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 $\phi = \psi = 0$:

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

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

Т.к. $\dot{\varphi} = \dot{\psi} = 0$, то $\Omega_x = \dot{\theta}$, $\Omega_y = 0$, $\Omega_z = 0$.

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

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

Тензор инерции будет иметь лишь две ненулевые компоненты, а именно, $I_{xx} = I_{yy} = \mu R^2$, где μ – приведенная масса системы, $\mu = \dfrac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$. Приведенные выше рассуждения показывают, что вектор угловой скорости направлен вдоль оси $x = X$:

$$\mathbf{\Omega} = \begin{bmatrix} \Omega_x \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

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

$$\begin{aligned} x_1^2 &= \frac{1}{2}\mu\dot{R}^2 \\ x_2^2 &= \frac{1}{2}\mu R^2\Omega_x^2 \end{aligned}, \tag{1}$$

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.

$$\begin{aligned} \dot{R} &= \sqrt{\frac{2}{\mu}}x_1 & \qquad p_R &= \frac{\partial T_{\mathcal{L}}}{\partial \dot{R}} = \mu\dot{R} = \sqrt{2\mu}x_1 \\ \Omega_x &= \sqrt{\frac{2}{\mu R^2}}x_2 & \qquad J_x &= \frac{\partial T_{\mathcal{L}}}{\partial \Omega_x} = \mu R^2\Omega_x = \sqrt{2\mu R^2}x_2 \end{aligned}$$

Получим выражение для гамильтоновой формы кинетической энергии

$$\begin{gathered} T_{\mathcal{H}} = \dot{R}p_R + \Omega_x J_x - x_1^2 - x_2^2 \\ \dot{R}\cdot p_R = \sqrt{\frac{\mu}{2}}x_1 \cdot \sqrt{2\mu}x_1 = 2x_1^2 \\ \Omega_x \cdot J_x = \sqrt{\frac{2}{\mu R^2}}x_2 \cdot \sqrt{2\mu R^2}x_2 = 2x_2^2 \\ T_{\mathcal{H}} = 2x_1^2 + 2x_2^2 - x_1^2 - x_2^2 = x_1^2 + x_2^2 \end{gathered}$$

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:

$$\begin{aligned} x_1^2 &= \frac{1}{2}\mu\dot{R}^2 & \longrightarrow \quad x_1^2 &= \frac{p_R^2}{2\mu} \\ x_2^2 &= \frac{1}{2}\mu R^2\Omega_x^2 & \longrightarrow \quad x_2^2 &= \frac{J_x^2}{2\mu R^2} \\ T_{\mathcal{L}} &= x_1^2 + x_2^2 & \longrightarrow \quad T_{\mathcal{H}} &= x_1^2 + x_2^2 \end{aligned}$$

Получим выражения для якобианов замены переменных в лагранжиане и гамильтониане.

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

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

Отметим, что якобианы связаны следующим соотношением

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

Система CO_2–Ar

Используем стандартную молекулярную систему отсчета для этой системы. Направим ось OZ вдоль линии $C-Ar$, ось OX перпендикулярно ей в плоскости системы. Координаты, в которых молекула CO_2 заменена виртуальной частицей, выглядят следующим образом

$$\begin{array}{ll} X_1 = 0 & X_2 = l\sin\Theta \\ Y_1 = 0 & Y_2 = 0 \\ Z_1 = R & Z_2 = l\cos\Theta \end{array},$$

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

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

Лагранжиан в этой системе отсчета имеет вид

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\mu_2\dot{R}^2 + \frac{1}{2}\mu_1 l^2\dot{\Theta}^2 + \mu_1 l^2\Omega_y^2\dot{\Theta} + \frac{1}{2}\left(\mu_1 l^2\cos^2\Theta + \mu_2 R^2\right)\Omega_x^2 + \frac{1}{2}\left(\mu_1 l^2 + \mu_2 R^2\right)\Omega_y^2 +$$
$$+\frac{1}{2}\mu_1 l^2\Omega_z^2\sin^2\Theta - \mu_1 l^2\Omega_x\Omega_z\sin\Theta\cos\Theta,$$

Будем использовать следующую замену для диагонализации лагранжиана

$$\begin{aligned} x_1^2 &= \frac{1}{2}\mu_2\dot{R}^2 \\ x_2^2 &= \frac{1}{2}\mu_1 l^2\left(\dot{\Theta}+\Omega_y\right)^2 \\ x_3^2 &= \frac{1}{2}\mu_2 R^2\Omega_y^2 \\ x_4^2 &= \frac{1}{2}\mu_1 l^2\left(\Omega_x\cos\Theta - \Omega_z\sin\Theta\right)^2 \\ x_5^2 &= \frac{1}{2}\mu_2 R^2\Omega_x^2 \end{aligned} \tag{3}$$

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.

$$
\begin{aligned}
\dot{R} &= x_1 \sqrt{\frac{2}{\mu_2}} \\
\dot{\Theta} &= x_2 \sqrt{\frac{2}{\mu_1 l^2}} - x_3 \sqrt{\frac{2}{\mu_2 R^2}} \\
\Omega_x &= x_5 \sqrt{\frac{2}{\mu_2 R^2}} \\
\Omega_y &= x_3 \sqrt{\frac{2}{\mu_2 R^2}} \\
\Omega_z &= x_5 \sqrt{\frac{2}{\mu_2 R^2}} \cot\Theta - \frac{x_4}{\sin\Theta} \sqrt{\frac{2}{\mu_1 l^2}}
\end{aligned}
$$

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 $x_1, \ldots, x_5$:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J} &= \frac{\partial T_{\mathcal{L}}}{\partial \mathbf{\Omega}} = \mathbb{I}\mathbf{\Omega} + \mathbb{A}\dot{\mathbf{q}} \\
\mathbf{p} &= \frac{\partial T_{\mathcal{L}}}{\partial \dot{\mathbf{q}}} = \mathbb{A}^\top \mathbf{\Omega} + \mathbb{a}\dot{\mathbf{q}}
\end{aligned}
\quad \Longrightarrow \quad
\begin{bmatrix} \mathbf{J} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbb{I} & \mathbb{A} \\ \mathbb{A}^\top & \mathbb{a} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{\Omega} \\ \dot{\mathbf{q}} \end{bmatrix} = \mathbb{B} \begin{bmatrix} \mathbf{\Omega} \\ \dot{\mathbf{q}} \end{bmatrix} \tag{4}
$$

$$
\begin{aligned}
p_R &= \mu_2 \dot{R} \\
p_\Theta &= \mu_1 l^2 \left(\dot{\Theta} + \Omega_y\right) \\
J_x &= \left(\mu_1 l^2 \cos^2\Theta + \mu_2 R^2\right) \Omega_x - \mu_1 l^2 \Omega_z \sin\Theta\cos\Theta \\
J_y &= \mu_1 l^2 \dot{\Theta} + \left(\mu_1 l^2 + \mu_2 R^2\right) \Omega_y \\
J_z &= -\mu_1 l^2 \Omega_x \sin\Theta\cos\Theta + \mu_1 l^2 \Omega_z \sin^2\Theta
\end{aligned}
\quad \Longrightarrow \quad
\begin{aligned}
p_R &= x_1 \sqrt{2\mu_2} \\
p_\Theta &= x_2 \sqrt{2\mu_1 l^2} \\
J_x &= x_4 \sqrt{2\mu_1 l^2} \cos\Theta + x_5 \sqrt{2\mu_2 R^2} \\
J_y &= x_2 \sqrt{2\mu_1 l^2} + x_3 \sqrt{2\mu_2 R^2} \\
J_z &= -x_4 \sqrt{2\mu_1 l^2} \sin\Theta
\end{aligned} \tag{5}
$$

Получим выражение для кинетической энергии в гамильтоновой форме

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

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

$$\begin{aligned}
\dot{R} &= \frac{1}{\mu_2} p_R \\
\dot{\Theta} &= -\frac{1}{\mu_2 R^2} J_y + p_\Theta \left(\frac{1}{\mu_2 R^2} + \frac{1}{\mu_1 l^2} \right) \\
\Omega_x &= \frac{1}{\mu_2 R^2} J_x + \frac{\cot\Theta}{\mu_2 R^2} J_z \\
\Omega_y &= \frac{J_y - p_\Theta}{\mu_2 R^2} \\
\Omega_z &= \frac{\cot\Theta}{\mu_2 R^2} J_x + \frac{\cot^2\Theta}{\mu_2 R^2} J_z + \frac{1}{\mu_1 l^2 \sin^2\Theta} J_z
\end{aligned}$$

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

Выпишем выражения для якобианов замены переменных в лагранжиане и гамильтониане

$$[\,Jac\,]_{lagr} = \left|\frac{\partial(\dot R,\dot\Theta,\Omega_x,\Omega_y,\Omega_z)}{\partial(x_1,x_2,x_3,x_4,x_5)}\right| = \begin{vmatrix} \sqrt{\dfrac{2}{\mu_2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\dfrac{2}{\mu_1 l^2}} & -\sqrt{\dfrac{2}{\mu_2 R^2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\dfrac{2}{\mu_2 R^2}} \\ 0 & 0 & \sqrt{\dfrac{2}{\mu_2 R^2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{\dfrac{2}{\mu_1 l^2 \sin^2\Theta}} & \sqrt{\dfrac{2}{\mu_2 R^2}}\cot\Theta \end{vmatrix} =$$

$$= 2^{5/2}\sqrt{\frac{1}{\mu_2}}\sqrt{\frac{1}{\mu_1 l^2}}\sqrt{\frac{1}{\mu_1 l^2\sin^2\Theta}}\frac{1}{\mu_2 R^2} = 2^{5/2}\mu_1^{-1}\mu_2^{-3/2}l^{-2}R^{-2}\sin^{-1}\Theta$$

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

$$= 2^{5/2}\mu_1\mu_2^{3/2}l^2R^2\sin\Theta$$

Якобианы связаны следующим соотношением

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

Система N_2–N_2

Рассмотрим координаты, в которых линейный молекулы с длинами l_1 и l_2 сводится к виртуальным частицам 1 и 2 с приведенными массами μ_1 и μ_2, соответственно

$$\begin{aligned} &X_1 = l_1\sin\Theta_1 \qquad &&X_2 = l_2\cos\Phi\sin\Theta_2 \qquad &&X_3 = 0 \\ &Y_1 = 0 &&Y_2 = l_2\sin\Phi\sin\Theta_2 &&Y_3 = 0 \\ &Z_1 = l_1\cos\Theta_1 &&Z_2 = l_2\cos\Theta_2 &&Z_3 = R \end{aligned}$$

Используем следующую замену для диагонализации лагранжиана

$$
\begin{aligned}
x_1^2 &= \frac{1}{2}\mu_2 l_2^2 \left(-\dot{\varphi}\sin\theta_2 + \Omega_x \cos\varphi\cos\theta_2 + \Omega_y \sin\varphi\cos\theta_2 - \Omega_z \sin\theta_2\right)^2 \\
x_2^2 &= \frac{1}{2}\mu_2 l_2^2 \left(\dot{\theta}_2 - \Omega_x \sin\varphi + \Omega_y \cos\varphi\right)^2 \\
x_3^2 &= \frac{1}{2}\mu_1 l_1^2 \left(\Omega_x \cos\theta_1 - \Omega_z \sin\theta_1\right)^2 \\
x_4^2 &= \frac{1}{2}\mu_3 R^2 \Omega_x^2 \\
x_5^2 &= \frac{1}{2}\mu_3 R^2 \Omega_y^2 \\
x_6^2 &= \frac{1}{2}\mu_1 l_1^2 \left(\dot{\theta}_1 + \Omega_y\right)^2 \\
x_7^2 &= \frac{1}{2}\mu_3 \dot{R}^2
\end{aligned}
\tag{6}
$$

Выражаем лагранжевы переменные через $x_1, \ldots, x_7$:

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

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

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

Правильность полученных выражений подтверждается следующей связью

$$
\begin{aligned}
T_{\mathcal{H}} = \Omega_x J_x + \Omega_y J_y + \Omega_z J_z + p_{\Theta_1}\dot\Theta_1 + p_{\Theta_2}\dot\Theta_2 + p_\varphi\dot\varphi + p_R\dot R - T_{\mathcal{L}} = \\
= \left[2x_1^2 + \ldots + 2x_7^2\right] - \left[x_1^2 + \ldots + x_7^2\right] = x_1^2 + \ldots + x_7^2
\end{aligned}
$$

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 $x_1, \dots, x_7$ в гамильтоновых переменных:

$$
\begin{aligned}
x_1 &= -\frac{1}{\sqrt{2\mu_2 l_2^2}\sin\Theta_2}p_\varphi \\
x_2 &= \frac{1}{\sqrt{2\mu_2 l_2^2}}p_{\Theta_2} + \frac{\sqrt{2\mu_2 l_2^2}}{\mu_3 R^2}p_{\Theta_1}\cot^2\Theta_1\sin\varphi\cos\Theta_2 \\
x_3 &= \frac{1}{\sqrt{2\mu_1}}\frac{J_z - p_\varphi}{\sin\Theta_1} \\
x_4 &= \frac{1}{\sqrt{2\mu_3 R^2}}\left(p_{\Theta_2}\sin\varphi + J_x + J_z\cos\Theta_1 + p_\varphi\cot\Theta_2\cos\varphi - p_\varphi\cot\Theta_1\right) \\
x_5 &= \frac{1}{\sqrt{2\mu_3 R^2}}\left(p_\varphi\sin\varphi\cot\Theta_2 + J_y - p_{\Theta_2}\cos\varphi - p_{\Theta_1}\right) \\
x_6 &= \frac{1}{\sqrt{2\mu_1 l_1^2}}p_{\Theta_1} \\
x_7 &= \frac{1}{\sqrt{2\mu_3}}p_R
\end{aligned}
\tag{7}
$$

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:

$$[\,Jac\,]_{lagr} = \left| \frac{\partial(\dot{R}, \dot{\Theta}_1, \dot{\Theta}_2, \dot{\varphi}, \Omega_x, \Omega_y, \Omega_z)}{\partial(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7)} \right| = 2^{7/2} \mu_1^{-1} l_1^{-2} \mu_2^{-1} l_2^{-2} \mu_3^{-3/2} R^{-2} \sin^{-1}\Theta_1 \sin^{-1}\Theta_2$$

$$[\,Jac\,]_{ham} = \left| \frac{\partial(p_R, p_{\Theta_1}, p_{\Theta_2}, p_\varphi, J_x, J_y, J_z)}{\partial(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7)} \right| = 2^{7/2} \mu_1 l_1^2 \mu_2 l_2^2 \mu_3^{3/2} R^2 \sin\Theta_1 \sin\Theta_2$$

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