}}_2^\top \mathbb{V}_2^\top \mathbb{I}_2 \mathbb{V}_2 \dot{\mathbf{e}}_2 \quad (18)$$

Проводя аналогичные рассуждения приходим к выражению для кинетической энергии первого мономера  $T_1$ . Получаем выражение для полной кинетической энергии пары:

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

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

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):

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_2^e &= \frac{\partial T}{\partial \dot{\mathbf{e}}_2} = \mathbb{V}_2 \mathbb{I}_2 \mathbb{V}_2 \dot{\mathbf{e}}_2 \\ p_2^\varphi &= I_1^2 \left( \dot{\varphi}_2 \sin \theta_2 \sin \psi_2 + \dot{\theta}_2 \cos \psi_2 \right) \sin \theta_2 \sin \psi_2 + \\ &\quad + I_2^2 \left( \dot{\varphi}_2 \sin \theta_2 \cos \psi_2 - \dot{\theta}_2 \sin \psi_2 \right) \sin \theta_2 \cos \psi_2 + \\ &\quad + I_3^2 \left( \dot{\varphi}_2 \cos \theta_2 + \dot{\psi}_2 \right) \cos \theta_2 \\ p_2^\theta &= I_1^2 \left( \dot{\varphi}_2 \sin \theta_2 \sin \psi_2 + \dot{\theta}_2 \cos \psi_2 \right) \cos \psi_2 - \\ &\quad - I_3^2 \left( \dot{\varphi}_2 \sin \theta_2 \cos \psi_2 - \dot{\theta}_2 \sin \psi_2 \right) \sin \psi_2 \\ p_2^\psi &= I_3^2 \left( \dot{\varphi}_2 \cos \theta_2 + \dot{\psi}_2 \right) \end{aligned} \quad (21)$$

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

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} (I_1^2 \sin^2 \psi_2 + I_2^2 \cos^2 \psi_2) \sin^2 \theta_2 + I_3^2 \cos^2 \theta_2 & (I_1^2 - I_2^2) \sin \theta_2 \sin \psi_2 \cos \psi_2 & I_3^2 \cos \theta_2 \\ (I_1^2 - I_2^2) \sin \theta_2 \sin \psi_2 \cos \psi_2 & I_1^2 \cos^2 \psi_2 + I_2^2 \sin^2 \psi_2 & 0 \\ I_3^2 \cos \theta_2 & 0 & I_3^2 \end{bmatrix} \dot{\mathbf{e}}_2 = \mathbf{p}_2^e \\ \dot{\mathbf{e}}_2 &= \frac{1}{I_1^2 I_2^2 \sin^2 \theta} \times \begin{bmatrix} \alpha & \beta & -\alpha \cos \theta_2 \\ \beta & (I_1^2 \sin^2 \psi_2 + I_2^2 \cos^2 \psi_2) \sin^2 \theta_2 & -\beta \sin \theta_2 \cos \theta_2 \\ -\alpha \cos \theta_2 & -\beta \sin \theta_2 \cos \theta_2 & \frac{I_1^2 I_2^2}{I_3^2} \sin^2 \theta_2 + \alpha \cos^2 \theta_2 \end{bmatrix} \mathbf{p}_2^e, \\ \alpha &= I_1^2 \cos^2 \psi_2 + I_2^2 \sin^2 \psi_2, \quad \beta = (I_2^2 - I_1^2) \sin \psi_2 \cos \psi_2 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} T_2^{\mathcal{H}} &= \frac{1}{2I_1^2 \sin^2 \theta_2} \left[ \left( p_2^\varphi - p_2^\psi \cos \theta_2 \right) \cos \psi_2 - p_2^\theta \sin \theta_2 \sin \psi_2 \right]^2 + \\ &+ \frac{1}{2I_2^2 \sin^2 \theta_2} \left[ \left( p_2^\varphi - p_2^\psi \cos \theta_2 \right) \sin \psi_2 + p_2^\theta \sin \theta_2 \cos \psi_2 \right]^2 + \frac{1}{2I_3^2} \left( p_2^\psi \right)^2 \end{aligned} \quad (22)$$

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

$$\begin{aligned} p_R &= \frac{\partial T}{\partial \dot{R}} = \mu \dot{R} \\ p_\Theta &= \frac{\partial T}{\partial \dot{\Theta}} = \mu R^2 \dot{\Theta} \\ p_\Phi &= \frac{\partial T}{\partial \dot{\Phi}} = \mu R^2 \dot{\Phi} \sin^2 \Theta \end{aligned}$$

Итого, приходим к следующему выражению для «японского гамильтониана»:

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